Universidad Central de Venezuela
Facultad de Ciencias
Escuela de Física

Métodos Matemáticos de la Física II (2424)
http://fisica.ciens.ucv.ve/~svincenz/metodosmatematicosdos.html

Tarea 7
Ecuaciones diferenciales ordinarias
Funciones especiales
Problemas de Sturm-Liouville
http://fisica.ciens.ucv.ve/~svincenz/metodosmatematicosdos(t7).pdf

1°) **¡Ojo con las segundas soluciones!** Para el caso muy particular de $\lambda = 0$ y $a_2(x) = 0$, la ecuación de autovalores auto-adjunta se transforma en

$$\frac{d}{dx}\left[a_0(x)\frac{d}{dx}u(x)\right] = 0. \tag{1.1}$$

Utilice esto para obtener una segunda solución de las ecuaciones de Legendre, Hermite y Laguerre. Verifique el comportamiento divergente que normalmente se encuentra en la segunda solución.

2°) **Un resultado poco conocido:** (a) Demuestre el siguiente resultado: "Sea $\hat{L}u(x)+\lambda w(x)u(x) = 0$, con

$$\hat{L} = \frac{d}{dx}\left[a_0(x)\frac{d}{dx}u(x)\right] + a_2(x), \tag{2.1}$$

sobre el intervalo $a \leq x \leq b$. Si se tiene que $a_0(x) > 0$, $a_2(x) \leq 0$ y $w(x) \geq 0$, y si las condiciones de frontera son tales que satisfacen la desigualdad $a_0(x)\,\bar{u}(x)\,u'(x)|_a^b \leq 0$ (donde la barra sobre u corresponde al complejo conjugado) entonces todos los autovalores λ son no-negativos" Ayuda: multiplique la ecuación diferencial $\hat{L}u(x) + \lambda w(x)u(x) = 0$ por $\bar{u}(x)$ e integre una vez por partes. (b) ¿Cómo son los autovalores si se tiene la condición de frontera $u'(a) - Au(a) = 0$, $u'(b) + Bu(b) = 0$, donde las constantes A y B son reales y positivas?

3°) **Un problema de Sturm-Liouville simple ¿o no tan simple?** (a) Encuentre los autovalores y las autofunciones ortonormales complejas asociadas al siguiente problema de Sturm-Liouville. La EDO es $\hat{L}u(x) + \lambda u(x) = 0$, donde $\hat{L} = d^2/dx^2$, con $-a \leq x \leq a$. Las condiciones de frontera son las antiperiódicas: $u(-a) = -u(a)$, $u'(-a) = -u'(a)$. (b) ¿Es el espectro de $\hat{L}$ degenerado? (c) Considere a los operadores $\hat{p} = -id/dx$ (el operador momentum) y $\hat{H} = -\hat{L} = \hat{p}^2$ (el operador energía) ¿Son las autofunciones de $\hat{L}$ autofunciones también de $\hat{p}$ y $\hat{H}$? (d) Compruebe que las autofunciones obtenidas en (a) satisfacen las relaciones $u_n(x) = u_{-(n+1)}(-x)$, $\bar{u}_n(x) = u_{-(n+1)}(x)$. (e) Considere ahora a los operadores $\hat{\Pi}$ (el operador paridad) y $\hat{T}$ (el operador de inversión temporal): $\left(\hat{\Pi}u\right)(x) = u(-x)$, $\left(\hat{T}u\right)(x) = \bar{u}(x)$ ¿Son las autofunciones que obtuvo en (a) autofunciones de $\hat{\Pi}$ y $\hat{T}$?

4°) **El potencial $1/x^2$ en la mecánica cúantica y sus estados ligados:** considere una partícula de masa m en el potencial unidimensional $V(x) = \infty$, para $x \leq 0$ y $V(x) = -a/x^2$, para $x > 0$, donde

$a > 0$ es una constante. La EDO de Schrödinger es

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - \frac{a}{x^2}\psi(x) = E\psi(x), \tag{4.1}$$

siendo $x > 0$. Multiplicando (4.1) por $-2m/\hbar^2$ obtenemos la ecuación

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{\alpha}{x^2}\psi(x) = \kappa^2\psi(x), \tag{4.2}$$

donde $\alpha \equiv 2ma/\hbar^2$ y $\kappa \equiv \sqrt{-2mE}/\hbar$ (con $E < 0$). Las condiciones de frontera para $\psi(x)$ son

$$\psi(0) = 0\,, \quad \psi(x \to \infty) = 0. \tag{4.3}$$

La primera condición de frontera es necesaria para que $\psi(x)$ sea continua en el origen (de hecho, $\psi = 0$ para $x < 0$) y la segunda es exigida por la normalización de los (posibles) estados ligados:

$$\int_0^\infty dx\ |\psi(x)|^2 = 1. \tag{4.4}$$

Con este problema deseamos mostrar ¡tan solo factorizando el Hamiltoniano $\hat{H}$ en (4.1)! que no existen estados ligados (es decir, estados con energía negativa) para $\alpha < 1/4$ (claramente esto es así para $\alpha < 0$, ya que en este caso el potencial es entonces repulsivo, de manera que el resultado es que no existen estados de cuadrado integrable para $0 < \alpha < 1/4$). (a) Sea $\alpha = \nu(1-\nu)$, donde ν es una nueva constante. Demuestre que

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{a}{x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d}{dx} + \frac{\nu}{x}\right)\left(\frac{d}{dx} - \frac{\nu}{x}\right). \tag{4.5}$$

Ayuda: verifique la igualdad en (4.5) haciendo actuar ambos lados sobre una función arbitraria $F(x)$, además $\nu(1-\nu) = 2ma/\hbar^2$. (b) Escriba ahora el valor medio de la energía de la partícula

$$E = \left\langle \hat{H} \right\rangle = \left\langle \psi, \hat{H}\psi \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\langle \psi, \left(\frac{d}{dx} + \frac{\nu}{x}\right)\left(\frac{d}{dx} - \frac{\nu}{x}\right)\psi \right\rangle. \tag{4.6}$$

Note ahora que

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\langle \left(\frac{d}{dx} + \frac{\nu}{x}\right)^\dagger \psi, \left(\frac{d}{dx} - \frac{\nu}{x}\right)\psi \right\rangle, \tag{4.7}$$

donde el símbolo † corresponde, como es usual, a la operación de conjugación hermítica ¿Por qué esto es así? ¿Puede demostrarlo? (c) A partir de (4.7) y suponiendo que $\nu \in \mathbb{R}$ obtenga el siguiente resultado:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty dx\ \left|\left(\frac{d}{dx} - \frac{\nu}{x}\right)\psi(x)\right|^2 > 0. \tag{4.8}$$

(d) Este resultado nos dice que si ν es real entonces no pueden existir estados ligados. Sin embargo, ya que $\alpha = \nu(1-\nu)$, entonces

$$\nu = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \alpha} \tag{4.9}$$

¡Demuestre este resultado! (e) A partir de (4.9) verifique ahora que si

$$\frac{1}{4} - \alpha < 0 \;\Rightarrow\; \alpha > \frac{1}{4} \;\Rightarrow\; \nu \in \mathbb{C}\,, \tag{4.10}$$

entonces si existen estados ligados. Si le interesó el problema, le recomiendo consultar la referencia: A. M. Essin y D. J. Griffiths, "Quantum mechanics of the $1/x^2$ potential," Am. J. Phys. **74**, 109 (2006).

5°) **El límite no-relativista de la ecuación de Dirac y sus consecuencias:** la ecuación de Dirac independiente del tiempo, en una dimensión, tiene la forma matricial

$$\begin{pmatrix} mc^2 + V(x) & -i\hbar c\frac{d}{dx} \\ +i\hbar c\frac{d}{dx} & -mc^2 + V(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \tag{5.1}$$

(a) Las funciones ϕ y χ son llamadas respectivamente "parte grande" y "parte pequeña" del espinor de Dirac ψ (es decir, de la función de onda de Dirac), $V(x)$ es el potencial eléctrico y c es la velocidad de la luz. Por inspección del sistema (5.1) se puede suponer que las componentes de ψ satisfacen $\phi(x,c) = \phi(x,-c)$ (es decir, ϕ es par en c) y $\chi(x,c) = -\chi(x,-c)$ (es decir, χ es impar en c), además $E(c) = E(-c)$. De esta forma, las funciones $\phi(x,-c)$ y $\chi(x,-c)$ satisfacen las ecuaciones (5.1) con $c \to -c$ ¡compruébelo! (b) Consecuentemente, podemos escribir las siguientes expansiones en c para ϕ y χ:

$$\phi = \phi_{\rm NR} + \frac{1}{c^2}\phi_1 + \frac{1}{c^4}\phi_2 + \cdots\,, \quad \chi = \frac{1}{c}\chi_{\rm NR} + \frac{1}{c^3}\chi_1 + \frac{1}{c^5}\chi_2 + \cdots\,, \tag{5.2}$$

y para la energía:

$$E = mc^2 + E_{\rm NR} + \frac{1}{c^2}E_1 + \frac{1}{c^4}E_2 + \cdots\,. \tag{5.3}$$

Sustituyendo todas estas expansiones en el sistema de ecuaciones (5.1) y comparando los términos de primer orden (que en este caso son los términos de orden c^0 y c^1), demuestre que se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$i\frac{d}{dx}\phi_{\rm NR}(x) + \frac{2m}{\hbar}\chi_{\rm NR}(x) = 0\,, \quad i\frac{d}{dx}\chi_{\rm NR}(x) + \frac{(E_{\rm NR} - V(x))}{\hbar}\phi_{\rm NR}(x) = 0. \tag{5.4}$$

(c) Demuestre que eliminando $\chi_{\rm NR}(x)$ en (5.4) se obtiene la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para $\phi_{\rm NR}(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi_{\rm NR}(x) + V(x)\phi_{\rm NR}(x) = E_{\rm NR}\,\phi_{\rm NR}(x). \tag{5.5}$$

(d) Eliminando ahora a $\phi_{\rm NR}(x)$ en (5.4) encuentre la siguiente EDO para $\chi_{\rm NR}(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\chi_{\rm NR}(x) + f(x)\frac{d}{dx}\chi_{\rm NR}(x) + V(x)\chi_{\rm NR}(x) = E_{\rm NR}\,\chi_{\rm NR}(x), \tag{5.6}$$

donde

$$f(x) \equiv \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}\ln\left(E_{\rm NR} - V(x)\right). \tag{5.7}$$

Note que si usted encuentra una solución de (5.6), entonces la solución de la ecuación de Schrödinger (5.5) se obtiene a partir de una de las ecuaciones (5.4):

$$\phi_{\rm NR}(x) = \frac{-i\hbar}{E_{\rm NR} - V(x)}\frac{d}{dx}\chi_{\rm NR}(x). \tag{5.8}$$

(e) Nota final: la conexión entre las componentes ϕ y χ de la autofunción de Dirac y la autofunción de Schrödinger $\phi_{\rm NR}$ se obtiene manteniendo el primer término en las expansiones para ϕ y χ y despejando a $\chi_{\rm NR}$ del sistema (5.4), es decir,

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \phi_{\rm NR} \\ -i\lambda \frac{d}{dx}\phi_{\rm NR} \end{pmatrix}, \tag{5.9}$$

donde $\lambda = \hbar/2mc$ ¡Demuéstrelo! La asignación (5.9) junto con $E \to mc^2 + E_{\rm NR}$ (obtenida a partir de (5.3) cuando $c \to \infty$) conforman el llamado límite no-relativista para la ecuación de Dirac en una dimensión.

6°) **Sobre el adjunto de un operador:** como se discutió en clase, el adjunto (formal) $\hat{A}^\dagger$ de un operador $\hat{A}$ se define por medio de la relación $\left\langle \psi, \hat{A}^\dagger \phi \right\rangle = \left\langle \hat{A}\psi, \phi \right\rangle$. Estrictamente hablando, esta expresión es válida para todo $\psi \in D(\hat{A})$ y para todo $\phi \in D(\hat{A}^\dagger)$, además, es importante recordar que son las condiciones de frontera las que determinan los dominios de los operadores. En relación con esto, la parte "no obvia", digamos, es precisamente la obtención de las condiciones de frontera para $\hat{A}^\dagger$. Consideremos el ejemplo del operador momentum $\hat{A} = -ihd/dx$ sobre el intervalo $0 \leq x \leq a$ con la condición de frontera $\psi(0) = 0$. (a) Note que

$$\left\langle \psi, \hat{A}^\dagger \phi \right\rangle = \left\langle \hat{A}\psi, \phi \right\rangle = i\hbar \int_0^a dx\, \bar{\psi}'(x)\phi(x). \tag{6.1}$$

Integre por partes la integral en (6.1) y obtenga el siguiente resultado (use la condición $\psi(0) = 0 \in D(\hat{A})$):

$$\left\langle \psi, \hat{A}^\dagger \phi \right\rangle = \int_0^a dx\, \bar{\psi}(x) \left(\hat{A}^\dagger \phi\right)(x) = i\hbar \bar{\psi}(a)\phi(a) + \int_0^a dx\, \bar{\psi}(x) \left(\hat{A}\phi\right)(x). \tag{6.2}$$

(b) Comparando las integrales en (6.2) junto con el término evaluado en $x = a$, intente "despejar" la acción (formal) de $\hat{A}^\dagger$ sobre la función $\phi \in D(\hat{A}^\dagger)$. Ayuda: Aquí tiene la respuesta

$$\left(\hat{A}^\dagger \phi\right)(x) = i\hbar\phi(a)\delta(x-a) + \left(\hat{A}\phi\right)(x). \tag{6.3}$$

(c) ¡Compruebe este resultado! Nota: siendo la acción de $\hat{A}^\dagger$ similar a la de $\hat{A}$, entonces se debe imponer la condición $\phi(a) = 0$, que es justamente la condición de frontera que define al dominio de $\hat{A}^\dagger$. En conclusión, los operadores $\hat{A}$ y $\hat{A}^\dagger$ con sus respectivos dominios son:

$$\hat{A} = -i\hbar \frac{d}{dx} \;\to\; D(\hat{A}) \sim \{\psi : \psi(0) = 0\} \tag{6.4}$$

$$\hat{A}^\dagger = -i\hbar \frac{d}{dx} \;\to\; D(\hat{A}^\dagger) \sim \{\phi : \phi(a) = 0\}. \tag{6.5}$$

(d) Considere ahora al siguiente operador $\hat{A}$ con un dominio más general $D(\hat{A})$:

$$\hat{A} = -i\hbar \frac{d}{dx} \;\to\; D(\hat{A}) \sim \{\psi : \alpha\psi(0) + \beta\psi(a) = 0\}, \tag{6.6}$$

donde α y $\beta \in \mathbb{C}$. Repita el mismo procedimiento de las preguntas anteriores e intente encontrar la condición de frontera que está incluida en el dominio de $\hat{A}^\dagger$. Ayuda: aquí tiene la respuesta

$$\bar{\beta}\phi(0) + \bar{\alpha}\phi(a) = 0. \tag{6.7}$$

(e) Como se discutió en clase, si las condiciones de frontera para $\hat{A}$ y $\hat{A}^\dagger$ son iguales, entonces $\hat{A}$ es autoadjunto. Use la condición de frontera en (6.6) y la (6.7) para encontrar la condición de frontera general que deberán satisfacer $\psi(x)$ y $\phi(x)$ (ambas funciones pertenecientes ahora al dominio común $D(\hat{A}) = D(\hat{A}^\dagger)$). Nota: claramente en este caso la condición de frontera (6.6) y la (6.7) son iguales para toda ψ (y toda ϕ), lo cual implica que α y β no son independientes. Ayuda: aquí tiene la respuesta a la pregunta

$$\psi(a) = \exp(i\theta)\psi(0), \tag{6.8}$$

donde $\theta \in \mathbb{R}$. Nota final: esta condición de frontera general es la que hace al operador momentum un operador auto-adjunto en el intervalo $0 \leq x \leq a$.

7°) **El método de variación de las constantes y la función de Green:** considere la EDO no homogénea

$$\hat{L}u(x) + \lambda u(x) = -F(x), \tag{7.1}$$

donde $\hat{L}$ es un operador real y auto-adjunto, además $u(x) \in \mathbb{C}$, $\lambda \in \mathbb{R}$ y $F(x) \in \mathbb{R}$, sobre el intervalo $a \leq x \leq b$. Introduzcamos ahora una ecuación en la cual una fuerza o perturbación impulsiva (o puntual) se aplica en el punto $x = y \in [a, b]$:

$$\hat{L}G(x, y) + \lambda G(x, y) = -\delta(x - y). \tag{7.2}$$

Como usted sabe, $G(x, y) \in \mathbb{C}$ es la llamada función de Green y $\delta(x - y)$ es la delta de Dirac. (a) Multiplique (7.1) por el complejo conjugado de la función de Green ($\bar{G}(x, y)$), luego multiplique el complejo conjugado de la ecuación (7.2) por $u(x)$ y reste estas dos expresiones. Ahora integre entre a y b y encuentre una relación integral simple entre $u(x)$ y $G(x, y)$ ¿encontró lo que esperaba? Ayuda: suponga que $u(x)$ y $G(x, y)$ satisfacen las mismas condiciones de frontera y no olvide que $\hat{L}$ es auto-adjunto. Nota informativa: como se demostró en clase, la función de Green satisface la relación $G(x, y) = \bar{G}(y, x)$, aunque usted no la necesitará para demostrar el resultado pedido en esta pregunta. (b) Aplique el método de variación de las constantes para obtener la solución de la ecuación (7.2). Suponga que $\hat{L} = d^2/dx^2$ en el intervalo $0 \leq x \leq L$, además escriba (para simplificar la escritura final) $\lambda \equiv k^2$. Ayuda: ya que usted usará el método de variación de las constantes entonces $G(x, y)$ tiene la forma

$$G(x, y) = c_1(x, y)G_1(x, y) + c_2(x, y)G_2(x, y), \tag{7.3}$$

donde $G_1(x, y)$ y $G_2(x, y)$ son soluciones de la homogénea. Otra ayuda: al obtener las funciones $c_1(x, y)$ y $c_2(x, y)$ surgen dos constantes de integración arbitrarias ¡no las elimine! recuerde que aun deben imponerse las condiciones de frontera sobre $G(x, y)$. (c) Imponga la siguiente condición de frontera homogénea a la función de Green general que obtuvo en la parte (b): $G(0, y) = G(L, y) = 0$. Finalmente escriba la función de Green para este problema.