



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**ANÁLISIS PARA ALTAS Y BAJAS ENERGÍAS DEL
OPERADOR DE SHRÖDINGER MATRICIAL EN EL SEMI EJE
CON CONDICIONES GENERALES A LA FRONTERA**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICA

P R E S E N T A:

SOFÍA RAMOS GUERRERO



**DR. RICARDO ALBERTO WEDER
ZANINOVICH**

Ciudad Universitaria, D.F. 2015



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

1. Datos del alumno
Ramos
Guerrero
Sofía
55 54 76 62
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
40900673-3
2. Datos del tutor
Dr.
Ricardo Alberto
Weder
Zaninovich
3. Datos del sinodal 1
Dr.
Pablo
Barberis
Blostein
4. Datos del sinodal 2
Dr.
Luis Octavio
Silva
Pereyra
5. Datos del sinodal 3
Dr.
Carlos
Villegas
Blas
6. Datos del sinodal 4
Dra.
María de los Ángeles
Sandoval Romero
7. Datos del trabajo escrito
Análisis para altas y bajas energías del operador de Schrödinger matricial en el semi eje con condiciones generales a la frontera
138 p
2015

Índice general

Índice general	3
1. Introducción y alcance de la Tesis	5
1.1. Introducción	5
1.2. Alcance de la Tesis	6
2. Espacios de Hilbert y Operadores Lineales	9
2.1. Espacios de Hilbert	11
2.2. Teoría de la medida de Lebesgue	12
2.2.1. Medida exterior	13
2.2.2. Conjuntos medibles	13
2.2.3. Medida de Lebesgue	13
2.3. Operadores lineales en espacios de Hilbert	15
2.4. Espacios L^p	17
3. Preliminares	19
3.1. Equivalencia de las formulaciones de la condición a la frontera	24
3.2. Soluciones matriciales	28
3.3. La matriz de Jost y la matriz de Dispersión	43
3.4. Transformaciones	50
4. Análisis del operador de Schrödinger para bajas energías	57
4.1. Comportamiento de k -chica	58
4.2. Comportamiento para k -chica de $J(k)^{-1}$ y de $S(k)$	71
4.3. Resultados adicionales para k -chica	79
5. Análisis y teorema de Levinson del operador de Schrödinger para altas energías	83
5.1. Las matrices de Jost y de dispersión con potencial cero	84
5.2. Comportamiento de k -grande	86
5.3. Estados Ligados	93
5.4. Teorema de Levinson	103

6. Análisis del operador de Schrödinger para bajas energías II	111
6.1. Soluciones matriciales II	111
6.2. Comportamiento de k -chica II	114
6.2.1. Comportamiento de k -chica para el caso genérico	116
6.2.2. Invertibilidad de la matriz relacionada \mathcal{J}	117
6.3. Análisis para k -chica de $J(k)^{-1}$ y $S(k)$ en el caso excepcional	117
7. Ejemplos	121
7.1. Ejemplos del análisis del operador de Schrödinger para bajas energías .	121
7.1.1. La condición a la frontera δ'	121
7.1.2. La condición a la frontera de Kirchhoff	124
7.1.3. La condición a la frontera de XOR	126
7.1.4. Ejemplo 6.1.4	128
7.2. Ejemplo del análisis del operador de Schrödinger para bajas energías II	130
Referencias	137

Capítulo 1

Introducción y alcance de la Tesis

1.1. Introducción

La *teoría de la dispersión* evoca una imagen simple: Se empieza con varios objetos separados, uno lejos del otro, que se mueven el uno hacia el otro, hasta que chocan y vuelven a separarse. No siempre son importantes los detalles de la colisión, siempre y cuando se prediga dónde y cómo van a terminar los objetos.

El problema directo de dispersión consiste en determinar la matriz de dispersión y la información sobre los estados ligados cuando se conoce el potencial autoadjunto y las condiciones a la frontera autoadjuntas. Existe otro problema teórico conocido como el *problema de dispersión inverso*, que consiste en recuperar el potencial y la condición a la frontera para un grupo de datos de dispersión.

Se sabe en mecánica cuántica que las partículas dispersadas por un campo potencial están completamente determinadas por la forma asintótica de la función de onda en infinito. De acuerdo a las ideas de Heisenberg, precisamente el comportamiento asintótico de esas funciones de onda es lo que tiene un significado físico. La cuestión que surge naturalmente entonces es si es posible reconstruir el potencial a partir del conocimiento de la forma asintótica de las funciones de onda en infinito y, si es posible, encontrar un método para llevar a cabo la construcción. Otra pregunta importante del problema de dispersión inverso es la caracterización de los datos de dispersión; esto es, que los datos de dispersión correspondan efectivamente a un único potencial y, eventualmente, a una única condición a la frontera.

En el problema de dispersión inverso, considerando la ecuación de Schrödinger con un potencial autoadjunto y condiciones a la frontera autoadjuntas definidas, lo que se busca en esta tesis es establecer las asíntotas para altas y bajas energías de varias cantidades relacionadas con la dispersión, como las soluciones de dispersión, la matriz de Jost y la matriz de dispersión.

El análisis para bajas energías para la matriz de dispersión no es fácil, ni siquiera en el caso escalar. Por ejemplo, en el caso escalar para el eje completo se ha establecido que la caracterización de los datos de dispersión dados por Faddeev podrían no sostenerse y que de hecho la continuidad de la matriz de dispersión no es clara cuando el potencial valuado en un número real pertenecía a $L_1^1(\mathbb{R})$, y se introdujo una suposición más fuerte de que pertenecía a $L_2^1(\mathbb{R})$ [2]. La prueba de la continuidad de la matriz de dispersión se dio después en el caso escalar.

Para la ecuación de Schrödinger, pueden definirse soluciones regulares e irregulares a partir de las condiciones a la frontera. Las dos soluciones irregulares, conocidas como la *solución de Jost*, cumplen con la condición de que, cuando $r \rightarrow \infty$, se comportan como una onda plana. Además, forman un sistema de soluciones linealmente independientes, por lo que la solución regular puede expresarse como una combinación lineal de ambas.

La matriz de dispersión puede expresarse en términos de la solución de Jost y de la solución regular. Su análisis para altas y bajas energías es crucial para el estudio tanto del problema de dispersión directo como del inverso, pues si no se conoce el comportamiento de los datos de dispersión para energías cercanas a cero y muy grandes no es posible resolver los problemas de dispersión relevantes. Además tiene una relevancia directa en la dispersión en mecánica cuántica que involucra partículas de estructuras internas como espines, dispersión en gráficas y cables cuánticos. Por ejemplo, el problema que estudiamos describe η cables cuánticos muy delgados conectados formando una gráfica de un vértice con puntas abiertas. Una condición a la frontera lineal es impuesta en el vértice y el comportamiento de cada cable está regido por el operador de Schrödinger. El problema tiene relevancia física en el diseño de puertas elementales en computación cuántica y en nanotubos para aparatos electrónicos microscópicos donde, por ejemplo, cuerdas de átomos puedan formar una gráfica con forma de estrellas.

1.2. Alcance de la Tesis

Esta tesis es un trabajo de deconstrucción de los artículos [1] y [2]. El primero considera la ecuación matricial de Schrödinger con un potencial matricial en el semi eje con la condición a la frontera autoadjunta más general cuando el potencial matricial es integrable y tiene un primer momento finito, y muestra que la matriz de dispersión correspondiente es continua en energía cero, da una fórmula explícita para ese caso y establece las asíntotas para bajas energías de la matriz de Jost, su inversa y otras cantidades relevantes. El segundo considera la misma ecuación y establece las asíntotas para altas energías de las cantidades mencionadas previamente; además, bajo la suposición de que el potencial es integrable y tiene un primer momento finito, se deriva el teorema de Levinson, relacionando el número de estados ligados con el cambio en el argumento del determinante de la matriz de dispersión. Finalmente, se enuncian los resultados

principales de [3], una ampliación de [1] que supone que el potencial matricial tiene un segundo momento.

En el segundo capítulo se determina el marco teórico: Se establecen las bases de los espacios de Hilbert y de los operadores lineales: Se definen los espacios de Hilbert y algunas desigualdades como la de Bessel y la de Schwartz, la medida de Lebesgue y sus propiedades, los operadores lineales y sus propiedades básicas y los espacios L^p .

En el tercer capítulo se estudian los conceptos, las relaciones y las propiedades básicas necesarias para los dos artículos. Se estudian las condiciones a la frontera y se definen las matrices de Jost y de dispersión y se estudia cómo cambian bajo algunas transformaciones.

En el cuarto se estudian las asíntotas para la matriz de Jost, la matriz inversa de Jost y la matriz de dispersión, para bajas energías, y se da una forma explícita para la matriz S a energía cero. En el quinto se estudian las mismas cantidades, pero para altas energías. Además, se demuestra el Teorema de Levinson.

En el sexto capítulo se enuncian los resultados principales de [3]. Finalmente, en el séptimo capítulo se consideran algunos ejemplos de los artículos [1] y [3].

Capítulo 2

Espacios de Hilbert y Operadores Lineales

En este capítulo empiezan a transcribirse algunas de las descripciones físicas de la teoría de dispersión a un lenguaje matemático, junto con los conceptos necesarios más relevantes para entenderlo, y su contenido se basa en el libro [10] y en las notas del curso Matemáticas Avanzadas de Física impartido por el Dr. Ricardo Weder.

Definición 2.1 *Un espacio pre-hilbertiano está definido por las siguientes condiciones:*

1. V es un espacio vectorial sobre \mathbb{R} o sobre \mathbb{C} .
2. Está definido un producto escalar interno $(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ tal que:
 - a) $(x, x) \geq 0$ y $(x, x) = 0$ si y sólo si $x = 0$, con $x \in V$.
 - b) $\overline{(x, y)} = (y, x)$, $x, y \in V$.
 - c) $(\alpha x + \beta y, z) = \alpha(x, z) + \beta(y, z)$, $x, y, z \in V$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$.
 - d) Se tiene entonces anti linealidad: $(z, \alpha x + \beta y) = \overline{(\alpha x + \beta y, z)} = \overline{\alpha(x, z) + \beta(y, z)} = \bar{\alpha}(z, x) + \bar{\beta}(z, y)$.
 - e) Tiene definida una norma: $\|x\| = \sqrt{(x, x)}$, donde la norma es una función $\|\cdot\| : V \rightarrow [0, \infty)$ tal que $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$ y $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.

Algunos ejemplos de espacios son:

- i) l^2 , con $z = (z_1, z_2, \dots) \in \mathbb{C}^\infty$, con el producto interior definido como: $(z, y) = \sum_{i=1}^{\infty} z_i y_i^*$ y con la condición de convergencia: $\sum_{i=1}^{\infty} |z_i|^2 < \infty$.
- ii) El espacio de funciones dado por:

$$C[a, b] = \{f \text{ continuas en } [a, b]\}$$

con

$$(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)^* dx,$$

donde

$$(f, f) = \int_a^b |f(x)|^2 dx \geq 0$$

y $(f, f) = 0$ si y sólo si $f(x) = 0$.

Definición 2.2 Sea V un espacio vectorial con producto interno. Entonces,

a) $x, y \in V$ son ortogonales si $(x, y) = 0$.

b) Un sistema $\{x_i\}_{i=1}^{\infty}$ es ortogonal si $(x_i, x_j) = 0 \forall i \neq j$.

El sistema es además ortonormal si $(x_i, x_j) = \delta_{ij} \forall i, j$.

Teorema 2.3 Sea $\{x_i\}_{i=1}^N$ un sistema ortonormal. Entonces,

$$\|x\|^2 = \sum_{i=1}^N |(x, x_i)|^2 + \|x - \sum_{i=1}^N (x, x_i)x_i\|^2, \quad (2.1)$$

con N finito.

Teorema 2.4 Desigualdad de Bessel. Para todo sistema ortonormal $\{x_i\}_{i=1}^N$, se tiene que:

$$\|x\|^2 \geq \sum_{i=1}^N |(x, x_i)|^2. \quad (2.2)$$

Esta igualdad también se cumple para $N = \infty$.

Teorema 2.5 Desigualdad de Schwartz. Sean $x, y \in \mathbb{C}^N$. Entonces,

$$|(x, y)| \leq \|x\| \cdot \|y\|. \quad (2.3)$$

Teorema 2.6 Ley del paralelogramo. Sean $x, y \in \mathbb{C}^N$. Entonces,

$$\|x + y\|^2 + \|x - y\|^2 = 2\|x\|^2 + 2\|y\|^2 = 2(\|x\|^2 + \|y\|^2), \quad (2.4)$$

siempre y cuando $\|x\| = \sqrt{(x, x)}$ para algún producto escalar.

Proposición 2.7 Sean $x, y \in \mathbb{C}^N$. Entonces,

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|. \quad (2.5)$$

Dem. Tenemos que:

$$\begin{aligned}
 \|x + y\|^2 &= (x + y, x + y) \\
 &= (x, x) + (y, x) + (x, y) + (y, y) \\
 &\leq \|x\|^2 + \|y\|^2 + 2\operatorname{Re}(x, y) \\
 &\leq \|x\|^2 + \|y\|^2 + 2\|x\| \cdot \|y\| \\
 &= (\|x\| + \|y\|)^2.
 \end{aligned}$$

Es decir,

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|.$$

■

2.1. Espacios de Hilbert

Definición 2.8 *Un espacio de Hilbert es un espacio vectorial con producto escalar que es completo; es decir, que toda sucesión de Cauchy es convergente, donde una sucesión es de Cauchy si $\lim_{n,m \rightarrow \infty} \|x_n - x_m\| = 0$ si y sólo si $\forall \epsilon$ existe $N \in \mathbb{N}$ tal que $\|x_n - x_m\| < \epsilon$ si $n, m \geq N$.*

Definición 2.9 *Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert. Un subespacio $V \subset \mathcal{H}$ es un subespacio de Hilbert si V es completo.*

Definición 2.10 *Sea $M \subset \mathcal{H}$ un subespacio de Hilbert. Su complemento ortogonal es:*

$$M^\perp = \{x \in \mathcal{H} \mid (x, y) = 0 \ \forall y \in M\}. \quad (2.6)$$

Definición 2.11 *Sea $M \subset \mathcal{H}$ un subespacio de Hilbert. La distancia (x, M) está definida como:*

$$(x, M) = \inf_{y \in M} \|x - y\| \quad (2.7)$$

Teorema 2.12 *Teorema de proyección. Sean \mathcal{H} un espacio de Hilbert y $M \subset \mathcal{H}$ un subespacio de Hilbert. Entonces $\mathcal{H} = M \oplus M^\perp$. Es decir, $\forall x \in \mathcal{H}$ existen $z \in M, w \in M^\perp$ únicos tales que $X = z + w$.*

Nótese que esto sólo es cierto si M es un subespacio de Hilbert, ya que si no lo es no necesariamente sería cerrado, y la clausura es necesaria para que se cumpla el teorema.

Definición 2.13 *Un espacio de Banach es un espacio vectorial normado completo.*

Definición 2.14 *Una base ortonormal es un sistema ortogonal y completo; i.e., un sistema al que no se le pueden agregar vectores sin que deje de ser ortogonal.*

Teorema 2.15 Sea $\{x_i\}_{i=1}^{\infty}$ una base ortonormal. Entonces, $\forall x \in \mathcal{H}$,

$$x = \sum_{i=1}^{\infty} (x, x_i)x_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N (x, x_i)x_i$$

y

$$\|x\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |(x, x_i)|^2.$$

2.2. Teoría de la medida de Lebesgue

Definición 2.16 Un álgebra es una familia \mathcal{A} de subconjuntos de U tal que:

- i) $\forall A \in \mathcal{A}$ se tiene que $A^c \in \mathcal{A}$ ($\tilde{A} \in \mathcal{A}$).
- ii) $\forall A \in \mathcal{A}$ se tiene que $A \cup B \in \mathcal{A}$.

Definición 2.17 \mathcal{A} es una sigma álgebra (σ -álgebra) si:

- i) $\forall A \in \mathcal{A}$ se tiene que $\tilde{A} \in \mathcal{A}$.
- ii) $\forall A \in \mathcal{A}$ se tiene que $\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{A}$.

Existen cuatro características que son deseables en una medida definida para todos los conjuntos de números reales:

- i) La medida m es una función $m : P(\mathbb{R}) \rightarrow [0, \infty]$ tal que $\forall A \subset \mathbb{R} \ m(A) \in [0, \infty]$.
- ii) Para cualquier intervalo I , $m(I) = l(I)$, donde l es la longitud del intervalo.
- iii) m es numerablemente aditiva. Es decir,

$$m\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} m(A_i),$$

si $A_i \cap A_j = \emptyset$ para toda $i \neq j$.

- iv) m es invariante bajo traslaciones. Esto es,

$$m(A + x) = m(A) \quad \forall A \subset \mathbb{R}, \quad \forall x \in \mathbb{R},$$

donde

$$A + x = \{y \in \mathbb{R} | y = x + z, z \in A\}.$$

Sin embargo, no existe ninguna función que cumpla con estas cuatro características, por lo que la medida se definirá sólo para una σ -álgebra de números reales. En consecuencia, no todos los conjuntos tienen medida. [5]

Definición 2.18 Una medida numerablemente aditiva es una función m de una σ -álgebra \mathcal{A} en $[0, \infty]$ tal que:

$$m\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} m(A_i), \quad (2.8)$$

si $A_i \cap A_j = \emptyset$ cuando $i \neq j$.

2.2.1. Medida exterior

Definición 2.19 La medida exterior m^* de $A \subset \mathbb{R}$ está dada por:

$$m^*(A) = \inf \sum_n l(I_n), \quad (2.9)$$

con $A \subset \bigcup_n I_n$, donde I_n es un intervalo abierto.

Proposición 2.20 Para cualquier intervalo $J \subset \mathbb{R}$, se tiene que $m^*(J) = l(J)$.

Proposición 2.21 a) Si $A \subset B$, entonces $m^*(A) \leq m^*(B)$.

b) $\forall A_n \subset \mathbb{R}$, se tiene que $m^*\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) \leq \sum_{n=1}^{\infty} m^*(A_n)$.

Una conclusión de la proposición anterior es que si A es numerable, $m^*(A) = 0$.

2.2.2. Conjuntos medibles

Definición 2.22 Un conjunto $E \subset \mathbb{R}$ es medible si $\forall A \subset \mathbb{R}$ se cumple que

$$m^*(A) = m^*(A \cap E) + m^*(A \cap E^c). \quad (2.10)$$

Un conjunto medible satisface ciertas características:

1. Cualquier conjunto E tal que $m^*(E) = 0$ es medible.
2. Si los conjuntos E_1 y E_2 son medibles, el conjunto $E_1 \cup E_2$ también es medible.

Una conclusión de estas características es:

Teorema 2.23 La familia \mathcal{M} de conjuntos medibles es una σ -álgebra.

2.2.3. Medida de Lebesgue

Definición 2.24 La medida de Lebesgue, m , está dada por:

$$m = m^*|_{\mathcal{M}}. \quad (2.11)$$

Teorema 2.25 La medida de Lebesgue, m , es numerablemente aditiva.

Definición 2.26 Sea $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Entonces f es continua si $f^{-1}(O) \subset \mathbb{R}$ es abierto para todos los abiertos $O \subset \mathbb{R}$, con $f^{-1}(A) = \{x \in \mathbb{R} | f(x) \in A\}$.

Proposición 2.27 Sea f a valores reales extendidos $\tilde{\mathbb{R}} = \mathbb{R} \cup \{-\infty, \infty\}$ definida en D medible. Entonces son equivalentes:

- a) $\forall \alpha \in \mathbb{R}, \{x \in D | f(x) > \alpha\} \in \mathcal{M}$.
- b) $\forall \alpha \in \mathbb{R}, \{x \in D | f(x) \geq \alpha\} \in \mathcal{M}$.
- c) $\forall \alpha \in \mathbb{R}, \{x \in D | f(x) < \alpha\} \in \mathcal{M}$.
- d) $\forall \alpha \in \mathbb{R}, \{x \in D | f(x) \leq \alpha\} \in \mathcal{M}$.

Nótese que cualquiera de los incisos anteriores implica que:

$$\forall \alpha \in \mathbb{R}, \{x \in D | f(x) = \alpha\} \in \mathcal{M}.$$

Definición 2.28 Sea $f : D \rightarrow \mathbb{R}$. La función f es medible si $D \in \mathcal{M}$ y si se cumple cualquiera de los incisos de la proposición 2.27.

Definición 2.29 Definimos la función característica como:

$$\chi_A(x) = \begin{cases} 1 & x \in A \\ 0 & x \notin A. \end{cases} \quad (2.12)$$

La función característica de un conjunto A no medible es un ejemplo de función no medible.

Proposición 2.30 Sean f, g funciones a valores reales definidas ambas en D ($f, g : D \rightarrow \mathbb{R}$) medibles. Entonces son medibles:

- i) $f + c$,
- ii) cf ,
- iii) $f + g$,
- iv) fg ,

con $c \in \mathbb{R}$ constante.

Definición 2.31 Decimos que las funciones f y g definidas en D son iguales en casi todo punto si

$$m(\{x \in D | f(x) \neq g(x)\}) = 0.$$

Proposición 2.32 Si f es medible y $f = g$ en casi todo punto, entonces g es medible.

Definición 2.33 Decimos que f es una función simple si es medible y toma un número finito de valores.

Definición 2.34 La integral de Lebesgue de una función simple $f = \sum a_j \chi_{A_j}(x)$ está definida como:

$$\int f = \sum_{j=1}^n a_j m(A_j), \quad (2.13)$$

donde a_j son números reales distintos de 0 y $m(A_j) < \infty$ (es decir, los conjuntos A_j son medibles).

Definición 2.35 Sea f definida y acotada en un conjunto medible A con medida finita $m(A)$. Entonces,

$$\inf_{f \leq \psi} \int_E \psi(x) dx = \sup_{f \geq \phi} \int_E \phi(x) dx \quad (2.14)$$

si y sólo si f es medible [5].

Definición 2.36 Sea $f : E \subset \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ es acotada y $m(E) < \infty$. Entonces definimos la integral de Lebesgue como:

$$\int_E f = \inf_{\psi \geq f} \int_E \psi = \sup_{\phi \leq f} \int_E \phi, \quad (2.15)$$

donde ψ y ϕ son funciones simples.

Proposición 2.37 Sea f acotada, integrable por Riemann en $[a, b]$. Entonces f es integrable por Lebesgue en $[a, b]$ y

$$\text{Riemann } R \int_a^b f(x) dx = \int_{[a,b]} f \text{ Lebesgue} . \quad (2.16)$$

2.3. Operadores lineales en espacios de Hilbert

Un *operador lineal* en un espacio de Hilbert \mathcal{H} es un mapeo lineal entre vectores de \mathcal{H} . Estos operadores están definidos por su dominio, D , por lo que dos operadores lineales A y B son iguales si y sólo si $D(A) = D(B)$ y $Af = Bf \forall f \in D(A) = D(B)$. También se usa la siguiente notación: Si M es un subconjunto de DA , entonces AM es el conjunto de vectores f en H tales que $f = Ag$ para algún g en M . El conjunto $AD(A)$ se conoce como el rango del operador A .

Definición 2.38 Un *operador lineal* A' es una extensión de A si $D(A) \subset D(A')$ y si $A'f = Af \forall f \in D(A)$.

Definición 2.39 *Un operador lineal tiene clausura si para cualesquiera dos sucesiones $\{f_n\}$ y $\{f'_n\}$ de Cauchy en $D(A)$ que convergen fuertemente al mismo límite f y $\{Af_n\}$ y $\{Af'_n\}$ también son de Cauchy, se cumple que $\lim Af_n = \lim Af'_n$.*

Si un operador A tiene una extensión cerrada B , entonces tiene clausura. Por otro lado, si A tiene clausura, entonces su clausura \bar{A} es su extensión cerrada más chica.

Definición 2.40 *Un operador lineal A es acotado si existe un número $M < \infty$ tal que $\|Af\| \leq M\|f\|$ para toda $f \in D(A)$. Si ese número M no existe, entonces A es no acotado.*

Para los operadores acotados se define la norma como:

$$\|A\| = \sup_{f \in D(A), f \neq 0} \frac{\|Af\|}{\|f\|}. \quad (2.17)$$

Un operador acotado siempre tiene clausura.

Proposición 2.41 *Si A es un operador lineal acotado en un espacio de Hilbert \mathcal{H} , tiene una extensión acotada única \bar{A} al subespacio generado por $D(A)$, es decir, la clausura $\overline{D(A)}$ de $D(A)$. \bar{A} es cerrado, y $\|\bar{A}\| = \|A\|$. En particular, si $D(A)$ es denso en \mathcal{H} , entonces $D(\bar{A}) = \mathcal{H}$.*

Definición 2.42 *El dominio de un operador adjunto A^* está dado por todos los vectores $g \in \mathcal{H}$ para los que existe $g^* \in \mathcal{H}$ tal que:*

$$(g, Af) = (g^*, f) \quad \forall f \in D(A),$$

donde A tiene un dominio denso. Así, el mapa A^* está definido como $A^*g = g^*$.

Claramente A^* es un operador lineal. Además, el adjunto de un operador lineal A siempre es un operador cerrado. También se cumple que si A tiene clausura y es $D(A)$ denso, entonces

$$A^* = (\bar{A})^* = \bar{A}^*.$$

Proposición 2.43 *Sea A un operador acotado con $D(A) = \mathcal{H}$. Entonces A^* es acotado, $D(A^*) = \mathcal{H}$ y $\|A^*\| = \|A\|$. Además, $A^{**} = A$.*

Definición 2.44 *Una proyección ortogonal, denotada por F , está definida por las siguientes características:*

$$D(F) = \mathcal{H} \quad (2.18)$$

$$F^2 = F = F^*. \quad (2.19)$$

La propiedad más interesante de las proyecciones es que el conjunto de todas las proyecciones ortogonales corresponde uno a uno con la familia de todos los subespacios de \mathcal{H} .

Definición 2.45 Ω es una isometría si es un operador lineal tal que $D(\Omega) = \mathcal{H}$ y si $\Omega^*\Omega = I$ para toda $f \in \mathcal{H}$.

Definición 2.46 Una isometría U para la que $UU^* = I$ es además el operador identidad es un operador unitario. Es decir, U es unitario si

$$D(U) = \mathcal{H} \quad (2.20)$$

$$UU^* = I. \quad (2.21)$$

Equivalentemente, U es unitario si $\text{Rango}\{U\} = \mathcal{H}$.

Definición 2.47 Un operador A es simétrico si $D(A)$ es denso en \mathcal{H} y $A \subset A^*$. Es decir, si

$$(Af, g) = (g, Af)$$

para todo $f, g \in D(A)$.

Un caso especial es un *operador autoadjunto*, caracterizado por $A^* = A$. Si A es acotado y simétrico y $D(A)$ sólo es denso en \mathcal{H} , entonces la clausura \bar{A} de A es autoadjunto

Un operador simétrico A siempre tiene clausura. Además, $A^{**} \subset A^* = \bar{A}^*$. De aquí se sigue que la clausura \bar{A} de un operador simétrico A también es simétrica y que un operador autoadjunto siempre es cerrado.

Generalmente un operador simétrico A se dice *esencialmente autoadjunto* si \bar{A} es autoadjunto. Un operador esencialmente autoadjunto tiene una y sólo una extensión autoadjunta.

Definición 2.48 Una función ψ_a medible es esencialmente acotada si existe un número $M < \infty$ tal que $|\psi(x)| \leq M$ para casi todo $x \in \Delta$ (con respecto a la medida de Lebesgue).

2.4. Espacios L^p

Primero definiremos la función característica de un subconjunto medible.

Definición 2.49 Sea $(M; \mu)$ un espacio de medida; i.e., sea μ una medida definida en una σ -álgebra de subconjuntos del conjunto M . Sea Δ es un subconjunto medible de M . Entonces definimos la función característica de Δ como:

$$\chi_\Delta(s) = \begin{cases} 1 & s \in \Delta \\ 0 & s \notin \Delta. \end{cases} \quad (2.22)$$

Sea $p \in [1, \infty]$. Entonces $L^p(M; d\mu)$ es el conjunto de todas las clases de equivalencia de funciones medibles $f : M \rightarrow \mathbb{C}$ que cumplen $\|f\|_p < \infty$, donde dos funciones son equivalentes si son iguales μ -casi todo punto, y donde $\|f\|_p$ está definido como:

$$\|f\|_p = \left[\int_M |f(s)|^p d\mu(s) \right]^{1/p} \quad \text{si } p < \infty \quad (2.23)$$

y

$$\|f\|_\infty = \inf_{s \in M} \sup |f(s)|, \quad (2.24)$$

donde se está tomando el ínfimo del supremo de $h(s)$ con h variando sobre todas las funciones que son iguales a g en casi todo punto. Es decir, el ínfimo de todas las m tales que la medida $\mu(\Delta_m)$ del conjunto $\Delta_m = \{s \in M \mid |g(s)| > m\}$ es cero.

$L^p(M; d\mu)$ es un espacio lineal normado completo con respecto a la norma $\|\cdot\|_p$.

Teorema 2.50 *Desigualdad de Hölder.* Sean $f \in L^p(M; d\mu)$, $g \in L^q(M; d\mu)$ y $1/r = 1/p + 1/q$. Entonces $f(\cdot)g(\cdot) \in L^r(M; d\mu)$ y

$$\|fg\|_r \leq \|f\|_p \|g\|_q. \quad (2.25)$$

Los siguientes enunciados son muy útiles cuando se trata con espacios L^p .

Lema 2.51 (a) Si Δ es un subconjunto medible de M con medida finita, $p \in [1, \infty]$ y $f \in L^p(M; d\mu)$, entonces $\chi_\Delta(\cdot)f(\cdot) \in L^r(M; d\mu)$ para cada $r \in [1, p]$. (b) Si $1 \leq p < q \leq \infty$, entonces $L^p(M; d\mu) \cap L^q(M; d\mu) \subset L^r(M; d\mu)$ para cada $r \in [p, q]$.

Teorema 2.52 *Teorema de la convergencia dominada de Lebesgue.* Sean

- i) $g, f_t \in L^1(M; d\mu) (t \in \mathbb{R})$,
- ii) $|f_t(s)| \leq g(s)$ para casi toda $s \in M$ y toda t ,
- iii) $\lim_{t \rightarrow t_0} f_t(s) = f(s)$ para casi toda $s \in M$.

Entonces se tiene que $f \in L^1(M; d\mu)$ y

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \int_M f_t(s) d\mu(s) = \int_M f(s) d\mu(s).$$

Capítulo 3

Preliminares

Consideremos la ecuación matricial de Schrödinger en el semi-eje

$$-\psi'' + V(x)\psi = k^2\psi, \quad x \in (0, +\infty), \quad (3.1)$$

donde la prima denota la derivada respecto a la coordenada espacial x y el potencial V es una función matricial $n \times n$ valuada que pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$ con $\mathbb{R}^+ := (0, +\infty)$. Nótese que $V \in L_1^1(\mathbb{I})$ significa que cada entrada de la matriz V es Lebesgue-medible en el intervalo \mathbb{I} y además:

$$\int_{\mathbf{I}} dx(1 + |x|) \|V(x)\| < +\infty,$$

donde $\|V(x)\|$ denota la norma matricial. Claramente, una función matricial pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$ si y sólo si cada una de sus entradas pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$. Nótese que no se ha asumido que V sea real, pero sí se impondrá la condición de que sea autoadjunto, i.e.

$$V = V^\dagger, \quad (3.2)$$

donde la daga denota el adjunto (el conjugado de la matriz transpuesta). Sin pérdida de generalidad, podemos ver la función de onda $\psi(k, x)$ de (3.1) tanto como una función vectorial valuada con n componentes, o como una función matricial $n \times p$ valuada para algún p tal que $1 \leq p \leq n$.

Estamos interesados en el estudio de (3.1) con un potencial autoadjunto V en $L_1^1(\mathbb{R}^+)$ bajo la condición a la frontera más general en $x = 0$. Ésta es la generalización de la versión escalar (con $n = 1$) del problema correspondiente, donde la condición a la frontera más general en $x = 0$ puede verse como:

$$(\cos \theta)\psi(0) + (\sin \theta)\psi'(0) = 0, \quad (3.3)$$

donde el parámetro θ toma valores en el intervalo $(0, \pi]$. El caso especial cuando $\theta = \pi$ corresponde a la condición a la frontera de Dirichlet, y el caso cuando $\theta = \pi/2$ corresponde a la condición a la frontera de Neumann.

Una formulación de la condición a la frontera más general en $x = 0$ para (3.1) es la siguiente:

$$A_1\psi(0) + B_1\psi'(0) = 0, \quad (3.4)$$

de forma que las matrices constantes $n \times n$ A_1 y B_1 satisfacen:

$$A_1B_1^\dagger = B_1A_1^\dagger, \quad (3.5)$$

$$\text{rank}[A_1 \ B_1] = n, \quad (3.6)$$

i.e. $A_1B_1^\dagger$ es autoadjunta y la matriz $n \times 2n$ $[A_1 \ B_1]$ tiene rango n .

Otra formulación de la condición a la frontera más general en $x = 0$ para (3.1) está en términos de la matriz unitaria constante $n \times n$ U_2 como:

$$-B_2^\dagger\psi(0) + A_2^\dagger\psi'(0) = 0, \quad (3.7)$$

donde las matrices constantes auxiliares $n \times n$ A_2 y B_2 esán dadas por:

$$A_2 := \frac{1}{2}(U_2 + I_n), \quad B_2 := \frac{i}{2}(U_2 - I_n), \quad (3.8)$$

con I_n la matriz identidad $n \times n$.

Proposición 3.1 *Las matrices A_2 y B_2 satisfacen las siguientes relaciones:*

$$A_2^\dagger A_2 = A_2 A_2^\dagger, \quad B_2^\dagger B_2 = B_2 B_2^\dagger, \quad A_2 B_2^\dagger = B_2 A_2^\dagger, \quad A_2^\dagger B_2 = B_2^\dagger A_2, \quad (3.9)$$

$$A_2 A_2^\dagger + B_2 B_2^\dagger = I_n, \quad A_2 + iB_2 = I_n, \quad A_2 - iB_2 = U_2. \quad (3.10)$$

Dem. Tenemos que, por (3.8):

$$\begin{aligned} \rightarrow A_2^\dagger A_2 &= \frac{1}{2}(U_2^\dagger + I_n) \frac{1}{2}(U_2 + I_n) = \frac{1}{4}(I_n + U_2^\dagger + U_2 + I_n) \\ &= \frac{1}{4}(2I_n + U_2^\dagger + U_2) = \frac{1}{2}(U_2 + I_n) \frac{1}{2}(U_2^\dagger + I_n) = A_2 A_2^\dagger \\ &\Rightarrow A_2^\dagger A_2 = A_2 A_2^\dagger. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow B_2^\dagger B_2 &= -\frac{i}{2}(U_2^\dagger - I_n) \frac{i}{2}(U_2 - I_n) = \frac{1}{4}(I_n - U_2^\dagger - U_2 + I_n) \\ &= \frac{1}{4}(2I_n - U_2^\dagger - U_2) = \frac{i}{2}(U_2 - I_n) \frac{(-i)}{2}(U_2^\dagger - I_n) = B_2 B_2^\dagger \\ &\Rightarrow B_2^\dagger B_2 = B_2 B_2^\dagger. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rightarrow A_2 B_2^\dagger &= \frac{1}{2}(U_2 + I_n) \frac{(-i)}{2}(U_2^\dagger - I_n) = -\frac{i}{4}(I_n + U_2^\dagger - U_2 - I_n) \\
&= -\frac{i}{4}(U_2^\dagger - U_2) = \frac{i}{2}(U_2 - I_n) \frac{1}{2}(U_2^\dagger + I_n) = B_2 A_2^\dagger \\
&\Rightarrow A_2 B_2^\dagger = B_2 A_2^\dagger.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rightarrow A_2^\dagger B_2 &= \frac{1}{2}(U_2^\dagger + I_n) \frac{i}{2}(U_2 - I_n) = \frac{i}{4}(I_n + U_2^\dagger - U_2 - I_n) \\
&= -\frac{i}{4}(U_2^\dagger - U_2) = \frac{i}{2}(U_2 - I_n) \frac{1}{2}(U_2^\dagger + I_n) = B_2^\dagger A_2 \\
&\Rightarrow A_2^\dagger B_2 = B_2^\dagger A_2.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rightarrow A_2 A_2^\dagger + B_2 B_2^\dagger &= \frac{1}{2}(U_2 + I_n) \frac{1}{2}(U_2^\dagger + I_n) + \frac{i}{2}(U_2 - I_n) \frac{(-i)}{2}(U_2^\dagger - I_n) \\
&= \frac{1}{4}(2I_n + U_2^\dagger + U_2) + \frac{1}{4}(2I_n - U_2^\dagger - U_2) = \frac{1}{4}4I_n = I_n \\
&\Rightarrow A_2 A_2^\dagger + B_2 B_2^\dagger = I_n.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rightarrow A_2 + iB_2 &= \frac{1}{2}(U_2 + I_n) + i \frac{i}{2}(U_2 - I_n) \\
&= \frac{1}{2}(I_n + U_2) - \frac{1}{2}(U_2 - I_n) = \frac{1}{2}2I_n = I_n \\
&\Rightarrow A_2 + iB_2 = I_n.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rightarrow A_2 - iB_2 &= \frac{1}{2}(U_2 + I_n) - i \frac{i}{2}(U_2 - I_n) \\
&= \frac{1}{2}(I_n + U_2) + \frac{1}{2}(U_2 - I_n) = \frac{1}{2}2U_2 = U_2 \\
&\Rightarrow A_2 - iB_2 = U_2.
\end{aligned}$$

■

Es conveniente enunciar la condición a la frontera más general para $x = 0$ para (3.1) en términos de las matrices $n \times n$ A_3 y B_3 tales que:

$$-B_3^\dagger \psi(0) + A_3^\dagger \psi'(0) = 0, \quad (3.11)$$

$$-B_3^\dagger A_3 + A_3^\dagger B_3 = 0, \quad (3.12)$$

$$A_3^\dagger A_3 + B_3^\dagger B_3 > 0, \quad (3.13)$$

i.e. $A_3^\dagger B_3$ es autoadjunta y la matriz autoadjunta $A_3^\dagger A_3 + B_3^\dagger B_3$ es positiva. Nótese que (3.13) implica la existencia de una matriz única positiva E_3 definida como:

$$E_3 := (A_3^\dagger A_3 + B_3^\dagger B_3)^{1/2}, \quad (3.14)$$

de forma que E_3 es autoadjunta e invertible.

Proposición 3.2 *La matriz E_3 definida en (3.14) es autoadjunta e invertible, de forma que:*

$$E_3 = E_3^\dagger, \quad (E_3^\dagger)^{-1}(A_3^\dagger A_3 + B_3^\dagger B_3)E_3^{-1} = I_n. \quad (3.15)$$

Dem. Sabemos que:

$$E_3^\dagger = ((A_3^\dagger A_3 + B_3^\dagger B_3)^{1/2})^\dagger = ((A_3^\dagger A_3)^\dagger + (B_3^\dagger B_3)^\dagger)^{1/2} = (A_3 A_3^\dagger + B_3 B_3^\dagger)^{1/2},$$

y por (3.9),

$$\begin{aligned} E_3^\dagger &= (A_3^\dagger A_3 + B_3^\dagger B_3)^{1/2} \\ \Rightarrow E_3^\dagger &= E_3 \end{aligned}$$

■

Sean C_3 y H_3 definidas como:

$$C_3 := \begin{bmatrix} B_3 & A_3 \\ A_3 & -B_3 \end{bmatrix}, \quad H_3 := C_3 \begin{bmatrix} E_3^{-1} & 0 \\ 0 & E_3^{-1} \end{bmatrix}.$$

Proposición 3.3 *La matriz H_3 cumple que $H_3^\dagger H_3 = I_{2n}$, y por lo tanto es unitaria.*

Dem.

$$\begin{aligned} H_3^\dagger H_3 &= \begin{bmatrix} E_3^{-1} & 0 \\ 0 & E_3^{-1} \end{bmatrix}^\dagger C_3^\dagger C_3 \begin{bmatrix} E_3^{-1} & 0 \\ 0 & E_3^{-1} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} E_3^{-1} & 0 \\ 0 & E_3^{-1} \end{bmatrix}^\dagger \begin{bmatrix} B_3 & A_3 \\ A_3 & -B_3 \end{bmatrix}^\dagger \begin{bmatrix} B_3 & A_3 \\ A_3 & -B_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_3^{-1} & 0 \\ 0 & E_3^{-1} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} (E_3^\dagger)^{-1} & 0 \\ 0 & (E_3^\dagger)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_3^\dagger & A_3^\dagger \\ A_3^\dagger & -B_3^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_3 & A_3 \\ A_3 & -B_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_3^{-1} & 0 \\ 0 & E_3^{-1} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} (E_3^\dagger)^{-1} B_3^\dagger & (E_3^\dagger)^{-1} A_3^\dagger \\ (E_3^\dagger)^{-1} A_3^\dagger & -(E_3^\dagger)^{-1} B_3^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_3 E_3^{-1} & A_3 E_3^{-1} \\ A_3 E_3^{-1} & -B_3 E_3^{-1} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} (E_3^\dagger)^{-1} (B_3^\dagger B_3 + A_3^\dagger A_3) E_3^{-1} & (E_3^\dagger)^{-1} (B_3^\dagger A_3 - A_3^\dagger B_3) E_3^{-1} \\ (E_3^\dagger)^{-1} (A_3^\dagger B_3 - B_3^\dagger A_3) E_3^{-1} & (E_3^\dagger)^{-1} (A_3^\dagger A_3 + B_3^\dagger B_3) E_3^{-1} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

y usando (3.14) y (3.15),

$$\begin{aligned} H_3^\dagger H_3 &= \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ 0 & I_n \end{bmatrix} \\ \Rightarrow H_3^\dagger H_3 &= I_{2n}. \end{aligned}$$

La proposición anterior implica que:

Proposición 3.4 Como H_3 es unitaria,

$$A_3 E_3^{-2} A_3^\dagger + B_3 E_3^{-2} B_3^\dagger = I_n, \quad B_3 E_3^{-2} A_3^\dagger - A_3 E_3^{-2} B_3^\dagger = 0. \quad (3.16)$$

Dem.

$$\begin{aligned} I_{2n} &= H_3 H_3^\dagger \\ &= \begin{bmatrix} B_3 & A_3 \\ A_3 & -B_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_3^{-1} & 0 \\ 0 & E_3^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (E_3^{-1})^\dagger & 0 \\ 0 & (E_3^{-1})^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_3^\dagger & A_3^\dagger \\ A_3^\dagger & -B_3^\dagger \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} B_3 E_3^{-1} & A_3 E_3^{-1} \\ A_3 E_3^{-1} & -B_3 E_3^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (E_3^\dagger)^{-1} B_3^\dagger & (E_3^\dagger)^{-1} A_3^\dagger \\ (E_3^\dagger)^{-1} A_3^\dagger & -(E_3^\dagger)^{-1} B_3^\dagger \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} B_3 E_3^{-1} & A_3 E_3^{-1} \\ A_3 E_3^{-1} & -B_3 E_3^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_3^{-1} B_3^\dagger & E_3^{-1} A_3^\dagger \\ E_3^{-1} A_3^\dagger & -E_3^{-1} B_3^\dagger \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} B_3 E_3^{-2} B_3 + A_3 E_3^{-2} A_3^\dagger & B_3 E_3^{-2} A_3^\dagger - A_3 E_3^{-2} B_3^\dagger \\ A_3 E_3^{-2} B_3^\dagger - B_3 E_3^{-2} A_3^\dagger & A_3 E_3^{-2} A_3^\dagger + B_3 E_3^{-2} B_3^\dagger \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

donde usamos el hecho de que E_3 es autoadjunta. Por lo anterior,

$$A_3 E_3^{-2} A_3^\dagger + B_3 E_3^{-2} B_3^\dagger = I_n, \quad B_3 E_3^{-2} A_3^\dagger - A_3 E_3^{-2} B_3^\dagger = 0.$$

A partir de ahora trabajaremos con las formulaciones dadas en (3.11)-(3.13) y cambiaremos A_3, B_3 y E_3 por A, B y E .

Nótese que las condiciones a la frontera enunciadas en (3.4), (3.7) y (3.11) pueden multiplicarse a la izquierda por una matriz invertible D sin que se cambie la condición a la frontera más general en $x = 0$. Por ejemplo, tomando (3.11) y dejando el subíndice 3, la multiplicación derecha queda descrita a través de la transformación

$$(A, B) \mapsto (\tilde{A}, \tilde{B}) := (AT, BT), \quad (3.17)$$

para la que tenemos

$$\begin{aligned} (-B^\dagger A + A^\dagger B) &\mapsto -T^{-1}(-\tilde{B}^\dagger \tilde{A} + \tilde{A}^\dagger \tilde{B})(T)^{-1}, \\ (A^\dagger A + B^\dagger B) &\mapsto T^{-1}(\tilde{A}^\dagger \tilde{A} + \tilde{B}^\dagger \tilde{B})(T)^{-1}, \end{aligned}$$

y por lo tanto (3.11)-(3.13) siguen siendo válidas con (\tilde{A}, \tilde{B}) en lugar de (A, B) . Así, el par transformado (\tilde{A}, \tilde{B}) puede ser usado en lugar de (A, B) en la formulación de la condición a la frontera autoadjunta.

3.1. Equivalencia de las formulaciones de la condición a la frontera

En la sección anterior se presentaron tres formulaciones de las condiciones a la frontera más generales en $x = 0$ para (3.1):

- a) La formulación (3.4)-(3.6).
- b) La formulación (3.7) y (3.8).
- a) La formulación que se usará (3.11)-(3.13).

Teorema 3.5 *Las tres formulaciones a), b) y c) de las condiciones a la frontera autoadjuntas en $x = 0$ para (3.1) son equivalentes.*

Dem. Veamos que $c) \Rightarrow d)$.

Sea

$$U_2 = (A_3 - iB_3)E_3^{-2}(A_3^\dagger - iB_3^\dagger).$$

Sea la transformación $(A, B) \mapsto (\tilde{A}, \tilde{B}) = (AD^\dagger, BD^\dagger)$. Podemos relacionar las condiciones a través de ella:

$$\begin{aligned} 0 = -B_3^\dagger\psi(0) + A_3^\dagger\psi'(0) &\mapsto D^{-1}(B_2^\dagger\psi(0) + A_2^\dagger\psi'(0)) = 0 \\ &\Rightarrow B_2^\dagger\psi(0) + A_2^\dagger\psi'(0). \end{aligned}$$

Y:

$$\begin{aligned} 0 = -B_3^\dagger A_3 + A_3^\dagger B_3 &\mapsto D^{-1}(-B_2^\dagger A_2 + A_2^\dagger B_2)D^{-1} = 0 \\ &\Rightarrow B_2^\dagger A_2 = A_2^\dagger B_2. \end{aligned}$$

Usando (3.15) y (3.16) veremos que $A_2 = \frac{1}{2}(U_2 + I_n)$ y $B_2 = \frac{i}{2}(U_2 - I_n)$.

$$\begin{aligned} U_2 &= (A_3 - iB_3)E_3^{-2}(A_3^\dagger - iB_3^\dagger) \\ &= A_3E_3^{-2}A_3^\dagger - B_3E_3^{-2}B_3^\dagger - i(A_3E_3^{-2}B_3^\dagger + B_3E_3^{-2}A_3^\dagger) \\ &= A_2A_2^\dagger - B_2B_2^\dagger - i(A_2B_2^\dagger + B_2A_2^\dagger) \\ &= -A_2A_2^\dagger - B_2B_2^\dagger + 2(A_2A_2^\dagger - 2iA_2B_2^\dagger) \\ &= -I_n + 2A_2(A_2^\dagger - iB_2^\dagger) \\ &= -I_n + 2A_2, \end{aligned}$$

donde usamos (3.10) y el hecho de que $B_2^\dagger A_2 = A_2^\dagger B_2$. Es decir,

$$\Rightarrow A_2 = \frac{1}{2}(U_2 + I_n).$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned}
U_2 &= (A_3 - iB_3)E_3^{-2}(A_3^\dagger - iB_3^\dagger) \\
&= A_3E_3^{-2}A_3^\dagger - B_3E_3^{-2}B_3^\dagger - i(A_3E_3^{-2}B_3^\dagger + B_3E_3^{-2}A_3^\dagger) \\
&= A_2A_2^\dagger - B_2B_2^\dagger - i(A_2B_2^\dagger + B_2A_2^\dagger) \\
&= A_2A_2^\dagger + B_2B_2^\dagger - 2B_2B_2^\dagger - 2iB_2A_2^\dagger \\
&= I_n - 2iB_2(A_2^\dagger - iB_2^\dagger) \\
&= I_n - 2iB_2,
\end{aligned}$$

donde nuevamente usamos (3.10) y el hecho de que $B_2^\dagger A_2 = A_2^\dagger B_2$. Esto es,

$$\Rightarrow B_2 = \frac{i}{2}(U_2 - I_n).$$

Ahora veamos que $b) \Rightarrow a)$.

Sean $A_1 = -B_2^\dagger$ y $B_1 = A_2^\dagger$. Entonces,

$$-B_2^\dagger \psi(0) + A_2^\dagger \psi'(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad A_1 \psi(0) + B_1 \psi'(0) = 0.$$

Además, como $A_2^\dagger B_2 = B_2^\dagger A_2$,

$$\begin{aligned}
-B_1 A_1^\dagger &= -A_1 B_1^\dagger \\
i.e., \quad A_1 B_1^\dagger &= B_1 A_1^\dagger.
\end{aligned}$$

Finalmente, sea

$$C_2 = \begin{bmatrix} B_2 & A_2 \\ A_2 & -B_2 \end{bmatrix}$$

Así,

$$C_2^\dagger C_2 = \begin{bmatrix} B_2^\dagger B_2 + A_2^\dagger A_2 & B_2^\dagger A_2 - A_2^\dagger B_2 \\ A_2^\dagger B_2 - B_2^\dagger A_2 & A_2^\dagger A_2 + B_2^\dagger B_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ 0 & -I_n \end{bmatrix}$$

Claramente, $\text{rango}[C_2] = 2n$ y C_2 es unitaria; por otro lado tenemos que $\text{rango}[B_2^\dagger \ A_2^\dagger] = \text{rango}[-A_1 \ B_1] = n$. Y como el cambio de signos en las primeras n columnas no altera el rango, el rango de $[A_1 \ B_1]$ es n . Luego, $b) \Rightarrow a)$.

Finalmente, veamos que $a) \Rightarrow c)$.

Sean $B_3 = -A_1^\dagger$ y $A_3 = B_1^\dagger$. Entonces,

$$-A_1 \psi(0) + B_1 \psi'(0) = -B_3^\dagger \psi(0) + A_3^\dagger \psi'(0) = 0.$$

Además, como $A_1 B_1^\dagger = B_1 A_1^\dagger$,

$$B_3^\dagger A_3 = A_3^\dagger B_3$$

$$\Rightarrow -B_3^\dagger A_3 + A_3^\dagger B_3 = 0.$$

Nótese que:

$$A_3^\dagger A_3 + B_3^\dagger B_3 = [B_1 \quad A_1] \begin{bmatrix} B_1^\dagger \\ A_1^\dagger \end{bmatrix}, \quad (3.18)$$

pues

$$[B_1 \quad A_1] \begin{bmatrix} B_1^\dagger \\ A_1^\dagger \end{bmatrix} = B_1 B_1^\dagger + A_1 A_1^\dagger = A_3^\dagger A_3 + B_3^\dagger B_3.$$

Como la matriz que resulta del producto de estas dos matrices es autoadjunta, el cero no puede ser uno de sus eigenvalores, porque en ese caso tendríamos un eigenvector v con el cero como eigenvalor, lo que implicaría que:

$$\begin{aligned} 0 = \langle v, [B_1 \quad A_1] \begin{bmatrix} B_1^\dagger \\ A_1^\dagger \end{bmatrix} \rangle &= \langle \begin{bmatrix} B_1^\dagger \\ A_1^\dagger \end{bmatrix} v, \begin{bmatrix} B_1^\dagger \\ A_1^\dagger \end{bmatrix} v \rangle \\ &\Rightarrow \begin{bmatrix} B_1^\dagger \\ A_1^\dagger \end{bmatrix} v = 0 \\ &\Rightarrow v \in \text{Ker} \left\{ \begin{bmatrix} B_1^\dagger \\ A_1^\dagger \end{bmatrix} \right\} \\ &\Rightarrow \text{Null} \left\{ \begin{bmatrix} B_1^\dagger \\ A_1^\dagger \end{bmatrix} \right\} \geq 1. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Como la nulidad y el rango deben sumar n , el rango entonces tendría que ser estrictamente menor que n , lo que violaría el hecho de que el rango de esa matriz es exactamente n por (3.6). Entonces, la matriz del producto de la derecha de (3.18) es positiva, con lo que queda demostrado que a) implica b). \blacksquare

Proposición 3.6 *Las tres formulaciones a), b) y c) de la condición autoadjunta a la frontera más general también son equivalentes a la formulación en términos de dos matrices $n \times n$ constantes A_4 y B_4 como:*

$$-B_4^\dagger \psi(0) + A_4^\dagger \psi'(0) = 0, \quad (3.20)$$

de forma que la matriz C_4 es unitaria, donde se ha definido:

$$C_4 := \begin{bmatrix} B_4 & A_4 \\ A_4 & -B_4 \end{bmatrix}. \quad (3.21)$$

Dem. Por el teorema anterior, es suficiente demostrar la equivalencia de la proposición con c).

\Rightarrow) Supongamos que (3.20) y (3.21) son ciertas. Sean $A_3 = A_4$ y $B_3 = B_4$. Como C_4 es unitaria,

$$\begin{aligned} I_{2n} = C_4^\dagger C_4 &= \begin{bmatrix} B_4^\dagger & A_4^\dagger \\ A_4^\dagger & -B_4^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_4 & A_4 \\ A_4 & -B_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_4^\dagger B_4 + A_4^\dagger A_4 & B_4^\dagger A_4 - A_4^\dagger B_4 \\ A_4^\dagger B_4 B_4^\dagger A_4^\dagger & A_4^\dagger A_4 + B_4^\dagger B_4 \end{bmatrix} \\ &\Rightarrow I_n = B_4^\dagger B_4 + A_4^\dagger A_4 > 0, \\ &0 = A_4^\dagger B_4 B_4^\dagger A_4^\dagger. \end{aligned}$$

Es decir,

$$\begin{aligned} -B_3^\dagger \psi(0) + A_3^\dagger \psi'(0) &= 0 \\ -B_3^\dagger A_3 + A_3^\dagger B_3 &= 0 \\ B_3^\dagger B_3 + A_3^\dagger A_3 &> 0. \end{aligned}$$

\Leftarrow) Supongamos que $c)$ es cierto. Sean $A_4 = A_3 E_3^{-1}$ y $B_4 = B_3 E_3^{-1}$. Como $-B_4^\dagger A_4 + A_4^\dagger B_4 = (E_3^\dagger)^{-1} (B_3^\dagger A_3 + A_3^\dagger B_3) E_3^{-1} = 0$ y $B_4^\dagger B_4 + A_4^\dagger A_4 = (E_3^\dagger)^{-1} (B_3^\dagger B_3 + A_3^\dagger A_3) E_3^{-1} = I_n$, entonces $C_4^\dagger C_4 = I_n$. Además, $-B_3^\dagger \psi(0) + A_3^\dagger \psi'(0) = 0$, así que $(E_3^\dagger)^{-1} B_3^\dagger \psi(0) + (E_3^\dagger)^{-1} A_3^\dagger \psi'(0) = 0$. Por lo tanto, $-B_4^\dagger \psi(0) + A_4^\dagger \psi'(0) = 0$. \blacksquare

Ya hemos visto en (3.7) y en (3.8) que la condición a la frontera autoadjunta más general para (3.1) puede enunciarse en términos de una matriz unitaria. Hay otras opciones para esa matriz unitaria U_2 que la que se dio en (3.8). Por ejemplo, puede usarse:

$$-B_5^\dagger \psi(0) + A_5^\dagger \psi'(0) = 0, \quad (3.22)$$

con las matrices $n \times n$ auxiliares A_5 y B_5 dadas por:

$$A_5 := \frac{i}{2}(U_5 - U_5^\dagger), \quad B_5 := \frac{1}{2}(U_5 + U_5^\dagger). \quad (3.23)$$

Como en (3.23), puede diagonalizarse U_5 simultáneamente como:

$$U_5 = \text{diag}\{e^{i\theta_1}, e^{i\theta_2}, \dots, e^{i\theta_n}\}, \quad \theta_j \in \mathbb{R}. \quad (3.24)$$

Entonces, la condición a la frontera se convierte en:

$$(\cos \theta_j) \psi_j(0) + (\sin \theta_j) \psi_j'(0) = 0, \quad j = 1, \dots, n,$$

donde ψ_j denota la j -ésima columna de la solución matricial $n \times n$ ψ . De forma similar, para la elección de (3.8) para poner a (A_2, B_2) en términos de una matriz unitaria U_2 , al diagonalizar U_2 como en (3.24), puede expresarse (3.7) como n condiciones a la frontera separadas como:

$$[\sin(\theta_j/2)] \psi_j(0) + [\cos(\theta_j/2)] \psi_j'(0) = 0, \quad j = 1, \dots, n.$$

3.2. Soluciones matriciales

En esta sección se enuncian algunas soluciones matriciales para (3.1) y sus propiedades. Recordemos que usaremos las condiciones a la frontera enunciadas en (3.11)-(3.13) sin el subíndice 3. Cuando V es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$, la ecuación matricial de Schrödinger (3.1) tiene varias matrices $n \times n$ que son solución y satisfacen ciertas condiciones iniciales o asintóticas, y su existencia ya es conocida.

La solución de Jost de (3.1) es la solución matricial $n \times n$ que satisface, $\forall k \in \overline{\mathbb{C}^+} \setminus \{0\}$ las asintotas:

$$f(k, x) = e^{ikx}[I_n + o(1)], \quad f'(k, x) = ik e^{ikx}[I_n + o(1)], \quad x \rightarrow \infty. \quad (3.25)$$

A continuación enunciaremos un lema que será muy útil para establecer las propiedades de las soluciones de Jost.

Definición 3.7 Sea $m(k, x) = e^{-ikx} f(k, x) \rightarrow 1$ cuando $x \rightarrow \infty$. Entonces,

$$m''(k, x) + 2ikm'(k, x) = q(x)m(k, x)$$

es la nueva ecuación a resolver. Definiremos la función D_k como:

$$D_k(y) = \int_0^y dt e^{2ikt} = \frac{1}{2ik}(e^{2iky} - 1).$$

Lema 3.8 $\forall k$, la ecuación integral

$$m(k, x) = 1 + \int_x^\infty dt D_k(t-x)q(t)m(k, t)$$

tiene una solución $m(k, x)$ que resuelve únicamente la ecuación de Schrödinger $m'' + 2ikm' = q(x)m$, con $m(k, x) \rightarrow 1$ cuando $x \rightarrow \infty$. Además satisface la condición $\overline{m(k, x)} = m(-k, x)$ y cumple las siguientes propiedades:

- a) $\|m(k, x) - I_n\| \leq e^{\eta(x)/k} \frac{\eta(x)}{|k|} \leq e^{cte/|k|} \frac{cte}{|k|}$.
- b) $\|m(k, x) - I_n\| \leq K \frac{(1+\max(-x,0))}{1+|k|} \int_x^\infty dt(1+|t|)|q(t)| \leq K_1 \left(\frac{1+\max(-x,0)}{1+|k|} \right)$.
- c) $\|m'(k, x)\| \leq \frac{K_2}{1+|k|} \int_x^\infty dt(1+|t|)|q(t)| \leq \frac{K_3}{1+|k|}, \quad -\infty < x < \infty$.
- d) $\|m'(k, x)\| \leq \frac{K_4}{1+|k|} \int_x^\infty dt|q(t)|, \quad 0 \leq x < \infty$.

Además, $\forall x$, $m(k, x)$ es analítica en \mathbb{C}^+ y continua en $\overline{\mathbb{C}^+}$. En particular, por b), $m(k, x) - I_n \in H^{2+}$.

Finalmente, $m(k, x)$ existe $\forall k \in \overline{\mathbb{C}^+}, k \neq 0$, con $\frac{dm(k, x)}{dk}$ continua en todos lados donde $k \in \overline{\mathbb{C}^+}$. Si $q \in L_2^1$, entonces $m(k, x)$ también existe y es continua en $k = 0$, con la aproximación:

$$\left\| \frac{dm(k, x)}{dk} \right\| \leq cte(1 + x^2) \forall k \geq 0, q \in L_2^1.$$

Observación 1: a) muestra que para $k \neq 0$ fijo, $m(k, x)$ es acotada $\forall x \in \mathbb{R}$ y b) muestra que $m(k, x)$ es acotada uniformemente $\forall k \in \overline{\mathbb{C}^+}$ en cualquier semi-línea $x \geq a$, pero que cuando $x \rightarrow -\infty$, $m(k, 0)$ podría crecer linealmente.

Observación 2: si $q \in L_2^1$, entonces $m(k, x)$ existe y es continua $\forall k \in \overline{\mathbb{C}^+}$, pero si sólo pertenece a L_1^1 , podría haber problemas con $k = 0$.

Dem. Las iteraciones de la integral de Volterra siempre convergen, por lo que:

$$m(k, x) = I_n + \sum_{n=1}^{\infty} g_n(k, x),$$

donde

$$g_n(k, x) = \int_{x \leq x_1 \leq \dots \leq x_n} dx_1 dx_2 \dots dx_n D_k(x_1 - x) \dots D_k(x_1 - x_{n-1}).$$

Ahora,

$$\|g_n(k, x)\| \leq \int_{x \leq x_1 \leq \dots \leq x_n} \frac{1}{|k|^n} dx_1 dx_2 \dots dx_n |q(x_1)| \dots |q(x_n)| = \frac{1}{|k|^n} \frac{1}{n!} \left(\int_x^{\infty} dt |q(t)| \right)^n,$$

porque $\|D_k(y)\| \leq \frac{1}{|k|} \forall k \in \overline{\mathbb{C}^+}$. Alternativamente,

$$\begin{aligned} \|g_n(k, x)\| &\leq \int_{x \leq x_1 \leq \dots \leq x_n} dx_1 \dots dx_n (x_1 - x) \dots (x_n - x_{n-1}) |q(x_1)| \dots |q(x_n)| \\ &\leq \int_{x \leq x_1 \leq \dots \leq x_n} dx_1 \dots dx_n (x_1 - x) \dots (x_n - x) |q(x_1)| \dots |q(x_n)| \\ &= \frac{1}{n!} \left(\int_x^{\infty} dt (t - x) |q(t)| \right)^n, \end{aligned}$$

porque $\|D_k(y)\| \leq y, k \geq 0$ y $y \geq 0$.

Así que

$$\begin{aligned} \|m(k, x) - I_n\| &= \left\| \sum_{n=1}^{\infty} g_n(k, x) \right\| \leq \sum_{n=1}^{\infty} \|g_n(k, x)\| \leq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{|k|^n n!} \left(\int_x^{\infty} dt |q(t)| \right)^n \\ &\leq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{|k|^{n-1}} \left(\int_x^{\infty} dt |q(t)| \right)^{n-1} \left(\frac{1}{|k|} \int_x^{\infty} dt |q(t)| \right). \end{aligned}$$

Es decir, haciendo $\gamma(x) = \frac{1}{|k|} \int_x^\infty dt |q(t)| \leq cte$,

$$\|m(k, x) - I_n\| \leq e^{\gamma(x)} \gamma(x) \leq \mathcal{C}'.$$

De la ecuación anterior también puede verse que se va a infinito si $x \rightarrow -\infty$.

Por otro lado, tenemos que:

$$\begin{aligned} \|m(k, x)\| &\leq I_n + \int_x^\infty dt (t-x) |q(t)| \|m(t, k)\| \\ &= I_n + \int_x^\infty dt (t) |q(t)| \|m(t, k)\| + \int_x^\infty dt (-x) |q(t)| \|m(t, k)\| \\ &\leq I_n + \int_0^\infty dt (t) |q(t)| \|m(t, k)\| + \int_0^\infty dt (-x) |q(t)| \|m(t, k)\|, \end{aligned}$$

donde

$$I_n + \int_0^\infty dt (t) |q(t)| \|m(t, k)\| \leq \left(1 + e^{\gamma(0)} \gamma(0) \int_0^\infty dt (t) |q(t)| \right) = K < \infty.$$

Sean $M(k, x) = \frac{m(k, x)}{K(1+|x|)}$ y $p(x) = (1+|x|)|q(x)| \in L_1^1$. Entonces,

$$\begin{aligned} M(k, x) &\leq \frac{K}{K(1+|x|)} + \int_x^\infty dt \frac{(1-x)}{x(1+|x|)} |q(t)| \|M(k, t)\| (1+|t|) \\ &\leq 1 + \int_x^\infty dt p(t) \|M(k, t)\| \\ \text{i.e., } M(k, x) &\leq 1 + \int_x^\infty dt p(t) \|M(k, t)\|. \end{aligned}$$

Iterando nuevamente,

$$\begin{aligned} M(k, x) &\leq 1 + \sum_{n=1}^\infty \left(\int_x^\infty dt |p(t)| \right)^n = \sum_{n=0}^\infty \left(\int_x^\infty dt |p(t)| \right)^n \\ \Rightarrow M(k, x) &\leq \exp \left\{ \int_x^\infty dt (1+|t|) |q(t)| \right\} \leq K_1 < \infty \\ \text{i.e., } \|m(k, x)\| &\leq K_2 (1+|x|). \end{aligned}$$

Esto implica que

$$\begin{aligned} \|m(k, x) - I_n\| &\leq \int_0^\infty dt (t) |q(t)| \|m(t, k)\| + \int_0^\infty dt (-x) |q(t)| \|m(t, k)\| \\ &\leq e^{\gamma(0)} \gamma(0) \int_0^\infty dt (t) |q(t)| + (-x) K_2 \int_x^\infty dt (1+|t|) |q(t)|, \end{aligned}$$

que puede dividirse en dos casos:

$$\forall x \leq 0, \quad \|m(k, x) - I_n\| \leq K_3(1 + |x|) \int_x^\infty dt(1 + |t|)|q(t)|.$$

$$\forall x \geq 0, \quad \|m(k, x) - I_n\| \leq e^{\gamma(0)}\gamma(x) \leq e^{\gamma(0)} \int_x^\infty dt(t)|q(t)|.$$

Así que:

$$\|m(k, x) - I_n\| \leq K'_4(1 + \text{máx}(-x, 0)) \int_x^\infty dt(1 + |t|)|q(t)|$$

$$\Rightarrow \|m(k, x) - I_n\| \leq K_4(1 + \text{máx}(-x, 0)).$$

Ahora consideremos la ecuación

$$m'(k, x) = - \int_x^\infty dt e^{2ik(t-x)} q(t)m(k, t).$$

Sustituyendo $b)$ en esta ecuación,

$$\begin{aligned} m'(k, x) &\leq K_4 \int_x^\infty dt e^{2ik(t-x)} q(t)(1 + \text{máx}(-x, 0)) \\ &\leq K_4 \int_x^\infty dt q(t)(1 + |t|). \end{aligned}$$

$$\Rightarrow m'(k, x) \leq K_4 \int_x^\infty dt(1 + |t|)q(t) \leq K_5 \quad \forall x \in (-\infty, \infty).$$

De aquí se sigue que si $x \in (0, \infty)$,

$$\begin{aligned} -K &\leq m(k, x) - 1 \leq K(1 + \text{máx}(-x, 0)) \\ \Rightarrow m'(k, x) &= - \int_x^\infty dt e^{2ik(t-x)} q(t)m(k, t) \\ &\leq K \int_x^\infty dt e^{2ik(t-x)} q(t) \\ &\leq K \int_x^\infty dt q(t). \end{aligned}$$

$$\Rightarrow m'(k, x) \leq K_4 \int_x^\infty dt q(t) \quad \forall x \in (0, \infty).$$

Ahora veamos que es solución de Schrödinger.

$$\begin{aligned}
\rightarrow m(k, x) &= 1 + \frac{i}{2k} \int_{\infty}^x dt (e^{2ik(t-x)} - 1) q(t)m(k, t) \\
&= 1 + \frac{i}{2k} e^{-2ikx} \int_{\infty}^x dt e^{2ikt} q(t)m(k, t) \\
\rightarrow m'(k, x) &= \frac{i}{2k} e^{-2ikx} \left[-2ik \int_{\infty}^x dt e^{2ikt} q(t)m(k, t) + e^{2ikx} q(x)m(k, x) \right] \\
&\quad - \frac{i}{2k} q(x)m(k, x) \\
&= e^{-2ikx} \int_{\infty}^x dt e^{2ikt} q(t)m(k, t) \\
\rightarrow m''(k, x) &= -2ike^{-2ikx} \int_{\infty}^x dt e^{2ikt} q(t)m(k, t) + e^{-2ikx} e^{2ikx} q(x)m(k, x) \\
&= -2ike^{-2ikx} \int_{\infty}^x dt e^{2ikt} q(t)m(k, t) + q(x)m(k, x).
\end{aligned}$$

Sustituyendo en $m'' + 2ikm' = qm$, tenemos que:

$$\begin{aligned}
m''(k, x) + 2ikm'(k, x) &= -2ike^{-2ikx} \int_{\infty}^x dt e^{2ikt} q(t)m(k, t) + q(x)m(k, x) \\
&\quad + 2ike^{-2ikx} \int_{\infty}^x dt e^{2ikt} q(t)m(k, t) \\
i.e., \quad m''(k, x) + 2ikm'(k, x) &= q(x)m(k, x).
\end{aligned}$$

Además,

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \int_x^{\infty} dt D_k(t-x) q(t)m(k, t) = 0,$$

por lo que:

$$m(k, x) \rightarrow 1, \quad x \rightarrow \infty.$$

Y como $m(k, x)$ satisface la ecuación con una condición asintótica, la solución es única.

Por otro lado, ya habíamos dicho que:

$$m(k, x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} g_n(k, x),$$

con

$$g_n(k, x) = \int_{x \leq x_1 \leq \dots \leq x_n} dx_1 dx_2 \cdots dx_n D_k(x_1 - x) \cdots D_k(x_1 - x_{n-1}),$$

donde g_n es analítica $\forall k \in \overline{\mathbb{C}^+}$.

Por otra parte, como $q \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned}\overline{m(k, x)} &= 1 + \int_x^\infty dt \overline{D_k(t-x)q(t)m(k, t)} \\ &= 1 - \frac{1}{2ik} \int_x^\infty dt e^{-2ik(t-x)} q(t)m(k, t) \\ &= 1 + \int_x^\infty dt D_{-k}(t-x)q(t)m(k, t) \\ &= m(-k, x).\end{aligned}$$

$$i.e., \quad \overline{m(k, x)} = m(-k, x).$$

Para el resto de la prueba hay que considerar a $\dot{m}(k, x)$, que se obtiene iterando:

$$\dot{m}(k, x) = \int_x^\infty dt D_k(t-x)q(t)\dot{m}(k, x) + \int_x^\infty dt \dot{D}_k(t-x)q(t)m(k, x). \quad (3.26)$$

$\forall q \in L_1^1$ usamos la desigualdad [4]:

$$\|k\dot{D}_k(t-x)\| = \left\| \int_0^{t-x} du u \left[\frac{\partial}{\partial u} e^{2iku} \right] \right\| \leq 2|t-x|,$$

para obtener:

$$\left| \int_x^\infty dt k\dot{D}_k(t-x)q(t)m(k, t) \right| \leq K(1 + \max(-x, 0)) \int_x^\infty dt (t-x)|q(t)| \leq K(x) < \infty$$

y vemos que $\dot{m}(k, x)$, $k \neq 0$, $k \in \overline{\mathbb{C}^+}$ existe, con $k\dot{m}(k, x)$ continua, incluso cuando $k \rightarrow 0$: $\forall q \in L_2^1$ usamos [4]

$$\|\dot{D}_k(t-x)\| \leq \left\| \int_0^{t-x} du 2iue^{2iku} \right\| \leq (t-x)^2.$$

→ Supongamos que $x < 0$. Entonces,

$$\begin{aligned}\int_x^\infty dt t^2|q(t)| \|m(k, t)\| &= \int_0^\infty dt t^2|q(t)| \|m(k, t)\| + \int_x^0 dt t^2|q(t)| \|m(k, t)\| \\ &\leq \int_0^\infty dt t^2|q(t)| \|m(k, t)\| + x^2 \int_x^0 dt |q(t)| \|m(k, t)\|.\end{aligned}$$

Y como $\|m(k, t)\| \leq K(1 + \max(-t, 0))$,

$$\begin{aligned}&\leq K \int_0^\infty dt t^2|q(t)| + x^2 K \int_0^\infty dt |q(t)| + x^2 K \int_x^0 dt (-t)|q(t)| \\ &\leq \text{cte}(1 + x^2).\end{aligned}$$

→ Supongamos que $x \geq 0$. Entonces,

$$\int_x^\infty dt t^2 |q(t)| \|m(k, t)\| \leq K \int_0^\infty dt t^2 |q(t)|.$$

Así que $\forall x$ se cumple que:

$$\int_x^\infty dt t^2 |q(t)| \|m(k, t)\| \leq K_2(1 - x \text{máx}(-x, 0)),$$

por lo que

$$\|\dot{m}(k, x)\| \leq K_2(1 - x \text{máx}(-x, 0)) + \int_x^\infty dt (t - x) |q(t)| \|\dot{m}(k, t)\|.$$

Iterando, llegamos a que:

$$\|\dot{m}(k, x)\| \leq K_2(1 - x \text{máx}(-x, 0))e^{\gamma(x)}, \quad (3.27)$$

pues, análogamente al caso de $m(k, x)$,

$$\|\dot{m}(k, x)\| \leq K_2(1 - x \text{máx}(-x, 0)) + \sum_{n=1}^{\infty} f_n(k, x),$$

donde

$$\begin{aligned} f_n(k, x) &= \int_{x \leq x_1 \leq \dots \leq x_n} dx_1 \cdots dx_n (x_n - x_{n-1}) q(x_1) \cdots q(x_n) \\ &\leq \int_{x \leq x_1 \leq \dots \leq x_n} dx_1 \cdots dx_n (x_1 - x) \cdots (x_n - x_{n-1}) q(x_1) \cdots q(x_n) \\ &\leq \frac{1}{n!} \left(\int_x^\infty dt (t - x) |q(t)| \right)^n. \end{aligned}$$

Así que:

$$\begin{aligned} \|\dot{m}(k, x)\| &\leq K_2(1 - x \text{máx}(-x, 0)) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\int_x^\infty dt (t - x) |q(t)| \right)^n \\ &\leq K_2(1 - x \text{máx}(-x, 0)) \sum_{n=1}^{\infty} \left(\int_x^\infty dt (t - x) |q(t)| \right)^n \\ &= K_2(1 - x \text{máx}(-x, 0))e^{\gamma(x)}. \end{aligned}$$

Esta cota asegura que las iteraciones en (3.26) convergen uniformemente en k [4].

Esto deja claro que $\|\dot{m}(k, x)\|$ existe y es continua $\forall k \in \overline{\mathbb{C}^+}$, incluyendo $k = 0$.

Finalmente, $\forall x$,

$$\begin{aligned} \|\dot{m}(k, x)\| &\leq K_2(1+x^2) + \int_x^\infty dt t|q(t)| \|\dot{m}(k, t)\| + (-x) \int_x^\infty dt |q(t)| \|\dot{m}(k, t)\| \\ &\leq K_2(1+x^2) + \int_0^\infty dt t|q(t)| \|\dot{m}(k, t)\| + |x| \int_x^\infty dt |q(t)| \|\dot{m}(k, t)\| \\ &\leq K_2(1+x^2) + K_2 e^{\gamma(0)} \int_0^\infty dt t|q(t)| + |x| \int_x^\infty dt |q(t)| \|\dot{m}(k, t)\|. \end{aligned}$$

Es decir,

$$h(k, x) \leq 1 + \int_x^\infty dt (1+t^2)|q(t)|h(k, t),$$

con

$$h(k, t) = \frac{\|m(k, t)\|}{K_3(1+x^2)}.$$

Iterando encontramos que:

$$\begin{aligned} h(k, x) &\leq \sum_{n=1}^{\infty} \left(\int_x^\infty dt (1+t^2)|q(t)|dt \right)^n \\ &\leq \sum_{n=0}^{\infty} \left(\int_x^\infty dt (1+t^2)|q(t)|dt \right)^n \\ &= e^{\beta(x)}. \end{aligned}$$

$$i.e., \quad \|\dot{m}(k, x)\| \leq K_4(1+x^2).$$

■

De acuerdo a la forma en la que habíamos definido a $m(k, x)$, $m(k, x) = e^{-ikx} f(k, x)$, vemos que $f(k, x)$ satisface la ecuación integral:

$$\begin{aligned} f(k, x) &= e^{ikx} m(k, x) \\ &= e^{ikx} I_n + \frac{e^{ikx}}{2ik} \int_x^\infty dt (e^{2ik(t-x)} - 1)q(t)e^{-ikt} f(k, x) \\ &= e^{ikx} I_n + \frac{1}{2ik} \int_x^\infty dt (e^{2ik(t-x)} - e^{-ik(t-x)})q(t)f(k, x) \\ &= e^{ikx} I_n + \frac{1}{k} \int_x^\infty dy \sin(k(t-x))V(y)f(k, y). \end{aligned}$$

Es decir,

$$f(k, x) = e^{ikx} I_n + \frac{1}{k} \int_x^\infty dy \sin(k(t-x))V(y)f(k, y).$$

Además, como $m(k, x)$, $m'(k, x)$ y e^{ikx} son analíticas $\forall k \in \mathbb{C}^+$ y continuas $\forall k \in \overline{\mathbb{C}^+}$, con x fijo, $f(k, x)$ y $f'(k, x)$ son analíticas $\forall k \in \mathbb{C}^+$ y continuas $\forall k \in \overline{\mathbb{C}^+}$. Eso lo enunciaremos en el siguiente teorema.

Teorema 3.9 $f(k, x)$ y $f'(k, x)$ son analíticas $\forall k \in \mathbb{C}^+$ y continuas $\forall k \in \overline{\mathbb{C}^+}$, donde $f(k, x)$ es la solución de Jost.

Proposición 3.10 La solución de Jost satisface la ecuación

$$f(0, x) = I_n + \int_x^\infty dy (y - x)V(y)f(0, y).$$

Dem. Como $f(k, x)$ es continua en $k = 0$,

$$\begin{aligned} f(0, x) &= \lim_{k \rightarrow 0} f(k, x) \\ &= \lim_{k \rightarrow 0} \left[e^{ikx} I_n + \frac{1}{2ik} \int_x^\infty dy \sin(k(t-x))V(y)f(0, y) \right] \\ &= I_n + \frac{k}{k} \int_x^\infty dy (y-x)V(y)f(0, y). \end{aligned}$$

Es decir,

$$f(0, x) = I_n + \int_x^\infty dy (y-x)V(y)f(0, y). \quad \blacksquare$$

Veamos que, efectivamente, $f(0, x)$ es solución de la ecuación $-\psi''(k, x) + V(x)\psi(k, x) = 0$.

$$\begin{aligned} \rightarrow f(0, x) &= I_n + \int_x^\infty dy yV(y)f(0, y) + x \int_x^\infty dy V(y)f(0, y). \\ \rightarrow f'(0, x) &= -xV(x)f(0, x) + \int_x^\infty dy V(y)f(0, y) + xV(x)f(0, x). \\ &\rightarrow f''(0, x) = xV(x)f(0, x). \end{aligned}$$

Así que:

$$-f''(0, x) + V(x)f(0, x) = -V(x)f(0, x) + V(x)f(0, x) = 0.$$

$$\text{i.e.,} \quad -f''(0, x) + V(x)f(0, x) = 0.$$

Teorema 3.11 Si se satisface que $\int_0^\infty dx xV(x) < \infty$, entonces la ecuación (3.1) con $k = 0$, $\psi''(k, x) = V(x)\psi(k, x)$, tiene un sistema fundamental de soluciones $E(x, 0), E^{(1)}(x, 0)$ tales que:

$$\begin{aligned} E(0, x) &= I_n + o(1), & E'(0, x) &= o(x^{-1}) \\ E^{(1)}(x) &= x[I_n + o(1)], & E'^{(1)}(x) &= I_n + o(x^{-1}). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Dem. Ya sabemos que $E(0, x)$ satisface la ecuación:

$$E(0, x) = I_n + \int_x^\infty dt (t - x)V(t)E(0, t).$$

Derivando,

$$E'(0, x) = - \int_x^\infty dt V(t)E(0, t).$$

Por otro lado, $E^{(1)}(x)$ está definida como la solución de una ecuación integral:

$$E^{(1)}(X) = xI_n - x \int_x^\infty dt V(t)E^{(1)}(t) - \int_x^\infty dt tV(t)E^{(1)}(t),$$

con $0 < h \leq x < \infty$ de forma que $\int_x^\infty dt t|V(t)| < 1$.

Veamos que es solución de la ecuación (3.1):

$$\begin{aligned} \rightarrow E'^{(1)}(x) &= I_n - \int_x^\infty dt V(t)E^{(1)} + xV(x)E^{(1)} - xV(x)E^{(1)} \\ \Rightarrow E'^{(1)} &= I_n - \int_x^\infty dt V(t)E^{(1)} \\ \rightarrow E''^{(1)} &= V(x)E^{(1)}. \end{aligned}$$

Así que

$$E''^{(1)} - V(x)E^{(1)} = 0.$$

De la ecuación (3.28) tenemos que $x^{-1}E^{(1)}(x)$ está acotada en el intervalo $0 < h \leq x < \infty$, pues, llamando $n(x) = x^{-1}E^{(1)}(x)$,

$$n(x) = I_n - \sum_{n=1}^{\infty} g_n(x) - \sum_{n=1}^{\infty} \ln x,$$

con

$$\begin{aligned} g_n(x) &= \int_{x \leq x_1 \leq \dots \leq x_n} dx_1 \dots dx_n V(x_1)V(x_2) \cdots V(x_n) \\ \ln x &= \int_{h \leq x_1 \leq \dots \leq x_n \leq x} dx_1 \dots dx_n x_1 \cdots x_n V(x_1) \cdots V(x_n). \end{aligned}$$

Ahora,

$$|g_n(x)| \leq \frac{1}{n!} \left(\int_x^\infty dt |V(t)| \right)^n \quad \text{y} \quad \ln x \leq \frac{1}{n!} \left(\int_x^\infty dt t|V(t)| \right)^n,$$

por lo que

$$\begin{aligned}
|n(x) - 1| &= \left| \sum_{n=1}^{\infty} (g_n(x) + \ln x) \right| \leq \sum_{n=1}^{\infty} |g_n(x) + \ln x| \leq \sum_{n=1}^{\infty} |g_n(x)| + \sum_{n=1}^{\infty} |\ln x| \\
&\leq \sum_{n=1}^{\infty} \left(\int_x^{\infty} dt |V(t)| \right)^n + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\int_x^{\infty} dt t|V(t)| \right)^n \\
&= e^{\alpha(x)} \alpha(x) + e^{\beta(x)} \beta(x) \leq \text{cte.}
\end{aligned}$$

Es decir, $n(x)$ está acotada en el intervalo $h \leq x < \infty$.

Veamos ahora el comportamiento asintótico de las soluciones.

$$\rightarrow E^{(1)}(x).$$

Primero tenemos que:

$$\int_h^x dt tV(t)E^{(1)}(x) = - \int_t^{\infty} dt sV(s)E^{(1)}(t) \Big|_h^x + \int_h^x \left[dt \left[\int_t^{\infty} ds sV(s) \right] E'^{(1)}(t) \right].$$

Por la condición $\int_{\infty} dx (1+x)^s |V(x)| < \infty$ y el hecho de que E y $E^{(1)}$ son acotadas, tenemos que:

$$- \int_t^{\infty} ds sV(s)E^{(1)}(t) \Big|_h^x = o(x), \quad x \rightarrow \infty$$

y

$$\begin{aligned}
\left| dt \int_h^x \left[\int_t^{\infty} ds sV(s) \right] E'^{(1)}(t) \right| &\leq \text{cte} \int_h^x dt \int_t^{\infty} ds sV(s) \\
&= c \left[\int_h^x ds s|V(s)| \int_h^s dt + \int_x^{\infty} ds s|V(s)| \int_h^x dt \right] \\
&\leq c \left[\int_h^x ds s^2|V(s)| + x \int_x^{\infty} ds s|V(s)| \right] \\
&\leq cx \left[x^{-1/2} \int_h^{\sqrt{x}} ds s|V(s)| + \int_{\sqrt{x}}^{\infty} ds s|V(s)| \right] \\
&= o(x), \quad x \rightarrow \infty.
\end{aligned}$$

Aplicando esto a la ecuación (3.28),

$$E^{(1)}(x) = xI_n + o(x)$$

$$i.e., \quad E^{(1)}(x) = x[I_n + o(1)].$$

Quitándole un orden y considerando que $x^{-1}E^{(1)}(x)$ es acotada y $E^{(1)}(x) \sim x^{-1}E^{(1)}(x)$,

$$E^{(1)}(x) = I_n + o(1).$$

$\rightarrow E(x, 0)$.

Como

$$\int_{\infty}^x dx (1+x)^j |V(x)| < \infty, \quad \int_x^{\infty} dt (t-x)V(t)E(t,0) = o(1), \quad x \rightarrow \infty,$$

$$\Rightarrow E(x, 0) = I_n + o(1).$$

Además,

$$\int_x^{\infty} dt V(t)E(t,0) = o(1/x), \quad x \rightarrow \infty,$$

$$\Rightarrow E'(x, 0) = o(1/x).$$

■

Renombrando estas dos soluciones, tenemos las soluciones de $2n$ columnas que satisfacen las condiciones asintóticas (debido al comportamiento asintótico, no pueden ser combinaciones lineales):

$$f(0, x) = I_n + o(1), \quad f'(0, x) = o(1/x), \quad x \rightarrow \infty, \quad (3.29)$$

$$g(0, x) = x[I_n + o(1)], \quad g'(0, x) = I_n + o(1), \quad x \rightarrow \infty. \quad (3.30)$$

Estas soluciones forman un sistema fundamental de soluciones para la ecuación

$$-\psi'' + V(x)\psi = 0, \quad x \in (0, +\infty). \quad (3.31)$$

Así, cualquier vector $\phi(x)$ que sea solución de (3.31) puede escribirse como:

$$\phi(x) = f(0, x)\xi + g(0, x)\eta, \quad x \in (0, +\infty), \quad (3.32)$$

donde los vectores constantes ξ y η en \mathbb{C}^n están únicamente determinados por $\phi(x)$. De (3.30) y (3.32) podemos ver que cualquier solución de (3.31) que se comporte como $o(x)$ cuando $x \rightarrow +\infty$ debe ser una solución acotada.

Hay varias soluciones matriciales $n \times n$ de (3.1) que se definen al especificar algunas condiciones iniciales constantes en un valor de x finito. Como resultado estas soluciones son analíticas en k en todo el plano complejo para todo x fijo. Debido a su analiticidad, se llaman *soluciones regulares*.

La solución regular $n \times n$ $\phi(k, x)$ satisface las condiciones iniciales

$$\phi(k, 0) = A, \quad \phi'(k, 0) = B, \quad (3.33)$$

donde A y B son las matrices que aparecen en (3.11).

Proposición 3.12 *La solución regular $\phi(kx)$ satisface la relación integral*

$$\phi(k, x) = A \cos kx + B \frac{\sin kx}{k} + \frac{1}{k} \int_0^x dy \sin k(x-y) V(y) \phi(k, y). \quad (3.34)$$

Dem. Claramente $\phi(k, 0) = A$. Y como

$$\begin{aligned} \phi(k, x) &= A \cos kx + \frac{B}{k} \sin kx + \frac{1}{2ik} \int_0^x dy (e^{ikx} e^{-iky} - e^{-ikx} e^{iky}) V(y) \phi(k, y) \\ &= +\frac{1}{k} \left[\frac{e^{ix}}{2i} \int_0^x dy e^{-iky} V(y) \phi(k, y) - \frac{e^{-ikx}}{2i} \int_0^x dy e^{iky} V(y) \phi(k, y) \right] \\ &\quad A \cos kx + \frac{B}{k} \sin kx \\ \Rightarrow \phi'(k, x) &= +\frac{1}{k} \left[\frac{ke^{ix}}{2} \int_0^x dy e^{-iky} V(y) \phi(k, y) + \frac{e^{ikx}}{2i} e^{-ikx} V(x) \phi(k, x) \right] \\ &\quad +\frac{1}{k} \left[\frac{ke^{-ikx}}{2} \int_0^x dy e^{iky} V(y) \phi(k, y) - \frac{e^{-ikx}}{2i} e^{ikx} V(x) \phi(k, x) \right] \\ &\quad -kA \sin kx + B \cos kx \\ &= -kA \sin kx + B \cos kx + \frac{1}{2} \int_0^x dy (e^{ik(x-y)} + e^{-ik(x-y)}) V(y) \phi(k, y) \\ \text{i.e., } \phi'(k, x) &= -kA \sin kx + B \cos kx + \int_0^x dy \cos(k(x-y)) V(y) \phi(k, y). \end{aligned}$$

Por lo que

$$\phi'(k, 0) = B.$$

Además,

$$\begin{aligned} \phi'(k, x) &= -k^2 A \cos kx - kB \sin kx + \frac{ik}{2} e^{ikx} \int_0^x dy e^{-iky} V(y) \phi(k, y) \\ &\quad + \frac{e^{ikx}}{2} e^{-ikx} V(x) \phi(k, x) - \frac{ik}{2} e^{-ikx} \int_0^x dy e^{iky} V(y) \phi(k, y) \\ &\quad + \frac{e^{-ikx}}{2} e^{ikx} V(x) \phi(k, x) \\ &= -\frac{k}{2i} \int_0^x dy (e^{ik(x-y)} - e^{-ik(x-y)}) V(y) \phi(k, y) + V(x) \phi(k, x) \\ &\quad -k^2 A \cos kx - kB \sin kx \\ \text{i.e., } \phi''(k, x) &= -k^2 A \cos kx - kB \sin kx - k \int_0^x dy \sin(k(x-y)) V(y) \phi(k, y) \\ &\quad + V(x) \phi(k, x). \end{aligned}$$

Así que:

$$\begin{aligned}
-\phi'' + V(x)\phi &= k^2\left(A \cos kx + \frac{B}{k} \sin kx\right) \\
&\quad + \frac{1}{k} \int_0^x dy \sin(k(x-y))V(y)\phi(k,y) \\
&= k^2\phi \\
&\Rightarrow -\phi'' + V(x)\phi = k^2\phi.
\end{aligned}$$

Como puede verse, es solución de (3.1).

Definamos ahora dos matrices $n \times n$ regulares adicionales soluciones de (3.1), $C(k, x)$ y $S(k, x)$, con condiciones iniciales en $x = a$, donde la matriz $f(0, a)$ es invertible. La existencia de dicho valor a está asegurada por el hecho de que $f(0, x) = I_n + o(1)$ cuando $x \rightarrow \infty$ y por lo tanto $f(0, x)$ es invertible al menos para valores grandes de x . De hecho, si $f(0, a)^{-1}$ existe, entonces debe existir $f(k, a)^{-1}$ en la vecindad de $k = 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$. Esto es porque para cada valor de x —fijo se sabe que $f(k, x)$ es una función continua de $k \in \overline{\mathbb{C}^+}$. Por lo tanto, $\det[f(k, a)]$ es una función continua de k y si es distinta de cero en $k = 0$ debe ser distinta de cero en la vecindad de $k = 0$. Así, concluimos que:

$$f(k, a) = f(0, a) + o(1), \quad f(k, a)^{-1} = f(0, a)^{-1} + o(1), \quad k \rightarrow \text{en } \overline{\mathbb{C}^+}. \quad (3.35)$$

La solución que involucra el coseno $C(k, x)$ satisface las condiciones iniciales

$$C(k, a) = I_n, \quad C'(k, a) = 0, \quad (3.36)$$

y la solución que involucra el seno $S(k, x)$ satisface

$$S(k, a) = 0, \quad S'(k, a) = I_n. \quad (3.37)$$

Así, tenemos las representaciones integrales

$$C(k, x) = I \cos k(x-a) + \frac{1}{k} \int_a^x dy \sin k(x-a)V(y)C(k, y). \quad (3.38)$$

$$S(k, x) = \frac{I \sin k(x-a)}{k} + \frac{1}{k} \int_a^x dy \sin k(x-a)V(y)S(k, y). \quad (3.39)$$

Nótese que suprimimos la dependencia de a en la notación de estas soluciones.

Definimos otra solución regular $n \times n$ de (3.1), $w(k, x)$, que satisface las condiciones iniciales

$$w(k, a) = f(0, a), \quad w'(k, a) = f'(0, a). \quad (3.40)$$

Nuevamente suprimimos la dependencia de a en la notación para $w(k, x)$. Nótese que

$$w(0, x) = f(0, x), \quad x \in \mathbb{R}^+, \quad (3.41)$$

porque ambos lados satisfacen (3.1) cuando $k = 0$ y ambos satisfacen las mismas condiciones iniciales en $x = a$ dadas en (3.40). Puede verse de (3.36), (3.37) y (3.40) que:

$$w(k, x) = C(k, x)f(0, a) + S(k, x)f'(0, a), \quad (3.42)$$

pues satisface las condiciones iniciales pedidas:

$$\begin{aligned} w(k, a) &= C(k, a)f(0, a) + S(k, a)f'(0, a) = f(0, a) \\ w'(k, a) &= C'(k, a)f(0, a) + S'(k, a)f'(0, a) = f'(0, a), \end{aligned}$$

donde $f(k, x)$ es la solución de Jost que aparece en (3.25).

Veamos que estas soluciones regulares satisfacen, $\forall k \in \mathbb{C}$, que

$$\phi(-k, x) = \phi(k, x), \quad C(-k, x) = C(k, x), \quad S(-k, x) = S(k, x), \quad w(-k, x) = w(k, x). \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \phi(-k, x) &= A \cos kx - B \frac{\sin -kx}{k} - \frac{1}{-k} \int_0^x dy \sin k(x-y)V(y)\phi(k, y) = \phi(k, x) \\ \rightarrow C(-k, x) &= I \cos k(x-a) - \frac{1}{-k} \int_a^x dy \sin k(x-a)V(y)C(k, y) = C(k, x) \\ \rightarrow S(-k, x) &= -\frac{I \sin k(x-a)}{-k} - \frac{1}{-k} \int_a^x dy \sin k(x-a)V(y)S(k, y) = S(k, x) \\ \rightarrow w(-k, x) &= C(-k, x)f(0, a) + S(-k, x)f'(0, a) = C(k, x)f(0, a) + S(k, x)f'(0, a) \\ &= w(k, x) \end{aligned}$$

Esto pasa porque k aparece como k^2 en (3.1) y los valores iniciales de estas soluciones son independientes de k , como puede verse de (3.33), (3.36), (3.37) y (3.40).

Asociada con (3.1) tenemos la ecuación adjunta

$$-(\psi^\dagger)'' + \psi^\dagger V(x) = (k^*)^2 \psi^\dagger, \quad x \in (0, +\infty), \quad (3.44)$$

donde usamos (3.2) y un asterisco que denota conjugación compleja. Nótese que si $\psi(k, x)$ es una solución a (3.1), entonces $\psi(\pm k^*, x)^\dagger$ es solución de (3.44). También agregaremos que si $\psi(k, x)$ tiene una extensión analítica de $k \in \mathbb{R}$ a $k \in \mathbb{C}^+$, entonces $\psi(-k, x)^\dagger$ también tiene una extensión analítica de $k \in \mathbb{R}$ a $k \in \mathbb{C}^+$, y de hecho esa extensión es igual a $\psi(-k^*, x)^\dagger$ para $k \in \mathbb{C}^+$. Una consecuencia de esto es que, como $f(k, x)$ y $f'(k, x)$ son analíticas para $k \in \mathbb{C}^+$, $f(-k, x)^\dagger$ y $f'(-k, x)^\dagger$ tienen extensiones analíticas de $k \in \mathbb{R}$ a $k \in \mathbb{C}^+$ dadas por $f(-k^*, x)^\dagger$ y $f'(-k^*, x)^\dagger$, respectivamente.

Sea $[F; G] := FG' - F'G$ el *Wronskiano*. Podemos ver que para cualquier solución $n \times p$ $\psi(k, x)$ y cualquier solución $n \times q$ $\phi(k, x)$ de (3.1), los siguientes Wronskianos son independientes de x :

Proposición 3.13 *Los Wronskianos $[\phi(k^*, x)^\dagger; \psi(k, x)]$ y $[\phi(-k^*, x)^\dagger; \psi(k, x)]$ son independientes de x .*

Al evaluar los Wronskianos en $x = 0$ y en $x = +\infty$, podemos obtener varias identidades, como las siguientes:

$$[f(\pm k, x)^\dagger; f(\pm k, x)] = \pm 2ikI_n, \quad k \in \mathbb{R}, \quad (3.45)$$

$$[f(-k^*, x)^\dagger; f(k, x)] =, \quad k \in \overline{\mathbb{C}^+}. \quad (3.46)$$

3.3. La matriz de Jost y la matriz de Dispersión

En esta sección introduciremos la matriz de Jost y la matriz de dispersión para (3.1) con un potencial matricial autoadjunto $V \in L_1^1(\mathbb{R}^+)$ con la condición a la frontera autoadjunta (3.11)-(3.13). También presentamos algunos resultados preliminares que se necesitan después para analizar el comportamiento en el límite de k -pequeñas de estas dos matrices y de la matriz inversa de Jost.

Recordemos que la matriz de Jost F_θ correspondiente a (3.3) en el caso escalar (es decir, cuando $n = 1$ en (3.1)) está definida con la ayuda de la solución de Jost $f(k, x)$ como

$$F_\theta(k) := \begin{cases} -i[f'(k, 0) + (\cot \theta)f(k, 0)], & \theta \in (0, \pi), \\ f(k, 0), & \theta = \pi. \end{cases} \quad (3.47)$$

Definiremos la matriz análoga de la función de Jost, llamada la matriz de Jost, de forma que se reduce a la función de Jost conocida cuando $n = 1$. Recordemos también que la matriz de dispersión en el caso escalar está definida como:

$$S_\theta(k) := \begin{cases} -\frac{F_\theta(-k)}{F_\theta(k)}, & \theta \in (0, \pi), \\ \frac{F_\theta(-k)}{F_\theta(k)}, & \theta = \pi. \end{cases} \quad (3.48)$$

El cambio de signo en (3.48) en el caso de Dirichlet (i.e., cuando $\theta = \pi$) se da porque (3.48) asegura que $S(k) \rightarrow 1$ cuando $V \rightarrow 0$, lo que es una consecuencia del hecho de que tanto el Hamiltoniano perturbado como el no perturbado satisfacen la misma condición autoadjunta a la frontera en $x = 0$. Definiremos la matriz de dispersión generalizando (3.48) al caso matricial. Por simplicidad, suprimiremos la dependencia de la matriz de Jost y la de dispersión de la parametrización (A, B) de la condición a la frontera, y usaremos la notación $J(k)$ para la matriz de Jost en lugar de $J_{(A,B)}(k)$; también escribiremos $S(k)$ para la matriz de dispersión en lugar de $S_{(A,B)}(k)$. Nótese que antes usamos $S(k, x)$ en (3.36) para denotar la solución regular similar al seno de (3.1), y no debe ser confundida con la notación $S(k)$ de la matriz de dispersión.

Definición 3.14 La matriz de Jost $J(k)$ para $k \in \overline{\mathbb{C}^+}$ se define como:

$$J(k) := [f(-k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)] = f(-k^*, 0)^\dagger B - f'(-k^*, 0)^\dagger A, \quad (3.49)$$

donde $f(k, x)$ es la solución de Jost que aparece en (3.25), $\phi(k, x)$ es la solución regular que aparece en (3.33) y A y B son las matrices que aparecen en (3.11)-(3.13) y (3.33).

Nótese que J no está unívocamente determinada por el potencial V y la condición a la frontera autoadjunta (3.11)-(3.13), porque las tres condiciones son invariantes bajo la transformación (3.17), por lo que se tiene $J \rightarrow JD^\dagger$ bajo (3.17), indicando que la definición de J como la hemos dado es única salvo por una multiplicación por la derecha por una matriz constante invertible. Por otro lado, dicha postmultiplicación no cambia los ceros en \mathbb{C}^n del determinante de $J(k)$. Estos ceros corresponden a las energías de los estados ligados de (3.1) con la condición a la frontera (3.11)-(3.13), por lo que las energías de los estados ligados siguen estando unívocamente determinadas por (3.49).

Teorema 3.15 Si V es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$, entonces la matriz de Jost $J(k)$ es invertible para $k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$.

Dem. Sea $k \in \mathbb{R}$. Definimos $L(k)$ como:

$$L(k) := f'(-k, 0)^\dagger B E^{-2} + f(-k, 0)^\dagger A E^{-2}, \quad (3.50)$$

donde E es la matriz E_3 de (3.14).

Usando (3.16), (3.45) y (3.49) podemos ver que $J(k)L(k)^\dagger - L(k)J(k)^\dagger$ es igual a:

$$\begin{aligned} &= (f(-k^*, 0)^\dagger B - f'(-k, 0)^\dagger A)(f'(-k, 0)^\dagger B E^{-2} + f(-k, 0)^\dagger A E^{-2})^\dagger \\ &\quad - (f'(-k, 0)^\dagger B E^{-2} + f(-k, 0)^\dagger A E^{-2})(f(-k^*, 0)^\dagger B - f'(-k, 0)^\dagger A)^\dagger \\ &= [f(-k, 0) B E^{-2} B^\dagger f'(-k, 0) - f'(-k, 0) B E^{-2} B^\dagger f(-k, 0)] \\ &\quad + [f(-k, 0)^\dagger A E^{-2} A^\dagger f'(-k, 0) - f'(-k, 0)^\dagger A E^{-2} A^\dagger f(-k, 0)] \\ &\quad + [f(-k, 0)^\dagger B E^{-2} A^\dagger f(-k, 0) - f'(-k, 0)^\dagger A E^{-2} B^\dagger f'(-k, 0)] \\ &\quad + [f'(-k, 0)^\dagger B E^{-2} A^\dagger f(-k, 0) - f(-k, 0)^\dagger A E^{-2} B^\dagger f(-k, 0)] \\ &= [f(-k, 0)^\dagger; (B E^{-2} B^\dagger + A E^{-2} A^\dagger) f'(-k, 0)] \\ &\quad + f(-k, 0)^\dagger (B E^{-2} A^\dagger - A E^{-2} B^\dagger) f(-k, 0) \\ &\quad + f'(-k, 0)^\dagger (B E^{-2} A^\dagger - A E^{-2} B^\dagger) f'(-k, 0). \end{aligned}$$

Es decir,

$$J(k)L(k)^\dagger - L(k)J(k)^\dagger = [f(-k, x)^\dagger; f'(-k, x)] \Big|_{x=0} = -2ikI_n, \quad k \in \mathbb{R}. \quad (3.51)$$

Si $J(k)$ no fuera invertible para algún $K_0 \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, entonces los renglones de $J(k_0)$ serían linealmente dependientes, por lo que $u^+ J(k_0) = 0$ para algún $u \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ y

también $J(k_0)^\dagger u = 0$. Sin embargo, esto implicaría que:

$$\begin{aligned} 0 &= u^\dagger J(k_0) L(k_0)^\dagger u - u^\dagger L(k_0) J(k_0)^\dagger u \\ &= -2ik_0 u^\dagger u \\ &= -2ik_0 \|u\|^2 \\ &\neq 0! \end{aligned}$$

Luego, $J(k_0)$ es invertible $\forall k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. ■

Definición 3.16 La matriz de dispersión $S(k)$ está definida como:

$$S(k) := -J(-k)J(k)^{-1}, \quad k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}, \quad (3.52)$$

y está unívocamente determinada por la condición a la frontera y el potencial V .

Aunque $J(k)$ está unívocamente determinada salvo por una multiplicación por la derecha por una matriz constante invertible, la determinación única de $S(k)$ está asegurada porque $S(k)$ permanece invariante bajo la transformación (3.17). Nótese que el dominio de $J(k)$ es $k \in \mathbb{C}^+$ porque $f(-k, 0)^\dagger$ y $f'(-k, 0)^\dagger$ tienen extensiones analíticas de $k \in \mathbb{R}$ a $k \in \mathbb{C}^+$ y los valores de esas extensiones son $f(-k^*, 0)^\dagger$ y $f'(-k^*, 0)^\dagger$, respectivamente.

Por otra parte, en general $S(k)$ sólo está definida para k reales porque normalmente $J(-k)$ no puede ser extendida de $k \in \mathbb{R}$ a $k \in \mathbb{C}^+$. Aún más, la existencia de $S(k)$ cuando $k = 0$ debe ser estudiada por separado porque, como puede verse en el Teorema anterior, la existencia de $J(k)^{-1}$ sólo está asegurada para $k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ y no puede ser fácilmente inferido de (3.52) si $S(k)$ tiene límite mientras $k \rightarrow 0$ cuando $J(0)^{-1}$ no existe.

Primero analizaremos el caso cuando V es cero en (3.1). En ese caso, $f(k, x) = e^{ikx} I_n$ y (3.49) y (3.52) conducen a:

$$J(k) = B - ikA, \quad [J(k)]^{-1} = (B - ikA)^{-1}, \quad S(k) = -(B + ikA)(B - ikA)^{-1},$$

puesto que:

$$J(k) = f(-k^*, 0)^\dagger B - f'(-k^*, 0)^\dagger A = I_n B - ik I_n A = B - ikA,$$

y las demás identidades son inmediatas.

Ahora usaremos la representación (3.23) para (A, B) con la forma diagonal de U que se obtuvo en (3.24). Entonces se obtiene:

$$\begin{aligned} A &= -\text{diag}\{\sin \theta_1, \dots, \sin \theta_n\}, & B &= \text{diag}\{\cos \theta_1, \dots, \cos \theta_n\}, \\ J(k) &= \text{diag}\{J_1(k), \dots, J_n(k)\}, & S(k) &= \text{diag}\{S_1(k), \dots, S_n(k)\}, \end{aligned}$$

donde

$$J_j(k) := \cos \theta_j + ik \sin \theta_j, \quad S_j(k) := \frac{-\cos \theta_j + ik \sin \theta_j}{J_j(k) := \cos \theta_j + ik \sin \theta_j}, \quad (3.53)$$

pues:

$$\begin{aligned} \rightarrow A &= \frac{i}{2}(U - U^\dagger) = \frac{i}{2} \text{diag}\{e^{i\theta_1} - e^{-i\theta_1}, \dots, e^{i\theta_n} - e^{-i\theta_n}\} = -\text{diag}\{\sin \theta_1, \dots, \sin \theta_n\}. \\ \rightarrow B &= \frac{1}{2}(U + U^\dagger) = \frac{i}{2} \text{diag}\{e^{i\theta_1} + e^{-i\theta_1}, \dots, e^{i\theta_n} + e^{-i\theta_n}\} = -\text{diag}\{\cos \theta_1, \dots, \cos \theta_n\}. \\ \rightarrow J(k) &= B - ikA = \text{diag}\{\cos \theta_1 + ik \sin \theta_1, \dots, \cos \theta_n + ik \sin \theta_n\} \\ &= \text{diag}\{J_1(k), \dots, J_n(k)\} \\ \rightarrow S_j(k) &= -J_j(-k)J_j(k)^{-1} = -(\cos \theta_j - ik \sin \theta_j)(\cos \theta_j + ik \sin \theta_j)^{-1} \\ &= \frac{-\cos \theta_j + ik \sin \theta_j}{J_j(k) := \cos \theta_j + ik \sin \theta_j}. \end{aligned}$$

Como puede verse de (3.53), en el caso de Dirichlet, con $\theta_j = \pi_j$,

$$J_j(k) = -1, \quad [J_j(k)]^{-1} = -1, \quad S_j(k) = -1.$$

Por otro lado, en el caso de Neumann, con $\theta_j = \pi/2$,

$$J_j(k) = ik, \quad [J_j(k)]^{-1} = \frac{1}{ik}, \quad S_j(k) = 1.$$

Nótese que en el caso de Neumann $J_j(0)$ se desvanece linealmente cuando $k \rightarrow 0$ y no es una matriz invertible; sin embargo, $S_j(0)$ todavía está bien definida porque $J(-k)[J(k)]^{-1}$ tiene un límite bien definido mientras $k \rightarrow 0$.

Proposición 3.17 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y (5.1). Entonces, la solución regular $\phi(k, x)$ puede ser expresada en términos de la solución de Jost $f(k, x)$:*

$$\phi(k, x) = \frac{1}{2ik} f(k, x) J(-k) - \frac{1}{2ik} f(-k, x) J(k), \quad k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}. \quad (3.54)$$

Usando (3.25) podemos ver que las $2n$ columnas combinadas de $f(k, x)$ y $f(-k, x)$ forman un sistema fundamental de soluciones vector-columna $\forall k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. Por lo tanto, podemos escribir:

$$\phi(k, x) = f(k, x) C_1(k) + f(-k, x) C_2(k), \quad k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}, \quad (3.55)$$

para alguna $C_1(k), C_2(k) \in \mathbb{M}_{n \times n}$ que dependen de k pero no de x .

Sustituyendo (3.55) en el Wronskiano y usando las identidades (3.45), (3.46) y (3.49) obtenemos

$$\begin{aligned}
[f(\pm k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)] &= f(\pm k^*, x)^\dagger \phi'(k, x) - f'(\pm k^*, x)^\dagger \phi(k, x) \\
&= f(\pm k^*, x)^\dagger (f'(k, x)C_1(k) + f'(-k, x)C_2(k)) \\
&\quad - f'(\pm k^*, x)^\dagger (f(k, x)C_1(k) + f(-k, x)C_2(k)) \\
&= C_1(k)(f(\pm k^*, x)^\dagger + f'(k, x) - f'(\pm k^*, x)^\dagger f(k, x)) \\
&\quad + C_2(k)(f(\pm k^*, x)^\dagger f'(-k, x) - f'(\pm k^*, x)^\dagger f(-k, x)) \\
&= C_1(k)[f(\pm k^*, x)^\dagger; f(k, x)] + C_2(k)[f(\pm k^*, x)^\dagger; f(-k, x)].
\end{aligned}$$

Por (3.45) y (3.46), \rightarrow Si tomamos $+k^*$,

$$J(-k) = [f(k, x)^\dagger; f(k, x)] = 2ikC_1(k) \quad \Rightarrow C_1(k) = \frac{1}{2ik}J(-k), \quad k \neq 0.$$

\rightarrow Si tomamos $-k^*$,

$$J(k) = [f(-k, x)^\dagger; f(-k, x)] = -2ikC_2(k) \quad \Rightarrow C_2(k) = -\frac{1}{2ik}J(k), \quad k \neq 0.$$

■

Sea $\psi \in \mathbb{M}_{n \times n}$ una solución de (3.1) tal que

$$\psi(k, x) := -2ik\phi(k, x)J(k)^{-1}, \quad (3.56)$$

donde $\phi(k, x)$ es la solución regular y J la matriz de Jost.

Así, $S(k)$ está determinada unívocamente por el potencial V y la condición a la frontera (3.11) porque, como se verá más adelante, $J(k)$ es única excepto por la post-multiplicación de una matriz constante, por lo que $S(k)$ es independiente de la parametrización particular usada en (3.11)-(3.13). En general, $S(k)$ está definida sólo para algunas $k \in \mathbb{R}$ porque $J(-k)$ no puede ser extendida, generalmente, de $k \in \mathbb{R}$ a $k \in \mathbb{C}^+$. La continuidad de $S(k)$ en $k = 0$ ya se demostró. Aún cuando $J(k)^{-1}$ puede no existir en $k = 0$, ya se mostró que el producto del lado derecho de la ecuación (3.52) tiene un límite bien definido cuando $k \rightarrow 0$ en \mathbb{R} , por lo que el dominio de $S(k)$ es $k \in \mathbb{R}$.

Proposición 3.18 *Consideremos al operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y (5.1). Entonces $\forall x \in \mathbb{R}^+$ la solución de (3.56) es continua para $k \in \mathbb{R}^+$ y puede ser escrita como*

$$\psi(k, x) := f(-k, x) + f(k, x)S(k), \quad k \in \mathbb{R}. \quad (3.57)$$

Dem. → Sea $k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. Entonces, de (3.56),

$$\begin{aligned}\psi(k, x) &= -2ik\phi(k, x)J(k)^{-1} \\ &= -2ik \left(\frac{1}{2ik} f(k, x)J(-k) - \frac{1}{2ik} f(-k, x)J(k) \right) J(k)^{-1} \\ &= f(k, x)(-J(-k)J(k)^{-1}) + f(-k, x)\end{aligned}$$

$$\psi(k, x) = f(-k, x) + f(k, x)S(k).$$

→ Sea $k = 0$. Como $f(k, x)$ y $S(k)$ son continuas $\forall k \in \mathbb{R}$,

$$\psi(0, x) = f(0, x) + f(0, x)S(0).$$

Es decir,

$$\psi(k, x) = f(-k, x) + f(k, x)S(k).$$

Además, el argumento anterior implica que $\psi(k, x)$ también es continua $\forall k \in \mathbb{R}$ para alguna $x \in \mathbb{R}^+$ fija. ■

Algunas propiedades útiles de $S(k)$ se muestran a continuación. Gracias al resultado del límite para k -chicas que veremos más adelante, estas propiedades son válidas para toda k , incluyendo $k = 0$.

Proposición 3.19 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y (5.1). Entonces $S(k)$ es unitaria y cumple que*

$$S(-k) = S(k)^{-1} = S(k)^\dagger, \quad k \in \mathbb{R}. \quad (3.58)$$

Dem. Tenemos que:

$$\begin{aligned}[\psi(k, x)^\dagger; \psi(k, x)] &= \psi(k, x)^\dagger \psi'(k, x) - \psi'(k, x)^\dagger \psi(k, x) \\ &= (f'(-k, x)^\dagger + S(k)^\dagger f(k, x)^\dagger)(f'(-k, x) + f'(k, x)S(k)) \\ &\quad - (f'(-k, x)^\dagger + S(k)^\dagger f'(k, x)^\dagger)(f(-k, x) + f(k, x)S(k)) \\ &= [f(-k, x)^\dagger f'(-k, x) - f'(-k, x)^\dagger f(-k, x)] \\ &\quad + [f(-k, x)^\dagger f'(k, x) - f'(-k, x)^\dagger f(k, x)]S(k) \\ &\quad + S(k)^\dagger [f(k, x)^\dagger f'(-k, x) - f'(k, x)^\dagger f(-k, x)] \\ &\quad + S(k)^\dagger [f(k, x)^\dagger f'(k, x) - f'(k, x)^\dagger f(k, x)]S(k) \\ &= -2ikI_n + 2ikS(k)^\dagger S(k).\end{aligned}$$

$$\text{i.e., } [\psi(k, x)^\dagger; \psi(k, x)] = -2ikI_n + 2ikS(k)^\dagger S(k), \quad k \in \mathbb{R}. \quad (3.59)$$

Por otro lado, usando (3.56) y recordando que $k = k^*$ porque $k \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} [\psi(k, x)^\dagger; \psi(k, x)] &= (2ik^*[J(k)^{-1}]^\dagger \phi(k, x)^\dagger)(-2ik\phi'(k, x)J(k)^{-1}) \\ &\quad - (2ik^*[J(k)^{-1}]^\dagger \phi'(k, x)^\dagger)(-2ik\phi(k, x)J(k)^{-1}) \\ &= -(2ik)^2 J(k)^{-1} [\phi(k, x)^\dagger \phi'(k, x)] J(k)^{-1} \\ &\quad + (2ik)^2 [J(k)^{-1}]^\dagger [\phi'(k, x)^\dagger \phi(k, x)] J(k)^{-1}. \end{aligned}$$

Valuando en $x = 0$ (porque los Wronskianos son independientes de x),

$$\begin{aligned} &= -(2ik)^2 [J(k)^{-1}]^\dagger (A^\dagger B - B^\dagger A) J(k)^{-1} \\ &= 0. \end{aligned}$$

$$\text{i.e., } [\psi(k, x)^\dagger; \psi(k, x)] = 0, \quad k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}. \quad (3.60)$$

Sin embargo, (3.60) sigue siendo válida en $k = 0$, porque $kJ(k)^{-1}$ tiene un límite bien definido cuando $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$, como establece el Teorema 4.15. Comparando (3.59) y (3.60),

$$\begin{aligned} -2ikI_n + 2ikS(k)^\dagger S(k) &= 0, \quad k \in \mathbb{R} \\ \Rightarrow S(k)^\dagger &= S(k)^{-1}, \quad k \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Ahora veamos la otra parte de la identidad:

$$\begin{aligned} [\psi(-k, x)^\dagger; \psi(k, x)] &= \psi(-k, x)^\dagger \psi'(k, x) - \psi'(-k, x)^\dagger \psi(k, x) \\ &= (f(k, x)^\dagger + S(-k)^\dagger f(-k, x)^\dagger)(f'(-k, x) + f'(k, x)S(k)) \\ &\quad - (f'(k, x)^\dagger + S(-k)^\dagger f'(-k, x)^\dagger)(f(-k, x) + f(k, x)S(k)) \\ &= [f(k, x)^\dagger; f(-k, x)] + S(-k)^\dagger [f(-k, x)^\dagger; f(-k, x)] \\ &\quad + [f(k, x)^\dagger; f(k, x)]S(k) + S(-k)^\dagger [f(-k, x)^\dagger; f(k, x)]S(k) \\ &= -2ikS(-k)^\dagger + 2ikS(k). \end{aligned}$$

$$\text{i.e., } [\psi(-k, x)^\dagger; \psi(k, x)] = 2ik(S(k) - S(-k)^\dagger), \quad k \in \mathbb{R}. \quad (3.61)$$

Y usando (3.56),

$$\begin{aligned} [\psi(-k, x)^\dagger; \psi(k, x)] &= (-2ik[J(-k)^{-1}]^\dagger \phi(k, x)^\dagger)(-2ik\phi'(k, x)J(k)^{-1}) \\ &\quad - (-2ik[J(-k)^{-1}]^\dagger \phi'(-k, x)^\dagger)(-2ik\phi(k, x)J(k)^{-1}) \\ &= (2ik)^2 J(k)^{-1} (A^\dagger B - B^\dagger A) J(k)^{-1} \\ &= 0. \end{aligned}$$

$$\text{i.e., } [\psi(-k, x)^\dagger; \psi(k, x)] = 0, \quad k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}. \quad (3.62)$$

Por el mismo argumento que en (3.60), (3.62) es válida para $k = 0$ y:

$$\begin{aligned} 2ik(S(k) - S(-k)^\dagger) &= 0 \\ \Rightarrow S(-k) &= S(k)^\dagger, \quad k \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Es decir,

$$[\psi(-k, x)^\dagger; \psi(k, x)] = 0, \quad k \in \mathbb{R}. \quad (3.63)$$

3.4. Transformaciones

En esta sección hacemos énfasis en cómo la solución de Jost, la solución regular de (3.1), la matriz de Jost y la matriz de dispersión cambian si las matrices A y B que se usan en la parametrización de la condición a la frontera (3.11)-(3.13) son transformadas sin afectar (3.12) y (3.13). En particular, consideramos una multiplicación por la derecha por una matriz invertible, una transformación unitaria por una matriz unitaria, y una combinación de las dos anteriores. Los resultados son útiles para el análisis de las asíntotas de k -grandes de varias cantidades y para la derivación del Teorema de Levinson.

Proposición 3.20 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y (5.1). Sean A y B las matrices de (3.11)-(3.13), $f(k, x)$ la solución de Jost de (3.1) que satisface (3.25), $\phi(k, x)$ la solución regular de (3.1) que satisface (3.33), $J(k)$ la matriz de Jost de (3.49) y $S(k)$ la matriz de dispersión de (3.52). Entonces,*

- a) *Bajo la transformación $V \mapsto V$ y $(A, B) \mapsto (AT, BT)$, con $T \in \mathbb{M}_{n \times n}$ invertible, se tiene que*

$$(f, \phi, J, S) \mapsto (f, \phi T, JT, S).$$

- b) *Bajo la transformación $V \mapsto M^\dagger V M$ y $(A, B) \mapsto (M^\dagger A M, M^\dagger B M)$, con $M \in \mathbb{M}_{n \times n}$ unitaria, se tiene que*

$$(f, \phi, J, S) \mapsto (M^\dagger f M, M^\dagger \phi M, M^\dagger J M, M^\dagger S M).$$

- c) *Bajo la transformación $V \mapsto M^\dagger V M$ con $M \in \mathbb{M}_{n \times n}$ unitaria y la combinación de tres transformaciones consecutivas $(A, B) \mapsto (M^\dagger A T_1 M T_2, M^\dagger B T_1 M T_2)$, $T_1, T_2 \in \mathbb{M}_{n \times n}$ invertibles, se tiene que:*

$$(f, \phi, J, S) \mapsto (M^\dagger f M, M^\dagger \phi T_1 M T_2, M^\dagger J T_1 M T_2, M^\dagger S T_1 M T_2). \quad (3.64)$$

Dem. Tenemos que verificar que se satisfaga la ecuación (3.1), la condición a la frontera (3.11)-(3.13), las asíntotas de (3.25), las condiciones iniciales de (3.33), la definición de $J(k)$ de (3.49) y la definición de $S(k)$ de (3.52).

- a) $V \mapsto V$ y $(A, B) \mapsto (AT, BT)$, con $T \in \mathbb{M}_{n \times n}$ invertible. Sean $(\tilde{A}, \tilde{B}) = (AT, BT)$.

$$\rightarrow \begin{cases} -\tilde{B}^\dagger \psi(0) + \tilde{A}^\dagger \psi'(0) = -T^\dagger (B^\dagger \psi(0) + A^\dagger \psi'(0)) = 0 \\ -\tilde{B}^\dagger \tilde{A} + \tilde{A}^\dagger \tilde{B} = -T^\dagger (B^\dagger A + A^\dagger B) T = 0 \\ \tilde{A}^\dagger \tilde{A} + \tilde{B}^\dagger \tilde{B} = T^\dagger (A^\dagger A + B^\dagger B) T > 0. \end{cases}$$

Tenemos, por [1] y [2], que:

$$-\psi'' + V(x)\psi = k^2\psi,$$

y

$$f = e^{ikx}[I_n + o(1/x)], \quad f' = ike^{ikx}[I_n + o(1/x)].$$

Por otro lado,

$$\rightarrow \begin{cases} \tilde{\phi}(k, 0) = \phi(k, 0)T = AT = \tilde{A} \\ \tilde{\phi}'(k, 0) = \phi'(k, 0)T = BT = \tilde{B}. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \tilde{J}(k) &= J(k)T = [f(-k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)]T \\ &= f(-k^*, x)^\dagger \phi'(k, x)T - f'(-k^*, x)^\dagger \phi(k, x)T \\ &= \tilde{f}(-k^*, x)^\dagger \tilde{\phi}'(k, x) - \tilde{f}'(-k^*, x)^\dagger \tilde{\phi}(k, x) \\ &= [\tilde{f}(-k^*, x)^\dagger; \tilde{\phi}(k, x)]. \end{aligned}$$

$$\rightarrow S(k) = -J(-k)J(k)^{-1} = -J(k)TT^{-1}J(k)^{-1} = -\tilde{J}(-k)\tilde{J}(k)^{-1} = \tilde{S}(k).$$

b) $V \mapsto M^\dagger VM$ y $(A, B) \mapsto (M^\dagger AM, M^\dagger BM)$, con $M \in \mathbb{M}_{n \times n}$ unitaria. Sean $(\tilde{A}, \tilde{B}) = (M^\dagger A, M^\dagger BM)$.

$$\rightarrow \begin{cases} -\tilde{B}^\dagger \psi(0) + \tilde{A}^\dagger \psi'(0) = -M^\dagger(B^\dagger M \psi(0) + A^\dagger M \psi'(0)) = 0 \\ -\tilde{B}^\dagger \tilde{A} + \tilde{A}^\dagger \tilde{B} = -M^\dagger(B^\dagger M M^\dagger A + A^\dagger M M^\dagger B)M = -M^\dagger(B^\dagger A + A^\dagger B)M = 0 \\ \tilde{A}^\dagger \tilde{A} + \tilde{B}^\dagger \tilde{B} = M^\dagger(A^\dagger A + B^\dagger B)M > 0. \end{cases}$$

Tenemos, por [1] y [2], que:

$$-\psi'' + V(x)\psi = k^2\psi,$$

$$\rightarrow \begin{cases} \tilde{f} = M^\dagger f M = M^\dagger(e^{ikx}[I_n + o(1/x)])M = e^{ikx}[M^\dagger M + o(1/x)] \\ = e^{ikx}[I_n + o(1/x)], \\ \tilde{f}' = M^\dagger f' M = M^\dagger(ike^{ikx}[I_n + o(1/x)])M = ike^{ikx}[M^\dagger M + o(1/x)] \\ = ike^{ikx}[I_n + o(1/x)]. \end{cases}$$

$$\rightarrow \begin{cases} \tilde{\phi}(k, 0) = M^\dagger \phi(k, 0)M = M^\dagger AM = \tilde{A} \\ \tilde{\phi}'(k, 0) = M^\dagger \phi'(k, 0)M = M^\dagger BM = \tilde{B}. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \tilde{J}(k) &= M^\dagger J(k)M = M^\dagger [f(-k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)]M \\ &= f(-k^*, x)^\dagger \phi'(k, x)T - f'(-k^*, x)^\dagger \phi(k, x)T \\ &= M^\dagger f(-k^*, x)^\dagger M M^\dagger \phi'(k, x)M - M^\dagger f'(-k^*, x)^\dagger M M^\dagger \phi(k, x)M \\ &= \tilde{f}(-k^*, x)^\dagger \tilde{\phi}'(k, x) - \tilde{f}'(-k^*, x)^\dagger \tilde{\phi}(k, x) \\ &= [\tilde{f}(-k^*, x)^\dagger; \tilde{\phi}(k, x)]. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \tilde{S}(k) &= M^\dagger S(k)M = M^\dagger (-J(k)J(k)^{-1})M \\ (-M^\dagger J(-k)M)(M^\dagger J(k)^{-1}M) & \end{aligned} \tag{3.65}$$

$$= -\tilde{J}(-k)\tilde{J}(k)^{-1}. \tag{3.66}$$

c) $V \mapsto M^\dagger V M$ y $(A, B) \mapsto (M^\dagger A T_1 M T_2, M^\dagger B T_1 M T_2)$, con $T, M \in \mathbb{M}_{n \times n}$, donde T es invertible y M es unitaria.

Por a), cuando se toma la transformación $(A, B) \mapsto (A T_1, B T_1)$, \tilde{A} y \tilde{B} , son válidas las ecuaciones. Por b), cuando se toma la transformación $V \mapsto M^\dagger V M$ y $(\tilde{A}, \tilde{B}) \mapsto (M^\dagger A T_1 M T_2, M^\dagger B T_1 M T_2) = (A', B')$, A' y B' son válidas. Finalmente, usando a) nuevamente, $(A', B') \mapsto (A' T_2, B' T_2)$, siguen siendo válidas las ecuaciones, con lo que queda demostrada la proposición. ■

Nótese que la transformación $V \mapsto V$ y $(A, B) \mapsto (A T, B T)$ con una matriz invertible T es sólo un cambio de parametrización en la condición a la frontera (3.11)-(3.13). Por otro lado, la transformación de b) es un cambio de representación en el sentido mecánico-cuántico.

A partir del caso escalar, con $n = 1$, queremos ir de A y B en (3.11)-(3.13) a \tilde{A} y \tilde{B} , donde

$$\tilde{A} := -\text{diag}\{\sin \theta_1, \dots, \sin \theta_n\}, \quad \tilde{B} := -\text{diag}\{\cos \theta_1, \dots, \cos \theta_n\}, \quad (3.67)$$

con los parámetros reales θ_j tomando valores de $(0, \pi]$. El caso especial $\theta_j = \pi$ corresponde a la condición a la frontera de Dirichlet, mientras que el caso $\theta_j = \pi/2$ corresponde a la de Neumann. Asumimos que hay n_N valores con $\theta_j = \pi/2$ y n_D valores con $\theta_j = \pi$, por lo que quedan n_M valores, con $n_M = n - n_N - n_D$, en el intervalo $(0, \pi/2) \cup (\pi/2, \pi)$. Este análisis toma en cuenta los casos especiales donde n_N, n_D y n_M sean 0 o n .

Para pasar de A y B en (3.11) y (3.13) al par de matrices diagonales \tilde{A} y \tilde{B} de (3.67) *satisfaciendo* (3.11)-(3.13), se necesitan otros resultados.

Sea

$$E := (A^\dagger A + B^\dagger B)^{1/2}, \quad (3.68)$$

con E positivo y, por lo tanto, definido unívocamente.

Proposición 3.21 *Sean A y B tales que satisfacen (3.11)-(3.13). Entonces,*

a) *La matriz E es invertible y satisface*

$$E = E^\dagger, \quad E^{-1}(A^\dagger A + B^\dagger B)E^{-1} = I_n. \quad (3.69)$$

b) *Se cumple que*

$$(B \pm iA)E^{-2}(B^\dagger \mp iA^\dagger) = I_n, \quad (3.70)$$

por lo que las matrices $(B \pm iA)^{-1}$ y $(B^\dagger \mp iA^\dagger)$ son invertibles y, de hecho,

$$(B \pm iA)^{-1} = E^{-2}(B^\dagger \mp iA^\dagger). \quad (3.71)$$

c) La matriz U definida como

$$U := (B - iA)E^{-2}(B^\dagger - iA^\dagger), \quad (3.72)$$

es unitaria, y por lo tanto satisface $UU^\dagger = U^\dagger U = I_n$.

d) La matriz U definida en (3.72) también puede ser escrita como

$$U = (B - iA)(B + iA)^{-1}, \quad (3.73)$$

y por lo tanto de $U^\dagger = U^{-1}$ se sigue que

$$U^\dagger = (B + iA)(B - iA)^{-1}.$$

Dem. a)

$$E^2 = A^\dagger A + B^\dagger B \Rightarrow E^{-1}(A^\dagger A + B^\dagger B)E^{-1} = I_n.$$

$$[E^\dagger]^2 = (((A^\dagger A + B^\dagger B)^{1/2})^\dagger)^2 = (A^\dagger A + B^\dagger B)^\dagger = A^\dagger A + B^\dagger B \Rightarrow E^\dagger = E.$$

b) Sea

$$\begin{bmatrix} BE^{-1} & AE^{-1} \\ AE^{-1} & -BE^{-1} \end{bmatrix}.$$

Por (3.69) y (3.12),

$$\begin{aligned} C^\dagger C &= \begin{bmatrix} BE^{-1} & AE^{-1} \\ AE^{-1} & -BE^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E^{-1}B^\dagger & E^{-1}A^\dagger \\ E^{-1}A^\dagger & -E^{-1}B^\dagger \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} E^{-1}(B^\dagger B + A^\dagger A)E^{-1} & E^{-1}(B^\dagger A - A^\dagger B)E^{-1} \\ E^{-1}(A^\dagger B - B^\dagger A)E^{-1} & E^{-1}(A^\dagger A + B^\dagger B)E^{-1} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$C^\dagger C = I_{2n}.$$

Por otro lado, como ya vimos que C es unitaria,

$$\begin{aligned} I_{2n} = CC^\dagger &= \begin{bmatrix} BE^{-2}B^\dagger + AE^{-2}A^\dagger & BE^{-2}A^\dagger - AE^{-2}B^\dagger \\ AE^{-2}B^\dagger - BE^{-2}A^\dagger & AE^{-2}A^\dagger + BE^{-2}B^\dagger \end{bmatrix}. \\ &\Rightarrow AE^{-2}A^\dagger + BE^{-2}B^\dagger = I_n, \quad BE^{-2}A^\dagger - AE^{-2}B^\dagger = 0. \end{aligned}$$

Usando este resultado,

$$\begin{aligned} (B \pm iA)E^{-2}(B^\dagger \mp iA^\dagger) &= (BE^{-2}B^\dagger + AE^{-2}A^\dagger) \mp i(BE^{-2}A^\dagger - AE^{-2}B^\dagger) \\ &\Rightarrow (B \pm iA)E^{-2}(B^\dagger \mp iA^\dagger) = I_n \\ \text{i.e., } (B \pm iA)^{-1} &= E^{-2}(B^\dagger \mp iA^\dagger). \end{aligned}$$

c)

$$\begin{aligned}
UU^\dagger &= [(B - iA)E^{-2}(B^\dagger - iA^\dagger)][(B + iA)(E^{-2}(B^\dagger + iA^\dagger))] \\
&= (B - iA)E^{-2}(B^\dagger - iA^\dagger)(B + iA)E^{-2}(B^\dagger + iA^\dagger) \\
&= (B - iA)E^{-1} \{ E^{-1}[B^\dagger B + A^\dagger A + i(B^\dagger A - A^\dagger B)]E^{-1} \} E^{-1}(B^\dagger + iA^\dagger) \\
&= (B - iA)E^{-2}(B^\dagger + iA^\dagger) \\
&= I_n.
\end{aligned}$$

$$\text{i.e., } UU^\dagger = I_n.$$

d)

$$\begin{aligned}
U &= (B - iA)(E^{-2}(B^\dagger - iA^\dagger)) \\
&\Rightarrow U = (B - iA)(B + iA)^{-1}.
\end{aligned}$$

Como U es unitaria, $U^\dagger = U^{-1}$, así que:

$$U^\dagger = (B + iA)(B - iA)^{-1}.$$

■

Proposición 3.22 Sean A y B matrices que satisfacen (3.12) y (3.13), y sean \tilde{A} y \tilde{B} como en (3.67). Entonces,

$$\tilde{A} = M^\dagger A T_1 M T_2, \quad \tilde{B} = M^\dagger B T_1 M T_2, \quad (3.74)$$

para alguna $M, T_1, T_2 \in \mathbb{M}$, M unitaria y T_1 y T_2 invertibles.

Dem. Como U es unitaria, podemos diagonalizarla con M unitaria tal que

$$M^\dagger U M = \text{diag}\{e^{2i\zeta_1}, \dots, e^{2i\zeta_n}\}, \quad (3.75)$$

para algún parámetro constante $\zeta_j \in (0, \pi]$. Sea

$$Y = \text{diag}\{e^{i\zeta_1}, \dots, e^{i\zeta_n}\}. \quad (3.76)$$

Usando una matriz de permutación P podemos reordenar ζ_j como θ_j de la forma en que se había dicho: n_M, n_D y n_N . De (3.75) y (3.76),

$$\begin{cases} M^\dagger U M = Y^2 P = \text{diag}\{e^{2i\theta_1}, \dots, e^{2i\theta_n}\}, \\ Y P = \text{diag}\{e^{i\theta_1}, \dots, e^{i\theta_n}\}, \\ Y^{-1} P = \text{diag}\{e^{-i\theta_1}, \dots, e^{-i\theta_n}\}. \end{cases} \quad (3.77)$$

Por otro lado, de (3.67) vemos que

$$\begin{aligned}\tilde{B} - i\tilde{A} &= \text{diag}\{\cos \theta_1 + i \sin \theta_1, \dots, \cos \theta_n + i \sin \theta_n\} \\ &= \text{diag}\{e^{i\theta_1}, \dots, e^{i\theta_n}\}.\end{aligned}\quad (3.78)$$

$$\Rightarrow (\tilde{B} - i\tilde{A})^{-1} = \tilde{B} + i\tilde{A} = \text{diag}\{e^{-i\theta_1}, \dots, e^{-i\theta_n}\}.\quad (3.79)$$

Por (3.71) sabemos que $B + iA$ es invertible, por lo que

$$(B + iA)(B + iA)^{-1} = I_n.\quad (3.80)$$

Por (3.73),

$$(B - iA)(B + iA)^{-1} = 1.\quad (3.81)$$

Multiplicando (3.80) y (3.81) por M^\dagger ,

$$M^\dagger(B + iA)(B + iA)^{-1}MY^{-1}P = Y^{-1}P,\quad (3.82)$$

$$M^\dagger(B - iA)(B + iA)^{-1}MY^{-1}P = M^\dagger UMY^{-1}P.\quad (3.83)$$

De (3.75) y (3.76) sabemos que $M^\dagger U M = Y^2$ y por lo tanto $M^\dagger U M Y^{-1} P = Y P$. Reescribiendo (3.83),

$$M^\dagger(B - iA)(B + iA)^{-1}MY^{-1}P = Y P.\quad (3.84)$$

Por otro lado, de (3.77)-(3.79),

$$Y P = \tilde{B} - i\tilde{A}, \quad Y^{-1}P = \tilde{B} + i\tilde{A}.\quad (3.85)$$

Usando (3.85) podemos reescribir (3.82) y (3.84), respectivamente como:

$$M^\dagger(B + iA)(B + iA)^{-1}MY^{-1}P = \tilde{B} + i\tilde{A},\quad (3.86)$$

$$M^\dagger(B - iA)(B + iA)^{-1}MY^{-1}P = \tilde{B} - i\tilde{A}.\quad (3.87)$$

Sean

$$T_1 := (B + iA)^{-1}, \quad T_2 := \tilde{B} + i\tilde{A}.\quad (3.88)$$

Por (3.71) y (3.79), vemos que T_1 y T_2 son invertibles y, además,

$$T_1^{-1} = B + iA, \quad T_2^{-1} = \tilde{B} - i\tilde{A}.\quad (3.89)$$

Reescribiéndolas,

$$M^\dagger(B + iA)T_1MT_2 = \tilde{B} + i\tilde{A},\quad (3.90)$$

$$M^\dagger(B - iA)T_1MT_2 = \tilde{B} - i\tilde{A}.\quad (3.91)$$

Despejando,

$$\begin{aligned}\tilde{B} &= \frac{1}{2}(\tilde{B} + i\tilde{A} + \tilde{B} - i\tilde{A}) = \frac{1}{2}(M^\dagger(B + iA)T_1MT_2 + M^\dagger(B - iA)T_1MT_2) \\ &= \frac{1}{2}M^\dagger(B + iA + B - iA)T_1MT_2.\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \tilde{B} = M^\dagger B T_1 M T_2.$$

$$\begin{aligned} \tilde{A} &= \frac{1}{2i}(\tilde{B} + i\tilde{A} - \tilde{B} + i\tilde{A}) = \frac{1}{2i}(M^\dagger(B + iA)T_1 M T_2 - M^\dagger(B - iA)T_1 M T_2) \\ &= \frac{1}{2i}M^\dagger(B + iA - B + iA)T_1 M T_2. \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \tilde{A} = M^\dagger A T_1 M T_2.$$

■

Debido a las Proposiciones 3.20 y 3.22 no hay mucha pérdida de generalidad al usar la parametrización a la frontera especial con \tilde{A} y \tilde{B} . Así, los resultados relevantes pueden ser transferidos para obtener los resultados correspondientes con la parametrización con A y B de (3.11)-(3.13). Usaremos " \sim " para las transformaciones de la Proposición 3.20 c). Con la ayuda de (3.64) y (3.74) obtenemos las cantidades correspondientes en cualquier parametrización a la frontera con A y B satisfaciendo (3.12) y (3.13). En otras palabras,

$$V(x) = M\tilde{V}(x)M^\dagger, \quad A = M\tilde{A}T_2^{-1}M^\dagger T_1^{-1}, \quad B = M\tilde{B}T_2^{-1}M^\dagger T_1^{-1}, \quad (3.92)$$

así que

$$f(k, x) = M\tilde{f}(k, x)M^\dagger, \quad J(k) = M\tilde{J}(k)T_2^{-1}M^\dagger T_1^{-1}, \quad S(k) = M\tilde{S}(k)M^\dagger. \quad (3.93)$$

Capítulo 4

Análisis del operador de Schrödinger para bajas energías

El objetivo principal es establecer, bajo la condición a la frontera más general en $x = 0$, las asintotas para k -pequeñas de varias cantidades relacionadas con (3.1) como las soluciones de dispersión, la matriz de Jost, la matriz inversa de Jost y la matriz de dispersión.

El problema de dispersión directo para (3.1) es determinar la matriz de dispersión y la información de los estados ligados cuando la matriz del potencial V y la condición a la frontera autoadjunta se conocen. Por otro lado, el problema de dispersión inverso consiste en recuperar el potencial y la condición a la frontera autoadjunta a partir de un grupo de datos de dispersión.

Veamos la definición de la matriz de Jost $J(k)$ de (3.49). Cuando V es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$, se sabe que el lado derecho de (3.49) es continuo en $k \in \overline{\mathbb{C}^+}$, donde usamos \mathbb{C} para el plano complejo, \mathbb{C}^+ para la mitad superior del plano complejo, y $\overline{\mathbb{C}^+} := \mathbb{C}^+ \cup \mathbb{R}$. Así, $J(0)$ existe. Veamos también la definición de la matriz de dispersión $S(k)$ dada en (3.52) en términos de la matriz de Jost $J(k)$. En caso de que $J(0)$ sea invertible, es claro de (3.52) que $S(0) = -I_n$. De cualquier forma, si $J(0)$ no es invertible no es claro si $S(k)$ es continua en $k = 0$ y cuál es el valor de $S(0)$ en caso de que lo sea. Aquí nos enfocamos principalmente al caso en el que $J(0)^{-1}$ no existe. Se prueba que, de hecho, $S(k)$ es continua en $k = 0$ y se determina el valor de $S(0)$, que en general es diferente de $-I_n$. En caso de que $J(0)$ sea invertible, los resultados se reducen al caso fácil cuando $S(0) = -I_n$.

Nótese que $J(0)$ no es invertible si y sólo si el determinante $\det [J(0)]$ es cero. En el caso escalar, cuando $n = 1$, esto es análogo a $F_\theta(0) = 0$, donde $F_\theta(k)$ es la función de Jost de (3.47). El caso $F_\theta(0) = 0$ se conoce como el *caso excepcional*, y el caso $F_\theta(0) \neq 0$ se conoce como el *caso genérico* para (3.1), a saber, el caso cuando $J(0)$ no es invertible.

4.1. Comportamiento de k -chica

Para poder hacer el análisis del comportamiento de la matriz de Jost $J(k)$, su inversa $J(k)^{-1}$ y la matriz de dispersión $S(k)$ a bajas energías, es necesario establecer las asíntotas para k -chicas de varias cantidades relacionadas con la solución regular (3.1).

Estamos interesados en el análisis de la matriz de Jost $J(k)$ cuando $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$. De (3.49) vemos que

$$J(0) = f(0, 0)^\dagger B - f'(0, 0)^\dagger A, \quad (4.1)$$

y nos gustaría determinar qué tan rápido $J(k)$ se aproxima a $J(0)$ y si $J(k)^{-1}$ existe en $k = 0$ y determinar su comportamiento cuando $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$. También nos gustaría saber acerca del comportamiento de k -chicas cuando V es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$.

Como se dijo en (3.35), $f(k, a)$ es invertible en la vecindad de $k = 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$ para algún valor a . En (3.49) se definió la matriz de Jost en términos de un Wronskiano cuyo valor es independiente de x . Como puede verse más abajo, es posible escribir $J(k)^\dagger$ en términos de Wronskianos evaluados en $x = a$ e involucrando las soluciones $f(k, x)$, $\phi(k, x)$ y $w(k, x)$ que aparecen en (3.25), (3.33) y (3.40), respectivamente.

Los siguientes resultados se necesitarán más tarde. Al referirnos a una constante genérica, hablamos de una constante que no necesariamente tiene el mismo valor en diferentes apariciones. Además, usaremos el siguiente resultado [1]:

Proposición 4.1 $\forall z \in \overline{\mathbb{C}^+}$ tenemos que

$$|\sin z| \leq \frac{c|z|e^{Im(z)}}{1+|z|}, \quad \left|1 - \frac{\sin z}{z}\right| \leq \frac{c|z|^2 e^{Im(z)}}{(1+|z|)^2}, \quad |1 - \cos z| \leq \frac{c|z|^2 e^{Im(z)}}{(1+|z|)^2}. \quad (4.2)$$

Proposición 4.2 Si V es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$, entonces la solución regular $w(k, x)$ de (3.1) que aparece en (3.40) satisface

$$\|w(k, x) - w(0, x)\| \leq c \left(\frac{|k|(x-a)}{1+|k|(x-a)} \right)^2 e^{(Im[k])(x-a)}, \quad k \in \overline{\mathbb{C}^+}, \quad x \geq a, \quad (4.3)$$

donde c es una constante genérica.

Dem. De (3.38), (3.39) y (3.42) vemos que

$$w(k, x) = f(0, a) \cos k(x-a) + f'(0, a) \frac{\sin k(x-a)}{k} + \frac{1}{k} \int_a^x dy \sin k(x-y) V(y) w(k, y). \quad (4.4)$$

Nótese que (4.4) lleva a que

$$w(0, x) = f(0, a) + f'(0, a)(x-a) + \int_a^x dy (x-y) V(y) w(0, y), \quad (4.5)$$

y por (3.41), $w(0, x) = f(0, x)$. Así, de (4.5) y de su derivada respecto a x , y considerando que $f'(0, x) = o(1/x)$, $x \rightarrow \infty$, obtenemos

$$\begin{aligned} f'(0, a) + \int_a^x dy V(y)w(0, y) &= f'(0, x) \\ \Rightarrow \int_a^\infty dy V(y)w(0, y) &= -f'(0, a) \end{aligned} \quad (4.6)$$

y, evaluando en $x = 0$,

$$\begin{aligned} f(0, a) - af'(0, a) + xf'(0, a) + x \int_a^x dy V(y)w(0, y) \\ &= f(0, x) + \int_a^x dy yV(y)w(0, y) \\ f(0, a) - af'(0, a) + xf'(0, a) + x \int_x^0 dy V(y)w(0, y) \\ &= I_n + \int_x^\infty dy yV(y)w(0, y) + \int_0^x dy yV(y)w(0, y) \\ f(0, a) - af'(0, a) &= I_n + \int_x^\infty dy yV(y)w(0, y) \end{aligned}$$

$$\text{i.e., } \int_x^\infty dy yV(y)w(0, y) = f(0, a) - af'(0, a) - I_n. \quad (4.7)$$

Podemos reescribir (4.6) como:

$$f'(0, a) = - \int_a^x dy V(y)w(0, y) - \int_x^\infty dy V(y)w(0, y). \quad (4.8)$$

Usando (4.4),(4.5) y (4.8) tenemos que:

$$\begin{aligned}
& \rightarrow w(k, x) - w(0, x) \\
& = f(0, a) \cos k(x - a) + f'(0, a) \frac{\sin k(x - a)}{k} - f(0, a) - f'(0, a)(x - a) \\
& \quad + \frac{1}{k} \int_a^x dy \sin k(x - y)V(y)w(k, y) - \int_a^x dy (x - y)V(y)w(0, y) \\
& = \overbrace{f(0, a)[\cos k(x - a) - 1]}^{K_1} + \frac{1}{k} \int_a^x dy \sin k(x - y)V(y)w(k, y) \\
& \quad - f'(0, a) \left(1 - \frac{\sin k(x - a)}{k(x - a)} \right) - \int_a^x dy (x - y)V(y)w(0, y) \\
& = K_1 + \overbrace{\left(1 - \frac{\sin k(x - a)}{k(x - a)} \right) (x - a) \int_x^\infty dy V(y)w(0, y) - \int_a^x dy (x - y)V(y)w(0, y)}^{K_2} \\
& \quad + \left((x - a) - \frac{\sin k(x - a)}{K} \right) \int_a^x dy V(y)w(0, y) + \frac{1}{k} \int_a^x dy \sin k(x - y)V(y)w(k, y) \\
& = K_1 + K_2 + \overbrace{\frac{1}{k} \int_a^x dy V(y)w(0, y)[k(x - a) - \sin k(x - a) - k(x - y) + \sin k(x - y)]}^{K_3} \\
& \quad + \overbrace{\frac{1}{k} \int_a^x dy \sin k(x - y)V(y)[w(k, y) - w(0, y)]}^{K_4} \\
& \quad \text{i.e., } w(k, x) - w(0, x) = K_1 + K_2 + K_3 + K_4, \tag{4.9}
\end{aligned}$$

con

$$K_1 = f(0, a)[\cos k(x - a) - 1] \tag{4.10}$$

$$K_2 = \left(1 - \frac{\sin k(x - a)}{k(x - a)} \right) (x - a) \int_x^\infty dy V(y)w(0, y) \tag{4.11}$$

$$K_3 = \frac{1}{k} \int_a^x dy V(y)w(0, y)[k(x - a) - \sin k(x - a) - k(x - y) + \sin k(x - y)] \tag{4.12}$$

$$K_4 = \frac{1}{k} \int_a^x dy \sin k(x - y)V(y)[w(k, y) - w(0, y)]. \tag{4.13}$$

Por la Proposición 4.1, y usando (4.10) y el hecho de que $f(0, a)$ es acotado,

$$\|K_1\| \leq \|f(0, a)[\cos k(x - a) - 1]\| \leq \frac{c|k|^2(x - a)^2 e^{\text{Im}[k](x - a)}}{(1 + |k|(x - a))^2}, \quad k \in \mathbb{C}^+, \quad x \geq a. \tag{4.14}$$

Notemos que

$$\left\| (x - a) \int_x^\infty dy V(y)w(0, y) \right\| \leq \left\| \int_x^\infty dy (y - a)V(y)w(0, y) \right\| \leq \left\| \int_x^\infty dy yV(y)w(0, y) \right\|. \tag{4.15}$$

Las normas de (4.15) están acotadas por una constante porque $V \in L_1^1(\mathbb{R}^+)$ y $w(0, x)$ está acotado por (3.29) y (3.41). Así, de (4.11) y (4.15) y el segundo enunciado de (4.2), tenemos:

$$\|K_2\| \leq \frac{c|k|^2(x-a)^2 e^{\text{Im}[k](x-a)}}{(1+|k|(x-a))^2}, \quad k \in \mathbb{C}^+, \quad x \geq a. \quad (4.16)$$

Veamos quién es K_3 cuando $k \in \mathbb{C}^+$ y $x \geq a$. Escribimos (4.12) como:

$$K_3 = \int_a^x dy \int_{x-y}^{x-a} dz [1 - \cos kz] V(y) w(0, y)$$

y usamos el tercer enunciado de (4.2) y el hecho de que $x \mapsto x^2/(1+x^2)$ es una función creciente $\forall x \geq 0$, pues si $0 \leq x < y$, $x^2 \leq y^2 \Rightarrow x^2 + x^2 y^2 \leq y^2 + x^2 y^2 \Rightarrow x^2(1+y^2) \leq y^2(1+x^2) \Rightarrow \frac{x^2}{1+x^2} \leq \frac{y^2}{1+y^2}$, con lo que la función es creciente.

Con esto obtenemos:

$$\|K_3\| \leq \frac{c|k|^2(x-a)^2 e^{\text{Im}[k](x-a)}}{(1+|k|(x-a))^2} \int_a^x dy y \|V(y)\| \|w(0, y)\|. \quad (4.17)$$

Como $w(0, y)$ está acotada y $V \in L_1^1(\mathbb{R}^+)$, de (4.17) obtenemos:

$$\|K_3\| \leq \frac{c|k|^2(x-a)^2 e^{\text{Im}[k](x-a)}}{(1+|k|(x-a))^2}, \quad k \in \mathbb{C}^+, \quad x \geq a, \quad (4.18)$$

para alguna constante genérica c .

Veamos quién es K_4 con $k \in \mathbb{C}^+$ y $x \geq a$. Sea

$$\zeta(k, x) := e^{-(\text{Im}[k])(x-a)} \|w(k, x) - w(0, x)\|. \quad (4.19)$$

De (4.13) llegamos a que:

$$e^{-(\text{Im}[k])(x-a)} \|K_4\| \leq \frac{1}{k} \int_a^x dy e^{-(\text{Im}[k])(x-a)} |\sin k(x-y)| \|V(y)\| \zeta(k, y). \quad (4.20)$$

Usando el primer enunciado de (4.2) en (4.20) y el hecho de que $x \mapsto x/(1+x)$ es creciente cuando $x \geq 0$, pues si $0 \leq x < y$, $\Rightarrow x(1+y) < y(1+x) \Rightarrow \frac{x}{1+x} < \frac{y}{1+y}$, obtenemos:

$$e^{-(\text{Im}[k])(x-a)} \|K_4\| \leq \frac{c(x-a)}{1+|k|(x-a)} \int_a^x dy \|V(y)\| \zeta(k, y). \quad (4.21)$$

Usando (4.14), (4.16), (4.18) y (4.21) en (4.9), encontramos que:

$$\zeta(k, x) \leq \frac{c|k|^2(x-a)^2}{(1+|k|(x-a))^2} + \frac{c}{k} \frac{|k|(x-a)}{1+|k|(x-a)} \int_a^x dy \|V(y)\| \zeta(k, y). \quad (4.22)$$

Sea

$$\chi(k, x) := \frac{(1 + |k|(x - a))^2}{c|k|^2(x - a)^2} \zeta(k, x). \quad (4.23)$$

Podemos escribir (4.22) como:

$$\chi(k, x) \leq 1 + \frac{1 + |k|(x - a)}{|k|^2(x - a)} \int_a^x dy \|V(y)\| \frac{c|k|^2(x - a)^2}{(1 + |k|(x - a))^2} \chi(k, y). \quad (4.24)$$

De (4.24) obtenemos

$$\chi(k, x) \leq 1 + c \int_z^x dy y \|V(y)\| \chi(k, x), \quad (4.25)$$

donde usamos para $0 \leq a \leq y \leq x$:

$$\frac{|k|^2(y - a)^2}{(1 + |k|(y - a))^2} \leq \frac{|k|(x - a)}{1 + |k|(x - a)} \frac{|k|(y - a)}{1 + |k|(y - a)} \leq \frac{|k|(x - a)}{1 + |k|(x - a)} |k|y,$$

utilizando el hecho de que $x \mapsto x/(1 + x)$ es creciente $\forall x \geq 0$.

A continuación enunciaremos el *lema de Gronwall* [15]:

Lema 4.3 *Sea $z : [a, a + h] \rightarrow \mathbb{R}$ continua y tal que*

$$0 \leq \int_a^x A + Mz(s) ds$$

$\forall a \leq x \leq a + h$, con $A, M \geq 0$ constantes. Entonces,

$$0 \leq z(t) \leq Ahe^{Mh},$$

$\forall a \leq t \leq a + h$.

Con ayuda del *lema de Gronwall* en (4.25)[1] y considerando que $V \in L^1_1(\mathbb{R}^+)$, llegamos a que $\chi(k, x) \leq c$ para alguna constante genérica c , no necesariamente igual a la c de (4.25). Así, usando (4.19) y (4.23) en $\chi(k, x) \leq c$, tenemos:

$$\begin{aligned} \|w(k, x) - w(0, x)\| &= \zeta(k, x) e^{\text{Im}[k](x-a)} \chi(k, x) \\ &\leq \frac{c|k|^2(x - a)^2}{(1 + |k|(x - a))^2} e^{\text{Im}[k](x-a)} c \end{aligned}$$

$$\|\mathbf{w}(\mathbf{k}, \mathbf{x}) - \mathbf{w}(\mathbf{0}, \mathbf{x})\| \leq \mathbf{c} \frac{\mathbf{c}|\mathbf{k}|^2(\mathbf{x} - \mathbf{a})^2}{(\mathbf{1} + |\mathbf{k}|(\mathbf{x} - \mathbf{a}))^2} e^{\text{Im}[\mathbf{k}](\mathbf{x}-\mathbf{a})}, \quad \mathbf{k} \in \overline{\mathbb{C}^+}, \quad \mathbf{x} \geq \mathbf{a}.$$

■

Ahora definiremos

$$P(k) := [w(-k^*, x)^\dagger; f(k, x)], \quad (4.26)$$

donde vemos que el Wronskiano es independiente de x :

$$\begin{aligned}
 P'(k) &= [w(-k^*, x)^\dagger; f(k, x)]' \\
 &= (w(-k^*, x)^\dagger f'(k, x) - w'(-k^*, x)^\dagger f(k, x))' \\
 &= w(-k^*, x)^\dagger f''(k, x) - w''(k^*, x)^\dagger f(k, x) \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow P(k)$ es independiente de x .

Por lo tanto, con ayuda de (3.40) y (3.43), al evaluar ese Wronskiano en $x = a$ obtenemos:

$$\begin{aligned}
 P(k) &= w(-k^*, x)^\dagger f'(k, x) - w'(-k^*, x)^\dagger f(k, x) \\
 &= f(0, x)^\dagger f'(k, x) - f'(0, x)^\dagger f(k, x) \\
 \Rightarrow P(k) &= f(0, a)^\dagger f'(k, a) - f'(0, a)^\dagger f(k, a). \tag{4.27}
 \end{aligned}$$

■

Nótese que $P(k)$ tiene una extensión analítica de $k \in \mathbb{R}$ a $k \in \mathbb{C}^+$ porque $f(k, a)$ y $f'(k, a)$ tienen esa propiedad. Es difícil obtener información útil de (4.27) cuando $k \rightarrow 0$ porque para $V \in L_1^1(\mathbb{R}^+)$ sólo podemos decir que

$$f(k, x) = f(0, x) + o(1), \quad f'(k, x) = f'(0, x) + o(1), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}. \tag{4.28}$$

En la siguiente proposición evaluamos las asíntotas para k -chicas de $P(k)$ evaluando el Wronskiano de (4.26) en $x = +\infty$. Este resultado será útil al evaluar el límite de la k -chica de la matriz de Jost $J(k)$.

Proposición 4.4 *Si V es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$, entonces la matriz $P(k)$ dada en (4.26) satisface*

$$P(k) = ikI_n + o(k), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}. \tag{4.29}$$

Dem. Podemos evaluar el comportamiento asintótico de $w(-k^*, x)$ y $w'(-k^*, x)$ cuando $x \rightarrow \infty$ a partir de (4.4). Además, podemos ver el comportamiento asintótico de $f(k, x)$ y $f'(k, x)$ cuando $x \rightarrow \infty$ en (3.25). Usando eso en (4.26),

$$P(k) = ik e^{ika} f(0, a)^\dagger - e^{ika} f'(0, a)^\dagger - \int_a^\infty dy e^{iky} w(-k^*, y)^\dagger V(y). \tag{4.30}$$

Dividiendo la parte derecha, tenemos que:

$$P(k) = P_1(k) + P_2(k) + P_3(k), \tag{4.31}$$

donde

$$P_1(k) = ik e^{ika} f(0, a)^\dagger - e^{ika} f'(0, a)^\dagger \quad (4.32)$$

$$P_2(k) = - \int_a^\infty dy e^{iky} [w(-k^*, x)^\dagger - w(0, y)^\dagger] V(y) \quad (4.33)$$

$$P_3(k) = - \int_a^\infty dy e^{iky} w(0, y)^\dagger V(y) \quad (4.34)$$

De (4.3) y la convergencia dominada de Lebesgue, se sigue que $P_2(k) = o(k)$ si $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+} \forall V \in L_1^1(\mathbb{R}^+)$, pues (4.3) establece que:

$$\|w(k, x) - w(0, x)\| \leq c \left(\frac{|k|(x-a)}{1+|k|(x-a)} \right)^2 e^{(\text{Im}[k])(x-a)}$$

y el Teorema de la convergencia dominada de Lebesgue afirma que si $\{f_n\}_n$ es una sucesión de funciones medibles, g es integrable y no negativa y se cumple que:

- 1) $\forall n \in \mathbb{N}$, $|f_n(x)| \leq g(x)$ para casi todo x ;
- 2) para casi todo x , $f(x) = \lim_n f_n(x)$,

entonces f es integrable y $\int f = \lim_n \int f_n$.

En este caso $f_k = w(k, x)e^{ikx}$ y por (4.3) se cumple 1). Por lo tanto,

$$P_2(k) = \lim \int dy e^{iky} [w(-k^*, y)^\dagger - w(0, y)].$$

Por otro lado, usando (4.6), (4.7) y (4.34), llegamos a que:

$$P_3(k) = f'(0, a)^\dagger + ik[I_n + af'(0, a)^\dagger - f(0, a)^\dagger] + P_4(k), \quad (4.35)$$

donde se definió

$$P_4(k) := - \int_a^\infty dy [e^{iky} - 1 - iky] w(0, y)^\dagger V(y), \quad (4.36)$$

pues como

$$\int_a^\infty dy V(y) w(0, y) = -f'(0, a)$$

por (4.6), y

$$\int_a^\infty dy y V(y) w(0, y) = f(0, a) - af'(0, a) - I_n$$

por (4.7), sustituyendo en (4.34) llegamos a que:

$$\begin{aligned}
P_3(k) &= f'(0, a)^\dagger - ik[f(0, a)^\dagger - af'(0, a)^\dagger - I_n^\dagger] + P_4(k) \\
&= - \left(\int_a^\infty dy V(y)w(0, y) \right)^\dagger - ik \left(\int_a^\infty dy yV(y)w(0, y) \right)^\dagger \\
&\quad - \int_a^\infty dy [e^{iky} - 1 - ik y]V(y)w(0, y)^\dagger \\
&= - \int_a^\infty dy V(y)w(0, y)^\dagger - ik \int_a^\infty dy yV(y)w(0, y)^\dagger - \int_a^\infty dy e^{iky}w(0, y)^\dagger V(y) \\
&\quad + \int_a^\infty dy V(y)w(0, y)^\dagger + ik \int_a^\infty dy yV(y)w(0, y)^\dagger \\
&= - \int_a^\infty dy e^{-iky}w(0, y)^\dagger V(y),
\end{aligned}$$

que es lo que habíamos dicho.

Nótese que $\forall z \in \overline{\mathbb{C}^+}$,

$$|e^{iz} - 1| \leq c|z|, \quad |e^{iz} - 1 - iz| \leq \frac{c|z|^2}{1 + |z|}, \quad (4.37)$$

con c una constante genérica no negativa independiente del número z , pues:

$$\begin{aligned}
&\rightarrow \text{para } |z| \geq 1, \\
&\quad |e^{iz} - 1| \leq |e^{iz}| + |1| = 2 \leq 2|z| = c|z| \\
&\rightarrow \text{para } |z| < 1, \\
&\quad |e^{iz} - 1| = \left| \int_0^z dx ie^{ix} \right| \leq \int_0^z dx |ie^{ix}| = \int_0^z dx = z \leq |z| = c|z|.
\end{aligned}$$

Y además,

$$|e^{iz} - 1 - iz| \leq |e^{iz} - 1| + |iz| \leq e^i|z| + |z| = |z| \frac{c' + 1}{c} \leq \frac{c|z|^2}{1 + |z|}.$$

Usando la segunda desigualdad,

$$|P_4(k)| \leq \int_a^\infty dy |(e^{iky} - 1 - ik y)w(0, y)^\dagger V(y)| \leq c \int_a^\infty dy \frac{|k|^2 |y|^2}{1 + |k||y|} w(0, y)^\dagger V(y),$$

por lo que $\lim_{k \rightarrow 0} |P_4(k)| = 0$. Es decir, $P_4(k) = o(k)$ si $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$. Así, usando (4.31)-(4.36) llegamos a que:

$$P(k) = ikI_n + [ike^{ika} - ik]f(0, a)^\dagger + [I_n + ika - e^{ika}]f'(0, a)^\dagger + o(k),$$

y por (4.37) cada coeficiente de $f(0, a)^\dagger$ y $f'(0, a)^\dagger$ es $o(k^2)$ si $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$. ■

Aunque (4.28) no nos da información extraordinaria, el siguiente teorema nos muestra que $f'(k, x)[f(k, x)]^{-1}$ es diferenciable en $k = 0$ para cualquier valor fijo de x donde la matriz $f(0, x)$ es invertible.

Teorema 4.5 *Supongamos que V de (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$. Si la matriz constante $f(0, a)$ es invertible, con $f(k, x)$ la solución de Jost que aparece en (3.25), entonces $f'(k, x)[f(k, a)]^{-1}$ es diferenciable en $k = 0$ y*

$$f'(k, a)f(ka)^{-1} = f'(0, a)f(0, a)^{-1} + ik[f(0, a)^{-1}]^\dagger f(0, a)^{-1} + o(k), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}. \quad (4.38)$$

Si en su lugar $f'(0, a)$ es invertible en algún $a \in \mathbb{R}^+$, entonces las soluciones de Jost satisfacen

$$f(k, a)f'(k, a)^{-1} = f(0, a)f'(k, a)^{-1} - ik[f'(k, a)^{-1}]^\dagger f'(k, a)^{-1} + o(k), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}. \quad (4.39)$$

Dem. Si $f(0, a)$ es invertible, por la continuidad del determinante de $f(k, a)$, $f(k, a)$ debe ser invertible en $\overline{\mathbb{C}^+}$ en la vecindad de $k = 0$. Entonces, de (4.27), $P(k) = f(0, a)^\dagger f'(k, a) - f'(0, a)^\dagger f(k, a)$, y tenemos que:

$$\begin{aligned} f'(k, a)f(k, a)^{-1} &= [f(0, a)^\dagger]^{-1} f'(0, a)^\dagger + [f(0, a)^\dagger]^{-1} P(k) f(k, a)^{-1} \\ &= [f(0, a)^\dagger]^{-1} f'(0, a)^\dagger + [f(0, a)^\dagger]^{-1} (f(0, a)^\dagger f'(k, a) \\ &\quad - f'(0, a)^\dagger f(k, a)) f(k, a)^{-1} \\ &= [f(0, a)^\dagger]^{-1} f'(0, a)^\dagger + f'(k, a) f(k, a)^{-1} - [f(0, a)^\dagger]^{-1} f'(0, a)^\dagger \\ &= f'(k, a) f(k, a)^{-1}, \end{aligned}$$

$$f'(k, a)f(k, a)^{-1} = [f(0, a)^\dagger]^{-1} f'(0, a)^\dagger + [f(0, a)^\dagger]^{-1} P(k) f(k, a)^{-1}. \quad (4.40)$$

Notemos que $[f(-k^*, x)^\dagger; f(k, x)] = 0$ (de (3.46)) implica que:

$$[f(0, a)^\dagger]^{-1} f'(0, a)^\dagger = f'(0, a) f(0, a)^{-1}. \quad (4.41)$$

Usando (4.29) en (4.40) y (3.35) en (4.41),

$$\begin{aligned} f'(k, a)f(k, a)^{-1} &= f'(0, a)f(0, a)^{-1} + [f(0, a)^\dagger]^{-1} ik I_n f(0, a)^{-1} + o(k), \quad k \rightarrow 0 \\ &= f'(0, a)f(0, a)^{-1} + ik[f(0, a)^{-1}]^\dagger f(0, a)^{-1} + o(k), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}, \end{aligned}$$

que es lo que queríamos.

Análogamente, si $f'(0, a)$ es invertible,

$$f(k, a)f'(k, a)^{-1} = -[f'(0, a)^\dagger]^{-1} P(k) f'(k, a)^{-1} + [f'(0, a)^\dagger]^{-1} f(0, a)^\dagger.$$

En este caso $[f'(0, a)^\dagger]^{-1} f(0, a)^\dagger = f(0, a) f'(0, a)^{-1}$ por (3.46). Usando (4.29) y (3.35), tenemos:

$$f(k, a)f'(k, a)^{-1} = f(0, a)f'(k, a)^{-1} - ik[f'(k, a)^{-1}]^\dagger f'(k, a)^{-1} + o(k), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}.$$

■

Ahora expresaremos la matriz de Jost $J(k)$ definida en (3.49) en términos de la solución de Jost $f(k, x)$, las soluciones regulares $\phi(k, x), w(k, x)$ y la matriz $P(k)$ que aparecen en (3.25), (3.33), (3.40) y (4.26), respectivamente.

Proposición 4.6 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces la matriz de Jost puede escribirse como:*

$$J(k) = T_1(k) + T_2(k), \quad k \in \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (4.42)$$

con

$$T_1(k) := -P(-k^*)^\dagger f(0, a)^{-1} \phi(k, a), \quad (4.43)$$

$$T_2(k) := f(-k^*, a)^\dagger [f(0, a)^{-1}]^\dagger [w(-k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)], \quad (4.44)$$

y recordemos que el valor del Wronskiano que aparece en (4.44) es independiente de x .

Dem. Usando (3.49), podemos escribir $J(k)$ en términos del Wronskiano. En $x = a$,

$$\begin{aligned} J(k) &= [f(-k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)]|_{x=a} \\ &= f(-k^*, a)^\dagger \phi'(k, a) - f'(-k^*, x)^\dagger \phi(k, a) \\ &= T_1(k) + T_2(k) + T_3(k), \end{aligned}$$

con

$$T_1(k) := -(f'(-k^*, a)^\dagger f(0, a) - f(-k^*, a)^\dagger f'(0, a)) f(0, a)^{-1} \phi(k, a), \quad (4.45)$$

$$T_2(k) := f(-k^*, a)^\dagger [f(0, a)^{-1}]^\dagger (f(0, a)^\dagger (\phi'(k, a) - f'(0, a)^\dagger \phi(k, a))), \quad (4.46)$$

$$T_3(k) := f(-k^*, a)^\dagger [f(0, a)^{-1}]^\dagger (f'(0, a)^\dagger (f(0, a) - f(0, a)^\dagger f'(0, a)) f(0, a)^{-1} \phi(k, a)). \quad (4.47)$$

Usando (4.27) en (4.45) vemos que

$$T_1(k) = -P(-k^*)^\dagger f(0, a)^{-1} \phi(k, a).$$

Usando (3.40) en (4.46) vemos que

$$\begin{aligned} T_2(k) &= f(-k^*, a)^\dagger [f(0, a)^{-1}]^\dagger (f(0, a)^\dagger (w(-k^*, a)^\dagger \phi'(k, a) - w'(-k^*, a)^\dagger \phi(k, a))) \\ &= f(-k^*, a)^\dagger [f(0, a)^{-1}]^\dagger (f(0, a)^\dagger [w(-k^*, a)^\dagger; \phi(k, a)]|_{x=a}), \end{aligned}$$

que es equivalente a (4.44) porque el Wronskiano es independiente de x y puede ser evaluado en $x = a$.

Finalmente, usando (3.46) con $k = 0$ en (4.47) podemos ver que $T_3(k) = 0$. Es decir,

$$J(k) = T_1(k) + T_2(k), \quad k \in \overline{\mathbb{C}^+}.$$

■

En el siguiente teorema se evalúa el Wronskiano de (4.44).

Proposición 4.7 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces, el Wronskiano de (4.44) tiene las asíntotas para k -chicas:*

$$[w(-k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)] = J(0) + O(k^2), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (4.48)$$

donde $J(k)$ es la matriz de Jost definida en (3.49).

Dem. Como el valor del Wronskiano en (4.48) es independiente de x , lo evaluaremos en $x = 0$.

$$[w(-k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)] = [w(-k^*, x)^\dagger - w(0, x)^\dagger; \phi(k, x)] + [w(0, x)^\dagger; \phi(k, x)]. \quad (4.49)$$

Por (3.33), (3.41) y (4.1), vemos que el segundo Wronskiano del lado derecho equivale, cuando $x = 0$, a:

$$[w(0, x)^\dagger; \phi(k, x)]|_{x=0} = J(0),$$

pues

$$\begin{aligned} [w(0, x)^\dagger; \phi(k, x)]|_{x=0} &= w(0, 0)^\dagger \phi'(k, x) - w'(0, 0)^\dagger \phi(k, x) \\ &= f(0, 0)^\dagger B - f'(0, 0)^\dagger A \\ &= J(0). \end{aligned}$$

Ahora evaluamos en $x = 0$ el primer Wronskiano del lado derecho de (4.29). Usando (3.1) y (3.44), podemos evaluar la derivada respecto a x :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} [w(-k^*, x)^\dagger - w(0, x)^\dagger; \phi(k, x)] &= w(-k^*, x)^\dagger \phi''(k, x) + w'(-k^*, x)^\dagger \phi'(k, x) \\ &\quad - w(0, x)^\dagger \phi''(k, x) - w'(0, x)^\dagger \phi'(k, x) - w''(-k^*, x)^\dagger \phi(k, x) \\ &\quad - w'(-k^*, x)^\dagger \phi'(k, x) + w''(0, x)^\dagger \phi(k, x) + w'(0, x)^\dagger \phi'(k, x) \\ &= w(-k^*, x)^\dagger \phi''(k, x) - w(0, x)^\dagger \phi''(k, x) - w''(-k^*, x)^\dagger \phi(k, x) \\ &\quad + w''(0, x)^\dagger \phi(k, x). \\ &= (w(-k^*, x)^\dagger - w(0, x)^\dagger) \phi''(k, x) - (w''(-k^*, x)^\dagger - w''(0, x)^\dagger) \phi(k, x) \\ &= (w(-k^*, x)^\dagger - w(0, x)^\dagger) (-k^2 \phi(k, x) + V(x) \phi(k, x)) \\ &\quad + (k^2 w(-k^*, x)^\dagger + V(x) w(-k^*, x)^\dagger) \phi(k, x) - V(x) w(0, x)^\dagger \phi(k, x) \\ &= k^2 w(0, x)^\dagger \phi(k, x). \end{aligned}$$

Es decir,

$$\frac{d}{dx} [w(-k^*, x)^\dagger - w(0, x)^\dagger; \phi(k, x)] = k^2 w(0, x)^\dagger \phi(k, x). \quad (4.50)$$

Por otro lado, integrando esa ecuación en el intervalo $[0, a]$ y usando (3.40) y (3.41), se obtiene:

$$[w(-k^*, x)^\dagger - w(0, x)^\dagger; \phi(k, x)]|_{x=0} = k^2 \int_0^a dy f(0, y)^\dagger \phi(k, y).$$

Esto significa que

$$[w(-k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)] = J(0) + O(k^2), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}.$$

■

Usando (4.5), (4.29), (4.42)-(4.44) y (4.48) tenemos la siguiente conclusión [1]:

Corolario 4.8 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces, la matriz de Jost $J(k)$ que aparece en (3.49) tiene el comportamiento para k -chicas*

$$f(0, a)^\dagger [f(-k^*, a)^\dagger]^{-1} J(k) = J(0) - ikf(0, a)^{-1} \phi(0, a) + o(k), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (4.51)$$

donde $f(k, x)$ y $\phi(k, x)$ son la solución de Jost y la solución regular de (3.25) y (3.33), respectivamente, y a es cualquier punto donde la matriz $f(0, a)$ es invertible.

Para poder estudiar el límite de k -chicas de $J(k)^{-1}$ es necesario que nos concentremos en el término $O(k)$ que aparece en (4.51), específicamente $f(0, a)^{-1} \phi(0, a)$. Usaremos el término $\text{Ker}[J(0)]$ para referirnos al kernel de la matriz $J(0)$.

Proposición 4.9 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces las siguientes afirmaciones son equivalentes:*

- (a) *El vector $u \in \mathbb{C}^n$ es un eigenvector de la matriz de Jost para la energía cero $J(0)$ con el eigenvalor cero, i.e., $u \in \text{Ker}[J(0)]$.*
- (b) *$\phi'(0, +\infty)u = 0$, donde $\phi(k, x)$ es la solución regular de (3.1) que aparece en (3.33)*
- (c) *$\phi(0, x)u$ está acotada para $x \in [0, +\infty)$.*

Dem. Veamos que (a) y (b) son equivalentes. Por (3.49), tenemos que

$$J(0) = f(0, x)^\dagger \phi'(0, x) - f'(0, x)^\dagger \phi(0, x), \quad (4.52)$$

donde la cantidad del lado derecho es independiente de x . Por (3.32) se sigue que cada columna de $\phi(0, x)$ es una combinación lineal de las columnas de $f(0, x)$ y de $g(0, x)$. Entonces existen $\alpha, \beta \in \mathbb{M}_{n \times n}$, de forma que

$$\phi(0, x) = f(0, x)\alpha + g(0, x)\beta, \quad x \in \mathbb{R}^+. \quad (4.53)$$

De la derivada respecto a x de (4.53) obtenemos:

$$\phi'(0, x) = f'(0, x)\alpha + g'(0, x)\beta, \quad x \in \mathbb{R}^+. \quad (4.54)$$

Usando (3.29) y (3.30) en (4.54) llegamos a que:

$$\phi'(0, +\infty) = o(1/x)\alpha + (I_n + o(1))\beta$$

$$\Rightarrow \phi'(0, +\infty) = \beta. \quad (4.55)$$

Ahora, insertando (4.53) y (4.54) en el lado derecho de (4.52) y evaluando la expresión resultante cuando $x \rightarrow +\infty$, tenemos que:

$$J(0) = f(0, x)^\dagger(f'(0, x)\alpha + g'(0, x)\beta) - f'(0, x)^\dagger(f(0, x)\alpha + g(0, x)\beta).$$

Por (3.29) y (3.30), si $x \rightarrow +\infty$,

$$J(0) = I_n(I_n)\beta = \beta, \quad (4.56)$$

$$J(0) = \phi'(0, +\infty). \quad (4.57)$$

Es decir, $u \in \text{Ker}[J(0)]$ si y sólo si $J(0)u = \phi'(0, +\infty)u = 0$, con lo que queda demostrada la equivalencia de (a) y (b).

Veamos ahora que (b) y (c) son equivalentes. Notemos que por (3.29), (3.30) y (4.53), $\phi(0, x)u$ es acotada si y sólo si $\beta u = 0$ [1].

Luego, existe $M \in \mathbb{N}$ tal que $\forall x \in \mathbb{R}^+$, $\|\phi(0, x)u\| < M$. Por otro lado, $\beta u = 0$ si y sólo si $\phi'(0, +\infty)u = 0$, por (4.6), y con esto queda demostrada la equivalencia entre (b) y (c). ■

Ahora expresaremos $\phi'(0, +\infty)$ de otra forma. Haciendo $k \rightarrow 0$ en (3.34) tenemos

$$\phi(0, x) = A + Bx + \int_0^x dy (x - y)V(y)\phi(0, x). \quad (4.58)$$

Derivando respecto a x ,

$$\phi'(0, x) = B + \int_0^x dy V(y)\phi(0, y) + xV(x)\phi(0, y) - xV(x)\phi(0, y);$$

es decir,

$$\phi'(0, x) = B + \int_0^x dy V(y)\phi(0, y), \quad (4.59)$$

Ahora, sabemos por (3.29)-(3.32) que $\phi(0, x)$ puede crecer a lo más como $o(x)$ si $x \rightarrow +\infty$, así que la integral de (4.59) existe si $x \rightarrow \infty$, y de (4.57) y (4.59) tenemos:

$$J(0) = \phi'(0, +\infty) = B + \int_0^\infty dy V(y)\phi(0, y).$$

Proposición 4.10 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces para cualquier vector $u \in \text{Ker}[J(0)]$ existe un único vector $\xi \in \text{Ker}[J(0)^\dagger]$ tal que*

$$\phi(0, x)u = f(0, x)\xi. \quad (4.60)$$

El mapa $u \mapsto \xi$ de $\text{Ker}[J(0)]$ a $\text{Ker}[J(0)^\dagger]$ es una biyección.

Dem. De acuerdo con (3.32) podemos expresar a $\phi(0, x)u$ como:

$$\phi(0, x)u = f(0, x)\xi + g(0, x)\eta,$$

así que $\phi(0, x)u$ es acotado, porque de forma equivalente a la Proposición 4.9, $u \in \text{Ker}[J(0)]$ si y sólo si $\eta = 0$. Así, el mapeo $u \mapsto \xi$ está identificado con (4.44). Veamos que $\xi \in \text{Ker}[J(0)^\dagger]$. Usando (4.1), encontramos que

$$J(0)^\dagger \xi = [B^\dagger f(0, 0) - A^\dagger f'(0, 0)]\xi. \quad (4.61)$$

Por otra parte, de (4.44) y su derivada, con ayuda de (3.33), vemos que

$$f(0, 0)\xi = \phi(0, 0)u = Au, \quad f'(0, 0)\xi = \phi'(0, 0)u = Bu. \quad (4.62)$$

Usando (4.62) en (4.61) e imponiendo (3.12) llegamos a que:

$$J(0)^\dagger \xi = [Bf(0, 0) - Af'(0, 0)]\xi = B^\dagger Au - A^\dagger Bu = 0.$$

$$\text{i.e., } J(0)^\dagger \xi = 0.$$

Esto quiere decir que $\xi \in \text{Ker}[J(0)^\dagger]$. Notemos que el mapa $u \mapsto \xi$ es un mapa lineal de $\text{Ker}[J(0)]$ a $\text{Ker}[J(0)^\dagger]$ porque, como puede verse en (4.60), se tiene que:

$$\xi = f(0, a)^{-1}\phi(0, a)u, \quad u \in \text{Ker}[J(0)]. \quad (4.63)$$

Este mapeo es uno a uno porque tiene núcleo cero: si $\xi = 0$ es (4.60), entonces $\phi(0, x)u = 0$ y $\phi'(0, x)u = 0$. En particular, si $x = 0$, usando (3.33), tenemos que $Au = 0$ y $Bu = 0$, por lo que $(A^\dagger A + B^\dagger B)u = 0$, lo que implica que $u = 0$ por (3.13).

Además, $\dim(\text{Ker}[J(0)]) = \dim(\text{Ker}[J(0)^\dagger])$, por lo que el mapa $u \mapsto \xi$ de $\text{Ker}[J(0)]$ a $\text{Ker}[J(0)^\dagger]$ es una biyección. ■

4.2. Comportamiento para k -chica de $J(k)^{-1}$ y de $S(k)$

En esta sección establecemos las asíntotas de k -chicas de la matriz de Jost $J(k)$, su inversa $J(k)^{-1}$, y de la matriz de dispersión $S(k)$. Como veremos, $J(k)$ es continua en $k = 0$, $J(k)^{-1}$ tiene una singularidad del orden $O(1/k)$ en $k = 0$ si $J(0)$ tiene un eigenvalor cero, $J(k)$ es continua en $k = 0$ si el cero no es un eigenvalor de $J(0)$, y que $S(k)$ es continua en $k = 0$ independientemente de si el cero es o no un eigenvalor de $J(0)$.

Para poder analizar el comportamiento para k -chica de $J(k)^{-1}$, analizaremos (4.51), a quien podemos escribir como:

$$F(k) = J(0) - ikR + o(k), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (4.64)$$

donde definimos

$$F(k) := f(0, a)^\dagger [f(-k^*, a)^{-1}]^\dagger J(k), \quad R := f(0, a)^{-1} \phi(0, a). \quad (4.65)$$

De forma equivalente analizaremos el comportamiento de $F(k)^{-1}$ si $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$. Como puede verse en la Proposición 4.10, la restricción de R a $\text{Ker}[J(0)]$ implica la existencia de un mapa invertible.

Supongamos que entre los n eigenvalores de $J(0)$ el eigenvalor cero tiene multiplicidad μ con una posible multiplicidad algebraica mayor ν . En otras palabras, $J(0)$ tiene μ eigenvectores linealmente independientes que corresponden al eigenvalor cero. Es decir, $J(0)v = 0$ si y sólo si $v \in \mathbb{C}^n$ es el eigenvector, en cuyo caso $Rv \neq 0$ [1].

Definición 4.11 *Un bloque de Jordan es una matriz $k \times k$ de la forma*

$$A_k = \begin{bmatrix} \lambda_k & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_k & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_k \end{bmatrix} \in \mathbb{K}_{n \times n}.$$

Definición 4.12 *Una cadena de Jordan es la lista*

$$(v, (T - \lambda I)v, \dots, (T - \lambda I)^{k-1}v),$$

donde λ es eigenvalor del operador $T \mapsto V$ y k es el entero positivo más pequeño tal que $(T - \lambda I)^k v = 0$.

Ahora escogeremos una base de Jordan para la matriz $J(0)$. Supongamos que hay κ bloques en la forma canónica de $J(0)$. Usaremos el subíndice α para $\alpha = 1, \dots, \kappa$ para identificar las cadenas de Jordan. Asumamos que la α^a cadena consiste de n_α vectores $u_{\alpha j} \quad \forall j \in \{1, \dots, n_\alpha\}$. Usaremos λ_α para denotar el eigenvalor de $J(0)$ asociado con la α^a cadena, donde los eigenvalores pueden repetirse.

Tenemos que:

$$\begin{cases} [J(0) - \lambda_\alpha]u_{\alpha 1} = 0 \\ [J(0) - \lambda_\alpha]u_{\alpha j} = u_{\alpha(j-1)}, \quad j = 2, \dots, n_\alpha, \end{cases} \quad (4.66)$$

así que $u_{\alpha 1}$ es un eigenvector y $u_{\alpha j}$ para toda $j = 2, \dots, n_\alpha$ son los eigenvectores generalizados.

Como asumimos que el eigenvalor cero tiene una multiplicidad geométrica μ , sin pérdida de generalidad hacemos $\lambda_\alpha = 0$ para $\alpha = 1, \dots, \mu$ y $\lambda_\alpha \neq 0$ para $\alpha = \mu+1, \dots, \kappa$. Ordenamos los vectores de la base de Jordan de acuerdo a la regla de que $u_{\alpha j}$ va antes

de u_{β_s} si y sólo si $\alpha < \beta$ o $\alpha = \beta$ y $j < s$. Así, $\{u_{11}, u_{21}, \dots, u_{\mu 1}\}$ es una base de $\text{Ker}[J(0)]$ y nuestra base de Jordan está dada por el conjunto ordenado $\{u_{\alpha j}\}$, i.e.,

$$\{u_{11}, u_{12}, \dots, u_{1n_1}, u_{21}, u_{22}, \dots, u_{2n_2}, \dots, u_{\kappa 1}, u_{\kappa 2}, \dots, u_{\kappa n_\kappa}\}. \quad (4.67)$$

La base autoadjunta de Jordan correspondiente $\{v_{\alpha j}\}$ satisface $v_{\alpha j}^\dagger u_{\rho t} = \delta_{\alpha\rho} \delta_{jt}$, con δ_{jt} la delta de Kronecker, y los índices α y ρ se refieren a los bloques de Jordan. Los vectores $v_{\alpha j}$ satisfacen:

$$\begin{cases} [J(0)^\dagger - \lambda_\alpha^*]v_{\alpha n_\alpha} = 0 \\ [J(0)^\dagger - \lambda_\alpha^*]v_{\alpha j} = v_{\alpha(j+1)}, \quad j = 1, \dots, n_\alpha - 1, \end{cases} \quad (4.68)$$

Así, $\{v_{1n_1}, v_{2n_2}, \dots, v_{\mu n_\mu}\}$ forma una base para $\text{Ker}[J(0)^\dagger]$. La base autoadjunta de Jordan ordenada es $\{v_{\alpha j}\}$. Es decir,

$$\{v_{11}, v_{12}, \dots, v_{1n_1}, v_{21}, v_{22}, \dots, v_{2n_2}, \dots, v_{\kappa 1}, v_{\kappa 2}, \dots, v_{\kappa n_\kappa}\}. \quad (4.69)$$

Sea S la matriz cuyas columnas están dadas por los elementos del conjunto ordenado (4.67). Entonces S^{-1} es exactamente la matriz cuyos renglones son los elementos del grupo ordenado $\{v_{\alpha j}^\dagger\}$ con el orden de (4.69).

Así, la forma canónica de Jordan de $J(0)$ es:

$$S^{-1}J(0)S = \bigoplus_{\alpha=1}^{\kappa} J_{n_\alpha}(\lambda_\alpha), \quad (4.70)$$

donde J_{n_α} es el bloque de Jordan $n_\alpha \times n_\alpha$ con λ_α en la diagonal y uno en las entradas de la superdiagonal. Como los primeros μ bloques de Jordan $J_{n_\alpha}(\lambda_\alpha)$ están asociados con el cero como eigenvalor y los otros $(n - \mu)$ bloques con eigenvalores distintos de cero, cada $J_{n_\alpha}(\lambda_\alpha)$ es una matriz $n_\alpha \times n_\alpha$ que está dada por:

$$J_{n_\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \alpha = 1, \dots, \mu, \quad (4.71)$$

$$J_{n_\alpha} = \begin{bmatrix} \lambda_\alpha & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_\alpha & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_\alpha & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda_\alpha \end{bmatrix} \quad \alpha = \mu + 1, \dots, \kappa, \quad (4.72)$$

Usaremos una tilde para denotar la transformación a través de S . Es decir, $\tilde{M} := S^{-1}MS \quad \forall M \in \mathbb{M}_{n \times n}$. Aplicando esta transformación a $F(k)$ de (4.64) y (4.65),

$$\tilde{F}(k) = \tilde{J}(0) - ik\tilde{R} + o(k), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}. \quad (4.73)$$

Inspeccionando (4.70)-(4.73) vemos que hay exactamente μ columnas de $\tilde{F}(k)$ que se comportan como $o(k)$ si $k \rightarrow 0$ y que cada $(n - \mu)$ columna contiene al menos una entrada que no se va a cero si $k \rightarrow 0$.

El siguiente objetivo es mover todas las entradas con 1 que aparecen en la superdiagonal en los primeros μ bloques de Jordan en (4.71) y juntar todas esas entradas en la matriz identidad $(\nu - \mu)$, $I_{\nu-\mu}$. Recordemos que ν y μ corresponden a las multiplicidades algebraica y geométrica, respectivamente, del eigenvalor cero de $J(0)$, por lo que hay exactamente $(\nu - \mu)$ entradas por mover. Este movimiento va a consistir de una permutación de algunas de las primeras ν columnas de $\tilde{J}(0)$ y después de otras permutaciones de algunos de los ν primeros renglones de la matriz resultante. Las permutaciones de las primeras ν columnas pueden ser descritas como una matriz llamada P_1 que se obtiene multiplicando $\tilde{J}(0)$ por la derecha. Por otro lado, las permutaciones de los primeros ν renglones pueden ser descritas como una matriz llamada P_2 que se obtiene multiplicando $\tilde{J}(0)$ por la izquierda. Así, tendremos que:

$$P_2 \tilde{J}(0) P_1 = \text{diag}\{0_\mu, I_{\nu-\mu}, J_{n_{\mu+1}}, \dots, J_{n_\kappa}(\lambda_\kappa)\},$$

donde 0_μ denota la matriz cero $\mu \times \mu$. Como P_1 y P_2 sólo afectan las primeras ν columnas y los primeros ν renglones, respectivamente, tienen la forma:

$$P_1 = \begin{bmatrix} \Pi_1 & 0 \\ 0 & I_{\nu-\mu} \end{bmatrix}, \quad P_2 = \begin{bmatrix} \Pi_2 & 0 \\ 0 & I_{\nu-\mu} \end{bmatrix}, \quad (4.74)$$

para algunas matrices de permutación Π_1 y Π_2 .

Hablando formalmente, la matriz Π_1 describe la permutación π_1 dada por:

$$\pi_1 : (1, \dots, \nu) \mapsto (q_1, \dots, q_\nu),$$

donde

$$q_\tau = \begin{cases} n_1 + \dots + n_{\tau-1}, & \tau = 1, \dots, \mu, \\ \tau - \mu + \alpha, & \tau = \mu + 1, \dots, \nu \end{cases}$$

y $\alpha \in \{1, \dots, \mu\}$ es el único entero tal que para τ y μ dados,

$$n_1 + n_2 + \dots + n_{\alpha-1} - \alpha + j = \tau - \mu,$$

para algún $j \in \{2, \dots, n_\alpha\}$. Nótese que, como $n_\alpha \geq 1$, la cantidad $n_1 + n_2 + \dots + n_{\alpha-1} - \alpha$ es una función no decreciente de α : si $\alpha, \beta \in \mathbb{Z}$ son tales que $\alpha < \beta$, es decir, $\beta =$

$\alpha + n$ para algún $n \in \mathbb{N}$, con $n > 1$, entonces $n \leq \overbrace{n_\alpha + \dots + n_{\beta-1}}^{\text{n-números}}$, por lo que $-\alpha + n_1 + \dots + n_{\alpha-1} \leq n_1 + \dots + n_{\alpha-1} + n_\alpha + \dots + n_{\beta-1} - \beta \Rightarrow f(\alpha) \leq f(\beta)$.

De forma similar, Π_2 está relacionada a la permutación π_2 dada por:

$$\pi_2 : (1, \dots, \nu) \mapsto (\sigma_1, \dots, \sigma_\nu),$$

donde

$$\sigma_\alpha = \begin{cases} n_1 + \dots + n_\alpha, & \alpha = 1, \dots, \mu, \\ \alpha - \mu + \rho - 1, & \alpha = \mu + 1, \dots, \nu \end{cases}$$

y $\rho \in \{1, \dots, \mu\}$ es el único entero tal que para α y μ dados,

$$n_1 + n_2 + \dots + n_{\rho-1} - \rho + s = \alpha - \mu,$$

para algún $s \in \{2, \dots, n_\rho\}$.

Para implementar estas permutaciones hacemos \hat{e}_j para toda $j = 1, \dots, \nu$ el vector columna de la base estándar de \mathbb{C}^ν y hacemos Π_1 la matriz $\nu \times \nu$ de permutación cuya j -ésima columna es \hat{e}_{qj} , y Π_2 la matriz $\nu \times \nu$ de permutación cuyo k -ésimo vector renglón es $\hat{e}_{\sigma k}^\dagger$. Observemos que si $M \in \mathbb{M}_{\nu \times \nu}$, la matriz $\Pi_2 M \Pi_1$ puede pensarse como la matriz obtenida permutando las columnas de M de acuerdo con Π_1 y permutando sus renglones de acuerdo con Π_2 .

Regresando a la matriz $F(k)$ de (4.65), al ponerla primero en la forma canónica de Jordan $\tilde{F}(k)$ y aplicamos P_1 y P_2 a las primeras ν columnas y renglones de $\tilde{F}(k)$ y formamos la matriz $Z(k)$ definida como

$$Z(k) := \begin{bmatrix} A(k) & B(k) \\ C(k) & D(k) \end{bmatrix} := P_2 \tilde{F}(k) P_1 = P_2 S^{-1} F(k) S P_1, \quad (4.75)$$

donde $A(k)$ tiene tamaño $\mu \times \mu$, $D(k)$ tiene tamaño $(n - \mu) \times (n - \mu)$, $A(k)$ coincide con la submatriz de $\tilde{F}(k)$ que consiste en las entradas de las α 1 columnas y los s renglones, donde $\alpha = 1, \dots, \mu$ y $s = 1, \dots, \mu$.

Los límites para las k -chicas de las entradas de los bloques de $Z(k)$ están descritos en el teorema siguiente.

Teorema 4.13 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces, las asíntotas cuando $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}}^+$ de $A(k), B(k), C(k)$ y $D(k)$, que aparecen en (4.75), están dadas por*

$$A(k) = kA_1 + o(k), \quad B(k) = kB_1 + o(k), \quad C(k) = kC_1 + o(k), \quad D(k) = D_0 + O(k), \quad (4.76)$$

donde A_1, B_1, C_1 y D_0 son matrices constantes; aún más, A_1 y D_0 son invertibles.

Dem. La invertibilidad de D_0 se sigue del hecho de que consiste de bloques invertibles y está dada por:

$$D_0 = \text{diag}\{I_{\nu-\mu}, J_{n_{\mu+1}}, \dots, J_{n_\kappa}(\lambda_{n_\kappa})\},$$

con $I_{\nu-\mu}$ la matriz identidad de tamaño $(\nu - \mu)$ y $J_{n_\kappa}(\lambda_{n_\kappa})$ los bloques de Jordan de (4.70) que corresponden a los eigenvalores distintos de cero $\alpha = \mu + 1, \dots, \kappa$.

De (4.64) y (4.73) obtenemos para la entrada (s, j) de A_1 [1]:

$$(A_1)_{sj} = -iv_{sns}^\dagger R u_{j1},$$

donde R es la matriz de (4.64) y (4.65).

Por (4.63) y la Proposición 4.10, sabemos que R es un mapa invertible de $\text{Ker}[J(0)]$ a $\text{Ker}[\tilde{J}(0)]$. Recordemos por (4.66) y (4.68) que $\{u_{11}, u_{21}, \dots, u_{\mu j}\}$ es una base de $\text{Ker}[J(0)]$ y $\{v_{11}, v_{21}, \dots, v_{\mu n_\mu}\}$ es la base de Jordan de $\text{Ker}[J(0)^\dagger]$. Así, la matriz de A_1 es, aparte del factor $-i$, la matriz de representación del mapa invertible R con respecto a la base de Jordan y la base de Jordan adjunta. Es decir, A_1 es invertible. ■

Teorema 4.14 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces, las asíntotas cuando $k \rightarrow 0$ en \mathbb{C}^+ de $Z(k)$ definida en (4.75) está dada por:*

$$Z(k)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{k}A_1^{-1}[I_\mu + o(1)] & -A_1^{-1}B_1D_0^{-1} \\ -D_0^{-1}C_1A_1^{-1} + o(1) & D_0^{-1} + O(k) \end{bmatrix}, \quad (4.77)$$

donde A_1, B_1, C_1 y D_0 son las matrices constantes que aparecen en (4.76) y la invertibilidad de A_1 y D_0 está garantizada en el Teorema 4.13.

Dem. Primero veamos que se satisface la fórmula de descomposición

$$\begin{bmatrix} I_\mu & -BD^{-1} \\ 0 & I_{\nu-\mu} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_\mu & 0 \\ -D^{-1}C & I_{\nu-\mu} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix}, \quad (4.78)$$

pues

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} I_\mu & -BD^{-1} \\ 0 & I_{\nu-\mu} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_\mu & 0 \\ -D^{-1}C & I_{\nu-\mu} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} I_\mu & -BD^{-1} \\ 0 & I_{\nu-\mu} \end{bmatrix} \\ &\cdot \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & B \\ 0 & D \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & B - BD^{-1}D \\ 0 & D \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Así, tenemos que:

$$\begin{aligned} Z(k)^{-1} &= \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I_\mu & 0 \\ -D^{-1}C & I_{\nu-\mu} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} (A - BD^{-1}C)^{-1} & 0 \\ 0 & D^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_\mu & -BD^{-1} \\ 0 & I_{\nu-\mu} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

o equivalentemente:

$$Z(k)^{-1} = \begin{bmatrix} (A - BD^{-1}C)^{-1} & -(A - BD^{-1}C)^{-1}BD^{-1} \\ -D^{-1}C(A - BD^{-1}C)^{-1} & -D^{-1}C(A - BD^{-1}C)^{-1}BD^{-1}D^{-1} \end{bmatrix}. \quad (4.79)$$

Finalmente, usando (4.76) en (4.79) y el hecho de que A_1 y D_0 son invertibles, obtenemos que

$$Z(k)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{k}A_1^{-1}[I_\mu + o(1)] & -A_1^{-1}B_1D_0^{-1} \\ -D_0^{-1}C_1A_1^{-1} + o(1) & D_0^{-1} + O(k) \end{bmatrix},$$

que es lo que buscábamos. ■

Con esto podemos evaluar el límite de la matriz de Jost $J(k)$ de (3.49) para k -chicas, de su inversa $J(k)^{-1}$ y de la matriz de dispersión $S(k)$ de (3.52). De (4.65) y (4.75) vemos que $J(k)$ está dada por:

$$J(k) = f(-k^*, a)^\dagger [f(0, a)^\dagger]^{-1} SP_2^{-1} Z(k) P_1^{-1} S^{-1}, \quad (4.80)$$

donde el límite para k -chicas será evaluado con ayuda de (3.35), (4.75) y (4.76). Por otro lado, de (4.80) obtenemos

$$J(k)^{-1} = SP_1 Z(k)^{-1} P_2 S^{-1} f(0, a)^\dagger f(0, a)^\dagger [f(-k^*, a)^\dagger]^{-1}, \quad (4.81)$$

donde el límite será evaluado usando (3.35) y (4.77). Usando (4.80) y (4.81) en (3.52) llegamos a que

$$S(k) = -f(k, a)^\dagger [f(0, a)^\dagger]^{-1} SP_2^{-1} Z(-k) Z(k)^{-1} P_2 S^{-1} f(0, a)^\dagger [f(-k, a)^\dagger]^{-1}. \quad (4.82)$$

También usaremos una consecuencia de (3.35): Para $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,

$$f(0, a)^\dagger [f(-k^*, a)^\dagger]^{-1} = I_n + o(1), \quad f(k, a)^\dagger [f(0, a)^\dagger]^{-1} = I_n + o(1). \quad (4.83)$$

Teorema 4.15 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces, cuando $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$, la matriz de Jost $J(k)$ tiene el comportamiento*

$$J(k) = SP_2^{-1} \begin{bmatrix} kA_1 + o(k) & kB_1A_1 + o(k) \\ kC_1 + o(k) & D_0 + o(1) \end{bmatrix} P_1^{-1} S^{-1}, \quad (4.84)$$

la matriz inversa de Jost $J(k)^{-1}$ tiene el comportamiento, cuando $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,

$$J(k)^{-1} = SP_1 \begin{bmatrix} \frac{1}{k}A_1^{-1}[I_\mu + o(1)] & -A_1^{-1}B_1D_0^{-1} + o(1) \\ -D_0^{-1}C_1A_1^{-1} + o(1) & D_0^{-1} + o(1) \end{bmatrix} P_2 S^{-1}, \quad (4.85)$$

y la matriz de dispersión $S(k)$ es continua en $k = 0$ y $S(k) = S(0) + o(1)$ cuando $k \rightarrow 0$ en \mathbb{R} , con

$$S(0) = SP_2^{-1} \begin{bmatrix} I_\mu & 0 \\ 2C_1A_1^{-1} & -I_{n-\mu} \end{bmatrix} P_2 S^{-1}, \quad (4.86)$$

donde A_1, B_1, C_1 y D_0 son las matrices de (4.76), μ es la multiplicidad geométrica del eigenvalor cero de la matriz de Jost para la energía cero $J(0)$, P_1 y P_2 son los operadores de permutación de (4.74) y S es la matriz de (4.70).

Dem. Usando (4.76) y (4.83) en (4.80) llegamos a (4.84):

$$J(k) = f(-k^*, a)^\dagger [f(0, a)^\dagger]^{-1} S P_2^{-1} Z(k) P_1^{-1} S^{-1}.$$

Si $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,

$$J(k) = [I_n + o(1)] S P_2^{-1} \begin{bmatrix} kA_1 + o(k) & kB_1A_1 + o(k) \\ kC_1 + o(k) & D_0 + o(1) \end{bmatrix} P_1^{-1} S^{-1}.$$

Usando (4.77) y (4.83) en (4.85) llegamos a:

$$J(k) = f(-k^*, a)^\dagger [f(0, a)^\dagger]^{-1} S P_2^{-1} Z(k) P_1^{-1} S^{-1}.$$

Si $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,

$$J(k)^{-1} = S P_1 \begin{bmatrix} \frac{1}{k} A_1^{-1} [I_\mu + o(1)] & -A_1^{-1} B_1 D_0^{-1} + o(1) \\ -D_0^{-1} C_1 A_1^{-1} + o(1) & D_0^{-1} + o(1) \end{bmatrix} P_2 S^{-1}.$$

Finalmente, usando (4.75)-(4.77) llegamos a que, si $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,

$$\begin{aligned} Z(-k)Z(k)^{-1} &= \begin{bmatrix} -kA_1 + o(-k) & -kB_1A_1 + o(-k) \\ -kC_1 + o(-k) & D_0 + o(1) \end{bmatrix} \\ &\cdot \begin{bmatrix} \frac{1}{k} A_1^{-1} [I_\mu + o(1)] & -A_1^{-1} B_1 D_0^{-1} + o(1) \\ -D_0^{-1} C_1 A_1^{-1} + o(1) & D_0^{-1} + o(1) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -I_\mu + o(1) + kB_1D_0^{-1}C_1A_1^{-1} + o(k) + o(1) & o(k) \\ -2C_1A_1^{-1}[I_\mu + o(1)] - C_1A_1^{-1} + o(1) & kC_1A_1^{-1}B_1D_0^{-1} + o(1) + I_{n-\mu} + o(k) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Es decir [1],

$$Z(-k)Z(k)^{-1} = \begin{bmatrix} -I_\mu + o(1) & o(k) \\ -2C_1A_1^{-1} + o(1) & I_{n-\mu} + o(k) \end{bmatrix}. \quad (4.87)$$

Y luego, usando (4.87) y (4.83) en (4.82), obtenemos (4.86) y $S(k) = S(0) + o(1)$ si $k \rightarrow 0$ en \mathbb{R} ,

$$\begin{aligned} S(k) &= -f(k, a)^\dagger [f(0, a)^\dagger]^{-1} S P_2^{-1} Z(-k)Z(k)^{-1} P_2 S^{-1} f(0, a)^\dagger [f(-k, a)^\dagger]^{-1} \\ &= S P_2^{-1} \begin{bmatrix} -I_\mu & o(k) \\ 2C_1A_1^{-1} & -I_{n-\mu} \end{bmatrix} P_2 S^{-1} + o(1) \\ \Rightarrow S(0) &= S P_2^{-1} \begin{bmatrix} -I_\mu & o(k) \\ 2C_1A_1^{-1} & -I_{n-\mu} \end{bmatrix} P_2 S^{-1}. \end{aligned}$$

Ademaás, $S(k) = S(0) + o(1)$. ■

4.3. Resultados adicionales para k -chica

Recordemos que, cuando $k = 0$ en (3.1), de acuerdo a (3.31), $\psi'' = V(x)\psi$, $x \in \mathbb{R}$. Además, por (3.29) y (3.30),

$$\begin{aligned} f(0, x) &= I_n + o(1), & f'(0, x) &= o(1/x), & x &\rightarrow \infty, \\ g(0, x)x &[I_n + o(1)], & g'(0, x) &= I_n + o(1), & x &\rightarrow \infty. \end{aligned}$$

De (3.29) y (3.30) vemos que las $2n$ columnas combinadas de $f(0, x)$ y $g(0, x)$ forman un sistema fundamental de soluciones para (3.31). De (3.29) vemos que las n columnas de $f(0, x)$ forman n soluciones linealmente independientes para (3.31) que permanecen acotadas cuando $x \rightarrow \infty$. Análogamente, (3.30) indica que las n columnas de $g(0, x)$ forman n soluciones linealmente independientes de (3.31) que se vuelven no acotadas cuando $x \rightarrow \infty$.

Del lado izquierdo de la ecuación $w(k, x) = f(k, x)\xi + g(k, x)\eta$ con $k = 0$, usaremos una combinación lineal de n columnas de la solución regular para energía cero $\phi(0, x) \in \mathbb{M}_{n \times n}$ solución de (3.31) y la expresaremos así:

$$\phi(0, x)u = f(0, x)\xi + g(0, x)\eta, \quad (4.88)$$

para algunos u, ξ, η vectores columna en \mathbb{C}^n constantes distintos de cero.

Sabemos que $\phi(0, x)u$ satisface (3.11) porque $\phi(0, x)$ lo hace:

$$(\phi(0, x)u)'' = \phi''(0, x)u = V(x)\phi(0, x)u.$$

Queremos saber cuántas soluciones vector-columna acotados linealmente independientes podemos formar usando combinaciones lineales de n columnas de $\phi(0, x)$.

Hay dos posibilidades: que $\phi(0, x)u$ esté acotada cuando $x \rightarrow \infty$, en cuyo caso $\xi \neq 0$ y $\eta = 0$, o que $\phi(0, x)u$ no esté acotado cuando $x \rightarrow +\infty$, en cuyo caso $\eta \neq 0$.

Sea μ la multiplicidad geométrica del eigenvalor cero de $J(0)$. De la Proposición 4.10 vimos que pueden formarse exactamente μ columnas usando combinaciones lineales de n columnas de la solución regular de la energía cero $\phi(0, x)$, de forma que esas μ columnas forman las soluciones linealmente independientes de (3.31) que permanecen acotadas cuando $x \rightarrow +\infty$. Además, cada μ solución vector-columna de (3.31) puede ser expresada como una combinación lineal de columnas de $f(0, x)$. En ese sentido, el entero μ indica el número máximo de soluciones acotadas de (3.31) linealmente independientes que también satisfacen (3.11). En el caso puramente excepcional, cuando, con $\mu = n$, cada columna de $\phi(0, x)$ puede expresarse como una combinación lineal de n columnas linealmente independientes de $f(0, x)$.

De (4.84) podemos concluir que:

Corolario 4.16 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y (5.1). Entonces, el determinante de la matriz de Jost $J(k)$ de (4.84) tiene el comportamiento para k -chicas:*

$$\det J(k) = c_1 k^\mu [1 + o(1)], \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (4.89)$$

donde μ es la multiplicidad geométrica del eigenvalor cero de la matriz de Jost para la energía cero $J(0)$ y c_1 es una constante distinta de cero. De hecho, el valor de c_1 está dado por:

$$c_1 := (\det P_1)(\det P_2)(\det A_1)(\det D_0),$$

donde P_1 y P_2 son las matrices $n \times n$ de permutación que se habían definido en (4.84), y por lo tanto sus determinantes son 1 o -1 , y A_1 y D_0 son las matrices invertibles de (4.84), lo que implica que sus determinantes son distintos de cero.

Dem. Ya habíamos visto que

$$J(k) := [f(-k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)], \quad k \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}.$$

Como $J(k)$ es continua y el determinante también es una función continua,

$$\det J(k) = k^\mu S P_2^{-1} \begin{bmatrix} A_1 + o(1) & B_1 + o(k) \\ k C_1 + o(k) & D_0 + o(1) \end{bmatrix} P_1 S^{-1}$$

$$\Rightarrow \lim_{k \rightarrow 0} \det J(k) = \det \lim_{k \rightarrow 0} J(k) = k^\mu \det S \det P_2^{-1} \det P_1 \det S \det A_1 \det D_0 [1 + o(1)].$$

$$\text{i.e., } \det J(k) = (\det P_1)(\det P_2)(\det A_1)(\det D_0) k^\mu [1 + o(1)].$$

■

De (4.86) vemos que $S(0)$ sólo tiene dos eigenvalores: ± 1 . Veremos que el eigenvalor $+1$ tiene multiplicidad (geométrica y algebraica) μ y -1 igual a $n - \mu$. Así, el valor de μ está unívocamente determinado por $S(0)$.

Proposición 4.17 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y (5.1). Sean $J(k)$ y $S(k)$ como en (3.49) y (3.52). Entonces,*

- a) $S(0)$ tiene dos eigenvalores: ± 1 .
- b) Las multiplicidades geométrica y algebraica de $+1$ de $S(0)$ son iguales a μ , la multiplicidad geométrica del eigenvalor de la energía cero de $J(0)$.
- c) Las multiplicidades geométrica y algebraica del eigenvalor -1 de $S(0)$ son iguales a $n - \mu$.

Dem. a) Por (4.86) vemos que $S(0)$ es similar a una matriz triangular inferior cuyas diagonales son $\{I_\mu, -I_{n-\mu}\}$. Como una transformación similar no cambia los eigenvalores, los eigenvalores de $S(0)$ son $(1 - \lambda)^\mu(-1 - \lambda)^{n-\mu} = 0 \Rightarrow \lambda = \pm 1$.

b), c) Por lo anterior, vemos que la multiplicidad algebraica de $+1$ es μ y la de -1 es $n - \mu$. Por (3.58) sabemos que $S(0)$ es unitaria, así que puede diagonalizarse con una matriz unitaria M_1 . Así, $S(0) = M_1 D M_1^\dagger$ para alguna matriz D diagonal, con μ entradas $+1$ y $n - \mu$ entradas -1 . Las multiplicidades son invariantes bajo transformaciones similares con matrices unitarias, y como las multiplicidades algebraica y geométrica de una diagonal son iguales, tenemos que

$$m_{a,g}^+ = \mu, \quad m_{a,g}^- = n - \mu,$$

donde $m_{a,g}$ se refiere a las multiplicidades algebraica y geométrica, y los signos positivo y negativo del superíndice se refieren al signo de ± 1 . ■

Capítulo 5

Análisis y teorema de Levinson del operador de Schrödinger para altas energías

Existen dos objetivos principales en esta sección para el operador de Schrödinger de la ecuación (3.1) con la condición a la frontera autoadjunta (3.11)-(3.13) cuando el potencial V satisface (3.2) y la condición

$$\int_0^{\infty} dx (1+x) \|V(x)\| < +\infty. \quad (5.1)$$

El primer objetivo consiste, aún cuando V satisface la condición más débil

$$\int_0^{\infty} dx \|V(x)\| < +\infty \quad (5.2)$$

en lugar de (3.5), en establecer las asintotas para k -grandes de varias cantidades relacionadas con (3.1), tal como se hizo en el Capítulo 4, como las soluciones de dispersión, la matriz de Jost, la inversa de la matriz de Jost y la matriz de dispersión. El segundo objetivo consiste, bajo la condición

$$\int_0^{\infty} dx x \|V(x)\| < +\infty, \quad (5.3)$$

en derivar el teorema de Levinson, específicamente para obtener la relación entre el número de estados ligados y el cambio de fase en el determinante de la matriz de dispersión.

Un *estado ligado* corresponde a una solución vector-columna cuadrado-integrable de (3.1) que satisface las condiciones a la frontera (3.11)-(3.13). El hecho de que V sea autoadjunto y la condición a la frontera autoadjunta garantizan que el operador de Schrödinger correspondiente es autoadjunto en $L^2(\mathbb{R}^+)$, por lo que sus eigenvalores deben ser reales. Cuando $k^2 \geq 0$, resulta que no hay soluciones vector-columna

cuadrado-integrables para (3.1). Por lo tanto, estado ligado, si existe, ocurre sólo cuando $k^2 < 0$, o equivalentemente cuando la k de (3.1) está en el eje imaginario positivo del plano complejo \mathbb{C} . Gracias a la restricción (5.1), el número de k -valores es finito. Para cada k -valor correspondiente a un estado ligado, el número de soluciones vector-columna cuadrado-integrables linealmente independientes (es decir, la multiplicidad del estado ligado) no puede ser mayor que n . El *número de estados ligados* está definido como el número de estados ligados incluyendo las multiplicidades.

Aquí se muestra no sólo el término de k -grande, también se especifica el término del siguiente orden y se establecen las asíntotas para k -grande hasta $o(1/k^2)$, lo que es crucial para establecer las transformaciones de Fourier de varias cantidades relevantes al problema de dispersión inverso. La razón por la que se necesita (5.1) en lugar de sólo (5.2) es el hecho de que las asíntotas para k -chicas son necesarias para establecer el teorema de Levinson, y esas asíntotas requieren de (5.1).

5.1. Las matrices de Jost y de dispersión con potencial cero

Para entender el comportamiento de k -grandes de la matriz de Jost $J(k)$, su inversa $J(k)^{-1}$, y la matriz de dispersión $S(k)$, primero necesitamos entender los comportamientos de esas matrices cuando el potencial V que aparece en (3.1) es cero. En ese caso, usaremos el subíndice 0 para denotar las cantidades correspondientes y escribiremos $J_0(k)$ y $S_0(k)$ para las matrices de Jost y de dispersión, respectivamente, que corresponden a $V = 0$.

Cuando $V = 0$, podemos ver que $f(k, x) = e^{ikx}I_n$, por lo que

$$J_0(k) = B - ikA, \quad J_0^{-1} = (B - ikA)^{-1}, \quad S_0(k) = -(B + ikA)(B - ikA)^{-1}. \quad (5.4)$$

En la parametrización con \tilde{A} y \tilde{B} en (3.67), las cantidades correspondientes están dadas por las matrices diagonales, donde:

$$\tilde{J}_0(k) = \text{diag}\{\cos \theta_1 + ik \sin \theta_1, \dots, \cos \theta_{n_M} + ik \sin \theta_{n_m}, -I_{n_D}, ikI_{n_N}\}, \quad (5.5)$$

$$\tilde{J}_0(k)^{-1} = \text{diag}\left\{\frac{1}{\cos \theta_1 + ik \sin \theta_1}, \dots, \frac{1}{\cos \theta_{n_M} + ik \sin \theta_{n_m}}, -I_{n_D}, ikI_{n_N}\right\}, \quad (5.6)$$

$$\tilde{S}_0(k) = \text{diag}\left\{\frac{-\cos \theta_1 + ik \sin \theta_1}{\cos \theta_1 + ik \sin \theta_1}, \dots, \frac{-\cos \theta_{n_M} + ik \sin \theta_{n_m}}{\cos \theta_{n_M} + ik \sin \theta_{n_m}}, -I_{n_D}, ikI_{n_N}\right\}. \quad (5.7)$$

Entonces, de (5.6) y (5.7) tenemos que, cuando $k \rightarrow \infty$ en \mathbb{C} ,

$$\tilde{J}_0(k)^{-1} = \text{diag}\{0_{n_M}, -I_{n_D}, 0_{n_N}\} + \frac{1}{ik} \text{diag}\{\csc \theta_1, \dots, \csc \theta_{n_M}, 0_{n_D}, I_{n_N}\} + O(1/k^2), \quad (5.8)$$

$$\tilde{S}_0(k) = Z_0 + \frac{2i}{k}Z_1 + O(1/k^2), \quad (5.9)$$

donde hemos definido

$$Z_0 := \text{diag}\{I_{n_M}, -I_{n_\nu}, I_{n_N}\}, \quad Z_1 := \text{diag}\{\cot \theta_1, \dots, \cot \theta_{n_M}, 0_{n_D}, 0_{n_N}\}, \quad (5.10)$$

con 0_j denotando la matriz cero $j \times j$.

Los resultados de la siguiente Proposición son usados más adelante.

Proposición 5.1 *La matriz de Jost $J_0(k)$ que aparece en (5.4) es invertible cuando $k \rightarrow \infty$ en \mathbb{C} . La matriz $J_0(k)^{-1}$ y la matriz de dispersión $S_0(k)$ dada en (5.4) satisfacen, cuando $k \rightarrow \infty$ en \mathbb{C} ,*

$$J_0(k)^{-1} = T_1 M T_2 \text{diag}\{0_{n_M}, -I_{n_\nu}, 0_{n_N}\} M^\dagger + O(1/k), \quad (5.11)$$

$$A J_0(k)^{-1} = \frac{1}{ik} M \text{diag}\{I_{n_M}, 0_{n_\nu}, I_{n_N}\} M^\dagger + O(1/k^2), \quad (5.12)$$

$$S_0(k) = S_0(\infty) + \frac{2i}{k} M Z_1 M^\dagger + O(1/k^2), \quad (5.13)$$

con

$$S_0(\infty) := M Z_0 M^\dagger,$$

donde T_1 y T_2 son las matrices en (3.88), M es la matriz unitaria de (3.75), A y B son las matrices que aparecen en (3.11)-(3.13), \tilde{A} y \tilde{B} son las matrices definidas en (3.67), y Z_0 y Z_1 son las matrices definidas en (5.10). Así, cuando $k \rightarrow \infty$ en \mathbb{C} tenemos:

$$J_0(k)^{-1} = O(1), \quad A J_0(k)^{-1} = O(1/k), \quad S_0(k) = S_0(\infty) + O(1/k). \quad (5.14)$$

Dem. Aprovechando las propiedades de M , $M^{-1} = M^\dagger$ y $M^\dagger M = I_n$, de (3.92) y (3.93) obtenemos, usando $V = 0$,

$$\begin{aligned} J_0(k)^{-1} &= T_1 M T_2 \tilde{J}_0(k)^{-1} M^\dagger, \quad A J_0(k)^{-1} = (M \tilde{A} T_2^{-1} M^\dagger T_1^{-1}) T_1 M T_2 \tilde{J}_0(k)^{-1} M^\dagger \\ &\Rightarrow A J_0(k)^{-1} = M \tilde{A} \tilde{J}_0(k)^{-1} M^\dagger, \quad S_0(\infty) = M \tilde{S}_0(k) M^\dagger. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Por (5.6) concluimos que $\tilde{J}(k)$ es invertible si $k \rightarrow \infty$ en \mathbb{C} .

De la primera igualdad de (5.15), existe $J_0(k)^{-1}$ si $k \rightarrow \infty$ en \mathbb{C} .

Por (3.67), (5.8) y (5.9) en (5.15), si $k \rightarrow \infty$ en \mathbb{C} ,

$$\begin{aligned}
 \rightarrow J_0(k)^{-1} &= T_1 M T_2 \tilde{J}_0(k)^{-1} M^\dagger = T_1 M T_2 \text{diag}\{0_{n_M}, -I_{n_D}, 0_{n_N}\} M^\dagger + o(1/k) \\
 &\rightarrow o(1). \\
 \rightarrow A J_0(k)^{-1} &= M \tilde{A} \tilde{J}_0(k)^{-1} M^\dagger M (-\text{diag}\{\sin \theta_1, \dots, \sin \theta_n\}) \cdot \\
 &\quad (\text{diag}\{0, -I, 0\} + \frac{1}{ik} \text{diag}\{\csc \theta_1, \dots, \csc \theta_n\} + o(1/k^2)) M^\dagger \\
 &= M (-\text{diag}\{\sin \theta_1, \dots, \sin \theta_{n_M}, 0, I_n\}) \cdot \\
 &\quad (\text{diag}\{0, -I, 0\} + \frac{1}{ik} \text{diag}\{\csc \theta_1, \dots, \csc \theta_n\} + o(1/k^2)) M^\dagger \\
 &= \frac{1}{ik} M (-I_{n_M}, 0, -I_{n_N}) M^\dagger + o(1/k^2) \\
 &\rightarrow o(1/k). \\
 \rightarrow S_0(k) &= M \tilde{S}_0(k) M^\dagger = M (Z_0 + \frac{2i}{k} Z_1 + o(1/k^2)) M^\dagger \\
 &= S_0(\infty) + \frac{2i}{k} M Z_1 M^\dagger + o(1/k^2) \\
 &\rightarrow S_0(\infty) + o(1/k),
 \end{aligned}$$

cuando $k \rightarrow \infty$ en \mathbb{C} . ■

5.2. Comportamiento de k -grande

Para determinar el comportamiento para k -grandes, es suficiente que el potencial V satisfaga (3.2) y (5.1). Las siguientes matrices serán útiles en este análisis:

$$Q_1 := \frac{1}{2} \int_0^\infty dy V(y), \quad Q_2(k) := \frac{1}{2} \int_0^\infty dy e^{2iky} V(y), \quad (5.16)$$

$$Q_3 := \frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z dy V(z)V(y), \quad Q_4(k) := \frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z dy e^{2ikz} V(z)V(y), \quad (5.17)$$

$$Q_5(k) := \frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z dy e^{2iky} V(z)V(y), \quad Q_6(k) := \frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z dy e^{2ik(z-y)} V(z)V(y). \quad (5.18)$$

Hacemos énfasis en que Q_1 y Q_3 son independientes de k mientras que las cuatro matrices restantes son funciones de k .

A continuación enunciaremos una proposición sobre las matrices Q_1 a Q_6 [2]:

Proposición 5.2 *Supongamos que V de (3.1) pertenece a $L^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces, Q_1 y Q_3 son matrices constantes bien definidas. Aún más, cada una de las cuatro matrices $Q_2(k)$, $Q_4(k)$, $Q_5(k)$ y $Q_6(k)$ está bien definida para $k \in \overline{\mathbb{C}^+}$, y cada una se comporta como $o(1)$ cuando $k \rightarrow \infty$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$.*

Proposición 5.3 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Sea $f(k, x)$ la solución de Jost. Entonces, si $k \rightarrow \infty$ en \mathbb{C}^+ ,*

$$f(-k^*, 0)^\dagger = I_n + \frac{1}{k}[-Q_1 + Q_2(k)] + \frac{1}{k^2}[-Q_3 - Q_4(k) + Q_5(k) + Q_6(k)] + o(1/k^3), \quad (5.19)$$

$$f'(-k^*, 0)^\dagger = ikI_n - Q_1 - Q_2(k) + \frac{1}{ik}[Q_3 - Q_4(k) + Q_5(k) - Q_6(k)] + o(1/k^2). \quad (5.20)$$

Dem. Sea $m(k, x) = e^{-ikx} f(k, x)$. Entonces obtenemos:

$$m(k, x) = I_n + \frac{1}{2ik} \int_x^\infty dy [e^{2ik(y-x)} - 1]V(y)m(k, y), \quad (5.21)$$

$$\begin{aligned} m'(k, x) &= \frac{1}{2ik} \left(-2ike^{-2ikx} \int_x^\infty dy e^{2iky}V(y)m(k, y) - e^{-2ikx}e^{2ikx}V(x)m(k, x) \right) \\ &= \frac{1}{2ik}V(x)m(k, x) \\ &\Rightarrow m'(k, x) = - \int_x^\infty dy e^{2ik(y-x)}V(y)m(k, y). \end{aligned} \quad (5.22)$$

Iterando (5.21) y (5.22) cuando $k \rightarrow \infty$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$

$$\begin{aligned} m(k, x) &= I_n + \frac{1}{2ik} \int_x^\infty (e^{2ik(y-x)} - 1)V(y) \cdot \\ &\quad \left[I_n + \frac{1}{2ik} \int_y^\infty (e^{2ik(z-y)} - 1)V(y)\{I_n + \dots\} \right] dw dz dy \\ \Rightarrow m(k, x) &= I_n + \frac{1}{2ik} \int_x^\infty dy (e^{2ik(y-x)} - 1)V(y) \\ &\quad + \frac{1}{(2ik)^2} \int_x^\infty (e^{2ik(y-x)} - 1)V(y) \int_y^\infty (e^{2ik(z-y)} - 1)V(z) dz dy + o(1/k^3). \end{aligned} \quad (5.23)$$

Derivando,

$$\begin{aligned} m'(k, x) &= \frac{1}{2ik}V(x) + \frac{1}{2ik} \left(-2ike^{-2ikx} \int_x^\infty dy e^{iky}V(y) - e^{-2ikx}e^{2ikx}V(x) \right) + o(1/k^2) \\ &\quad + \left[\frac{1}{(2ik)^2}V(x) + \frac{1}{(2ik)^2} \left(-2ike^{-2ikx} \int_x^\infty dy e^{iky}V(y) - e^{-2ikx}e^{2ikx}V(x) \right) \right] \\ &\quad \cdot \int_y^\infty dz (e^{-2ik(z-y)} - 1)V(z) \\ \Rightarrow m'(k, x) &= - \int_x^\infty dy e^{2ik(y-x)}V(y) - \frac{1}{2ik} \int_x^\infty dy e^{2ik(y-x)}V(y) \\ &\quad \cdot \int_y^\infty dz (e^{2ik(z-y)} - 1)V(z) + o(1/k^2). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Evaluando en $x = 0$,

$$\begin{aligned}
 m(k, 0) &= I_n + \frac{1}{2ik} \int_0^\infty dy (e^{2iky} - 1)V(y) \\
 &\quad + \frac{1}{(2ik)^2} \int_0^\infty (e^{2iky} - 1)V(y) \int_0^y (e^{2ikz} - 1)V(z)dz dy + o(1/k^3). \\
 m'(k, 0) &= - \int_0^\infty dy e^{2iky}V(y) - \frac{1}{2ik} \int_0^\infty dy e^{2iky}V(y) \\
 &\quad \cdot \int_0^\infty dz (e^{2ikz} - 1)V(z) + o(1/k^2).
 \end{aligned}$$

Y como

$$f(k, 0) = m(k, 0) \quad \text{y} \quad f'(k, 0) = ikm(k, 0) + m'(k, 0), \quad (5.25)$$

entonces

$$\begin{aligned}
 f(k, 0) &/= I_n + \frac{1}{2ik} \int_0^\infty dy (e^{2iky} - 1)V(y) \\
 &\quad + \frac{1}{(2ik)^2} \int_0^\infty (e^{2iky} - 1)V(y) \int_0^y (e^{2ikz} - 1)V(z)dz dy + o(1/k^3). \\
 f'(k, 0) &= ikI_n - \frac{1}{2} \int_0^\infty dy (e^{2iky} - 1)V(y) \\
 &\quad + \frac{1}{4ik} \int_0^\infty dy \int_0^y dz (e^{2iky} + 1)(-e^{2ikz} + 1)V(y)V(z) + o(1/k^2),
 \end{aligned}$$

Si $k \rightarrow +\infty$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$.

Finalmente, reemplazando k por $-k^*$ y tomando los adjuntos y considerando que $[V(y)V(z)]^\dagger = V(z)V(y)$, encontramos que:

$$\begin{aligned}
 f(-k^*, 0)^\dagger &/= I_n + \frac{1}{2ik} \int_0^\infty dy (e^{2iky} - 1)V(y) \\
 &\quad + \frac{1}{(2ik)^2} \int_0^\infty (e^{2iky} - 1)V(y) \int_0^y (e^{2ikz} - 1)V(z)dz dy + o(1/k^3). \\
 f'(-k^*, 0)^\dagger &= ikI_n - \frac{1}{2} \int_0^\infty dy (e^{2iky} - 1)V(y) \\
 &\quad + \frac{1}{4ik} \int_0^\infty dy \int_0^y dz (e^{2iky} + 1)(-e^{2ikz} + 1)V(y)V(z) + o(1/k^2).
 \end{aligned}$$

Por otro lado tenemos que:

$$\begin{aligned}
f(-k^*, 0)^\dagger &= I_n + \frac{1}{ik}[-Q_1 + Q_2(k)] + \frac{1}{k^2}[-Q_3 - Q_4(k) + Q_5(k) + Q_6(k)] + o(1/k^3) \\
&= I_n + \frac{1}{k} \left[-\frac{1}{2} \int_0^\infty dy V(y) + \frac{1}{2} \int_0^\infty dy e^{2iky} V(y) \right] + o(1/k^3) \\
&\quad + \frac{1}{k^2} \left[-\frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z dy V(z)V(y) - \frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z e^{2ikz} V(y)V(z) \right] \\
&\quad + \frac{1}{k^2} \left[\frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z e^{2iky} V(y)V(z) - \frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z e^{2ik(z-y)} V(y)V(z) \right] \\
&= I_n + \frac{1}{ik} \int_0^\infty dz \int_0^z dy (e^{2iky} - 1)V(y) \\
&\quad + \frac{1}{(2ik)^2} \int_0^\infty dz \int_0^z dy V(z)V(y)(1 + e^{2ikz} - e^{2iky} - e^{2ik(z-y)}) \\
&= I_n + \frac{1}{ik} \int_0^\infty dz \int_0^z dy (e^{2iky} - 1)V(y) \\
&\quad + \frac{1}{(2ik)^2} \int_0^\infty dz \int_0^z dy V(z)V(y)(e^{2ikz} - 1)(e^{2iky} - 1) + o(1/k^3). \\
&\quad \text{i.e., } f(-k^*, 0)^\dagger = f(-k^*, 0)^\dagger.
\end{aligned}$$

Y, finalmente,

$$\begin{aligned}
f'(-k^*, 0)^\dagger &= ikI_n - Q_1 - i_2(k) + \frac{1}{ik}[Q_3 - Q_4(k) + Q_5(k) - Q_6(k)] + o(1/k^2) \\
&= ikI_n - \frac{1}{2} \int_0^\infty dy V(y) + \frac{1}{2} \int_0^\infty dy e^{2iky} V(y) + o(1/k^2) \\
&\quad + \frac{1}{ik} \left[\frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z dy V(z)V(y) - \frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z e^{2ikz} V(y)V(z) \right] \\
&\quad + \frac{1}{ik} \left[\frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z e^{2iky} V(y)V(z) - \frac{1}{4} \int_0^\infty dz \int_0^z e^{2ik(z-y)} V(y)V(z) \right] \\
&= ikI_n - \frac{1}{2} \int_0^\infty dy V(y)(e^{2iky} - 1) \\
&\quad + \frac{1}{4ik} \int_0^\infty dz \int_0^z dy V(z)V(y)(1 - e^{2ikz} + e^{2iky} - e^{2ik(z-y)}) \\
&= ikI_n - \frac{1}{2} \int_0^\infty dy V(y)(e^{2iky} - 1) \\
&\quad + \frac{1}{4ik} \int_0^\infty dz \int_0^z dy V(z)V(y)(1 - e^{2ikz})(1 + e^{2iky}). \\
&\quad \text{i.e., } f'(-k^*, 0)^\dagger = f'(-k^*, 0)^\dagger.
\end{aligned}$$

■

Proposición 5.4 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Sea $J(k)$ la matriz de Jost definida en (3.49). Entonces, si $k \rightarrow \infty$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,*

$$J(k) := -ikA + B + [Q_1 + Q_2(k)]A + \frac{1}{ik}P(k) + o(1/k^2), \quad (5.26)$$

donde

$$P(k) := [-Q_1 + Q_2(k)]B + [-Q_3 + Q_4(k) - Q_5(k) + Q_6(k)]A,$$

donde A y B son las matrices definidas en (3.11)-(3.13) y las Q_i son las matrices que se definieron en (5.16)-(5.18).

Dem. Por la segunda parte de (3.49).

$$J(k) = f(-k^*, 0)^\dagger B - f'(-k^*, 0)^\dagger A.$$

Por (5.19) y (5.20),

$$\begin{aligned} J(k) &= [I_n + \frac{1}{ik}(-Q_1 + Q_2(k) + \frac{1}{k^2}(-Q_3 - Q_4(k) + Q_5(k) + Q_6(k))]B \\ &\quad - [ikI_n - Q_1 - Q_2(k) + \frac{1}{ik}(Q_3 - Q_4(k) + Q_5(k) - Q_6(k))]A + o(1/k^2) \\ \Rightarrow J(k) &= -ikA + B + (Q_1 + Q_2(k))A + \frac{1}{ik}P(k) + o(1/k^2). \end{aligned}$$

con

$$P(k) := [-Q_1 + Q_2(k)]B + [-Q_3 + Q_4(k) - Q_5(k) + Q_6(k)]A. \quad \blacksquare$$

Proposición 5.5 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Sean $J(k)$ y $J_0(k)$ las matrices de Jost de (3.49) y (5.4), respectivamente, Q_1 y $Q_2(k)$ las matrices de (5.16) y $S_0(\infty)$ la matriz constante definida en (5.13). Entonces, si $k \rightarrow \infty$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$, se tiene que:*

$$J(k)J_0(k)^{-1} = I_n - \frac{1}{ik}(Q_1 + Q_2(k)S_0(\infty)) + o(1/k^2), \quad (5.27)$$

$$J_0(k)J(k)^{-1} = I_n + \frac{1}{ik}[Q_1 + Q_2(k)S_0(\infty)] + o(1/k^2). \quad (5.28)$$

Dem. Sabemos por (5.4) que $J_0(k) = B - ikA$ y $J_0(-k) = B + ikA$. Por (5.26), si $k \rightarrow \infty$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,

$$J(k) = J_0(k) - \frac{1}{ik}Q_1J_0(k) + \frac{1}{ik}Q_2(k)J_0(-k) + \frac{1}{ik}[-Q_3 + Q_4(k) - Q_5(k) + Q_6(k)]A + o(1/k^2). \quad (5.29)$$

La invertibilidad de $J_0(k)$ cuando si $k \rightarrow \infty$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$ está asegurada por la Proposición 5.1. Multiplicando (5.29) por $J_0(k)^{-1}$ y usando $J_0(-k)J_0(k)^{-1} = -S_0(k)$, obtenemos, si $k \rightarrow \infty$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,

$$\begin{aligned} J_0(k)J_0(k)^{-1} &= I_n - \frac{Q_1}{ik} - \frac{Q_2(k)}{ik}S_0(k) + \frac{1}{ik}(-Q_3 + Q_4(k) - Q_5(k) \\ &+ Q_6(k))AJ_0(k)^{-1} + o(1/k^2)J_0(k)^{-1}. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Usando (5.4) y (5.30),

$$J(k)J_0(k)^{-1} = I_n - \frac{1}{ik}Q_1 - \frac{1}{ik}Q_2(k)S_0(\infty) + o(1/k^2), \quad k \rightarrow \infty \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}$$

$$\text{i.e., } J(k)J_0(k)^{-1} = I_n - \frac{1}{ik}[Q_1 + Q_2(k)S_0(\infty)] + o(1/k^2) \quad k \rightarrow \infty \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}.$$

Cambiando los signos de (5.27) de los término $o(1/k)$ [2],

$$J_0(k)J(k)^{-1} = I_n - \frac{1}{ik}[Q_1 + Q_2(k)S_0(\infty)] + o(1/k^2) \quad k \rightarrow \infty \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}.$$

■

Proposición 5.6 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Entonces la matriz de Jost definida en (3.49), $J(k)$, satisface:*

$$J(k) = J_0(k)[I_n + o(1/k)], \quad k \rightarrow \infty \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (5.31)$$

$$\det J(k) = c_2 k^{n_M+n_N}[1 + o(1/k)], \quad k \rightarrow \infty \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}. \quad (5.32)$$

donde c_2 es una constante distinta de cero.

Dem. Usando (5.15) llegamos a que:

$$J_0(k) = M\tilde{J}_0(k)T_2^{-1}M^\dagger T_1^{-1}. \quad (5.33)$$

Usando (5.5) y (5.33) encontramos:

$$\begin{aligned} \det J_0(k) &= \frac{1}{\det T_1} \frac{1}{\det T_2} \det M \frac{1}{\det M} \cdot \\ &\det (\text{diag}\{i \cos \theta_{n_M} + ik \sin \theta_{n_M}, -I_{n_\nu}, ik I_{n_N}\}) k^{n_M+n_N} \\ &= \frac{1}{\det T_1 T_2} (-1)^{n_\nu} (i)^{n_N} (i)^{n_M} \prod_{j=1}^{n_M} \sin \theta_j k^{n_M+n_N} (1 + o(1/k)). \end{aligned}$$

Es decir, haciendo

$$c_2 = \frac{(-1)^{n_\nu} (i)^{n_N+n_M}}{\det T_1 T_2} \prod_{j=1}^{n_M} \sin \theta_j,$$

que está bien definida porque T_1 u T_2 son invertibles y $\sin \theta_j \neq 0$ para las θ_j tales que $j \in \{1, \dots, n_\mu\}$. Vemos que:

$$\det J_0(k) = c_2 k^{n_M+n_N} [1 + o(1/k)], \quad k \rightarrow \infty \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}. \quad (5.34)$$

Por otro lado, de (5.30) es evidente que:

$$J(k) = J_0(k)[I_n + o(1/k)], \quad k \rightarrow \infty \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}.$$

Por último y por (5.34)

$$\det J(k) = c_2 k^{n_M+n_N} [1 + o(1/k)], \quad k \rightarrow \infty \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}.$$

■

A continuación presentaremos las asíntotas para k -grandes para la matriz de dispersión.

Proposición 5.7 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Entonces la matriz de dispersión $S(k)$ de (3.52) satisface:*

$$S(k) = S_0(\infty) + \frac{G(k)}{ik} + o(1/k^2), \quad k \rightarrow \infty \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (5.35)$$

donde $G(k)$ es la matriz definida como:

$$G(k) := -2MZ_1M^\dagger + Q_1S_0(\infty) + S_0(\infty)Q_1 + S_0(\infty)Q_2(k)S_0(\infty) + Q_2(-k),$$

con M la matriz unitaria de (3.75), Z_1 la matriz de (5.10), $S_0(\infty)$ la matriz de (4.11) y Q_1 y $Q_2(k)$ las matrices de (5.16).

Dem. A partir de (3.52) vemos que:

$$S(k) = -J(-k)J(k)^{-1} = J(-k)J_0(-k)^{-1}S_0(k)J_0(k)J(k)^{-1}, \quad (5.36)$$

porque, por (5.4),

$$S(k) = J(-k)(B + ikA)^{-1}(-1)(B + ikA)(B - ikA)^{-1}(B - ikA)J(k)^{-1} = J(-k)J(k)^{-1}.$$

Usando (5.27) y (5.28) en (5.36),

$$\begin{aligned} S(k) &= \left(I_n + \frac{1}{ik}(Q_1 + Q_2(-k)S_0(-k)) + o(1/k^2) \right) S_0(k) \\ &\cdot \left(I_n + \frac{1}{ik}(Q_1 + Q_2(k)S_0(-k)) + o(1/k^2) \right). \end{aligned}$$

Por (3.49), $S(-k) = S(k)^{-1} = S(k)^\dagger$, $S_0(-k)S_0(k) = I_n$, así que:

$$S(k) = S_0(k) + \frac{1}{ik} [Q_1 S_0(k) + S_0(k) Q_1 + Q_2(k) S_0(k) + Q_2(-k) S_0(-k) S_0(k)] + o(1/k^2).$$

Haciendo $H(k) = Q_1 S_0(k) + S_0(k) Q_1 + S_0(k) Q_2(k) S_0(k) + Q_2(-k)$, tenemos que:

$$S(k) = S_0(k) + \frac{H(k)}{ik} + o(1/k^2), \quad k \rightarrow \pm\infty. \quad (5.37)$$

Usando (5.13),

$$S(k) = S_0(\infty) + \frac{G(k)}{ik} + o(1/k^2), \quad k \rightarrow \pm\infty.$$

■

5.3. Estados Ligados

En esta sección comprobaremos que, como se mencionó en la introducción del capítulo, un estado ligado ocurre sólo cuando $k^2 < 0$.

Supongamos que $k = i\kappa$ para alguna $\kappa > 0$ corresponde a un estado ligado, y sea $w(i\kappa, x)$ una solución vector-columna cuadrado-integrable que satisface (3.11). Entonces, la ecuación de $w(k, x)$ es cierta para $k = i\kappa$ con $\eta = 0$ y para algún vector columna distinto de cero $\xi \in \mathbb{C}^n$, lo que nos lleva a que:

$$w(i\kappa, x) = f(i\kappa, x)\xi. \quad (5.38)$$

Veamos que ξ debe pertenecer a $\ker [J(i\kappa)^\dagger]$ porque $w(i\kappa, x)$ debe satisfacer (3.11). Nótese que, de (3.11) y (5.38) tenemos que:

$$-B^\dagger f(i\kappa, 0)\xi + A^\dagger f'(i\kappa, 0)\xi = 0, \quad (5.39)$$

que es equivalente a:

$$[-\phi'(i\kappa, 0)^\dagger f(i\kappa, 0)] + \phi(i\kappa, 0)^\dagger f'(i\kappa, 0)]\xi = 0, \quad (5.40)$$

o, en términos del Wronskiano,

$$[f(i\kappa, x)^\dagger; \phi(i\kappa, x)]^\dagger \xi = 0. \quad (5.41)$$

Comparando (3.49) y (5.41), vemos que la última equivale a :

$$J(i\kappa)^\dagger \xi = 0, \quad (5.42)$$

por lo que $\xi \in \ker [J(i\kappa)^\dagger]$. Así, $\det J(i\kappa) = 0$.

Ahora consideremos cualquier vector-columna de la forma $f(i\kappa, x)\xi$, donde $k = i\kappa$ corresponde al cero de $\det J(k)$ como en el eje positivo imaginario y $\xi \in \mathbb{C}$ es un vector columna distinto de cero tal que $\xi \in \ker [J(i\kappa)^\dagger]$. Entonces, $f(i\kappa, x)\xi$ debe ser una solución vector-columna estado-ligado del operador de Schrödinger correspondiente. Para verificar esto, debemos probar que $f(i\kappa, x)\xi$ es solución de (3.1), que es cuadrado-integrable en $x \in \mathbb{R}^+$, y que satisface la condición a la frontera (3.11)-(3.13). Claramente es solución de (3.1) porque $f(i\kappa, x)$ es una matriz $n \times n$ solución de (3.1). Es cuadrado-integrable porque $f(k, x)$ decae exponencialmente a cero para toda $k \in \mathbb{C}^+$ si $x \rightarrow +\infty$. Finalmente, satisface (3.11) porque:

$$-B^\dagger f(i\kappa, x)\xi + A^\dagger f'(i\kappa, x)\xi = J(i\kappa)^\dagger \xi = 0,$$

por (5.39)-(5.42). La multiplicidad del estado ligado $k = i\kappa$ es igual a la dimensión del kernel de $J(i\kappa)^\dagger$, que es igual a la dimensión del kernel de $J(i\kappa)$.

Veamos ahora que una solución vector-columna estado-ligado en $k = i\kappa$ debe ser de la forma $\phi(i\kappa, x)\alpha$ para algún vector columna constante distinto de cero $\alpha \in \mathbb{C}^n$ que pertenezca al kernel de $J(i\kappa)$ de forma que:

$$\phi(i\kappa, x)\alpha = f(i\kappa, x)\beta, \tag{5.43}$$

donde $\beta \in \ker [J(i\kappa)^\dagger]$. En otras palabras, debemos mostrar que $\phi(i\kappa, x)\alpha$ con $\alpha \in \ker [J(i\kappa)]$ satisface (3.11), es cuadrado-integrable y satisface (5.43) para algún vector columna $\beta \in \ker [J(i\kappa)^\dagger]$. Nótese que (3.11) se satisface porque, por (3.12) y (3.33),

$$-B^\dagger \phi(i\kappa, 0)\alpha + A^\dagger \phi'(i\kappa, 0)\alpha = (-B^\dagger A + A^\dagger B)\alpha = 0.$$

Ahora vemos que $\phi(i\kappa, x)\alpha$ decae exponencialmente a cero si $x \rightarrow +\infty$, y que por lo tanto es cuadrado-integrable en $x \in \mathbb{R}^+$. Como

$$w(k, x) = f(k, x)\xi + g(k, x)\eta, \tag{5.44}$$

vemos que existen n vectores columna constantes $\beta, \gamma \in \mathbb{C}^n$ tales que:

$$\phi(i\kappa, x)\alpha = f(i\kappa, x)\beta + g(i\kappa, x)\gamma, \quad x \in \mathbb{R}^+. \tag{5.45}$$

Usando (5.45) y (3.49), podemos evaluar el Wronskiano:

$$[f(i\kappa, x)^\dagger; \phi(i\kappa, x)]\alpha = J(i\kappa)\alpha = 0, \tag{5.46}$$

porque $\alpha \in \ker [J(i\kappa)]$. Por otro lado, usando (5.45) tenemos que:

$$\begin{aligned} \alpha &= [f(i\kappa, x)^\dagger; f(i\kappa, x)\beta + g(i\kappa, x)\gamma] \\ &= [f(i\kappa, x)^\dagger; f(i\kappa, x)]\beta + [f(i\kappa, x)^\dagger; g(i\kappa, x)]\gamma \\ &= [f(i\kappa, x)^\dagger; g(i\kappa, x)]\gamma \\ &= 2\kappa\gamma, \end{aligned} \tag{5.47}$$

donde usamos (3.25) el hecho de que V es autoadjunto.

Comparando (5.46) y (5.47) vemos que $\gamma = 0$ y por lo tanto (5.43) se satisface para algún vector columna distinto de cero $\beta \in \mathbb{C}^n$. De (5.43), por (3.25), concluimos que $\phi(i\kappa, x)\alpha$ decae exponencialmente a cero si $x \rightarrow +\infty$, por lo que es cuadrado-integrable. Nótese que β debe pertenecer a $\ker [J(i\kappa)^\dagger]$ como resultado del argumento anterior que dice que si $f(i\kappa, x)\beta$ es un estado ligado, entonces β debe pertenecer al kernel de $J(i\kappa)^\dagger$.

Haremos énfasis en que (5.43) establece una biyección $\alpha \mapsto \beta$ entre $\ker [J(i\kappa)]$ y $\ker [J(i\kappa)^\dagger]$ para toda $k = i\kappa$ que sea un cero del determinante de $J(k)$ en el eje positivo imaginario. Como $f(i\kappa, x)\xi$ corresponde a un estado ligado con $\xi \in \ker [J(i\kappa)^\dagger]$, por (3.25) concluimos que hay tantos estados ligados linealmente independientes en $k = i\kappa$ como la dimensión de $\ker [J(i\kappa)^\dagger]$. Como esto también es igual a la dimensión de $\ker [J(i\kappa)]$, podemos decir que la multiplicidad del estado ligado en $k = i\kappa$ está dada por la dimensión de $\ker [J(i\kappa)]$. Sea m_k la multiplicidad de dicho estado. Entonces,

$$m_k = \dim \ker [J(i\kappa)]. \quad (5.48)$$

Nótese que $1 \leq m_k \leq n$ porque la dimensión de $\ker [J(i\kappa)]$ no puede exceder n para la correspondiente matriz $n \times n$ $J(k)$.

A continuación resumiremos estas observaciones.

Teorema 5.8 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Sean $f(k, x)$, $\phi(k, x)$ y $J(k)$ como en (3.25), (3.33) y (3.49). Entonces,*

- a) *Hay un estado ligado en $k = i\kappa$ para alguna $\kappa > 0$ si sólo si $\ker [J(i\kappa)]$ es no trivial o, equivalentemente, si y sólo si $\det J(i\kappa) = 0$.*
- b) *La multiplicidad m_k del estado ligado $k = i\kappa$ es finita, y de hecho es igual a la dimensión de $\ker [J(i\kappa)]$.*
- c) *Una solución estado-ligado vector-columna de (3.1) en $k = i\kappa$ debe ser igual a $f(i\kappa, x)\beta$ para algún vector columna distinto de cero $\beta \in \ker [J(i\kappa)^\dagger]$. De la misma forma, una solución estado-ligado vector-columna de (3.1) en $k = i\kappa$ debe ser igual a $\phi(i\kappa, x)\alpha$ para algún vector-columna distinto de cero $\alpha \in \ker [J(i\kappa)]$.*
- d) *Si $k = i\kappa$ corresponde a un estado ligado, existe una biyección $\alpha \mapsto \beta$ entre $\ker [J(i\kappa)]$ y $\ker [J(i\kappa)^\dagger]$ tal que $\phi(i\kappa, x)\alpha = f(i\kappa, x)\beta$.*

Ahora analizaremos el comportamiento de $J(k)$ y su inversa en un estado ligado $k = i\kappa$. Uno de los objetivos es probar que la multiplicidad m_k de un estado ligado es igual a la multiplicidad del cero del $\det J(k)$ en $k = i\kappa$. La derivada respecto a k estará indicada por un punto arriba.

Proposición 5.9 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Sean $f(k, x)$ y $J(k)$ la solución de Jost y la matriz de Jost que aparecen en (3.25) y (3.49), respectivamente. Supongamos que hay un estado ligado en $k = i\kappa$ para algún κ positivo. Entonces, para cada valor de x fijo en \mathbb{R}^+ , tenemos:*

$$f(-k^*, x)^\dagger|_{k=i\kappa} = f(i\kappa, x), \quad \frac{df(-k^*, x)^\dagger}{dk}|_{k=i\kappa} = -\dot{f}(i\kappa, x)^\dagger, \quad (5.49)$$

$$\frac{df'(-k^*, x)^\dagger}{dk}|_{k=i\kappa} = -\dot{f}'(i\kappa, x)^\dagger, \quad \frac{df''(-k^*, x)^\dagger}{dk}|_{k=i\kappa} = -\dot{f}''(i\kappa, x)^\dagger, \quad (5.50)$$

$$\dot{J}(i\kappa) = \dot{f}'(i\kappa)^\dagger A - \dot{f}(i\kappa, 0)^\dagger B. \quad (5.51)$$

Dem. En la Sección 3.3 vimos que $f(k, x)$ es analítica en $k \in \mathbb{C}^n$ para todo $x \in \mathbb{R}^+$ fijo. Así, tenemos la expansión de Taylor:

$$f(k, x) = f(i\kappa, x) + (k - i\kappa)\dot{f}(i\kappa, x) + o((k - i\kappa)^2), \quad k \rightarrow i\kappa. \quad (5.52)$$

Reemplazando k por $-k^*$ en (5.52) y tomando los adjuntos,

$$f(-k^*, x)^\dagger = f(i\kappa, x)^\dagger - (k - i\kappa)\dot{f}(i\kappa, x)^\dagger + o((k - i\kappa)^2), \quad k \rightarrow i\kappa. \quad (5.53)$$

Los primeros dos términos de la expansión implican que:

$$f(i\kappa, x)^\dagger = f(-k^*, x)^\dagger|_{k=i\kappa} \quad \text{y} \quad -\dot{f}(i\kappa, x)^\dagger = \frac{df(-k^*, x)^\dagger}{dk}|_{k=i\kappa}.$$

Como $f'(k, x)$ y $f''(k, x)$ son analíticas $\forall k \in \mathbb{C}^+$, $\forall x \in \mathbb{R}^+$ fijo,

$$f'(k, x) = f'(i\kappa, x) + (k - i\kappa)\dot{f}'(i\kappa, x) + o((k - i\kappa)^2), \quad k \rightarrow i\kappa.$$

Reemplazando k por $-k^*$ y tomando los adjuntos,

$$\begin{aligned} f'(-k^*, x)^\dagger f'(i\kappa, x)^\dagger - (k - i\kappa)\dot{f}'(i\kappa, x)^\dagger + o((k - i\kappa)^2), \quad k \rightarrow i\kappa \\ \Rightarrow -\dot{f}'(i\kappa, x)^\dagger = \frac{df'(-k^*, x)^\dagger}{dk}|_{k=i\kappa}. \end{aligned}$$

Análogamente,

$$-\dot{f}''(i\kappa, x)^\dagger = \frac{df''(-k^*, x)^\dagger}{dk}|_{k=i\kappa}.$$

Derivando (3.49) respecto a k ,

$$\dot{J}(k) = \frac{df'(-k^*, x)^\dagger}{dk} B - \frac{df'(-k^*, x)^\dagger}{dk} A.$$

Por (5.50),

$$\dot{J}(i\kappa) = \dot{f}'(i\kappa, 0)^\dagger A - \dot{f}(i\kappa, 0)^\dagger B. \quad \blacksquare$$

Teorema 5.10 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Sean $f(k, x)$, $\phi(k, x)$ y $J(k)$ como en (3.25), (3.33) y (3.49). Supongamos que existe $k = i\kappa$ un estado ligado para alguna $\kappa > 0 \forall \alpha \in \ker [J(i\kappa)]$ vector-columna constante, sea β el vector columna constante único del Teorema 5.8 d). Entonces,*

$$i\beta^\dagger \dot{J}(i\kappa)\alpha = 2\kappa \int_0^\infty dx [\phi(i\kappa, x)\alpha]^\dagger [\phi(i\kappa, x)\alpha], \quad (5.54)$$

por lo que $\beta^\dagger \dot{J}(i\kappa)\alpha \neq 0$ a menos que $\alpha = 0$.

Dem. Como la solución de Jost satisface (3.1),

$$f''(k, x) + k^2 f(k, x) = V(x)f(k, x). \quad (5.55)$$

Derivando respecto a k ,

$$\dot{f}''(k, x) + k^2 \dot{f}(k, x) + 2kf(k, x) = V(x)\dot{f}(k, x). \quad (5.56)$$

Reemplazando k por $-k^*$ en (5.55) y tomando el adjunto,

$$f''(-k^*, x)^\dagger + k^2 f(-k^*, x)^\dagger = f(-k^*, x)^\dagger V(x). \quad (5.57)$$

Evaluando (5.56) y (5.57) en $k = i\kappa$ y usando (5.49),

$$\dot{f}''(i\kappa, x) - \kappa^2 \dot{f}(i\kappa, x) + 2i\kappa f(i\kappa, x) = V(x)\dot{f}(i\kappa, x), \quad (5.58)$$

$$f''(i\kappa, x)^\dagger - \kappa^2 f(i\kappa, x)^\dagger = f(i\kappa, x)^\dagger V(x). \quad (5.59)$$

Multiplicando (5.58) por $f(i\kappa, x)^\dagger$ por la izquierda y multiplicando (5.59) por la derecha por $\dot{f}(i\kappa, x)$,

$$f(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}''(i\kappa, x) - f(i\kappa, x)^\dagger \kappa^2 \dot{f}(i\kappa, x) + f(i\kappa, x)^\dagger 2i\kappa f(i\kappa, x) = f(i\kappa, x)^\dagger V(x)\dot{f}(i\kappa, x)$$

$$f''(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}(i\kappa, x) - \kappa^2 f(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}(i\kappa, x) = f(i\kappa, x)^\dagger V(x)\dot{f}(i\kappa, x).$$

Tomando la diferencia,

$$\begin{aligned} f(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}''(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}(i\kappa, x) &= -2i\kappa f(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}(i\kappa, x) \\ \Rightarrow \frac{d}{dx} [f(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}'(i\kappa, x) - f'(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}(i\kappa, x)] &= -2i\kappa f(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}(i\kappa, x) \end{aligned} \quad (5.60)$$

Multiplicando (5.60) por la izquierda por β^\dagger y por la derecha por β , e integrando en $x \in \mathbb{R}^+$, llegamos a que:

$$\begin{aligned} \beta^\dagger \int_0^\infty dx \frac{d}{dx} [f(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}'(i\kappa, x) - f'(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}(i\kappa, x)] \beta &= \\ &= -2i\kappa \beta + \int_0^\infty dx f(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}(i\kappa, x) \beta \\ \Rightarrow \beta^\dagger f(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}'(i\kappa, x) \beta - \beta^\dagger f'(i\kappa, x)^\dagger \dot{f}(i\kappa, x) \beta &= \\ &= -2i\kappa \int_0^\infty dx [f(i\kappa, x)\beta]^\dagger [f(i\kappa, x)\beta], \end{aligned} \quad (5.61)$$

donde se usó el Teorema 5.8 c) junto con el hecho de que $f(i\kappa, x)\beta$ es una solución estado-ligado vector-columna, por lo que es cuadrado-integrable, y además se usó el hecho de que la cantidad dentro de los paréntesis en (5.60) desaparece cuando $x \rightarrow +\infty$. La última propiedad es una consecuencia del decaimiento exponencial a cero de $f(i\kappa, x)\beta$ y de $f'(i\kappa, x)\beta$ y puede ser establecida a partir de (3.25) en $k = i\kappa$. Multiplicando por i y usando (5.43),

$$i[\alpha^\dagger \phi(i\kappa, 0)^\dagger f'(i\kappa, 0)\beta - \alpha^\dagger \phi'(i\kappa, 0)^\dagger f(i\kappa, 0)\beta] = 2\kappa \int_0^\infty dx [\phi(i\kappa, x)\alpha]^\dagger [\phi(i\kappa, x)\alpha] \quad (5.62)$$

Usando (3.33) y tomando los adjuntos,

$$-i\beta^\dagger [f'(i\kappa, 0)^\dagger A - f(i\kappa, 0)0^d a g B]\alpha = 2\kappa \int_0^\infty dx [\phi(i\kappa, x)\alpha]^\dagger [\phi(i\kappa, x)\alpha]. \quad (5.63)$$

Comparando el lado izquierdo con (5.51), obtenemos:

$$-i\beta^\dagger J(i\kappa)\alpha = 2\kappa \int_0^\infty dx [\phi(i\kappa, x)\alpha]^\dagger [\phi(i\kappa, x)\alpha].$$

Finalmente, como $\kappa > 0$, el lado derecho es positivo si $\alpha \neq 0$ y cero si $\alpha = 0$. Así, del lado izquierdo concluimos que $\beta^\dagger \dot{J}(i\kappa)\alpha = 0$ si $\alpha = 0$. ■

Teorema 5.11 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Sean $f(k, x)$, $\phi(k, x)$ y $J(k)$ como en (3.25), (3.33) y (3.49). Supongamos que existe $k = i\kappa$ un estado ligado para alguna $\kappa > 0$. Entonces $J(k)^{-1}$ tiene un polo simple en $k = i\kappa$.*

Dem. Por el Teorema 5.8 a), el determinante de $J(k)$ desaparece en $k = i\kappa$, por lo que $J(k)^{-1}$ es analítico en una vecindad de $k = i\kappa$ con un polo de algún orden finito p en $k = i\kappa$. Si no fuera simple, $\forall p \geq 2$, en alguna vecindad de k tendríamos la expansión:

$$J(k) = J(i\kappa) + (k - i\kappa)\dot{J}(i\kappa) + o((k - i\kappa)^2), \quad (5.64)$$

$$J(k)^{-1} = \frac{N_{-p}}{(k - i\kappa)^p} + \frac{N_{-p+1}}{(k - i\kappa)^{p-1}} + \dots + \frac{N_{-1}}{k - i\kappa} + N_0 + (k - i\kappa)N_1 + o((k - i\kappa)^2). \quad (5.65)$$

Usando (5.64) y (5.65) en $J(k)J(k)^{-1} = I_n$ obtendríamos:

$$J(i\kappa)N_{-p} = 0, \quad J(i\kappa)N_{-p+1} + \dot{J}(i\kappa)N_{-p} = 0. \quad (5.66)$$

De la primera ecuación vemos que cada columna de N_{-p} tendrá que pertenecer a $\ker [J(i\kappa)]$. Tomando todas las columnas distintas de cero de N_{-p} y denotándolas α como en el Teorema 5.10, de (5.66) obtendríamos la ecuación vectorial vector columna:

$$J(i\kappa)\zeta + \dot{J}(i\kappa)\alpha = 0, \quad (5.67)$$

donde $\alpha \in \ker [J(i\kappa)]$ y ζ es algún vector columna en \mathbb{C}^n .

Sea $\beta \in \ker [J(i\kappa)^\dagger]$ el único vector columna correspondiente a α como en el Teorema 5.10. As; tendríamos que $J(i\kappa)^\dagger \beta = 0$ o, equivalentemente,

$$\beta^\dagger J(i\kappa) = 0 \quad (5.68)$$

Si multiplicamos (5.67) por la izquierda por β^\dagger y usando (5.68) obtenemos:

$$\beta^\dagger \dot{J}(i\kappa) \alpha = 0 \quad (5.69)$$

Usando el Teorema 5.10 en (5.69) vemos que debemos tener $\alpha = 0$ y por lo tanto $N_{-p} = 0 \forall p \geq 0$. Es decir, de (5.65) concluimos que $J(k)^{-1}$ debe tener un polo simple en $k = i\kappa$. Es decir,

$$p = 1.$$

■

Una vez que establecimos que la expansión (5.65) tiene sólo un polo simple como

$$J(k)^{-1} = \frac{N_{-1}}{k - i\kappa} + N_0 + (k - i\kappa)N_1 + o((k - i\kappa)^2), \quad k \rightarrow i\kappa, \quad (5.70)$$

nos gustaría ahondar en el término N_{-1} .

Teorema 5.12 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Sea $J(k)$ la matriz de Jost como en (3.49). Supongamos que existe $k = i\kappa$ un estado ligado para alguna $\kappa > 0$. Entonces,*

$$\det J(k) = c_3(k - i\kappa)^{m_\kappa} [1 + O(k - i\kappa)], \quad k \rightarrow i\kappa, \quad (5.71)$$

donde c_3 es una constante diferente de cero y m_κ es el término positivo que aparece en (5.48) y que denota la multiplicidad del estado ligado en $k = i\kappa$. Por consecuencia, el orden del cero del determinante $\det J(k)$ en $k = i\kappa$ es igual a m_κ .

Dem. De (5.48) sabemos que la multiplicidad geométrica del eigenvalor de $J(i\kappa)$ es m_κ .

Supongamos que hay ν_n cadenas de Jordan y, por lo tanto, la forma canónica de Jordan de $J(i\kappa)$ contiene ν_κ bloques de Jordan. Sea λ_s el eigenvalor de $J(i\kappa)$ asociado con la s -ésima cadena de Jordan, donde los eigenvalores pueden ser repetidos y puede haber más de un bloque de Jordan para un eigenvalor λ_s . Sea $J_{n_s}(\lambda_s)$ el s -ésimo bloque de Jordan, donde asumimos que el tamaño del bloque es $n_s \times n_s$. Sin pérdida de generalidad, podemos asumir que las primeras M_κ cadenas de Jordan pertenecen al eigenvalor cero de $J(i\kappa)$. Sea μ_κ la multiplicidad algebraica de ese eigenvalor. Entonces, asumimos que el número de eigenvalores diferentes de cero (incluyendo multiplicidades)

de $J(i\kappa)$ es $n - \mu_\kappa$. Como resultado, los primeros m_κ bloques de Jordan tienen la forma dada por la ecuación (4.71):

$$J_{n_s}(\lambda_s) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad s = 1, \dots, m_\kappa,$$

y los bloques restantes asociados a los eigenvalores diferentes de cero son los establecidos en la ecuación (4.72):

$$J_{n_s}(\lambda_s) = \begin{bmatrix} \lambda_s & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_s & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_s & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda_s \end{bmatrix}, \quad s = m_\kappa + 1, \dots, \nu_\kappa,$$

con entrada en la diagonal $\lambda_s \neq 0$.

Como se estableció en la ecuación (4.70), la forma canónica de Jordan está dada entonces por:

$$S_1^{-1}J(i\kappa)S_1 = \bigoplus_{s=1}^{\nu_\kappa} J_{n_s}(\lambda_s).$$

Ahora moveremos todas las entradas 1 en la superdiagonal de los primeros m_κ bloques de Jordan en (5.72) y las recolectaremos en la matriz identidad $(\mu_\kappa - m_\kappa)(\mu_\kappa - m_\kappa) I_{\mu_\kappa - m_\kappa}$. Esto puede conseguirse usando las matrices P_4 y P_5 :

$$P_4 = \begin{bmatrix} \Pi_4 & 0 \\ 0 & I_{n-\mu_\kappa} \end{bmatrix}, \quad P_5 = \begin{bmatrix} \Pi_5 & 0 \\ 0 & I_{n-\mu_\kappa} \end{bmatrix},$$

para algunas matrices de permutación Π_4 y Π_5 que afecta sólo a las primeras μ_κ columnas y μ_κ renglones, respectivamente, de las matrices en las que operan. La transformación matricial combinada $J(i\kappa) \mapsto P_5 S_1^{-1} J(i\kappa) S_1 P_4$ resulta en la matriz triangular superior dada por:

$$P_5 S_1^{-1} J(i\kappa) S_1 P_4 = \text{diag}\{0_{m_\kappa}, I_{\mu_\kappa - m_\kappa}, I_{n_{\mu_\kappa+1}}(\lambda_{\mu_\kappa+1}), \dots, J_{n_{\nu_\kappa}}(\lambda_{\nu_\kappa})\}, \quad (5.72)$$

donde 0_{m_κ} es la matriz cero $m_\kappa \times m_\kappa$.

Sea d_0 la matriz $(n - \mu_\kappa)(n - \mu_\kappa)$ dada por:

$$d_0 := \text{diag}\{I_{\mu_\kappa - m_\kappa}, J_{n_{\mu_\kappa+1}}(\lambda_{\mu_\kappa+1}), \dots, J_{n_{\nu_\kappa}}(\lambda_{\nu_\kappa})\}. \quad (5.73)$$

La matriz d_0 es invertible porque es una matriz triangular superior cuyas entradas en la diagonal son distintas de cero.

Usando (5.73) en (5.72) vemos que:

$$P_5 S_1^{-1} J(i\kappa) S_1 P_4 = \text{diag}\{0_{m_\kappa}, d_0\}. \quad (5.74)$$

Usando (5.73) y (5.74) vemos que:

$$P_5 S_1^{-1} J(k) S_1 P_4 = \text{diag}\{m_\kappa, d_0\} + (k - i\kappa) \begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{bmatrix} + o((k - i\kappa)^2), \quad k \rightarrow i\kappa, \quad (5.75)$$

donde

$$\begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{bmatrix} = P_5 S_1^{-1} J(i\kappa) S_1 P_4.$$

Del Teorema 5.11 sabemos que $J(k)^{-1}$ tiene un polo simple en $k = i\kappa$, por lo que, usando (5.70), tenemos que:

$$(P_5 S_1^{-1} J(k) S_1 P_4)^{-1} = \frac{1}{k - i\kappa} \begin{bmatrix} n_1 & n_2 \\ n_3 & n_4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} m_1 & m_2 \\ m_3 & m_4 \end{bmatrix} + O(k - i\kappa), \quad k \rightarrow i\kappa, \quad (5.76)$$

donde

$$\begin{bmatrix} n_1 & n_2 \\ n_3 & n_4 \end{bmatrix} := P_4^{-1} S_1^{-1} N_{-1} S_1 P_5^{-1}, \quad \begin{bmatrix} m_1 & m_2 \\ m_3 & m_4 \end{bmatrix} := P_4^{-1} S_1^0 N_{-1} S_1 P_5^{-1},$$

con N_{-1} y N_0 las matrices que aparecen en (5.70), con algunos bloques matriciales n_1 y m_1 de tamaño $m_\kappa \times m_\kappa$, algunos bloques matriciales n_4 y m_4 de tamaño $(n - m_\kappa) \times (n - m_\kappa)$, y los bloques matriciales restantes de tamaño apropiado. Usando (5.75) y (5.76) en las identidades matriciales

$$\begin{cases} (P_5 S_1^{-1} J(k) S_1 P_4)^{-1} (P_5 S_1^{-1} J(k) S_1 P_4) = I_n, \\ (P_5 S_1^{-1} J(k) S_1 P_4) (P_5 S_1^{-1} J(k) S_1 P_4)^{-1} = I_n, \end{cases}$$

obtenemos que:

$$\begin{bmatrix} n_1 & n_2 \\ n_3 & n_4 \end{bmatrix} \text{diag}\{0_{m_\kappa}, d_0\} = 0_n, \quad \text{diag}\{0_{m_\kappa}, d_0\} \begin{bmatrix} n_1 & n_2 \\ n_3 & n_4 \end{bmatrix} = 0, \quad (5.77)$$

$$\begin{bmatrix} n_1 & n_2 \\ n_3 & n_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} m_1 & m_2 \\ m_3 & m_4 \end{bmatrix} \text{diag}\{0_{m_\kappa}, d_0\} = I_n, \quad (5.78)$$

$$\begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_1 & n_2 \\ n_3 & n_4 \end{bmatrix} + \text{diag}\{0_{m_\kappa}, d_0\} \begin{bmatrix} m_1 & m_2 \\ m_3 & m_4 \end{bmatrix} = I_n. \quad (5.79)$$

Como d_0 es invertible, de (5.77) vemos que:

$$n_2 = 0, \quad n_3 = 0, \quad n_4 = 0, \quad (5.80)$$

para algunas matrices de tamaño apropiado.

Usando (5.80) en (5.78) y (5.79) tenemos que:

$$n_1 a_1 = I_{m_\kappa}, \quad n_1 b_1 + m_2 d_0 = 0, \quad m_4 d_0 = I_{n-m_\kappa}, \quad c_1 n_1 + d_0 m_3 = 0,$$

lo que establece la invertibilidad de a_1 e implica que:

$$n_1 = a_1^{-1}, \quad m_2 = -a_1^{-1} b_1 d_0^{-1}, \quad m_4 = d_0^{-1}, \quad m_3 = -d_0^{-1} c_1 a_1^{-1}. \quad (5.81)$$

Usando (5.81) en (5.76) obtenemos la expansión:

$$(P_5 S_1^{-1} J(k) S_1 P_4)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{a_1^{-1} [I_{m_\kappa} + O(k-i\kappa)]}{k-i\kappa} & -a_1^{-1} b_1 d_0^{-1} \\ -d_0^{-1} c_1 a_1^{-1} & d_0^{-1} \end{bmatrix} + O(k-i\kappa), \quad k \rightarrow i\kappa. \quad (5.82)$$

De (5.82) vemos que:

$$\det((P_5 S_1^{-1} J(k) S_1 P_4)^{-1}) = \frac{(\det a_1^{-1})(\det d_0^{-1})}{(k-i\kappa)^{m_\kappa}} [1 + O(k-i\kappa)], \quad k \rightarrow i\kappa,$$

o, de forma equivalente,

$$\det J(k) = \frac{\det a_1 d_0}{\det P_4 P_5} (k-i\kappa)^{m_\kappa} [1 + O(k-i\kappa)], \quad k \rightarrow i\kappa. \quad (5.83)$$

Así (5.83) establece (5.71) con c_3 dada por:

$$c_3 := (\det P_4)(\det P_5)(\det a_1)(\det d_0),$$

que es distinto de cero porque $P_4, P_5 \in \mathbb{M}_{n \times n}$ son permutaciones, por lo que sus determinantes son $+1$ ó -1 , y las matrices a_1 y d_0 son invertibles, por lo que sus determinantes no son cero. ■

Hacemos énfasis en la similitud entre el Teorema 5.12 y el Corolario 4.16 y entre (5.71) y (4.89).

Nótese que la transformación de la Proposición (3.20) a) sobre A y B no afecta (3.11)-(3.13), porque $(A, B) \mapsto (AT, BT)$ para alguna T invertible resulta en una multiplicación por la izquierda de ambos lados de (3.11) por T^\dagger y en una multiplicación por la derecha por T de ambos lados de (3.12) y (3.13). Así, como puede verse en (3.49), el potencial V y la condición a la frontera no pueden determinar unívocamente la matriz de Jost $J(k)$, pero sí determinan $J(k)$ unívocamente excepto por la multiplicación por la derecha de una matriz invertible T . De cualquier forma, esa no-unicidad no afecta los ceros en \mathbb{C}^+ del determinante de $J(k)$ porque $\det J(k)$ y $\det J(k)T$ tienen el mismo conjunto de ceros. Así, los estados ligados no son afectados por la no-unicidad, y están unívocamente determinados por V y la condición a la frontera.

El siguiente resultado es relevante para el establecimiento de la finitud del número de estados ligados.

Teorema 5.13 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Sea $J(k)$ la matriz de Jost definida en (3.49). Entonces, los ceros de $\det J(k)$ en $\mathbb{C}^+ \setminus \{0\}$ sólo pueden ocurrir en el eje positivo imaginario y el número de ceros, N (sin multiplicidades), es finito.*

Dem. Sabemos que $J(k)$ es analítica en \mathbb{C}^+ y continua en $\overline{\mathbb{C}^+}$. Entonces, $\det J(k)$ tiene las mismas propiedades. Como el operador de Schrödinger es autoadjunto, los k -valores de los estados ligados, i.e., los ceros de $\det J(k)$ en $\overline{\mathbb{C}^+} \setminus \{0\}$, pueden ocurrir tanto en el eje real como en el eje positivo imaginario. Además, $J(k)$ es invertible $\forall k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, por lo que esos ceros sólo pueden ocurrir en el eje positivo imaginario. Sea H el conjunto de ceros de $\det J(k)$ en el eje positivo imaginario. Por (5.27), H es un conjunto acotado. Además, (4.89) implica que $\det J(i\zeta) \neq 0$ para $0 < \zeta < \kappa_0$ para alguna $\kappa > 0$. Entonces, $H \subset [i\kappa_0, ik]$ para alguna $k > 0$.

Tenemos que probar que H es finito. Si no fuera finito, como está acotado, H tendría un punto de acumulación en $[i\kappa_0, ik]$. Sin embargo, la analiticidad de $\det J(k)$ en \mathbb{C}^+ requeriría que $\det J(k)$ fuera 0 en \mathbb{C}^+ !

Supongamos que los N ceros distintos de $\det J(k)$ en el eje positivo imaginario ocurren en $k = i\kappa_j$, con $j = 1, \dots, N$. Si no hay estados ligados, entonces $N = 0$. Si sí los hay, $N < \infty$. Sea m_{κ_j} la multiplicidad del estado ligado en $k = i\kappa_j$. Como en (5.48), tenemos que:

$$m_{\kappa_j} = \dim \ker [J(i\kappa_j)],$$

por lo que m_{κ_j} es un entero positivo menor que n . Por los Teoremas 5.8 y 5.13, concluimos que el número de estados ligados incluyendo las multiplicidades, \mathcal{N} , es un número finito dado por:

$$\mathcal{N} := \sum_{j=1}^N m_{\kappa_j}. \quad (5.84)$$

Por el Teorema 5.12 la multiplicidad del cero de $\det J(k)$ en $k = i\kappa$ es la misma que la multiplicidad m_{κ_j} del estado ligado en $\kappa = i\kappa_j$. Entonces, por (5.84) tenemos el siguiente resultado:

Corolario 5.14 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Sea $J(k)$ la matriz de Jost definida en (3.49) y \mathcal{N} como en (5.84). Entonces, \mathcal{N} es igual al número de ceros incluyendo las multiplicidades de $\det J(k) \in \mathbb{C}^+$.*

5.4. Teorema de Levinson

En la siguiente sección relacionaremos \mathcal{N} con el cambio del argumento del determinante de $J(k)$ en el eje positivo real.

En esta sección estableceremos el Teorema de Levinson para el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Lo conseguiremos aplicando el principio del argumento al determinante de $J(k)$ la matriz de Jost de (3.49).

Sea $h(k)$ la función definida como:

$$h(k) := \det S(k). \quad (5.85)$$

La región que usaremos con el principio del argumento es la región cuya frontera es $C_{\epsilon, R}$ y que consiste en cuatro partes dadas por:

$$C_{\epsilon, \mathbb{R}} = (-R, -\epsilon) \cup C_{\epsilon} \cup (\epsilon, R) \cup C_R. \quad (5.86)$$

La primera parte $(-\mathbb{R}, \epsilon)$ es el segmento de línea direccionado en el eje real para algún $0 < \epsilon \leq 1$ y para algún R grande, con la dirección del camino de $-R + i0$ a $-\epsilon + i0$. La segunda parte C_{ϵ} consiste en el semicírculo superior centrado en el origen con radio ϵ y atravesando del punto $-\epsilon + i0$ al punto $\epsilon + i0$. La tercera parte (ϵ, R) es el segmento del eje positivo real direccionado de $\epsilon + i0$ a $R + i0$. La cuarta parte C_R es el semicírculo superior centrado en el origen con radio R atravesado del punto $R + i0$ al punto $-R + i0$. La analiticidad de $h(k)$ en esta región y su continuidad en la clausura de la región se sigue por el Teorema 4.15 a). Al escoger R lo suficientemente grande y ϵ lo suficientemente chico, por el Teorema 5.13 sabemos que los únicos ceros de $h(k)$ en esta región pueden ocurrir en el eje positivo imaginario en \mathcal{N} puntos distintos $k = i\kappa_j$ para alguna $\mathcal{N} \in \mathbb{Z}^+ \cup \{0\}$ y que $h(k)$ no se anula en la frontera.

Sea $\arg [h(k)]$ el cambio en el argumento de $h(k)$ a lo largo del camino C .

Proposición 5.15 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Sean $J(k)$ y $S(k)$ las matrices de Jost y de dispersión definidas en (3.49) y en (3.52), respectivamente. Entonces el cambio en el argumento de $\det S(k)$ a lo largo del camino direccionado (ϵ, R) y el cambio en el argumento de $\det J(k)$ a lo largo de los caminos direccionados $(-R, -\epsilon)$ y (ϵ, R) están relacionados entre ellos como:*

$$\arg [\det S(k)]|_{(\epsilon, R)} = -\arg [\det J(k)]|_{(\epsilon, R)} - \arg [\det J(k)]|_{(-R, -\epsilon)}. \quad (5.87)$$

Dem. De (3.52) tenemos que:

$$\det S(k) = (-1)^n \frac{\det J(-k)}{\det J(k)}, \quad k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}. \quad (5.88)$$

Por otra parte tenemos que $|\det S(k)| = 1$ y por consiguiente

$$\det S(k) = e^{i \arg [\det S(k)]}, \quad k \in (\epsilon, R), \quad (5.89)$$

$$|\det J(-k)| = |\det J(k)|, \quad k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}. \quad (5.90)$$

Por el Teorema 4.15 c), tenemos que $|\det J(k)| \neq 0 \forall k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, así que a partir de (5.90) llegamos a que:

$$\det J(k) = |\det J(k)| e^{i \arg [\det J(k)]}, \quad k \in (\epsilon, R), \quad (5.91)$$

$$\det J(-k) = |\det J(k)| e^{i \arg [\det J(-k)]}, \quad k \in (\epsilon, R). \quad (5.92)$$

Usando (5.89), (5.91) y (5.92) en (5.88) obtenemos:

$$e^{i \arg [\det S(k)]} = (-1)^n e^{i \arg [\det J(-k)]} e^{-i \arg [\det J(k)]}, \quad k \in (\epsilon, R).$$

Sacando el logaritmo y dividiendo entre i ,

$$\arg [\det S(k)]|_{(\epsilon, R)} = - \arg [\det J(k)]|_{(\epsilon, R)} - \arg [\det J(k)]|_{(-R, -\epsilon)}.$$

■

En la siguiente proposición se da el cambio en el argumento de $h(k)$ a lo largo de las partes del camino de (5.86).

Proposición 5.16 *Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. Entonces, la función $h(k)$ definida en (5.85) satisface la relación:*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{C_{\epsilon, R}} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = 2\pi i \mathcal{N}, \quad (5.93)$$

$$\lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{C_R} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = \pi i (n_M + n_N), \quad (5.94)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{C_\epsilon} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = -\pi i \mu, \quad (5.95)$$

$$\int_{(-R, -\epsilon) \cup (\epsilon, R)} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = i(\arg [h(k)]|_{(\epsilon, R)} + \arg [h(k)]|_{(-R, -\epsilon)}), \quad (5.96)$$

donde \mathcal{N} es el entero no negativo de (5.84), los caminos $C_{\epsilon, R}$, C_ϵ y C_R son los de (5.86), n_M y n_N son los enteros no negativos definidos después de (3.67), y μ es la multiplicidad (algebraica y geométrica) del eigenvalor $+1$ de la matriz de dispersión para la energía cero $S(0)$, con $S(k)$ la matriz de dispersión de (3.52).

Dem. Por el Corolario 5.14, el número de estados ligados (incluyendo multiplicidades) \mathcal{N} es igual al número de ceros de $\det J(k)$ (incluyendo multiplicidades) en \mathbb{C}^+ .

Aplicando el principio del argumento a $h(k)$ a lo largo de $C_{\epsilon,R}$ y considerando que \mathcal{N} es el número de ceros de $h(k)$ dentro de $C_{\epsilon,R}$,

$$\int_{C_{(\epsilon,R)}} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = 2\pi i \mathcal{N}.$$

$$\text{i.e., } \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{C_{\epsilon,R}} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = 2\pi i \mathcal{N}.$$

Ahora partiremos de (5.32)

$$\begin{aligned} h(k) &= c_2 k^{n_M+n_N} [1 + o(1/k)], \quad k \rightarrow \infty \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}. \\ \Rightarrow \dot{h}(k) &= c_2 (n_M + n_N) k^{n_M+n_N-1} [1 + o(1/k^2)], \quad k \rightarrow \infty \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}. \end{aligned}$$

Así que, cuando $k \rightarrow \infty$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,

$$\int_{C_R} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = \int_{C_R} dk \frac{2(n_M + n_N) k^{n_M+n_N-1}}{c_2 k^{n_M+n_N}} = (n_M + n_N) \int_{C_R} \frac{dk}{k},$$

donde

$$\int_{C_R} \frac{dk}{k} = \int_{\gamma} dk f(k) = \int_0^{\pi} dt f(Re^{it}) Ri e^{it} = Ri \int_0^{\pi} dt \frac{1}{R} e^{-it} e^{it} = \pi i$$

, con $\gamma(t) = Re^{it}$, $t \in [0, \pi]$, en el sentido opuesto al del reloj. Es decir, si $k \rightarrow \infty$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,

$$\int_{C_R} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = \pi i (n_M + n_N),$$

$$\lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{C_R} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = \pi i (n_M + n_N).$$

Partiendo de (4.89),

$$\begin{aligned} h(k) &= c_1 k^{\mu} [1 + o(1)], \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}, \\ \Rightarrow \dot{h}(k) &= c_1 \mu k^{\mu-1} [1], \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}. \end{aligned}$$

Así que, si $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,

$$\int_{C_{\epsilon}} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = \int_{C_{\epsilon}} dk \frac{\mu c_1 k^{\mu-1}}{c_1 k^{\mu}} = \mu \int_{C_{\epsilon}} \frac{dk}{k},$$

donde

$$\int_{C_{\epsilon}} \frac{dk}{k} = - \int_{\gamma} dk f(k) = - \int_0^{\pi} dt f(\epsilon e^{it}) \epsilon i e^{it} = -\epsilon i \int_0^{\pi} dt \frac{1}{\epsilon} e^{-it} e^{it} = -\pi i,$$

con $\gamma(t) = \epsilon e^{it}$, $t \in [0, \pi]$, en el sentido opuesto al del reloj. Es decir, si $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$,

$$\int_{C_\epsilon} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = -\pi i \mu,$$

$$\text{i.e., } \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{C_\epsilon} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = -\pi i \mu.$$

Finalmente, usando (5.90) $|h(-k)| = |h(k)|$,

$$\int_{(-R, -\epsilon) \cup (\epsilon, R)} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = \int_{(-R, -\epsilon)} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} + \int_{(\epsilon, R)} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)},$$

donde

$$\begin{aligned} \rightarrow \int_{(-R, -\epsilon)} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} &= \int_{(-R, -\epsilon)} dk \frac{|h(k)| e^{i \arg [h(k)]}}{|h(k)| e^{i \arg [h(k)]}} i \frac{\partial \arg [h(k)]}{\partial k} \\ &= i \int_{(-R, -\epsilon)} \partial \arg [h(k)] = i \arg [h(k)] \Big|_{-R, -\epsilon}. \\ \rightarrow \int_{(\epsilon, R)} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} &= \int_{(\epsilon, R)} dk i \frac{\partial \arg [h(k)]}{\partial k} = i \int_{(\epsilon, R)} \partial \arg [h(k)] = i \arg [h(k)] \Big|_{(\epsilon, R)}. \end{aligned}$$

Es decir,

$$\int_{(-R, -\epsilon) \cup (\epsilon, R)} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} = i(\arg [h(k)] \Big|_{(\epsilon, R)} + \arg [h(k)] \Big|_{(-R, -\epsilon)}).$$

■

Ahora enunciaremos el Teorema de Levinson.

Teorema 5.17 Teorema de Levinson

Sea el operador matricial autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13) y el potencial V tal que satisface (3.2) y es autoadjunto. El número \mathcal{N} de estados ligados (incluyendo multiplicidades) que aparece en (5.84) está relacionado con el argumento del determinante de la matriz de dispersión $S(k)$ definida en (3.52) como:

$$\arg [\det S(0^+)] - \arg [\det S(+\infty)] = \pi(2\mathcal{N} + \mu - n_M - n_N). \quad (5.97)$$

Dem. Por la ecuación 4.86, el determinante de $S(k)$ es continuo en \mathbb{R} , por lo que el lado izquierdo de (5.97) está dado por:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \lim_{R \rightarrow +\infty} \left(\arg [\det S(k)] \Big|_{(\epsilon, R)} \right) = -\arg [\det S(0^+)] \arg [\det S(+\infty)]. \quad (5.98)$$

Combinando los resultados de (5.94)-(5.96) y usando (5.87) y (5.98), evaluamos la suma de las integrales de (5.94)-(5.96) cuando $\epsilon \rightarrow 0^+$ y $R \rightarrow +\infty$. Es decir,

$$\begin{aligned}
 \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \lim_{R \rightarrow +\infty} \left(\arg [\det S(k)]|_{(\epsilon, R)} \right) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \lim_{R \rightarrow +\infty} \left(\arg [h(k)]|_{(\epsilon, R)} + \arg [h(k)]|_{(-R, -\epsilon)} \right) \\
 &= \frac{1}{i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{(-R, -\epsilon) \cup (\epsilon, R)} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} \\
 &= \frac{1}{i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{C_{\epsilon, R} \setminus \{C_\epsilon \cup C_R\}} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} \\
 &= \frac{1}{i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \lim_{R \rightarrow +\infty} \left[\int_{C_{\epsilon, R}} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} - \int_{C_\epsilon} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} - \int_{C_R} dk \frac{\dot{h}(k)}{h(k)} \right] \\
 &= \frac{1}{i} [2\pi i \mathcal{N} + \pi i \mu - \pi i (n_M + n_N)] \\
 &= \pi (2\mathcal{N} + \mu - n_M - n_N).
 \end{aligned}$$

Relacionándolo con (5.98),

$$\arg [\det S(0^+)] - \arg [\det S(+\infty)] = \pi (2\mathcal{N} + \mu - n_M - n_N).$$

■

En nuestro análisis del operador autoadjunto de Schrödinger con la condición a la frontera (3.11)-(3.13), el Hamiltoniano sin perturbar se escogió para satisfacer la condición a la frontera de Neumann. Esa decisión es compatible con la derivación dependiente del tiempo de la matriz de dispersión y es motivada por su aplicación a los cables cuánticos. Una consecuencia de esa decisión es aparente en los límites de k -grandes de $S(k)$. Como puede verse en (5.10), (5.13) y (5.35), $S(k) = S(\infty) + O(1/k)$ cuando $k \rightarrow \pm\infty$, con

$$S(\infty) = M \text{diag}\{I_{n_M}, -I_{n_D}, I_{n_N}\} M^\dagger, \quad (5.99)$$

donde M es la matriz unitaria que aparece en (3.75). Como consecuencia de la última ecuación, el argumento del determinante de $S(k)$ cuando $k \rightarrow +\infty$ está dado por:

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \arg [\det S(k)] = \arg [\det S(\infty)] = (-1)^{n_D} \pi + 2\pi j, \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Se puede escoger una rama con $\arg [\det S(k(\infty))] = 0$ si n_D es par y una rama con $\arg [\det S(k(\infty))] = \pi$ si n_D es impar. Así, el caso puro de Dirichlet, i.e., cuando $n_M = n_N = 0$ y $n_D = n$, de (5.99) se obtiene $S(k) = -I_n + o(1/k)$, $k \rightarrow \pm\infty$. Por otro lado, cuando se trata con el caso de Dirichlet en la literatura, se escoge el Hamiltoniano no perturbado para satisfacer la condición a la frontera de Dirichlet, lo que lleva a $S(k) = I_n + o(1/k)$, $k \rightarrow \pm\infty$. Por lo tanto, también es necesario usar la rama particular de la función argumento para $\det S(k)$ de forma que ese argumento sea cero en $k = +\infty$. De hecho, en ese caso,

$$\det S(k) = e^{2i\delta_S(k)}, \quad k \in (0, +\infty),$$

con $\delta_S(+\infty) = 0$. Luego, en ese caso el Teorema de Levinson está dado por

$$\delta_S(0^+) = \pi \left(\mathcal{N} + \frac{\mu}{2} \right). \quad (5.100)$$

En el caso particular escalar se tiene (5.100) con $\mu = 1$ en el caso excepcional y $\mu = 0$ en el caso genérico.

Capítulo 6

Análisis del operador de Schrödinger para bajas energías II

En esta sección se enuncian los principales resultados de [3].

6.1. Soluciones matriciales II

En esta sección ahondaremos en las propiedades de las soluciones $f(k, x)$ de la ecuación (3.1).

Proposición 6.1 *Supongamos que el potencial V es autoadjunto y que pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$, y sea $f(k, x)$ la solución de Jost. Entonces:*

- a) *Para cada $x \in [0, +\infty]$ fija, las cantidades $f(k, x)$ y $f'(k, x)$ son analíticas en $k \in \mathbb{C}^+$, continuas en $k \in \overline{\mathbb{C}^+}$ y se tiene que:*

$$f(k, x) = f(0, x) + k\dot{f}(0, x) + o(k), \quad k \rightarrow 0 \in \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (6.1)$$

$$f'(k, x) = f'(0, x) + kf'(0, x) + o(k), \quad k \rightarrow 0 \in \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (6.2)$$

donde el punto denota la derivada respecto a k .

- b) *Para cada $k \in \overline{\mathbb{C}^+}$ fija, las funciones evaluadas matriciales $f(k, x)$, $f'(k, x)$, $\dot{f}(k, x)$ y $\dot{f}'(k, x)$ son continuas en $x \in [0, +\infty]$.*

- c) *Para cada $k \in \overline{\mathbb{C}^+} \setminus \{0\}$, las asíntotas espaciales de la ecuación (3.25) pueden ser reemplazadas por las estimaciones:*

$$f(\bar{k}, x) = e^{ikx} I_n \left[1 + o\left(\frac{1}{x^2}\right) \right], \quad f'(k, x) = ike^{ikx} I_n \left[1 + o\left(\frac{1}{x^2}\right) \right], \quad x \rightarrow +\infty, \quad (6.3)$$

como resultado del hecho de que $V \in L_2^1(\mathbb{R}^+)$.

d) Para cada $a \in [0, +\infty]$ para la cual la matriz $f(0, a)$ es invertible, la matriz $f(k, a)^{-1}$ existe cuando k está en la vecindad de $k = 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$ y se tiene que:

$$f(k, a)^{-1} = f(0, a)^{-1} - kf(0, a)^{-1}\dot{f}(0, a)f(0, a)^{-1} + o(k), \quad k \in \overline{\mathbb{C}^+}. \quad (6.4)$$

Para cada $a \in [0, +\infty]$ para la cual la matriz $f'(0, a)$ es invertible, la matriz $f'(k, a)^{-1}$ existe cuando k está en la vecindad de $k = 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$ y se tiene que, mientras $k \rightarrow 0$:

$$f'(k, a)^{-1} = f'(0, a)^{-1} - kf'(0, a)^{-1}\dot{f}'(0, a)f'(0, a)^{-1} + o(k). \quad (6.5)$$

La matriz $n \times n$ valuada para la energía cero de la ecuación de Schrödinger dada en $-\psi'' + V(x)\psi = 0$, $x \in \mathbb{R}^+$, tiene dos [3] soluciones matriciales $n \times n$ linealmente independientes, una de las cuales está aceptada y la otra no. Como se verá en la siguiente proposición, una solución acotada a la ecuación anterior está dada por $f(0, x)$ y la solución no acotada está dada por $\dot{f}(0, x)$ [3]. Además, las $2n$ columnas de $f(0, x)$ y $\dot{f}(0, x)$ forman soluciones vector-valuadas $n \times 1$ linealmente independientes.

Proposición 6.2 *Supongamos que el potencial V es autoadjunto y que pertenece a $L^1_2(\mathbb{R}^+)$, y sea $f(k, x)$ la solución de Jost correspondiente que aparece en (3.25). Entonces:*

a) La solución de Jost $f(0, x)$ correspondiente a la energía cero que aparecen en (3.29) es una solución acotada de (3.31), y de hecho satisface las asíntotas espaciales más pulidas:

$$f(0, x) = I_n \left[1 + o\left(\frac{1}{x}\right) \right], \quad f'(0, x) = o\left(\frac{1}{x^2}\right), \quad x \rightarrow +\infty. \quad (6.6)$$

b) Se tiene que $f(0, x) - I_n \in L^1(\mathbb{R}^+)$ bajo la suposición más débil de que $V \in L^1_1(\mathbb{R}^+)$.

c) Para cada $x \in \mathbb{R}^+$ fija, se tiene que:

$$\int_x^\infty V(y)f(0, x)dy = -f'(0, x), \quad (6.7)$$

$$\int_x^\infty yV(y)f(0, y)dy = -I_n + f(0, x) - xf'(0, x), \quad (6.8)$$

$$\int_x^\infty y^2V(y)f(0, y)dy = -x^2f'(0, x) + 2x[f(0, x) - I_n] + 2 \int_x^\infty [f(0, y) - I_n]dy. \quad (6.9)$$

d) La cantidad $\dot{f}(0, x)$ es una solución no acotada de (3.31) y satisface las asíntotas espaciales:

$$\dot{f}(0, x) = ixI_n \left[1 + \left(\frac{1}{x}\right) \right], \quad \dot{f}'(0, x) = iI_n [1 + o(1/x)], \quad x \rightarrow +\infty. \quad (6.10)$$

e) Para cada $x \in \mathbb{R}^+$, tenemos:

$$\begin{bmatrix} f(0, x) & \dot{f}(0, x) \\ f'(0, x) & \dot{f}'(0, x) \end{bmatrix}^{-1} = i \begin{bmatrix} \dot{f}'(0, x)^\dagger & -\dot{f}(0, x)^\dagger \\ f'(0, x)^\dagger & -f(0, x)^\dagger \end{bmatrix}. \quad (6.11)$$

De forma similar a (A19) de [3], podemos ver que $w(k, x)$ definida en (3.40) y (4.5) satisface que:

$$w(k, x) = w(0, x) + ik^2 f(0, x) \int_a^x \dot{f}(0, y)^\dagger w(k, y) dy + ik^2 \dot{f}(0, x) \int_a^x f(0, y)^\dagger w(k, y) dy. \quad (6.12)$$

Nótese que, con la ayuda de (3.25) y (5.7), puede verificarse directamente que el lado derecho de (6.12) satisface (3.1) y (3.40).

Escribamos (6.12) como:

$$w(k, x) = w(0, x) + ik^2 w_1(x) + ik^2 w_2(k, x), \quad (6.13)$$

donde se definieron:

$$w_1(x) := f(0, x) \int_a^x \dot{f}(0, y)^\dagger w(0, y) dy + \dot{f}(0, x) \int_a^x f(0, y)^\dagger w(0, y) dy, \quad (6.14)$$

$$w_2(k, x) := f(0, x) \int_a^x \dot{f}(0, y)^\dagger [w(k, y) - w(0, y)] dy + \dot{f}(0, x) \int_a^x f(0, y)^\dagger [w(k, y) - w(0, y)] dy. \quad (6.15)$$

Algunas propiedades relevantes de $w(k, x)$ se presentan en la siguiente proposición.

Proposición 6.3 *Supongamos que V de (3.1) es autoadjunto, y sea $w(k, x)$ la solución a (3.1) que aparece en (3.40). Entonces:*

a) *Cuando V pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$, para cada $x \in \mathbb{R}^+$ fija las cantidades $w(k, x)$ y $w'(k, x)$ son enteras en k , y se tiene que:*

$$w(0, x) = f(0, x), \quad x \in \mathbb{R}^+, \quad (6.16)$$

$$\|w(k, x) - w(0, x)\| \leq c \left(\frac{|k|(x-a)}{1+|k|(x-a)} \right)^2 e^{(Im[k])(x-a)}, \quad k \in \overline{\mathbb{C}^+}, \quad x \geq a, \quad (6.17)$$

donde c es una constante genérica.

b) *Cuando V pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$, la cantidad $w_2(k, x)$ definida en (6.15) satisface:*

$$\|w_2(k, x)\| \leq c(1+x^2) \left(\frac{|k|x}{1+|k|x} \right)^2 e^{(Im[k])(x-a)}, \quad k \in \overline{\mathbb{C}^+}, \quad x \geq a. \quad (6.18)$$

c) Cuando V pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$, la cantidad $w_2(k, x)$ definida en (6.15) satisface:

$$\int_a^\infty e^{ikx} V(x) w_2(k, x) dx = o(1), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}. \quad (6.19)$$

d) Cuando V pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$, la cantidad $w_1(k, x)$ definida en (6.14) satisface:

$$\|w_1(x)\| \leq c(1 + x^2), \quad x \in \mathbb{R}^+, \quad (6.20)$$

$$\int_a^\infty [e^{ikx} - 1] V(x) w_1(x) dx = o(1), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (6.21)$$

$$\int_a^\infty V(x) w_1(x) dx = i \int_a^\infty [f(0, x)^\dagger f(0, x) - I_n] dx - i \int_a^\infty [f(0, x) - I_n] dx. \quad (6.22)$$

Ahora introduciremos la solución de (3.1) matricial $n \times n$ valuada $\phi(k, x)$ que satisface las condiciones iniciales de (3.33). Algunas de sus propiedades relevantes están resumidas en la siguiente proposición.

Proposición 6.4 *Supongamos que el potencial V es autoadjunto y pertenece a $L_1^1(\mathbb{R}^+)$, y sea $\phi(k, x)$ la solución que corresponde a (3.1) que aparece en (3.33). Entonces:*

a) Para cada $x \in [0, +\infty)$ fija, las cantidades $\phi(k, x)$ y $\phi'(k, x)$ son enteras en $k \in \mathbb{C}$.

b) Para cada $x \in [0, +\infty)$, se tiene que:

$$\phi(k, x) = \phi(0, x) + O(k^2), \quad \phi'(k, x) = \phi'(0, x) + O(k^2), \quad k \rightarrow 0 \text{ in } \mathbb{C}. \quad (6.23)$$

6.2. Comportamiento de k -chica II

Como en la ecuación (4.26) del capítulo anterior, definiremos en términos del Wronskiano a $P(k)$, que además satisface la ecuación (4.27). En el siguiente teorema se establecen algunas propiedades relevantes de $P(k)$ necesarias para determinar las asíntotas para k -chica de la matriz de Jost $J(k)$.

Teorema 6.5 *Supongamos que el potencial V es autoadjunto y que pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$, y sea $f(k, x)$ la solución de Jost de (3.1) que satisface (3.25). Entonces, la matriz $P(k)$ dada en (4.27) es analítica en \mathbb{C}^+ , continua en $\overline{\mathbb{C}^+}$ y satisface:*

$$P(k) = ikI_n + k^2 \left(-aI_n + \int_a^\infty [f(0, y)^\dagger f(0, y) - I_n] dy \right) + o(k^2), \quad k \rightarrow 0 \text{ in } \overline{\mathbb{C}^+}. \quad (6.24)$$

Una consecuencia importante de (6.24) es el teorema siguiente.

Teorema 6.6 *Supongamos que el potencial V es autoadjunto y pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$. Sea $f(k, x)$ la solución de Jost de (3.1) que aparece en (3.25). En cualquier $x \in \mathbb{R}^+$ para el que la matriz $f(0, x)$ es invertible, la matriz $f'(k, x)f(k, x)^{-1}$ es dos veces diferenciable en $k = 0$ y se tiene que:*

$$\begin{aligned} f'(k, x)f(k, x)^{-1} &= f'(0, x)f(0, x)^{-1} + ik[f(0, x)^{-1}]^\dagger f(0, x)^{-1} \\ &+ k^2[f(0, x)^{-1}]^\dagger q_1(x)f(0, x)^{-1} + o(k^2), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}, \end{aligned} \quad (6.25)$$

donde se definió:

$$q_1(x) := -xI_n - if(0, x)^{-1}\dot{f}(0, x) + \int_x^\infty [f(0, y)^\dagger f(0, y) - I_n]dy. \quad (6.26)$$

En cualquier $x \in \mathbb{R}^+$ para la que la matriz $f'(0, x)$ sea invertible, la matriz $f(k, x)f'(k, x)^{-1}$ es dos veces diferenciable en $k = 0$ y se tiene que:

$$\begin{aligned} f(k, x)f'(k, x)^{-1} &= f(0, x)f'(0, x)^{-1} - ik[f'(0, x)^{-1}]^\dagger f'(0, x)^{-1} \\ &+ k^2[f'(0, x)^{-1}]^\dagger q_2(x)f'(0, x)^{-1} + o(k^2), \quad k \rightarrow 0 \text{ en } \overline{\mathbb{C}^+}, \end{aligned} \quad (6.27)$$

donde se definió:

$$q_2(x) := xI_n + if'(0, x)^{-1}\dot{f}'(0, x) - \int_x^\infty [f(0, y)^\dagger f(0, y) - I_n]dy.$$

Los resultados de (6.25) y (6.27) son muy importantes porque las expansiones explícitas están dadas hasta $o(k^2)$, mientras que las expansiones de $f(k, x)$ y de $f'(k, x)$ de (6.1) y (6.2) sólo pueden obtenerse hasta $o(k)$. Aunque las ecuaciones (6.1) y (6.2) no pueden mejorarse porque la existencia de $\dot{f}(0, x)$ o de $\dot{f}'(0, x)$ no están garantizadas cuando $V \in L_2^1(\mathbb{R}^+)$, todavía tenemos las expansiones de (6.25) y (6.27) hasta $o(k^2)$.

En el caso escalar, cuando $n = 1$ en (3.1), el hecho de que el potencial V sea autoadjunto lo obliga a ser una función escalar real-valuada, como resultado de que $f(0, x)$ y $f'(0, x)$ también se vuelven real-valuadas. Entonces, de (6.25) y (6.27) se obtienen las expansiones respectivas cuando $k \rightarrow 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$:

$$\begin{aligned} \frac{f'(k, x)}{f(k, x)} &= \frac{f'(0, x)}{f(0, x)} + \frac{ik}{f(0, x)^2} \\ &+ k^2 \left[-\frac{i\dot{f}(0, x)}{f(0, x)^3} - \frac{x}{f(0, x)^2} + \frac{\int_x^\infty [f(0, y)^2 - 1]dy}{f(0, x)^2} \right] + o(k^2), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{f(k, x)}{f'(k, x)} &= \frac{f(0, x)}{f'(0, x)} - \frac{ik}{f'(0, x)^2} \\ &+ k^2 \left[\frac{i\dot{f}'(0, x)}{f'(0, x)^3} - \frac{x}{f'(0, x)^2} + \frac{\int_x^\infty [f(0, y)^2 - 1]dy}{f'(0, x)^2} \right] + o(k^2). \end{aligned}$$

Recordemos que, en el caso escalar, $f(0, x)$ y $f'(0, x)$ no pueden ser cero simultáneamente en el mismo valor de x porque eso implicaría que un problema con valor inicial para (3.31) en el intervalo $(x, +\infty)$ sólo tendría la solución cero $f(0, x) = 0$, contradiciendo (3.29).

6.2.1. Comportamiento de k -chica para el caso genérico

El interés de esta sección es analizar el comportamiento de las matrices $J(k)$ y $J(k)-1$ en la vecindad de $k = 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$ y el comportamiento de la matriz $S(k)$ en la vecindad de $k = 0$ en \mathbb{R} cuando el potencial de (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$. Hay dos casos a considerar: El caso genérico cuando $J(0)$ es invertible y el excepcional, cuando $J(0)$ no es invertible.

Teorema 6.7 *Supongamos que el potencial V es autoadjunto y pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$, y sean $f(k, x)$ la solución de Jost que aparece en (3.25) y $J(k)$ la matriz de Jost asociada. Entonces:*

a) *La matriz de Jost es diferenciable en $k = 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$ y se tiene que:*

$$J(k) = J(0) + k\dot{J}(0) + o(k), \quad k \rightarrow \text{in } \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (6.28)$$

donde

$$J(0) = f(0, 0)^\dagger B - f'(0, 0)^\dagger A, \quad (6.29)$$

$$\dot{J}(0) = \dot{f}'(0, 0)^\dagger A - \dot{f}(0, 0)^\dagger B, \quad (6.30)$$

donde A y B son las matrices constantes que satisfacen la ecuación $-B^\dagger\psi(0) + A^\dagger\psi'(0) = 0$.

b) *Si $J(0)$ es invertible, la inversa de la matriz de Jost es diferenciable en $k = 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$ y se tiene que:*

$$J(k)^{-1} = J(0)^{-1} - kJ(0)^{-1}\dot{J}(0)J(0)^{-1} + o(k), \quad k \rightarrow \text{in } \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (6.31)$$

con $J(0)$ y $\dot{J}(0)$ dadas como en (6.29) y (6.30), respectivamente.

c) *Si $J(0)$ es invertible, la matriz de dispersión $S(k)$ es diferenciable en $k = 0$ en \mathbb{R} y se tiene que:*

$$S(k) = -I_n + 2k\dot{J}(0)J(0)^{-1} + o(k), \quad k \rightarrow \text{in } \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (6.32)$$

con $J(0)$ y $\dot{J}(0)$ como en (6.29) y (6.30), respectivamente.

Nótese que el teorema 6.7 a) es válido tanto para el caso genérico como para el excepcional, porque no se necesita que $J(0)$ sea invertible. Además, los coeficientes en las expansiones de (6.28), (6.31) y (6.32) pueden construirse a partir del conocimiento del potencial V y las matrices constantes A y B . Esto es porque $f(0, x)$ y $\dot{f}(0, x)$ pueden obtenerse al resolver (3.31) con las condiciones asintóticas correspondientes (6.6) y (6.10), por lo que se obtienen directamente las matrices constantes $f(0, 0)$ y $\dot{f}(0, 0)$, y a través de diferenciación se obtienen las matrices constantes $f'(0, 0)$ y $\dot{f}'(0, 0)$. Así, tenemos todas las partes necesarias para determinar los coeficientes de expansión de (6.28), (6.31) y (6.32).

6.2.2. Invertibilidad de la matriz relacionada \mathcal{J}

Sea $K(k)$ la matriz de Jost de (3.1) cuando las matrices constantes A y B son reemplazadas con $-B$ y A , respectivamente. Usando (6.29) y (6.30) se tiene que:

$$K(0) = f(0, 0)^\dagger A + f'(0, 0)^\dagger B, \quad (6.33)$$

$$\dot{K}(0) = -\dot{f}(0, 0)^\dagger A - \dot{f}'(0, 0)^\dagger B. \quad (6.34)$$

Definamos la matriz $2n \times 2n$ \mathcal{J} como:

$$\mathcal{J} := \begin{bmatrix} J(0) & K(0) \\ \dot{J}(0) & \dot{K}(0) \end{bmatrix}. \quad (6.35)$$

El siguiente resultado muestra que \mathcal{J} siempre es invertible, aún cuando $J(0)$ no lo es.

Teorema 6.8 *Supongamos que el potencial V es autoadjunto y pertenece a $L^1_2(\mathbb{R}^+)$. Entonces, la matriz \mathcal{J} siempre es invertible y su inversa está dada por:*

$$\mathcal{J}^{-1} = \begin{bmatrix} i(A^\dagger A + B^\dagger B)^{-1} \dot{K}(0)^\dagger & i(A^\dagger A + B^\dagger B)^{-1} K(0)^\dagger \\ -i(A^\dagger A + B^\dagger B)^{-1} \dot{J}(0)^\dagger & -i(A^\dagger A + B^\dagger B)^{-1} J(0)^\dagger \end{bmatrix}. \quad (6.36)$$

6.3. Análisis para k -chica de $J(k)^{-1}$ y $S(k)$ en el caso excepcional

Proposición 6.9 *Supongamos que V de (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L^1_1(\mathbb{R}^+)$. Sean $f(k, x)$, $w(k, x)$ y $\phi(k, x)$ las soluciones de (3.1). Entonces, la matriz de Jost puede escribirse como:*

$$J(k) = T_1(k) + T_2(k), \quad k \in \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (6.37)$$

donde se definieron:

$$T_1(k) := -P(-k^*)^\dagger f(0, a)^{-1} \phi(k, a), \quad (6.38)$$

$$T_2(k) := f(-k^*, a)^\dagger [f(0, a)^{-1}]^\dagger [w(-k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)], \quad (6.39)$$

con $P(k)$ la matriz definida en el Wronskiano y a la constante no negativa de (3.40).

Proposición 6.10 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces, el Wronskiano que aparece en (6.39) tiene las asíntotas para k -pequeñas*

$$[w(-k^*, x)^\dagger; \phi(k, x)] = J(0) + ik^2[w_1'(0)^\dagger A - w_1(0)^\dagger B] + o(k^2), \quad k \rightarrow 0 \in \mathbb{C}, \quad (6.40)$$

donde A y B son las matrices de la condición a la frontera, $J(k)$ es la matriz de Jost y $w_1(x)$ es la matriz definida anteriormente.

Para analizar el comportamiento de $J(k)$ para k -pequeñas, definiremos la matriz $F(k)$ como:

$$F(k) := f(0, a)^\dagger [f(-k^*, a)^\dagger]^{-1} J(k). \quad (6.41)$$

Proposición 6.11 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces, la matriz $n \times n$ $F(k)$ definida en (6.41) tiene las asíntotas para k pequeñas:*

$$F(k) = J(0) - ik\mathcal{R} + k^2 F_2 + o(k^2), \quad k \rightarrow 0 \in \mathbb{C}, \quad (6.42)$$

donde

$$\mathcal{R} := f(0, a)^{-1} \phi(0, a), \quad (6.43)$$

$$F_2 := i[w_1'(0)^\dagger A - w_1(0)^\dagger B] - q_1(a)^\dagger \mathcal{R}, \quad (6.44)$$

con $f(k, x)$ y $\phi(k, x)$ las soluciones de Jost definidas anteriormente, $q_1(x)$ la cantidad definida en (6.26) y a la constante no negativa de (3.40).

Al igual que en [1], se define la matriz $Z(k)$ como (4.75).

Por otro lado, tenemos las siguientes proposiciones y teorema [3]:

Proposición 6.12 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$. Entonces:*

a) *Las asíntotas cuando $k \rightarrow 0 \in \mathbb{C}$ de la matriz $n \times n$ $Z(k)$ están dadas por:*

$$Z(k) = P_2 S^{-1} J(0) S P_1 - ik P_2 S^{-1} \mathcal{R} S P_1 + k^2 P_2 S^{-1} F_2 S P_1 + o(k^2), \quad (6.45)$$

donde \mathcal{R} y F_2 son las matrices $n \times n$ definidas en (6.43) y (6.44) respectivamente.

b) *En el caso excepcional, i.e., cuando $J(0)$ no es invertible, la expansión de (6.45) es equivalente a la expansión cuando $k \rightarrow 0 \in \overline{\mathbb{C}^+}$:*

$$\begin{bmatrix} A(k) & B(k) \\ C(k) & D(k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} kA_1 + k^2 A_2 + o(k^2) & kB_1 + k^2 B_2 + o(k^2) \\ kC_1 + k^2 C_2 + o(k^2) & D_0 + kD_1 + k^2 D_2 + o(k^2) \end{bmatrix}, \quad (6.46)$$

con A_1 y D_0 matrices constantes invertibles de tamaño $\mu \times \mu$ y $(\nu - \mu) \times (\nu - \mu)$, respectivamente, y $A_2, B_1, B_2, C_1, C_2, D_1$ y D_2 son matrices constantes.

Proposición 6.13 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$ y sea $Z(k)$ la matriz $n \times n$ definida en (4.75). En el caso excepcional, i.e. cuando $J(0)$ no es invertible, $Z(k)^{-1}$ tiene las asíntotas para k pequeñas cuando $k \rightarrow 0 \in \overline{\mathbb{C}^+}$ dadas por:*

$$Z(k)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{k}A_1^{-1} + \mathfrak{Y}_1 + o(1) & -A_1^{-1}B_1D_0^{-1} + k\mathfrak{Y}_2 + o(k) \\ -D_0^{-1}C_1A_1^{-1} + k\mathfrak{Y}_3 + o(k) & D_0^{-1} + k\mathfrak{Y}_4 + O(k^2) \end{bmatrix}. \quad (6.47)$$

donde:

$$\begin{aligned} \mathfrak{Y}_1 &:= A_1(B_1D_0^{-1}C_1 - A_2)A_1^{-1}, \\ \mathfrak{Y}_2 &:= A_1^{-1}[A_2A_1^{-1}B_1 - B_1D_0^{-1}C_1A_1^{-1}B_1 - B_2 - B_1D_0^{-1}D_1]D_0^{-1}, \\ \mathfrak{Y}_3 &:= D_0^{-1}[D_1D_0^{-1}C_1 - C_2 + C_1A_1^{-1}A_2 - C_1A_1^{-1}B_1D_0^{-1}C_1]A_1^{-1}, \\ \mathfrak{Y}_4 &:= D_0^{-1}(C_1A_1^{-1}B_1 - D_1)D_0^{-1}. \end{aligned}$$

Teorema 6.14 *Supongamos que V en (3.1) es autoadjunto y pertenece a $L_2^1(\mathbb{R}^+)$. Sea $J(k)$ la matriz de Jost y supongamos que estamos tratando con el caso excepcional, i.e. $J(0)$ no es invertible. Entonces:*

a) *La matriz de Jost $J(k)$ es diferenciable en $k = 0$ en $\overline{\mathbb{C}^+}$ y se comporta como:*

$$J(k) = J(0) + k\dot{J}(0) + o(k), \quad k \rightarrow 0 \in \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (6.48)$$

donde $J(0)$ y $\dot{J}(0)$ están dadas como:

$$J(0) = SP_2^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & D_0 \end{bmatrix} P_1^{-1}S^{-1}, \quad (6.49)$$

$$\dot{J}(0) = -\dot{f}(0, a)^\dagger [f(0, a)^\dagger]^{-1} J(0) + SP_2^{-1} \begin{bmatrix} A_1 & B_1 \\ C_1 & D_1 \end{bmatrix} P_1^{-1}S^{-1}. \quad (6.50)$$

b) *La matriz de Jost $J(k)$ tiene un polo simple en $k = 0$, y se tienen las asíntotas:*

$$J(k)^{-1} = \frac{1}{k}SP_1 \begin{bmatrix} A_1^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} P_2S^{-1} + \mathfrak{E}_1 + o(1), \quad k \rightarrow 0 \in \overline{\mathbb{C}^+}, \quad (6.51)$$

donde se ha definido:

$$\mathfrak{E}_1 := SP_1 \begin{bmatrix} A_1 & B_1 \\ C_1 & D_1 \end{bmatrix} P_2S^{-1} \dot{f}(0, a)^\dagger [f(0, a)^\dagger]^{-1} \quad (6.52)$$

$$+ SP_1 \begin{bmatrix} A_1^{-1}(B_1D_0^{-1}C_1 - A_2)A_1^{-1} & -A_1^{-1}B_1D_0^{-1} \\ -D_0^{-1}C_1A_1^{-1} & D_0^{-1} \end{bmatrix} P_2S^{-1}. \quad (6.53)$$

c) La matriz de dispersión $S(k)$ es diferenciable en $k = 0$ en \mathbb{R} y satisface las asintotas:

$$S(k) = S(0) + k\dot{S}(0) + o(k), \quad k \rightarrow 0 \in \mathbb{R}, \quad (6.54)$$

donde

$$S(0) = SP_2^{-1} \begin{bmatrix} I_\mu & 0 \\ 2C_1A_1^{-1} & -I_{\nu-\mu} \end{bmatrix} P_2S^{-1}, \quad (6.55)$$

$$\dot{S}(0) = SP_2^{-1}\mathcal{E}_2SP_2^{-1} + S(0)\dot{f}(0, a)^\dagger[f(0, a)^\dagger]^{-1} + \dot{f}(0, a)^\dagger[f(0, a)^\dagger]^{-1}S(0), \quad (6.56)$$

con la matriz $n \times n$ \mathcal{E}_2 definida como:

$$\mathcal{E}_2 := 2 \begin{bmatrix} -A_2A_1^{-1} & 0 \\ \mathcal{E}_3 & (D_1 - C_1A_1^{-1}B_1)D_0^{-1} \end{bmatrix} \quad (6.57)$$

y la matriz $(\nu - \mu) \times \mu$ \mathcal{E}_3 dada por:

$$\mathcal{E}_3 := (C_1A_1^{-1}B_1D_0^{-1}C_1 - C_1A_1^{-1}A_2 - D_1D_0^{-1}C_1)A_1^{-1}. \quad (6.58)$$

Es importante hacer énfasis en que las expansiones (6.48), (6.51) y (6.54) para $J(k)$, $J(k)^{-1}$ y $S(k)$ pueden construirse explícitamente los primeros dos términos a partir del potencial matricial V y de las matrices constantes A y B definidas en la condición a la frontera de (3.1).

Capítulo 7

Ejemplos

7.1. Ejemplos del análisis del operador de Schrödinger para bajas energías

En esta sección se verifica el valor de $S(0)$ dado en (4.86) en casos particulares.

7.1.1. La condición a la frontera δ'

Sean $A, B \in \mathbb{M}_{3 \times 3}$, con A y B tales que satisfacen (3.11)-(3.13) y dadas por:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -a \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (7.1)$$

con $a \in \mathbb{R}$ y $V = 0$.

De (3.49) obtenemos $J(k)$ y de (3.52) encontramos $S(k)$:

$$\begin{aligned} J(k) &= I_3 B - (-ik^* I_3)^\dagger A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} - ik \begin{bmatrix} 1 & 0 & -a \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \\ \Rightarrow J(k) &= \begin{bmatrix} -ik & 0 & -1 + iak \\ ik & -ik & -1 \\ 0 & ik & -1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (7.2)$$

Obteniendo la inversa,

$$J(k)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{-1-ab}{ik} & \frac{-ab}{ik} & \frac{-ab}{ik} \\ \frac{a}{a^2} & \frac{a}{a^2} & \frac{-ik-a^2}{ik} \\ \frac{ik}{a^2} & \frac{ik}{a^2} & \frac{ik}{a^2} \end{bmatrix}$$

Así que:

$$S(k) = -J(k)J(k)^{-1} = \begin{bmatrix} i + ak & -2i & -2i \\ -2i & i + ak & -2i \\ -2i & -2i & i + ak \end{bmatrix} \frac{1}{3i + ak}. \quad (7.3)$$

De (7.3) vemos que $S(k)$ es continua en el 0 (todas sus entradas lo son) y que en $k = 0$,

$$S(0) = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{-2}{3} & \frac{-2}{3} \\ \frac{-2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{-2}{3} \\ \frac{-2}{3} & \frac{-2}{3} & \frac{1}{3} \end{bmatrix}. \quad (7.4)$$

Por otro lado, vemos que $J(0)$ está dada por:

$$J(0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

Por lo que sus eigenvalores son:

$$0 = \left| \begin{bmatrix} -\lambda & 0 & -1 \\ 0 & -\lambda & -1 \\ 0 & 0 & -1 - \lambda \end{bmatrix} \right| = -\lambda^2(1 + \lambda) \Rightarrow \lambda_1 = 0, \lambda_2 = 0, \lambda_3 = -1.$$

Y sus eigenvectores son:

$$u_{11} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u_{21} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u_{31} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

De acuerdo a la notación que hemos manejado, $n_1 = 1, n_2 = 1$ y $n_3 = 1$, con $\kappa = 3$. Los operadores de permutación P_1 y P_2 están dados por:

$$\begin{aligned} P_1 &= \begin{bmatrix} \Pi_1 & 0 \\ 0 & I_{3-2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_1 \end{bmatrix} = I_3 \\ P_2 &= \begin{bmatrix} \Pi_1^2 & 0 \\ 0 & I_{3-2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_1 \end{bmatrix} = I_3. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Así que las matrices S de (4.70) y $Z(k)$ de (4.75) son:

$$S = \{u_{\alpha j}\} \Rightarrow S = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (7.6)$$

y

$$Z(k) = P_2 S^{-1} F(k) S P_1 = S^{-1} F(k) S,$$

donde

$$S^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad F(k) = f(0, a)^\dagger [f(-k^*, a)^{-1}]^\dagger J(k) = \begin{bmatrix} -ik & 0 & -1 + aik \\ ik & -ik & -1 \\ 0 & ik & -1 \end{bmatrix}$$

Por lo que:

$$F(k) = \begin{bmatrix} -ik & -ik & (a-2)ik \\ ik & -2ik & -ik \\ 0 & ik & -1+ik \end{bmatrix} \quad (7.7)$$

De (7.7) y usando (4.75) obtenemos:

$$A(k) = \begin{bmatrix} -ik & -ik \\ ik & -2ik \end{bmatrix},$$

pues $A(k)$ es de tamaño $\mu \times \mu = 2 \times 2$.

$$B(k) = \begin{bmatrix} (a-2)ik \\ -ik \end{bmatrix}, \quad C(k) = [0 \quad ik] \quad \text{y} \quad D(k) = -1$$

, pues es de tamaño $(n - \mu) \times (n - \mu) = n \times 1$.

Por (4.76) llegamos a que:

$$A_1 = \begin{bmatrix} -i & -i \\ i & -2i \end{bmatrix}, \quad B_1 = \begin{bmatrix} (a-2)i \\ -i \end{bmatrix}, \quad C_1 = [0 \quad i] \quad \text{y} \quad D_0 = -1.$$

Como en este caso $\mu = \nu = 2$ y $n = 3$, evaluamos (4.86) y confiamos en que coincide con la matriz en (7.4):

$$S(0) = SP_2^{-1} \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 2C_1A_1^{-1} & -I_1 \end{bmatrix} P_2S^{-1} = S \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 2C_1A_1^{-1} & -I_1 \end{bmatrix} S^{-1},$$

y como

$$C_1A_1^{-1} = [0 \quad i] \begin{bmatrix} \frac{2}{3}i & -\frac{1}{3}i \\ \frac{1}{3}i & \frac{1}{3}i \end{bmatrix} = \frac{1}{3} [-1 \quad -1],$$

entonces

$$\begin{aligned} S(0) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{-2}{3} & \frac{-2}{3} \\ \frac{-2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{-2}{3} \\ \frac{3}{3} & \frac{3}{3} & \frac{1}{3} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Entonces $S(0)$ viene dada por (4.86). ■

7.1.2. La condición a la frontera de Kirchhoff

Actualmente las estructuras mesoscópicas casi unidimensionales como los cables moleculares, atómicos y cuánticos están siendo intensamente estudiados, tanto experimental como teóricamente [6]. Este tipo de aparatos electrónicos están lejos de ser comercialmente útiles, pero se ha progresado tanto en los últimos años que puede suponerse que no pasará mucho tiempo antes de que estos componentes electrónicos del tamaño de una molécula sean una realidad.

De acuerdo a la terminología tradicional de la física, un *cable cuántico* es una estructura parecida a una gráfica sobre la superficie de un semiconductor, que confina a un electrón a ranuras potenciales del ancho de unos pocos nanómetros [6]. Cualquier teoría precisa sobre estas nanoestructuras incluye el confinamiento, acoplamiento entre cables muy cercanos, fronteras, impurezas, entre otras cosas. El modelo más simple que describe la conducción en los cables cuánticos es un Hamiltoniano en una gráfica planar. Un modelo similar puede aplicarse a un cable molecular (una molécula casi unidimensional que puede transportar cargas (electrones o agujeros) entre sus extremos.

En este caso se consideran cables cuánticos idealizados, donde la configuración espacial es una gráfica, i.e. un objeto estrictamente unidimensional y el Hamiltoniano es menos el Laplaciano con condiciones a la frontera autoadjuntos en los vértices de la gráfica, que es lo que lo hace un operador autoadjunto. La gráfica puede no ser plana y puede ser doblada cuando se hace como un subconjunto del espacio Euclidiano tridimensional \mathbb{R}^3 . El caso sin potencial está enunciado en [6].

La teoría de dispersión para estos operadores tiene una estructura muy rica. La matriz S para la energía E es una matriz $n \times n$ si la gráfica tiene n extremos abiertos, dada en términos de las condiciones a la frontera y de la longitud de las líneas internas de la gráfica. La matriz S es simétrica para todas las energías si las condiciones a la frontera son reales y es unitaria, continua en la energía y analítica excepto en un conjunto numerable sin puntos de acumulación de energías [6]. Este resultado puede ser visto como la versión cuántica de la regla de Kirchhoff.

Físicamente, se espera que la matriz S sea unitaria porque localmente hay una regla de Kirchhoff. De hecho, las condiciones a la frontera implican que la probabilidad cuántica de las corrientes de los componentes de cualquier paquete de ondas asociado a diferentes líneas entrantes a cualquier vértice suman cero.

A continuación se muestra un ejemplo.

Sean $A, B \in \mathbb{M}_{3 \times 3}$, con A y B tales que satisfacen (3.11)-(3.13) y dadas por:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (7.9)$$

con $V = 0$.

Tenemos que por (3.49):

$$J(k) = I_3 B - (-ik^* I_3)^\dagger A = B - ikA = \begin{bmatrix} -1 & 0 & -ik \\ -1 & -1 & -ik \\ 0 & 1 & -ik \end{bmatrix}.$$

Y por (3.52),

$$S(k) = -J(-k)J(k)^{-1} = -\frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & -2 & -2 \\ -2 & 1 & -2 \\ -2 & 2 & -1 \end{bmatrix}. \quad (7.10)$$

Nótese que $S(k) = S(0)$. Por otro lado,

$$J(0) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Los eigenvalores de $J(0)$ son, entonces: $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = -1, \lambda_3 = -1$. Y los eigenvectores son:

$$v_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad v_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Por lo tanto, $n_1 = 1, n_2 = 2$. Además, tenemos que $\mu = \nu = 1, n = 3$ y $P_1 = P_2 = I_3$. Así,

$$S = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1/\sqrt{2} \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix}, \quad Z(k) = \begin{bmatrix} -3ik & -3ik/\sqrt{2} & 0 \\ 2\sqrt{2}ik & -1 + 2ik & 1 \\ \sqrt{2}ik & ik & -1 \end{bmatrix}, \quad (7.11)$$

de donde:

$$A_1 = -3i, \quad B_1 = [3i\sqrt{2} \ 0], \quad C_1 = \begin{bmatrix} 2\sqrt{2}i \\ \sqrt{2}i \end{bmatrix} \quad y \quad D_0 = \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Usándolo en (4.86):

$$S(0) = SP_2^{-1} \begin{bmatrix} I_1 & 0 \\ 2C_1 A_1^{-1} & -I_2 \end{bmatrix} P_2 S^{-1} = S \begin{bmatrix} I_1 & 0 \\ 2C_1 A_1^{-1} & -I_2 \end{bmatrix} S^{-1},$$

y como

$$C_1 A_1^{-1} = \begin{bmatrix} 2\sqrt{2}i \\ \sqrt{2}i \end{bmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 3i \end{pmatrix} = -\frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2\sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad S^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

entonces

$$\begin{aligned} S(0) &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1/\sqrt{2} \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -4\sqrt{2}/3 & 1 & 0 \\ -2\sqrt{2}/3 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &= -\frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & -2 & -2 \\ -2 & 1 & -2 \\ -2 & 2 & -1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{7.12}$$

Es decir, Entonces $S(0)$ viene dada por (4.86). ■

7.1.3. La condición a la frontera de XOR

En esta sección se aborda el problema inverso, específicamente la determinación de las condiciones a la frontera dada la matriz S con una energía fija. Este problema tiene posibles aplicaciones en el diseño de computadoras cuánticas. En la teoría clásica de redes la teoría de matrices unitarias se usa para describir (de forma determinista) las relaciones input-output y hasta puede hablarse de matrices de dispersión. En el caso de las computadoras cuánticas se debe usar la teoría cuántica de dispersión y la noción asociada de una matriz unitaria S para formular (de forma probabilística) relaciones cuánticas de input-output. Esto difiere de las discusiones estándares en que la matriz unitaria es considerada como el operador unitario de la evolución del tiempo para un tiempo fijo dado y con un Hamiltoniano como el generador infinitesimal, que describe la dinámica. También se considera que la regla que establece que la conexión de puertas corresponde a la multiplicación de matrices asociada a las matrices unitarias no es tan precisa. De hecho, conectar dos puertas significa que se tiene un sistema acoplado para el cual la relevancia de los Hamiltonianos de los dos subsistemas permanece incierto. Así que desde el punto de vista de la transmisión de información, se considera al menos natural cuestionar la relevancia de las matrices de dispersión en el contexto de la computación cuántica. De hecho, se entiende que la mayoría de los diseños experimentales actuales de compuertas cuánticas describen experimentos de dispersión. En el contexto actual de los cables cuánticos las señales entrantes son ondas planas con energía fija en cada cable que son dispersadas en el vértice en ondas planas salientes en cada cable y con la misma energía.

Vale la pena mencionar la relación entre la descripción mecánica cuántica dependiente del tiempo y la teoría de dispersión. La segunda describe el comportamiento

para tiempos grandes de la evolución cuántica. Así, el uso de las matrices de dispersión en lugar de los operadores unitarios de la evolución del tiempo sólo pueden ser apropiados si la "frecuencia de contacto" dada de la computadora cuántica no es muy alta, lo que depende de su realización física.

Como ilustración con las posibles aplicaciones a las computadoras cuánticas en mente, consideremos las compuertas elementales discutidas en esta sección. Así, consideraremos un vértice con n cables entrantes como una compuerta cuántica con los otros cables vistos como canales. En particular, los canales de salida son los mismos que los de entrada. Por lo tanto, además de la transmisión cuántica de un canal a otro distinto habrá reflexión de un canal a sí mismo. Estas amplitudes de reflexión corresponden a la noción de propagación de reversa en la teoría clásica de información.

En este caso estamos lidiando con una teoría de una sola partícula. En el arreglo concreto de las computadoras clásicas se lidia con señales que se localizan en el espacio y tiempo. Pero en la teoría cuántica de campos y con las modificaciones apropiadas ésta es una de las nociones usadas para describir partículas en términos de paquetes de ondas. En la formulación mecánica cuántica las señales entrantes en las compuertas resultan en las señales salientes y esto corresponde a la teoría de dispersión asociada con la matriz S .

Este acercamiento también puede ser adaptado a la situación cuando se consideran electrones no relativistas con espín moviéndose a través de cables y con las condiciones a la frontera posiblemente permitiendo espines cambiantes.

A continuación se muestra un ejemplo.

Sean $V = 0$ y a un parámetro real. Sean $A, B \in \mathbb{M}_{4 \times 4}$, con A y B tales que satisfacen (3.11)-(3.13) y dadas por:

$$A = \begin{bmatrix} i/a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i/a & 0 & 1/2a \\ 0 & 0 & 1/2a & 1/2a \\ 0 & 0 & 1/2a & 1/2a \end{bmatrix}, \quad (7.13)$$

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1/2 & -1/2 \end{bmatrix}. \quad (7.14)$$

Tenemos que

$$J(k) = B - ikA = \begin{bmatrix} k/a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k/a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (k+a)/2a & (k+a)/2a \\ 0 & 0 & (k+a)/2a & (k-a)/2a \end{bmatrix}$$

y

$$S(0) = S(k) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (7.15)$$

Por otro lado,

$$J(0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1/2 & -1/2 \end{bmatrix}.$$

Los eigenvalores de $J(0)$ son: $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0, \lambda_4 = 1$. Y sus eigenvalores son:

$$v = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix},$$

por lo que $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ y $n_4 = 1$. Además, $\mu = \nu = 3, n = 4, P_1 = P_2 = I_4$. Así que:

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad Z(k) = \begin{bmatrix} k/a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k/a & k/2a & k/2a \\ 0 & 0 & k/a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (7.16)$$

Por lo tanto,

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1/a & 0 & 0 \\ 0 & 1/a & 1/2a \\ 0 & 0 & 1/a \end{bmatrix}, \quad B_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2a \\ 0 \end{bmatrix}, \quad C_1 = [0 \ 0 \ 0] \quad \text{y} \quad D_0 = [-1]. \quad (7.17)$$

Usando (4.86), llegamos a que:

$$S(0) = S \begin{bmatrix} I_3 & 0 \\ 2C_1A_1^{-1} & I_1 \end{bmatrix} S^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Entonces $S(0)$ viene dada por (4.86). ■

7.1.4. Ejemplo 6.1.4

Sean $A, B \in \mathbb{M}_{3 \times 3}$, con A y B tales que satisfacen (3.11)-(3.13) y dadas por:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & a \\ 0 & 0 & b \\ 1 & 1 & c \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (7.18)$$

Tenemos que:

$$J(k) = B - ikA = \begin{bmatrix} -2ik & -ik & -aik \\ 0 & 0 & 1 - ikb \\ -ik & -ik & cik \end{bmatrix}$$

y

$$S(k) = -J(-k)J(k)^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-i+bk}{i+bk} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Así que:

$$S(0) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad J(0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (7.19)$$

con eigenvalores $-\lambda^3 = 0 \Rightarrow \lambda = 0$ y eigenvectores:

$$v = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

con $n_1 = 1, n_2 = 2$. Además, $\mu = 2, \nu = 3, n = 3, P_1 = I_3$ y

$$P_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (7.20)$$

Lo que nos lleva a:

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad Z(k) = \begin{bmatrix} -2ik & -ik & -aik \\ -ik & -ik & 1 - ikc \\ 0 & 0 & 1 - bik \end{bmatrix}, \quad (7.21)$$

$$A_1 = \begin{bmatrix} -2i & -i \\ -i & -i \end{bmatrix}, \quad B_1 = \begin{bmatrix} -ia \\ -ic \end{bmatrix}, \quad C_1 = [0 \ 0], \quad D_0 = [1]. \quad (7.22)$$

Y por (4.86),

$$S(0) = SP_2^{-1} \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 2C_1A_1^{-1} & I_1 \end{bmatrix} P_2S^{-1} = SP_2^{-1}I_3P_2S^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Entonces $S(0)$ viene dada por (4.86).

$$S(0) = S(0).$$

■

7.2. Ejemplo del análisis del operador de Schrödinger para bajas energías II

En esta sección ilustraremos los resultados e las asíntotas para k -pequeñas de la matriz de Jost, su inversa y la matriz de dispersión mediante un ejemplo explícito.

En este ejemplo usaremos las condiciones a la frontera de Kirchhoff dadas por:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) = \psi_3(0), \quad \psi'_1(0) + \psi'_2(0) + \psi'_3(0) = 0, \quad (7.23)$$

donde $\psi_j(0)$ denota el j -ésimo compnoente de la función de onda $\psi(x)$. Estas condiciones a la frontera son muy relevantes en muchas áreas de aplicación y pueden corresponder, por ejemplo en los cables cuánticos, a la continuidad de la función de onda y a la conservacioón de la corriente en un nodo.

Supongamos que el potencial está dado por:

$$V = \begin{bmatrix} \frac{32e^{2x}}{(4e^{2x}-1)^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \delta(x+1) \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & \gamma \end{bmatrix},$$

donde $\delta(x)$ denota la distribución de Dirac y γ es un parámetro real. Veremos que la elección $\gamma = -31/77$ corresponde al caso $\det [J(0)] = 0$ y que cualquier otro valor de γ corresponde al caso $\det [J(0)] \neq 0$. Supongamos que los parámetros matriciales a la frontera A y B de la ecuación $-B^\dagger \psi(0) + A^\dagger \psi'(0) = 0$ dadas por:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (7.24)$$

que satisfacen las condiciones a la frontera de Kirchhoff dadas en (7.23). Si se evalúa la solución explícita de Jost se obtiene:

$$f(k, x) = \begin{cases} \begin{bmatrix} f_1 & 0 & 0 \\ 0 & f_2 & f_3 \\ 0 & f_3 & f_4 \end{bmatrix}, & 0 \leq x \leq 1, \\ \begin{bmatrix} f_1 & 0 & 0 \\ 0 & e^{ikx} & 0 \\ 0 & 0 & e^{ikx} \end{bmatrix}, & x > 1, \end{cases} \quad (7.25)$$

donde

$$f_1 := e^{ikx} \left(1 + \frac{2i}{(k+i)(4e^{2x}-1)} \right), \quad f_2 := e^{ikx} \left(1 + \frac{i}{2k} \right) - \frac{i}{ek} e^{ik(2-x)},$$

$$f_3 := \frac{i}{2k} e^{ikx} - \frac{i}{2k} e^{ik(2-x)}, \quad f_4 := e^{ikx} \left(1 + \frac{i\gamma}{2k} \right) - \frac{i\gamma}{2k} e^{ik(2-x)}.$$

Nótese que $f(k, 0)$ y $f'(k, 0)$ están dadas por:

$$f(k, 0) = \begin{bmatrix} 1 + \frac{2i}{3(k+i)} & 0 & 0 \\ o & 1 + \frac{i}{2k}(1 - e^{2ik}) & \frac{i}{2k}(1 - e^{2ik}) \\ 0 & \frac{i}{2k}(1 - e^{2ik}) & 1 + \frac{i\gamma}{2k}(1 - e^{2ik}) \end{bmatrix}, \quad (7.26)$$

$$f'(k, 0) = \begin{bmatrix} ik - \frac{2(3k+8i)}{9(k+i)} & 0 & 0 \\ 0 & ik - \frac{1}{2}(1 + e^{2ik}) & -e^{ik} \cos k \\ 0 & -e^{ik} \cos k & ik - \frac{\gamma}{2}(1 + e^{2ik}) \end{bmatrix} \quad (7.27)$$

Usando (7.25)-(7.27) se obtiene la matriz de Jost:

$$J(k) = \begin{bmatrix} -1 - \frac{2i}{3(k+i)} & 0 & -ik + \frac{2}{3} + \frac{10i}{9(k+i)} \\ 1 + \frac{i}{2k}(1 - e^{2ik}) & -1 & 1 - ik + e^{2ik} \\ \frac{1}{k} e^{ik} \sin k & 1 + \frac{\gamma-1}{k} e^{ik} \sin k & -ik + \frac{\gamma+1}{2}(1 + e^{2ik}) \end{bmatrix}.$$

El determinante de $J(0)$ tiene las asíntotas para k -pequeñas:

$$\det [J(k)] = \frac{31 + 77\gamma}{9} + \frac{(128\gamma - 39)ik}{9} + \left(\frac{131}{27} - \frac{193\gamma}{9} \right) k^2 + O(k^3), \quad k \rightarrow 0 \in \mathbb{C}.$$

Así, $-\gamma = 31/77$ corresponde al caso excepcional, i.e. $\det [J(0)] = 0$ y cualquier otro valor de γ lleva al caso genérico, i.e. $\det [J(0)] \neq 0$. El límite para k -pequeñas de $J(k)$ está dado por:

$$J(k) = J(0) + k\dot{J}(0) + O(k^2), \quad k \rightarrow 0 \in \mathbb{C}, \quad (7.28)$$

con

$$J(0) = \begin{bmatrix} -\frac{5}{3} & 0 & \frac{16}{9} \\ 2 & -1 & 2 \\ 1 & \gamma & 1 + \gamma \end{bmatrix}, \quad \dot{J}(0) = \begin{bmatrix} -\frac{2i}{3} & 0 & \frac{i}{9} \\ i & 0 & i \\ i & i(\gamma - 1) & i\gamma \end{bmatrix}. \quad (7.29)$$

Para $\gamma = -31/77$ se obtienen las asíntotas:

$$J(k)^{-1} = \frac{i}{k} M_1 + M_2 + O(k), \quad k \rightarrow 0 \in \mathbb{C}, \quad (7.30)$$

donde se definió:

$$M_1 := \begin{bmatrix} \frac{144}{6971} & -\frac{496}{6971} & \frac{1232}{6971} \\ \frac{558}{1922} & -\frac{6971}{4774} & \frac{6971}{4774} \\ \frac{6971}{135} & -\frac{465}{6971} & \frac{6971}{1155} \\ \frac{6971}{6971} & -\frac{6971}{6971} & \frac{6971}{6971} \end{bmatrix}, \quad M_2 := \begin{bmatrix} -\frac{16095714}{48594841} & \frac{22880111}{145784523} & \frac{32930051}{145784523} \\ \frac{10281837}{30462632} & -\frac{30462632}{145784523} & \frac{61380319}{145784523} \\ \frac{48594841}{11927250} & \frac{8244046}{8244046} & \frac{145784523}{7573258} \\ \frac{48594841}{48594841} & \frac{48594841}{48594841} & \frac{48594841}{48594841} \end{bmatrix},$$

y de forma similar para la matriz de dispersión se obtiene:

$$S(k) = S(0) + k\dot{S}(0) + O(k^2), \quad k \rightarrow 0 \in \mathbb{C}, \quad (7.31)$$

con

$$S(0) = \begin{bmatrix} \frac{6809}{6971} & -\frac{558}{6971} & \frac{1386}{6971} \\ -\frac{558}{6971} & -\frac{3049}{6971} & -\frac{4774}{6971} \\ \frac{1386}{6971} & -\frac{4774}{6971} & \frac{4887}{6971} \end{bmatrix}, \quad (7.32)$$

$$S(0) = \begin{bmatrix} \frac{24111452i}{48594841} & -\frac{8336928i}{48594841} & -\frac{12952632i}{48594841} \\ -\frac{8336928i}{48594841} & \frac{95224498i}{111299650} & \frac{111299650i}{111299650} \\ -\frac{12952632i}{48594841} & \frac{145784523}{111299650} & -\frac{145784523}{145784523} \end{bmatrix}. \quad (7.33)$$

En el caso genérico, se tiene (7.31) con las matrices relevantes especificadas como:

$$S(0) = -I_3, \quad \dot{S}(0) = \begin{bmatrix} \frac{2i(20\gamma+7)}{77\gamma+31} & -\frac{18i\gamma}{77\gamma+31} & -\frac{18i}{77\gamma+31} \\ -\frac{18i\gamma}{77\gamma+31} & \frac{62i\gamma}{77\gamma+31} & -\frac{62i}{77\gamma+31} \\ -\frac{18i}{77\gamma+31} & \frac{62i}{77\gamma+31} & -\frac{2i(77\gamma-46)}{77\gamma+31} \end{bmatrix}, \quad (7.34)$$

donde I_3 es la matrix identidad 3×3 .

Ahora verificaremos los resultados para los límites de k -pequeña. En el caso genérico, i.e. cuando $\gamma \neq -31/77$, se obtienen los límites para k -pequeña descritos en el Teorema 6.7. De (7.26) y (7.27) se llega a que:

$$f(0,0) = \begin{bmatrix} \frac{5}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & \gamma+1 \end{bmatrix}, \quad f'(0,0) = \begin{bmatrix} \frac{16}{9} & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -\gamma \end{bmatrix}, \quad (7.35)$$

$$\dot{f}(0,0) = \begin{bmatrix} \frac{2i}{3} & 0 & 0 \\ 0 & i & i \\ 0 & i & i\gamma \end{bmatrix}, \quad \dot{f}'(0,0) = \begin{bmatrix} -\frac{i}{9} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & -i & i(1-\gamma) \end{bmatrix}. \quad (7.36)$$

Usando (7.24), (7.25) y (7.26) en (6.29) y (6.30) se obtiene (7.28) con

$$J(0) = \begin{bmatrix} -\frac{5}{3} & 0 & \frac{16}{9} \\ 2 & -1 & 2 \\ 1 & \gamma & \gamma+1 \end{bmatrix}, \quad \dot{J}(0) = \begin{bmatrix} -\frac{2i}{3} & 0 & \frac{i}{9} \\ i & 0 & i \\ i & i(\gamma-1) & i\gamma \end{bmatrix}, \quad (7.37)$$

que coincide con lo establecido en (7.29). De forma similar, usando (7.37) en (6.32) se obtiene (7.31) con $S(0)$ y $\dot{S}(0)$ que coinciden con las cantidades establecidas en (7.32) y (7.33), respectivamente. Así, se han verificado los resultados del Teorema 6.7 en el caso genérico de este ejemplo.

Ahora verificaremos, en el caso excepcional, i.e. cuando $\gamma = -31/77$, las asíntotas para k -pequeñas. De (7.26) y (7.27) con $\gamma = -31/77$, se obtiene

$$f(0,0) = \begin{bmatrix} \frac{5}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & \frac{46}{77} \end{bmatrix}, \quad f'(0,0) = \begin{bmatrix} -\frac{16}{9} & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & \frac{31}{77} \end{bmatrix}, \quad (7.38)$$

$$\dot{f}(0,0) = \begin{bmatrix} \frac{2i}{3} & 0 & 0 \\ 0 & i & i \\ 0 & i & -\frac{31i}{77} \end{bmatrix}, \quad \dot{f}'(0,0) = \begin{bmatrix} -\frac{i}{9} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & -i & \frac{108i}{77} \end{bmatrix}. \quad (7.39)$$

Usando (7.24), (7.26) y (7.27) en (6.29) y (6.30), se obtiene (7.28) con:

$$J(0) = \begin{bmatrix} -\frac{5}{3} & 0 & \frac{16}{9} \\ 2 & -1 & 2 \\ 1 & -\frac{31}{77} & \frac{46}{77} \end{bmatrix}, \quad \dot{J}(0) = \begin{bmatrix} -\frac{2i}{3} & 0 & \frac{i}{9} \\ i & 0 & i \\ i & -\frac{108i}{77} & -\frac{31i}{77} \end{bmatrix}, \quad (7.40)$$

lo que coincide con los valores dados en (7.29) cuando $\gamma = -31/77$. Los eigenvalores de $J(0)$ se obtienen de (7.37) y están dados por:

$$\lambda_1, \quad \lambda_2 = \frac{-239 + 2\sqrt{26273}}{231}, \quad \lambda_3 = \frac{-239 - 2\sqrt{26273}}{231}, \quad (7.41)$$

con los respectivos eigenvectores

$$v_1 = \begin{bmatrix} \frac{16}{15} \\ \frac{62}{15} \\ \frac{1}{1} \end{bmatrix}, \quad v_2 = \begin{bmatrix} \frac{-73 + \sqrt{26273}}{102} \\ \frac{2399 + 3\sqrt{26273}}{1054} \\ \frac{1}{1} \end{bmatrix}, \quad v_3 = \begin{bmatrix} \frac{-73 - \sqrt{26273}}{102} \\ \frac{2399 - 3\sqrt{26273}}{1054} \\ \frac{1}{1} \end{bmatrix}. \quad (7.42)$$

Usando (7.42) se forman las columnas de la matriz constante S :

$$S = \begin{bmatrix} \frac{16}{15} & \frac{-73 + \sqrt{26273}}{102} & \frac{-73 - \sqrt{26273}}{102} \\ \frac{62}{15} & \frac{2399 + 3\sqrt{26273}}{1054} & \frac{2399 - 3\sqrt{26273}}{1054} \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (7.43)$$

Usando (7.40) y (7.43) vemos que

$$P_1 = I_3, \quad P_2 = I_3. \quad (7.44)$$

Nótese que el determinante de $f(0,0)$ dado en (7.38) es $25/77$ y por lo tanto distinto de cero, por lo que puede elegirse la constante α como cero. Entonces, usando (7.40) y (7.43) se obtiene

$$w_1(0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad w'_1(0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (7.45)$$

De forma similar, usando (7.25) en (6.26) se obtiene

$$q_1(0) = \begin{bmatrix} \frac{16}{15} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{5} & \frac{2438}{385} \\ 0 & \frac{2438}{385} & -\frac{275162}{29645} \end{bmatrix}. \quad (7.46)$$

De (7.24) se obtiene

$$\phi(0,0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (7.47)$$

Así, usando (7.24), (7.45)-(7.47) en (6.43) y (6.44) se obtiene

$$\mathcal{R} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{3}{5} \\ 0 & 0 & -\frac{31}{15} \\ 0 & 0 & \frac{77}{15} \end{bmatrix}, \quad F_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{16}{25} \\ 0 & 0 & -\frac{100}{3} \\ 0 & 0 & \frac{70148}{1155} \end{bmatrix}. \quad (7.48)$$

Ahora, usando (7.40), (7.41), (7.43) y (7.44) obtenemos

$$\mathcal{D}_0 = \begin{bmatrix} \frac{-239+2\sqrt{26273}}{231} & 0 \\ 0 & \frac{-239-2\sqrt{26273}}{231} \end{bmatrix}, \quad (7.49)$$

y usando (7.43), (7.44) y (7.48) se obtiene

$$\mathcal{A}_1 = \begin{bmatrix} 6971i \\ 623 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{B}_1 = \begin{bmatrix} 6971i & 6971i \\ 623 & 623 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{C}_1 = \begin{bmatrix} -\frac{76268i}{9345} - \frac{11541857i}{9345\sqrt{26273}} \\ -\frac{76268i}{9345} + \frac{11541857i}{9345\sqrt{26273}} \end{bmatrix}, \quad (7.50)$$

$$\mathcal{D}_1 = \begin{bmatrix} -\frac{76268i}{9345} - \frac{11541857i}{9345\sqrt{26273}} & -\frac{76268i}{9345} - \frac{11541857i}{9345\sqrt{26273}} \\ -\frac{76268i}{9345} + \frac{11541857i}{9345\sqrt{26273}} & -\frac{76268i}{9345} + \frac{11541857i}{9345\sqrt{26273}} \end{bmatrix}, \quad (7.51)$$

$$\mathcal{A}_2 = \begin{bmatrix} -\frac{427808}{3115} \end{bmatrix}, \quad \mathcal{B}_2 = \begin{bmatrix} -\frac{427808}{3115} & -\frac{427808}{3115} \end{bmatrix}, \quad (7.52)$$

$$\mathcal{C}_2 = \begin{bmatrix} \frac{10180418}{102795} + \frac{7539081034}{513975\sqrt{26273}} \\ \frac{10180418}{102795} - \frac{7539081034}{513975\sqrt{26273}} \end{bmatrix}, \quad (7.53)$$

$$\mathcal{D}_2 = \begin{bmatrix} \frac{10180418}{102795} + \frac{7539081034}{513975\sqrt{26273}} & \frac{10180418}{102795} + \frac{7539081034}{513975\sqrt{26273}} \\ \frac{10180418}{102795} - \frac{7539081034}{513975\sqrt{26273}} & \frac{10180418}{102795} - \frac{7539081034}{513975\sqrt{26273}} \end{bmatrix}. \quad (7.54)$$

Así, se tienen todos los elementos para la verificación de los resultados presentados en el Teorema 6.14.

Usando (7.43),(7.44),(7.48)-(7.54) en (6.49),(6.50)(6.55)-(6.58) se obtiene

$$J(0) = \begin{bmatrix} -\frac{5}{3} & 0 & \frac{16}{9} \\ 2 & -1 & 2 \\ 1 & -\frac{31}{77} & \frac{46}{77} \end{bmatrix}, \quad \dot{J}(0) = \begin{bmatrix} -\frac{2i}{3} & 0 & \frac{i}{9} \\ i & 0 & i \\ i & -\frac{108i}{77} & -\frac{31i}{77} \end{bmatrix}, \quad (7.55)$$

$$\mathcal{E}_1 = \begin{bmatrix} -\frac{16095714}{48594841} & \frac{22880111}{145784523} & \frac{32930051}{145784523} \\ \frac{48594841}{10281837} & -\frac{30462632}{145784523} & \frac{61380319}{145784523} \\ -\frac{48594841}{11927250} & \frac{8244046}{48594841} & \frac{145784523}{7573258} \\ \frac{48594841}{48594841} & \frac{48594841}{48594841} & \frac{48594841}{48594841} \end{bmatrix}, \quad (7.56)$$

$$\mathcal{E}_2 = \begin{bmatrix} -\frac{855616i}{34855} & 0 & 0 \\ \frac{855616i(2003789164+11541857\sqrt{26273})}{95754919319475} & 0 & 0 \\ \frac{855616i(2003789164-11541857\sqrt{26273})}{95754919319475} & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (7.57)$$

$$\mathcal{E}_3 = \begin{bmatrix} -\frac{427808i(2003789164+11541857\sqrt{26273})}{95754919319475} & 0 & 0 \\ -\frac{427808i(2003789164-11541857\sqrt{26273})}{95754919319475} & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (7.58)$$

$$\begin{aligned}
S(0) &= \begin{bmatrix} -\frac{6809}{6971} & -\frac{558}{6971} & \frac{1386}{6971} \\ -\frac{558}{6971} & -\frac{5049}{6971} & -\frac{4774}{6971} \\ \frac{1386}{6971} & -\frac{4774}{6971} & \frac{4887}{6971} \end{bmatrix}, \\
\dot{S}(0) &= \begin{bmatrix} \frac{24111452i}{48594841} & -\frac{8336928i}{48594841} & -\frac{12952632i}{48594841} \\ -\frac{8336928i}{48594841} & \frac{95224498i}{111299650i} & \frac{111299650i}{111299650i} \\ -\frac{12952632i}{48594841} & \frac{145784523}{111299650i} & -\frac{145784523}{124617494i} \end{bmatrix}. \tag{7.59}
\end{aligned}$$

Finalmente, usando (7.55)-(7.59), se evalúa (6.48),(6.51) y (6.54) y se obtiene las expansiones para k -pequeñas para $J(k)$, $J(k)^{-1}$ y $S(k)$, respectivamente, que coinciden con las expansiones dadas en (7.28),(7.30) y (7.31).

Referencias

- [1] T. Aktosun, M. Klaus y R. Weder, *Small-energy analysis for the selfadjoint matrix Schrödinger operator on the half line*, J. Math. Phys. **52**, 102101 (2011).
- [2] T. Aktosun, M. Klaus y R. Weder, *High-energy analysis and Levinson's theorem for the selfadjoint matrix Schrödinger operator on the half line*, J. Math. Phys. **54**, 012108 (2013).
- [3] T. Aktosun, M. Klaus y R. Weder, *Small-energy analysis for the selfadjoint matrix Schrödinger operator on the half line II*, J. Math. Phys. **55**, 032103 (2014).
- [4] Roger G. Newton, *Analytic Properties of Radial Wave Functions*, J. Math. Phys. **1**, 4 (1969), p.319-347.
- [5] H.L. Royden, *Real Analysis*, McMillan, Estados Unidos (1968)
- [6] V. Kostrykin y R. Schrader, *Kirchhoff's Rule for Quantum Wires*, J. Phys. A: Math.Gen. **32**, (1999), p.595 - 630.
- [7] V. Kostrykin y R. Schrader, *Kirchhoff's Rule for Quantum Wires II: The inverse problem with possible applications to quantum computers*, Fortschritte der Physik **48**, (2000), p.703 - 716.
- [8] P. Kuchment, *Quantum graphs I: Some basic structures*, Waves Random Media **14**, (2004), S107-S128.
- [9] P. Exner y P. Seba, *Free Quantum Motion on a Branching Graph*, Reports on Mathematical Physics, (1989).
- [10] W. Amrein, *Scattering Theory in Quantum Mechanics*, W.A. Benjamin Inc., Estados Unidos, 1977.
- [11] T. Aktosun, M. Klaus y C. van der Mee, *Small energy asymptotics for the Schrödinger equation on the line, inverse problems*, **17**, (2001), p619-632.
- [12] R. Newton, *Analytic properties of radial wave functions*, J. Math. Phys. **1**, 4 (1960), p.319-347.

-
- [13] R. Newton, *Connection between the S–Matrix and the Tensor Force*, Physical Review **100**, 4 (1955), p.412-428.
- [14] R. Newton y R. Jost, *The construction of potentials from the S–Matrix for systems of differential equations*, Nuovo Cimento **1**, 4 (1955), p.590-622.
- [15] T.H. Gronwall, *Note on the derivative with respect to a parameter of the solution of a system of differential equations*, Ann. Math. **20**, 4 (1919), p.292-296.