



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

COMPARACIÓN ENTRE LAS PROPIEDADES DE LAS  
SOLUCIONES A LA ECUACIÓN LINEAL DE  
SCHRÖDINGER Y LA ECUACIÓN NO LINEAL DE  
SCHRÖDINGER EN UNA GUÍA DE ONDAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

F Í S I C O

P R E S E N T A :

LUIS ALBERTO GONZÁLEZ ARREGUÍN

TUTOR:

DR. RICARDO MÉNDEZ FRAGOSO

Ciudad Universitaria, CD. MX. 2024.





Universidad Nacional  
Autónoma de México



**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.

# Agradecimientos

Se agradece el apoyo de los proyectos DGAPA-UNAM IN105924 y PE109423.

Agradezco de manera especial a mi tutor, Ricardo Méndez Fragoso, por su incondicional apoyo, motivación y paciencia a lo largo de este trabajo. Las reuniones con él no solo fueron oportunidades para reflexionar sobre diversos temas, sino también momentos clave para adquirir los conocimientos que me han llevado hasta aquí.

Estimados miembros del jurado, quiero agradecerles sinceramente por su tiempo y valiosas observaciones durante la evaluación de mi tesis. Su apoyo ha sido fundamental en este proceso.

Quiero expresar mi reconocimiento a mis profesores universitarios, cuyo amor por la ciencia ha sido una constante fuente de inspiración que me ha motivado a seguir estudiando. Gracias por su dedicación y enseñanzas que han dejado una marca significativa en mi trayectoria académica.

A mi compañera de vida, Paola, le estoy profundamente agradecido. Sin su cariño y apoyo incondicional, este proyecto no habría llegado a su fin.

Quiero expresar mi profundo agradecimiento a mis padres, Alma y Alberto, por su infinito amor y sabiduría. Su fortaleza ha sido mi motor para seguir adelante, y las puertas que me han abierto han sido fundamentales para llegar hasta este momento.



# Índice general

<b>1. Introducción.</b>	<b>3</b>
1.1. Antecedentes . . . . .	4
1.1.1. La ecuación de Schrödinger lineal . . . . .	4
1.1.2. Unidades atómicas . . . . .	6
1.1.3. La ecuación de Schrödinger no lineal . . . . .	7
1.2. Contenido del trabajo . . . . .	9
<b>2. Soluciones de la ecuación de Schrödinger lineal en una dimensión.</b>	<b>11</b>
2.1. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo . . . . .	11
2.2. El potencial de pozo cuadrado infinito . . . . .	12
2.3. El potencial de pozo cuadrado finito . . . . .	16
2.4. Pozo finito integrando directamente . . . . .	23
2.5. Delta de dirac . . . . .	25
<b>3. Soluciones de la ecuación de Schrödinger no lineal en una dimensión</b>	<b>31</b>
3.1. Conteo de partículas en una guía de onda de materia ultra fría . . . . .	31
3.2. Integración directa de la ecuación de Schrödinger no lineal para un pozo cuadrado	32
3.3. Solución para un pozo cuadrado finito de la ENLS . . . . .	35
3.4. Primer estado excitado para el potencial pozo . . . . .	38
3.5. Propiedades de las soluciones para conteo de partículas . . . . .	39
<b>4. Resultados y discusión</b>	<b>43</b>
4.1. Comportamiento del estado base . . . . .	43
4.2. Comportamiento del primer estado excitado para el potencial pozo cuadrado . .	45
<b>5. Conclusiones</b>	<b>47</b>
5.1. Discusión . . . . .	47
<b>A. La ecuación de Schrödinger no lineal en óptica</b>	<b>49</b>
<b>B. Propiedades de las funciones elípticas de Jacobi</b>	<b>53</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>54</b>



# Capítulo 1

## Introducción.

*Nos hallamos en un mundo desconcertante. Queremos darle sentido a lo que vemos a nuestro alrededor y nos preguntamos: ¿Cuál es la naturaleza del universo? ¿Cuál es nuestro lugar en él y de dónde surgimos él y nosotros?*

*Stephen W. Hawking,  
Historia del tiempo.*

En esta tesis se aborda la pregunta fundamental de cómo encontrar una solución analítica a la Ecuación No Lineal de Schrödinger, para un potencial específico, y cómo se comparan estas soluciones con su contraparte lineal. En ambos casos se tratará el caso independiente del tiempo.

En el caso de la ecuación lineal, se abordan tres potenciales significativos. El primero estudiado es un pozo cuadrado infinito, de ancho  $a$ , que pesar de ser un potencial artificial, es de gran relevancia teórica. Se derivan soluciones para la función de onda y se identifican valores de energía permitidos. Se observa que estas soluciones exhiben una alternancia en, y a medida que la energía aumenta, la cantidad de nodos en la función también aumenta, características que se extienden a los otros potenciales y al caso no lineal.

El segundo potencial abordado es el de un pozo de potencial finito, de ancho  $2a$ , para el que se encuentran soluciones de la ecuación lineal de Schrödinger, demostrando que son de nuevo alternadamente pares e impares, así como la ecuación trascendental para las energías permitidas en el sistema. Se demuestra que la cantidad de soluciones depende del tamaño del pozo, y si este disminuye lo suficiente, todos los estados desaparecen excepto el primer estado par, que se conoce como el estado base y que se caracteriza por tener el menor valor propio de energía posible. Además, se exploran soluciones para energías mayores que las del pozo, demostrando que no son normalizables al representar estados no ligados. Se calculan los coeficientes de transmisión y reflexión al pasar por dicho potencial.

Finalmente, se abordan las soluciones para una distribución tipo delta de Dirac. Se demuestra que solo existe un estado ligado en este caso, y en los casos de estados no ligados, se calculan nuevamente los coeficientes de transmisión y reflexión.

A continuación, abordamos la ecuación de Schrödinger no lineal con un potencial de pozo cuadrado finito, que describe un condensado de Bose-Einstein en una trampa de profundidad finita. Este pozo representa el efecto de una guía de onda para un paquete de ondas de materia ultrafría. Resolvemos analíticamente el pozo y estudiamos específicamente los resultados en el umbral de deslocalización. Modelamos la guía de ondas con un potencial de pozo cuadrado unidimensional con profundidad  $V_0$  y longitud  $2R_0$  y estudiamos las semejanzas con el segundo potencial del caso lineal. Resolvemos de forma exacta la ecuación de Schrödinger no lineal e independiente del tiempo que describe un condensado de Bose-Einstein en el umbral de deslo-

calización. Informamos sobre el valor y el significado de la constante de acoplamiento no lineal máxima  $g_{max}$  y el número máximo de átomos  $N_{max}$  en el potencial descrito, para los estados base y primer estado excitado. Demostramos que  $g_{max}$  es función únicamente del tamaño reducido de la impureza  $\xi = \sqrt{V_0}R_0$ . También encontramos que el estado excitado en el umbral de deslocalización existe solo para  $\xi \geq \frac{\pi}{2\sqrt{2}}$ , siempre con un menor número de átomos que el estado fundamental correspondiente para el mismo tamaño reducido de impureza.

A pesar de la no linealidad propia en la ecuación no lineal de Schrödinger, también conocida como ecuación de Gross-Pitaevskii, se observa que existe una ley general de escala que se mantiene para impurezas con un  $\xi$  idéntico, vinculadas al mismo  $g_{max}$ . Se exploran las repercusiones de estos resultados en la determinación de las propiedades del paquete de ondas.

Al finalizar, se enfatiza la importancia de distinguir entre las diferencias y similitudes presentes entre los casos no lineales y lineales. El objetivo es permitir al lector comprender plenamente el significado y las repercusiones inherentes a la no linealidad. Este análisis comparativo proporciona una visión más profunda de cómo los fenómenos no lineales difieren de sus contrapartes lineales, así como también resalta las áreas donde se superponen, ofreciendo así una comprensión más completa del tema.

## 1.1. Antecedentes

### 1.1.1. La ecuación de Schrödinger lineal

La propuesta de ondas de materia realizada por el científico de Broglie<sup>1</sup> inspiró a Erwin Schrödinger a proponer una ecuación de onda que las describiera en 1926. Uno de los rasgos más llamativos de esta ecuación es que de ella se pueden obtener los números cuánticos de manera natural, sin necesidad de asumirlos, tal y como necesitaron hacerlo Planck y Bohr. Para obtener dicha ecuación comencemos recordando la función de una onda plana, en una dimensión, que se mueve a lo largo del eje  $x$ . Su desplazamiento en el punto “ $x$ ”, en el instante “ $t$ ”, viene dado por la parte real de la cantidad compleja:

$$A(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad (1.1)$$

donde  $\omega$  es la frecuencia angular de onda,  $k$  es el número de onda y  $A$  es la amplitud de la onda. La función de onda clásica  $A(x, t)$  representa una cantidad física real (lo que se mide) de algo que está oscilando, se sobreentiende que sólo podrá tomarse a fin de cuentas la parte real o la parte imaginaria de la función de onda. Si vamos a construir una función de onda que represente una onda de materia, podemos tomar como base una función de onda sinusoidal y podemos intuir que aparecerá en dicha función la relación de Louis de Broglie. Es así como, tentativamente, postulamos la siguiente función de onda para una onda de materia

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}. \quad (1.2)$$

Con el fin de describir la naturaleza corpuscular de la luz, Einstein propuso que la energía  $E$ , el número de onda  $k$  y el momento  $p$  pueden expresarse como

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad p = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \quad (1.3)$$

donde  $\nu$  es la frecuencia del fotón, de nuevo  $\omega = 2\pi\nu$  es la frecuencia angular,  $c$  es la velocidad de la luz,  $\lambda$  la longitud de onda del fotón y  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  la constante reducida de Planck. Utilizando esa propuesta podemos reescribir la función de onda en la Ec. (1.2) como

$$\Psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}. \quad (1.4)$$

---

<sup>1</sup>Nos referimos a la hipótesis de Louis de Broglie, que establece la relación onda-corpúsculo. Vea por ejemplo la sección 1 del Capítulo 3 de la Ref. [7].

Derivando dos veces la función de onda anterior con respecto a  $x$  obtenemos

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi. \quad (1.5)$$

La ecuación que caracteriza la energía de una partícula moviéndose a lo largo del eje  $x$  es:

$$E = E_c + V = \frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{p^2}{2m} + V \quad (1.6)$$

siendo  $E$  la energía total,  $E_c$  la energía cinética y  $V$  la energía potencial ( $V = V(x, t)$ ), ya que suponemos que se mueve solamente en una dimensión). Utilizamos esta expresión en nuestra búsqueda de una ecuación para ondas de materia. Sustituyendo la expresión (1.6) en la Ec. (1.5) conseguimos

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = 2m(E\Psi - V\Psi). \quad (1.7)$$

Por otra parte derivando la función de onda con respecto a  $t$  podemos obtener la energía de la siguiente forma

$$E\Psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi, \quad (1.8)$$

sustituyendo esto en la Ec. (1.7) obtenemos finalmente, después de acomodar los términos, obtenemos la siguiente expresión

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t). \quad (1.9)$$

La ecuación que acabamos de obtener es de primer orden en el tiempo, en vez de ser una ecuación de segundo orden en el tiempo como su análoga clásica, este es nuestro primer indicio de que las ondas de materia poseen un comportamiento diferente al de las ondas clásicas. Debemos recordar que mientras que los fotones, los cuantos de luz, se mueven a la velocidad de la luz, a las partículas materiales no les es posible debido a las limitaciones impuestas por la teoría de la relatividad.

El término que se encuentra en corchetes en la Ec. (1.9) se le conoce como operador Hamiltoniano, que en mecánica clásica es la suma de la energía potencial y cinética, la Ec. (1.9) puede reescribirse como

$$\hat{H}\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t). \quad (1.10)$$

La ecuación anterior fue postulada por primera vez en 1926 por Erwin Schrödinger y por ello se le conoce como la “ecuación de Schrödinger”. Como mencionan Eisberg y Resnik [7] esta ecuación no puede ser derivada a partir de otros postulados más elementales, al igual que las leyes de Newton y los teoremas de la geometría clásica no pueden ser deducidos a partir de otros postulados más elementales que los propuestos por Euclides. Se pueden dar argumentos de cómo obtenerla intuitivamente, pero a final de cuentas tenemos que aceptarla como un postulado. Mientras que Griffiths [9] indica que realmente la validez de la ecuación se debe a que ha sido confirmada mediante los resultados que se obtienen de ella.

Cabe apuntar que no es posible esperar que la ecuación de Schrödinger sea válida cuando se aplica a partículas que se mueven a velocidades relativistas. Esto es así ya que la ecuación fue diseñada para ser congruente con la Ec. (1.6), que es la ecuación de la energía clásica y que es incorrecta para velocidades comparables con la velocidad de la luz. Afortunadamente buena parte de los casos que son de interés en la vida cotidiana no son relativistas.

Notemos que para resolver un problema dado se tiene que dar la forma del potencial  $V(x)$ , esto determina la forma particular de la ecuación diferencial que satisface la función de onda, pero una vez resuelta, ésta contiene toda la información de la partícula.

Aunque la función de onda no tiene una interpretación física directa (ya que sus soluciones son cantidades no observables) el cuadrado de la función de onda nos da la probabilidad de encontrar a la partícula en el punto  $x$  al tiempo  $t$ , es decir que el cuadrado de la función de onda en un punto representa la densidad de probabilidad en dicho punto <sup>2</sup>. Como la probabilidad de un evento debe estar entre cero (no ocurrencia), hasta uno (certeza absoluta de ocurrencia), debemos normalizar la función de onda. Para aclarar el punto anterior podemos imaginar una partícula de masa  $m$ , confinada a moverse a través del eje  $x$ , en mecánica cuántica tratamos de encontrar la función de onda  $\Psi(x, t)$  de dicha partícula y la obtenemos, dadas ciertas condiciones iniciales, resolviendo la ecuación de Schrödinger. La función de onda es determinada por la ecuación de Schrödinger para cualquier tiempo futuro y, según la interpretación estadística de Born,  $|\Psi(x, t)|^2$  es la probabilidad de encontrar la partícula en el punto  $x$  al tiempo  $t$

$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \begin{cases} \text{probabilidad de encontrar la partícula} \\ \text{entre } a \text{ y } b \text{ al tiempo } t \end{cases} \quad (1.11)$$

la probabilidad es el área bajo la curva de  $|\Psi(x, t)|^2$ . La interpretación estadística introduce una indeterminación en la mecánica cuántica, incluso si conocemos todo sobre la partícula no podemos predecir con certeza la posición de la partícula, solamente tenemos información estadística de los posibles resultados. Como la partícula debe estar en algún lado, la integral de  $|\Psi(x, t)|^2$  debe ser igual a 1,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (1.12)$$

sin esto la interpretación estadística no tendría sentido. Notemos que si  $\Psi(x, t)$  es solución de la ecuación de Schrödinger, entonces  $A\Psi(x, t)$  también lo es, donde  $A$  es cualquier constante (compleja), por lo que se debe tomar  $A$  de forma en que lo anterior se satisfaga (solución de cuadrado integrable). A este proceso se le llama normalización.

En mecánica cuántica usualmente el promedio es la cantidad de interés que queremos obtener, en ese sentido se le ha llegado a nombrar a esa cantidad “valor esperado”. Por ejemplo para una partícula en el estado  $\Psi$ , el valor esperado de  $x$  (la posición) sería

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (1.13)$$

pero hay que poner atención en el término “valor esperado”, ya que el nombre sugiere que es el resultado que obtendríamos más probablemente al hacer una sola medición (eso sería el valor más probable, no el promedio), de hecho podría ser que el valor esperado ni siquiera sea un valor posible entre los resultados de las mediciones, y tampoco significa, como en el caso clásico, que si realizamos medidas de posición de una partícula una y otra vez,  $\langle x \rangle$  es el promedio de los resultados que vamos a obtener. Al contrario, al realizar la primera medición (cuyo resultado es indeterminado) colapsaríamos la función de onda a un pico, que sería el valor que realmente obtuvimos y las mediciones siguientes simplemente repetirían el mismo resultado. Más bien,  $\langle x \rangle$  es el promedio de los resultados de las medidas realizadas en partículas que están todas en el estado  $\Psi$ . Griffiths sostiene que el valor esperado es el promedio de mediciones repetidas en un conjunto de sistemas idénticamente preparados (no confundir con el promedio de mediciones en el mismo sistema), [9].

### 1.1.2. Unidades atómicas

Como se pudo ver, la ecuación de Schrödinger incluye dos constantes, tenemos  $m$  que representa la masa de la partícula y  $\hbar$ , la constante reducida de Planck, que tiene un valor aproximado de  $1.054\ 571\ 817 \times 10^{-34}$  Js, [7]. Es importante recalcar que cuando se habla de partícula, en el

<sup>2</sup>A esto se le conoce como interpretación estadística de Born, ver sección 1, capítulo 1 de la Ref. [9]

caso de este trabajo, nos estamos refiriendo a un estado puro de una partícula cuántica, que está descrito por la función  $\Psi$  normalizada.

En física atómica es muy común utilizar unidades diferentes a las del sistema internacional, la razón es que simplifican mucho los cálculos y al ser constantes las que se reescalan, no se altera de ninguna forma las propiedades de las partículas que buscamos describir. Las unidades que utilizaremos se conocen como unidades atómicas. Existen diferentes tipos de unidades atómicas, pero consideraremos primero las unidades atómicas de Hartree para explicar la simplificación.

La idea radica en tomar seis constantes como la unidad:

1. Dos propiedades del electrón: la masa y carga.
2. Dos propiedades del átomo de hidrógeno que son el radio de Bohr ( $a_0$ ) y el valor absoluto de la energía potencial eléctrico en el estado fundamental.
3. Dos constantes, la Constante de Planck reducida y la constante de la Ley de Coulomb.

Pero estas propiedades no son independientes, para comprobar (por ejemplo), como la normalización de la energía de Hartree es consecuencia de normalizar estas constantes, podemos utilizar el análisis dimensional. Así, si consideramos las dimensiones del operador de energía cinética en unidades del Sistema Internacional, tenemos que el Hartree se puede expresar como

$$E_H = \frac{\hbar^2}{a_0^2 m_e} \quad (1.14)$$

expresión que queda naturalmente normalizada por el cambio de unidades.

En nuestro caso solamente estamos utilizando  $m$  y  $\hbar$  como si fueran iguales a una unidad, pero para generalizar (no solamente utilizar la masa del electrón) en vez de utilizar la energía convencional  $E$  que aparece en la ecuación de Schrödinger utilizaremos el símbolo  $\varepsilon$  para la energía con el cambio a unidades atómicas.

Con estas consideraciones podemos reescribir la Ec. (1.9) en unidades atómicas de la siguiente forma:

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \Psi(x, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t). \quad (1.15)$$

en adelante usaremos unidades atómicas, solamente tendremos la excepción en la sección 2.1, para mostrar cómo se trabaja con la Ec. (1.9) con y sin ellas.

### 1.1.3. La ecuación de Schrödinger no lineal

En esta sección se resume de forma breve la manera de obtener la ecuación no lineal Schrödinger, ya que será de mucha utilidad en el Capítulo 3. Para ello se utiliza como base la explicación que viene en la referencia [6]. Una consideración clave de la Ec. (1.9) es que constituye un modelo que describe la evolución temporal de una partícula con masa. En el contexto de la mecánica cuántica, esta ecuación es fundamental ya que representa, aunque con diferencias, un equivalente a la segunda ley de Newton en la mecánica clásica. Aquí, los valores propios del Hamiltoniano corresponden a las posibles energías del sistema. Vale la pena recordar que la función normalizada  $\Psi$  describe el estado cuántico de una partícula, donde  $\int_{\Omega} |\Psi(x)|^2 dx$  representa la probabilidad de encontrar la partícula en la región  $\Omega$ . La evolución temporal de esta función está determinada por el operador Hamiltoniano  $H = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V$ , donde  $\nabla^2$  denota el Laplaciano representando la energía cinética y  $V$  representa la energía potencial de la partícula. Es importante señalar que este formalismo es equivalente al resultado presentado en la Ec. (1.9), aunque este último se obtuvo para una dimensión única exclusivamente. El operador  $-\frac{1}{2} \nabla^2 + V$  es simétrico y tiene un límite inferior acotado (esto ya que existe un valor mínimo del potencial y que la función debe estar normalizada, por lo que en infinito positivo y negativo debe ir a cero).

Dependiendo de la situación física la ecuación de Schrödinger toma diferentes formas. En el caso particular de nuestro trabajo nos interesa ampliar la teoría al caso del estado base del Hamiltoniano de un sistema de muchas partículas, más específicamente hablaremos de un sistema de  $N$  partículas, donde  $N$  es grande y el radio de interacción de las partículas es pequeño. Estas características son de interés por sus múltiples aplicaciones, en particular en la condensación de Bose-Einstein (BEC), que es el estado de agregación de la materia que se da en ciertos materiales a muy bajas temperaturas. La propiedad que lo caracteriza es que una cantidad macroscópica de las partículas del material pasan al nivel de mínima energía, denominado estado fundamental o estado base. El condensado es una propiedad cuántica, que no tiene análogo clásico.

La aproximación más simple para la función de onda de un sistema de muchas partículas es el producto de los estados de cada partícula simple. En el caso de un BEC para considerado a  $T = 0$ , esta aproximación es usualmente conocida como la aproximación de campo medio o la aproximación de Gross-Pitaevskii. Con esta aproximación se obtiene una ecuación muy conveniente para cálculos numéricos.

Consideremos un gas de  $N$  partículas, todas de la misma especie, en equilibrio a temperatura cero y confinados por medio de un potencial atractivo que no depende del tiempo,  $V(x)$ . Usando la teoría de Hartree [10], se tiene que el estado fundamental es

$$\phi_N(x_1 \dots x_N) = \prod_{i=1}^N \psi_0(x_i) \quad (1.16)$$

donde  $\psi_0$  es la función de onda normalizada de una partícula, esta es la aproximación más simple para la función de onda de un sistema de muchas partículas. El Hamiltoniano (de  $N$  partículas en este caso) está dado por

$$H_{N,a} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V(x_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} v(x_i - x_j), \quad (1.17)$$

note que de nuevo utilizamos unidades atómicas en la expresión anterior. Aquí el potencial externo  $V$  debe ser una función real y localmente acotada, satisfaciendo  $\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) = \infty$ . Entonces no hay restricción para asumir  $V \geq 0$ . El potencial de interacción  $v$  se supone positivo (es decir, repulsivo) y radial.

Llamamos  $a$  al rango de interacción de las partículas, buscamos  $N$  grande y  $a$  pequeña, de hecho el caso de interés es cuando  $a \sim N^{-1}$  y si  $N$  es suficientemente grande, entonces  $4\pi Na \rightarrow g$ . El término  $4\pi$  hace referencia a la dispersión de las partículas por efecto de la interacción, y a  $g$  se le conoce como constante de interacción efectiva.

Utilizando la función de onda mostrada en la Ec. (1.16) el valor esperado de la energía es

$$\langle H \rangle_N = \int \left[ \left| \frac{1}{2} \nabla \psi_0(x) \right|^2 + V(x) |\psi_0(x)|^2 \right] dx + \frac{1}{2} Ng \int |\psi_0(x)|^4 dx \quad (1.18)$$

con  $g = 4\pi a(N - 1)$ . Minimizando la ecuación anterior, sujeta a la condición de normalización de  $\psi_0$ , se obtiene la ecuación de Hartree para los bosones del condensado.

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \psi_0(x) + V(x) \psi_0(x) + Ng |\psi_0(x)|^2 \psi_0(x) = \mu \psi_0(x), \quad (1.19)$$

multiplicando la Ec. (1.19) por  $\psi_0^*(x)$ , integrando sobre  $x$ , y usando el hecho de que  $\langle H \rangle_N$  es estacionario frente a pequeñas variaciones de  $\psi_0(x)$ , vemos que  $\mu$  es igual a  $\frac{\delta \langle H \rangle_N}{\delta N}$ , es decir, al potencial químico. Normalmente se reescribe la ecuación de Schrödinger no lineal Ec. (1.19) en términos del parámetro de orden  $\Psi(x)$  que se define por la siguiente ecuación:

$$\Psi(x) = \sqrt{N_0} \psi_0(x), \quad (1.20)$$

con  $N_0 = N$  a temperatura cero. Entonces, se tiene que la Ec. (1.19) se convierte en

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\Psi(x) + V(x)\Psi(x) + g|\Psi(x)|^2\Psi(x) = \mu\Psi(x) \quad (1.21)$$

Con  $\Psi(x)$  normalizada a  $\int|\Psi(x)|^2 dx = 1$ . La Ec. (1.21) es la ecuación de Gross-Pitaevskii, también reconocida como la ecuación no lineal de Schrödinger independiente del tiempo (NLSE por sus siglas en inglés). Cabe mencionar que en este trabajo utilizaremos las siglas ENLS para referirnos de forma compacta a la ecuación no lineal de Schrödinger.

Para entender exactamente lo que obtuvimos en la Ec. (1.21) vamos a recapitular lo que hemos escrito. En primer lugar es una ecuación modelo para la función de onda de partícula en un condensado de Bose-Einstein, tiene exactamente la misma forma que la Ec. (1.9) con la excepción de un término que representa la interacción de las partículas, que es proporcional a  $g$  (la constante de interacción efectiva), que en unidades del S.I. se vería

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a(N-1)}{m} \quad (1.22)$$

donde  $a$  representa el radio de interacción de las partículas,  $m$  la masa de las partículas individuales,  $N$  el número de partículas y  $\hbar$  la constante de Planck reducida. Recordando que  $V(x)$  es el potencial externo y finalmente el término  $\mu$  representa el potencial químico que se encuentra con la condición de que el número de partículas esté relacionado con la función de onda por  $\int|\psi_0(x)|^2 dx = N$ .

La ecuación de Schrödinger no lineal no solamente se manifiesta en el caso específico abordado en esta tesis, que se centra en guías de ondas, sino que también emerge como una herramienta fundamental en diversos problemas físicos. La ENLS se encuentra involucrada en una amplia gama de fenómenos, abarcando desde la mecánica de fluidos hasta la física de plasma y la óptica no lineal. Su presencia en estos contextos resalta la versatilidad y aplicabilidad de esta ecuación en la descripción de fenómenos físicos complejos y diversos en diferentes ramas de la ciencia, como menciona Carr, L. en [2]. Además de esta formulación, se puede encontrar una adicional en el apéndice A, que aunque obtiene una ecuación no lineal análoga, esta se hizo para el problema específico de solitones en óptica.

## 1.2. Contenido del trabajo

Este trabajo se dedica a resolver las ecuaciones de Schrödinger, tanto en su versión lineal como no lineal, para potenciales específicos. Exploraremos las distinciones y significados inherentes a cada caso, y además, analizaremos los casos límite en los cuales ambas ecuaciones convergen hacia la misma solución. Este análisis nos proporcionará una comprensión más clara de las particularidades de cada tipo de función de onda y nos permitirá discernir sus implicaciones específicas.

La estructura del trabajo sigue la siguiente organización. En el Capítulo 2, se obtiene primero, en la sección 2.1, la ecuación lineal de Schrödinger independiente del tiempo. Posteriormente, se presentan soluciones analíticas para dicha ecuación, abordando estados ligados y no ligados para los potenciales de pozo infinito (sección 2.2), pozo finito (sección 2.3) y delta de Dirac (sección 2.5). En cada caso, se derivan ecuaciones trascendentales para las energías permitidas, explorando también los casos límites asociados. Además, en la sección 2.4, se introduce un método alternativo para la integración directa de la ecuación, que resultará útil en el caso no lineal.

En el Capítulo 3, se presentan soluciones para la ENLS independiente del tiempo. Primero, se explora la importancia y el significado de la constante de acoplamiento no lineal,  $g$ , en la sección 3.1. Luego, en la sección 3.2, se obtiene una solución analítica de la ENLS para el potencial de pozo finito en el umbral (cuando  $\mu = 0$ ), utilizando un método similar al de la sección 2.4. La sección 3.3 analiza la solución obtenida, concluyendo que solo existe un único estado par, es decir,

el estado base, proporcionando expresiones para este estado y para  $g$ . La sección 3.4 presenta la solución analítica de la ENLS, nuevamente con  $\mu = 0$ , para el primer estado excitado (solución impar), junto con una expresión para  $g$  en este caso. La sección 3.5 discute los perfiles de las soluciones para las diferentes  $g$ .

En el Capítulo 4, se presentan los resultados obtenidos, destacando en la sección 4.1 tanto la función de onda del estado base como su comportamiento, y en la sección 4.2 se muestra la función de onda del primer estado excitado y su comportamiento. El Capítulo final, 5, proporciona las conclusiones de nuestros hallazgos.

Los apéndices contienen una forma alternativa de encontrar la ENLS, propiedades de las funciones elípticas de Jacobi que forman parte de la solución de la ENLS, y se describe el procedimiento numérico utilizado en el trabajo.

## Capítulo 2

# Soluciones de la ecuación de Schrödinger lineal en una dimensión.

### 2.1. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Para obtener la función de onda que debe resolver la ecuación de Schrödinger para un potencial específico  $V(x, t)$ , supondremos que el potencial no varía en el tiempo (como será en todos los problemas en éste trabajo). De esta manera, la ecuación diferencial se puede resolver por el método de separación de variables, donde buscamos soluciones que sean un producto

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \varphi(t) , \quad (2.1)$$

donde  $\psi$  es una función de  $x$  solamente y  $\varphi$  es una función de  $t$  solamente. Sustituyendo en la Ec. (1.9)

$$i\hbar\psi \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} \varphi + V\psi\varphi . \quad (2.2)$$

Notemos que las derivadas ahora son ordinarias, dividiendo por  $\psi\varphi$  obtenemos

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V . \quad (2.3)$$

El lado izquierdo es una función de  $t$  solamente y el lado derecho de  $x$  solamente. La única forma posible de que esto sea cierto es si ambos lados son iguales a una constante, llamamos a esta constante de separación  $E$ . Por lo tanto

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} \varphi , \quad (2.4)$$

y

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi . \quad (2.5)$$

La primera de estas dos últimas, Ec. (2.4), se resuelve integrando directamente, obteniendo como solución

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (2.6)$$

la segunda, Ec. (2.5), es llamada ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y para ser resuelta se debe especificar el potencial  $V(x)$ . Griffiths [9] hace notar que las soluciones obtenidas con separación de variables tienen varias características:

1. Son estados estacionarios (la función de onda depende de  $t$  pero la densidad de probabilidad no)

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^* \Psi = \psi^* e^{iEt/\hbar} \psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2 . \quad (2.7)$$

2. Son estados con energía total definida ya que la energía total es el hamiltoniano y podemos escribir la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo como:

$$\hat{H}\psi = E\psi . \quad (2.8)$$

Es decir que en cualquier medida de la energía total se obtendrá el valor de  $E$ .

3. La solución general de la ecuación de Schrödinger es una combinación lineal de las soluciones encontradas por separación de variables, es decir, por cada energía permitida ( $E_1, E_2$ , etc...) existe una solución separable ( $\psi_1, \psi_2$ , etc...), y la solución general es la combinación lineal de estas

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} . \quad (2.9)$$

Notemos que de haber usado unidades atómicas en este proceso la solución sería exactamente igual, simplemente debemos tomar  $m$  y  $\hbar$  como 1 y ocupar  $\varepsilon$  en lugar de  $E$ , de forma que la Ec. (2.5) queda simplemente como

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = \varepsilon\psi , \quad (2.10)$$

y la Ec. (2.6) queda como

$$\varphi(t) = e^{-i\varepsilon t} . \quad (2.11)$$

## 2.2. El potencial de pozo cuadrado infinito

Es fundamental recordar que para abordar la solución de la ecuación diferencial presentada en la Ec. (2.5) es esencial conocer la forma específica del potencial  $V$ . En este contexto, consideremos el siguiente potencial, cuya representación gráfica se muestra en la Figura 2.1. Este potencial proporcionará el marco necesario para explorar y derivar las soluciones correspondientes a la ecuación independiente del tiempo, permitiendo así una comprensión más profunda de su comportamiento y características asociadas.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \geq a \quad \text{y} \quad x \leq 0 \end{cases} \quad (2.12)$$

Una partícula en este potencial es completamente libre excepto en los límites  $x = 0$  y  $x = a$ , en donde una fuerza infinita previene que escape. Fuera del pozo la ecuación de Schrödinger es cero ( $\psi(x) = 0$ ) ya que la partícula no puede escapar del potencial y la probabilidad de encontrarla en esta zona es cero. Dentro del pozo, donde  $V = 0$ , la ecuación de Schrödinger (2.5) se convierte en

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\kappa^2\psi , \quad (2.13)$$

con

$$\kappa = \sqrt{2\varepsilon} . \quad (2.14)$$

Advierta que  $\kappa$  es real y positivo ( $\varepsilon < 0$  no existe ya que la función no sería de cuadrado integrable y por lo tanto no tendría sentido físico). La ecuación (2.13) es la de un oscilador armónico simple, cuya solución general es <sup>1</sup>

$$\psi(x) = A \sin(\kappa x) + B \cos(\kappa x) \quad (2.15)$$

<sup>1</sup>Ver Debnath (2005) [5], cap. 1, sec. 1.6 , pag. 26

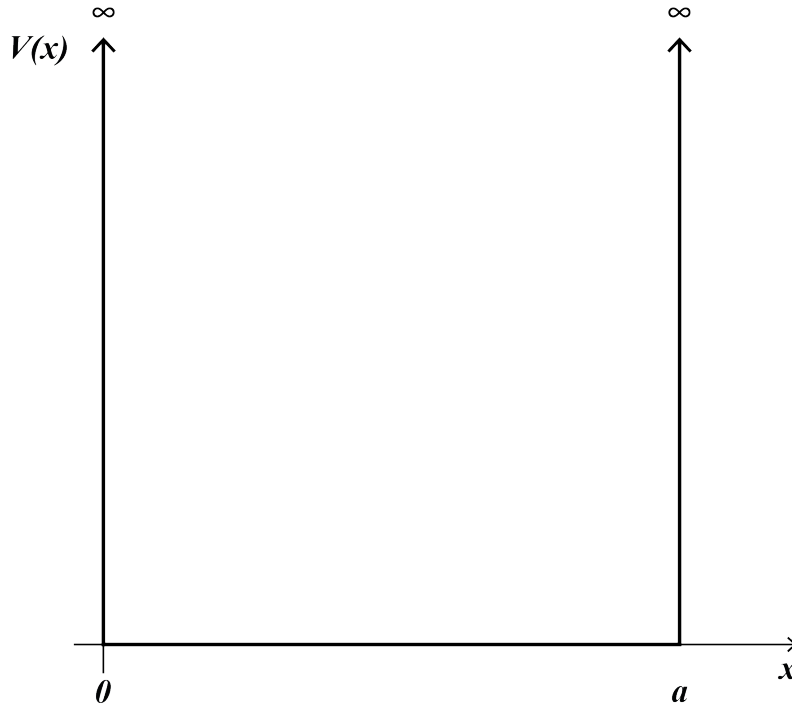


Figura 2.1: El potencial pozo cuadrado infinito, Ec. (2.12).

Con  $A$  y  $B$  constantes arbitrarias, de las cuales podemos encontrar su valor haciendo cumplir las condiciones de frontera (normalmente  $\psi$  y  $\frac{d\psi}{dx}$  deben ser continuas en las fronteras  $0$  y  $a$ , pero donde el potencial es infinito solo aplica la primera de estas condiciones), por lo tanto requerimos

$$\psi(0) = \psi(a) = 0, \quad (2.16)$$

y sustituyendo la condición de frontera tenemos que

$$\psi(0) = A \sin(0) + B \cos(0) = B \quad (2.17)$$

entonces  $B = 0$  y por lo tanto

$$\psi(x) = A \sin(x) \quad (2.18)$$

luego  $\psi(a) = A \sin(\kappa a)$ , entonces  $A = 0$ , en cuyo caso tendríamos simplemente una solución trivial,  $\psi(x) = 0$ , y por lo tanto descartamos esta opción. De esta manera la condición es que  $\sin(\kappa a) = 0$ , lo que significa que

$$\kappa a = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots \quad (2.19)$$

de nuevo  $\kappa = 0$  no nos sirve (obtenemos de nuevo  $\psi(x) = 0$ ), y las soluciones negativas no nos dan nada nuevo ya que  $-\sin(x) = \sin(-x)$  y podemos absorber el signo negativo dentro de  $A$ . Por lo que las soluciones distintas son

$$\kappa_n = \frac{n\pi}{a}, \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.20)$$

y por lo tanto los valores posibles de la energía son

$$\varepsilon_n = \frac{\kappa_n^2}{2} = \frac{n^2 \pi^2}{2a^2}. \quad (2.21)$$

Contrario a un caso clásico, la energía de la partícula en el pozo cuadrado infinito solamente puede tener ciertos valores permitidos, se dice entonces que la energía total de la partícula en

la caja está cuantizada. Para visualizarlo mejor se presentan las soluciones graficadas en la Fig. 2.2, para el caso específico de  $a = 1$ .

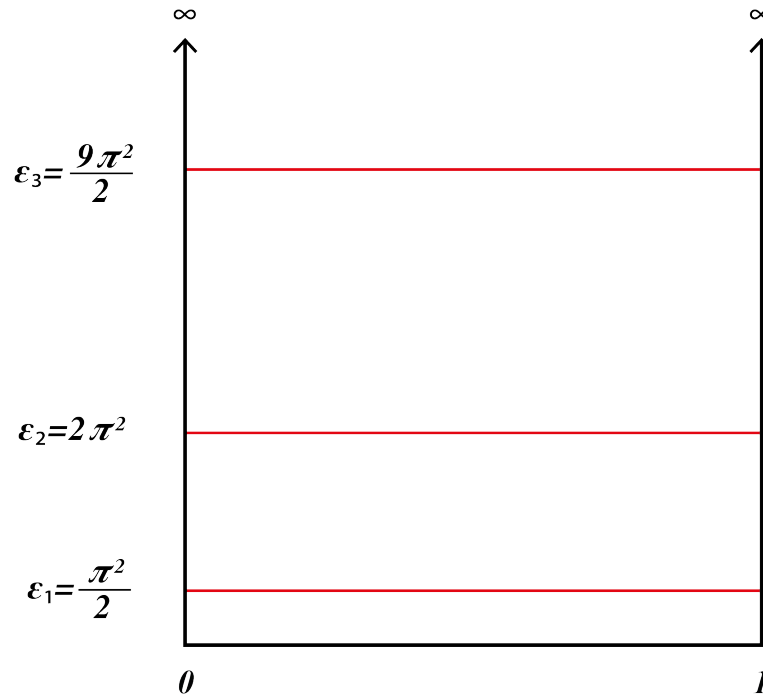


Figura 2.2: Energías pozo cuadrado infinito

La primer energía es particularmente interesante, que para el pozo infinito tiene un valor de  $\epsilon_1 = \frac{\pi^2}{2a^2}$ , ya que es la energía total más baja que puede tener la partícula si está ligada a la región  $0 < x < a$  por el potencial del pozo cuadrado infinito. Note que la partícula no puede tener energía total cero. Para comprobar esto solo basta observar que si la partícula está ligada al potencial, la incertidumbre en su coordenada  $x$  es aproximadamente  $\Delta x \simeq a$ . En consecuencia, la incertidumbre en su impulso deberá ser al menos  $\Delta p \simeq 1/2\Delta x$ . El principio de incertidumbre no puede permitir que la partícula esté ligada al potencial con energía total cero ya que esto significaría que la incertidumbre en el impulso debería ser igual a cero.

Para completar la solución nos falta obtener el valor de  $A$ . Para ello, vamos a normalizar la Ec. (2.18), siguiendo el siguiente proceso:

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2(\kappa x) dx = |A|^2 \frac{a}{2} = 1, \quad \text{entonces} \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}, \quad (2.22)$$

esto solamente determina la magnitud de  $A$ , podemos tomar por simplicidad la raíz positiva ya que la fase de  $A$  no tiene ningún significado físico. Las soluciones dentro del pozo quedan finalmente

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad (2.23)$$

las primeras soluciones de este conjunto están graficadas en la Fig. 2.3 (también para el caso específico  $a = 1$ ). Vea que se utilizó también, al igual que en la Ec. (2.21), el número cuántico  $n$  para denotar las diferentes soluciones de las ecuaciones trascendentales y las funciones correspondientes.

$\psi_1$ , que es la solución de menor energía, es llamada estado base y las demás (cuyas energías aumentan con  $n^2$ ) son llamadas estados excitados. Como grupo, las funciones  $\psi_n(x)$  tienen algunas propiedades interesantes:

1. Son alternativamente pares e impares, con respecto al centro del pozo (El número de mitades de longitudes de onda de cada función es igual al número cuántico  $n$ ).

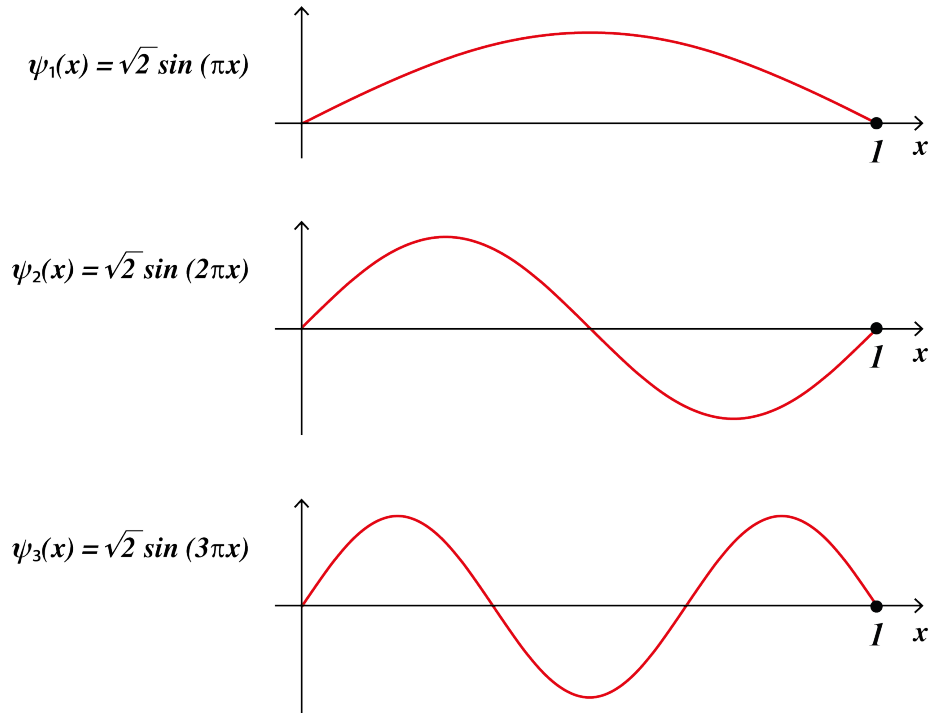


Figura 2.3: Soluciones pozo cuadrado infinito.

2. Conforme aumenta la energía también aumenta la cantidad de nodos de la función. El número de nodos se relaciona con el número cuántico  $n$ , siendo el número de nodos igual a  $n + 1$ .
3. Son funciones ortonormales, es decir que cumplen

$$\int \psi_m(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn} , \quad (2.24)$$

donde  $\delta_{mn}$ , la llamada delta de Kronecker, es definida como

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & \text{si } m \neq n \\ 1, & \text{si } m = n \end{cases} \quad (2.25)$$

4. Son un grupo de funciones completas, es decir que cualquier otra función de onda  $f(x)$  puede expresarse como una combinación lineal de ellas:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (2.26)$$

Estas cuatro propiedades no son únicas del pozo infinito de potencial. La primera es cierta para cualquier potencial que sea par y la segunda es universal (en una dimensión), sin importar la forma del potencial. La tercera y cuarta se mantienen para cualquier potencial de estudio de este trabajo.

Con el objetivo de observar la solución integral del problema, en la Fig. 2.4 se muestran las primeras funciones del pozo con sus respectivos valores de energía. Puede comprobar que estos resultados son congruentes con los presentados en [9], [7] y [11]

La solución general para la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es una combinación lineal de los estados estacionarios:

$$\Psi_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2/2a^2)t} . \quad (2.27)$$

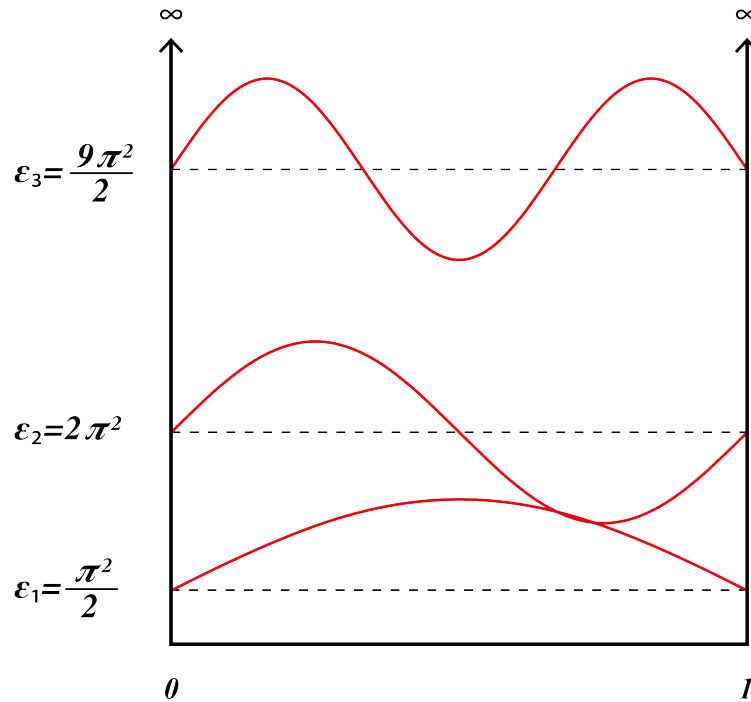


Figura 2.4: El pozo cuadrado finito, Ec. (2.28)

Esta es la solución más general de la ecuación de onda y con ésta podemos calcular cualquier cantidad dinámica de interés.

### 2.3. El potencial de pozo cuadrado finito

Considere el siguiente potencial (Fig. 2.5)

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases} \quad (2.28)$$

A diferencia del caso presentado en la sección 2.2, para el potencial anterior existen soluciones en las regiones exteriores al pozo, por eso se debe ser meticuloso al trabajar cada una de las regiones y luego “pegar” las soluciones utilizando las condiciones de frontera.

Obtendremos primero las soluciones para  $\varepsilon < 0$ . En la región  $x < -a$  el potencial es cero, por lo que la ecuación de Schrödinger queda

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi, \quad (2.29)$$

donde  $\kappa = \sqrt{-2\varepsilon}$  es real y positivo. La solución general de esta ecuación diferencial es  $\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$  pero el primer término tiende a infinito si  $x$  tiende a menos infinito, para que la solución sea de cuadrado integrable, lo cual es necesario para ser una solución aceptable, debemos concluir que la única solución posible es

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}, \quad \text{para } x < -a. \quad (2.30)$$

En la región  $-a < x < a$  el potencial es  $-V_0$  por lo que la ecuación de Schrödinger que se debe resolver ahora es

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\gamma^2\psi, \quad (2.31)$$

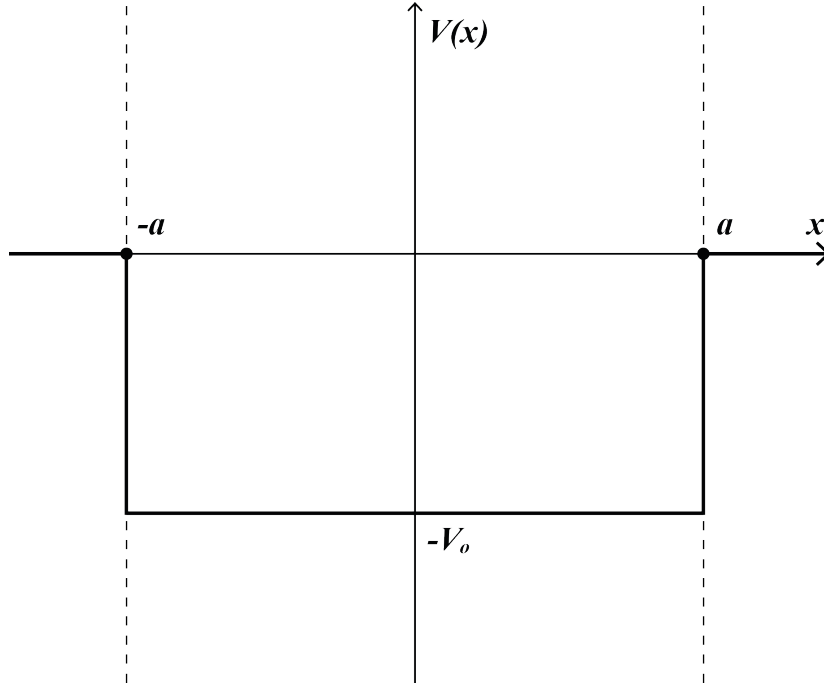


Figura 2.5: El pozo cuadrado finito, Ec. (2.28)

donde  $\gamma = \sqrt{2(\varepsilon + V_0)}$ . Aunque  $\varepsilon$  sea negativa, para estados ligados debe ser mayor que el potencial. De hecho, en este caso la energía debe cumplir  $\varepsilon > V_{min}$ , o no sería una función normalizable, por lo que  $\gamma$  también es positiva y real. La solución general de esta ecuación diferencial es

$$\psi(x) = C \sin(\gamma x) + D \cos(\gamma x), \quad \text{para } -a < x < a. \quad (2.32)$$

Finalmente en la región  $x > a$  el potencial es cero de nuevo, por lo que la solución general vuelve a ser  $\psi(x) = F e^{-\kappa x} + G e^{\kappa x}$  pero ahora es el segundo término el que tiende a infinito si  $x$  tiende a infinito, y por lo tanto la única solución posible es

$$\psi(x) = F e^{-\kappa x}, \quad \text{Para } x > a. \quad (2.33)$$

Ahora para encontrar la solución completa del problema debemos hacer cumplir las condiciones de frontera ( $\psi$  y  $\frac{d\psi}{dx}$  deben ser continuas en las fronteras  $-a$  y  $a$ ). Pero ya que nuestro potencial es par, podemos asumir sin pérdida de generalidad que las soluciones son pares o impares. La ventaja de esto es que al imponer las condiciones de frontera en un lado obtenemos automáticamente las del otro lado ya que  $\psi(-x) = \pm\psi(x)$ .

Obtengamos la solución par primero, el coseno es par, por lo que las soluciones son de la forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} F e^{-\kappa x}, & \text{Para } x > a \\ D \cos(\gamma x), & \text{Para } 0 < x < a \\ \psi(-x), & \text{Para } x < 0 \end{cases} \quad (2.34)$$

de la continuidad de  $\psi(x)$  en  $x = a$  obtenemos

$$F e^{-\kappa a} = D \cos(\gamma a), \quad (2.35)$$

y de la continuidad de  $\frac{d\psi}{dx}$  obtenemos

$$-\kappa F e^{-\kappa a} = -\gamma D \sin(\gamma a), \quad (2.36)$$

dividiendo estas ecuaciones encontramos que

$$\kappa = \gamma \tan(\gamma a). \quad (2.37)$$

La anterior es una ecuación trascendental para las energías permitidas en el sistema. Notemos que  $\kappa^2 + \gamma^2 = 2V_0$ , por lo que podemos tomar  $z = \gamma a$  y  $z_0 = a\sqrt{2V_0}$  para obtener

$$\tan(z) = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1} \quad (2.38)$$

donde  $z_0$  es una medida del pozo de potencial. Esta ecuación puede resolverse de forma gráfica buscando los puntos de intersección entre  $\tan z$  (en azul en la gráfica) y  $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$  (en rojo en la gráfica), como se observa en la Fig. 2.6.

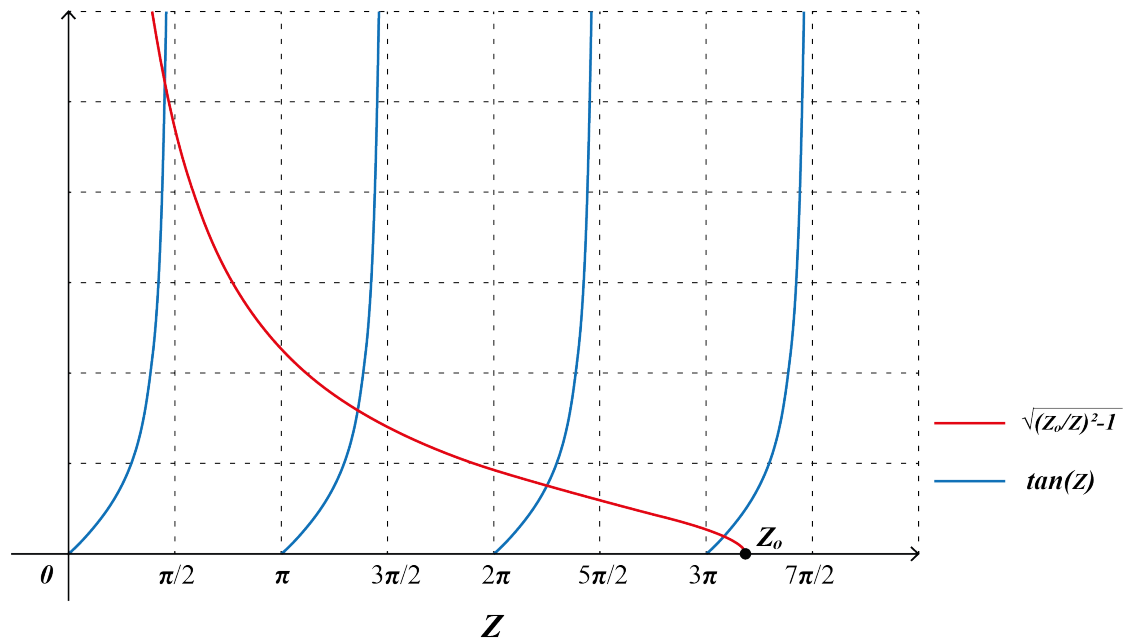


Figura 2.6: Solución gráfica de la Ec. (2.38), para  $z_0 = 10$

Hay algunas de notas de interés de la solución gráfica:

1. Se puede observar que el número de estados ligados depende del tamaño del pozo. Si  $z_0$  decrece (es decir que el tamaño del pozo decrece) la cantidad de estados estacionarios permitidos dentro del pozo también disminuye y si su valor es menor o igual que  $\pi/2$  (es decir  $V_0 \leq \frac{\pi^2}{2(2a)^2}$ ), sólo quedaría un estado ligado (siempre hay por lo menos 1 estado ligado par, sin importar que tan débil sea el pozo).
2. Otro caso de interés es cuando  $z_0$  es muy grande, en este caso las intersecciones ocurren justo en  $z_n = n\frac{\pi}{2}$  (con  $n$  impar) y por lo tanto tenemos

$$\varepsilon_n + V_0 \cong \frac{n^2\pi^2}{2(2a)^2}, \quad (2.39)$$

donde el lado derecho corresponde con las energías permitidas en el pozo infinito, Ec. (2.21) (o más exactamente la mitad de ellas ya que la otra mitad vienen de las soluciones impares), para un pozo de ancho  $2a$  (el lado izquierdo es simplemente la medida del valor de la energía desde el fondo del pozo).

Una vez resuelta la ecuación trascendente, se pueden obtener las soluciones de la ecuación de Schrödinger independientes del tiempo. Para esto necesitamos expresiones para las constantes  $F$  y  $D$ , dejando  $D$  como constante de normalización y como sabemos que se debe cumplir

$$\int |\psi(x)|^2 = 1 \quad (2.40)$$

la constante de normalización  $D$  debe cumplir entonces

$$D^2 \left[ \frac{1}{\kappa} \cos^2(\gamma a) + \frac{1}{2} \sin(2\gamma a) + \gamma a \right] = 1, \quad (2.41)$$

y por lo tanto las soluciones pares independientes del tiempo son

$$\psi(x) = \begin{cases} De^{\kappa a} \cos(\gamma a) e^{-\kappa x}, & \text{Para } x > a \\ D \cos(\gamma x), & \text{Para } 0 < x < a \\ \psi(-x), & \text{Para } x < 0 \end{cases} \quad (2.42)$$

con  $D$  como se muestra en (2.41). De esta manera, las soluciones pares de la ecuación de Schrödinger son las funciones anteriores multiplicadas por el factor  $e^{-i\omega t}$ .

Ahora resolveremos las soluciones impares en un proceso análogo. Las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo son de la forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} Fe^{-\kappa x}, & \text{Para } x > a \\ C \sin(\gamma x), & \text{para } 0 < x < a \\ -\psi(-x), & \text{Para } x < 0 \end{cases} \quad (2.43)$$

de la continuidad de  $\psi(x)$  en  $x = a$  obtenemos

$$Fe^{-\kappa a} = C \sin(\gamma a), \quad (2.44)$$

y de la continuidad de  $\frac{d\psi}{dx}$  obtenemos

$$-\kappa Fe^{-\kappa a} = \gamma C \cos(\gamma a), \quad (2.45)$$

dividiendo estas ecuaciones encontramos que

$$-\kappa = \gamma \cot(\gamma a) \quad (2.46)$$

que es la ecuación trascendental para las energías permitidas en el sistema, para las soluciones impares. De nuevo usamos  $\kappa^2 + \gamma^2 = 2V_0$ , por lo que podemos tomar  $z = \gamma a$  y  $z_0 = a\sqrt{2V_0}$  para obtener  $\kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2}$  y así obtener de la Ec. (2.46) la siguiente ecuación trascendental para  $z$  como función de  $z_0$

$$\cot(z) = -\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}. \quad (2.47)$$

Análogo al caso anterior éste también se puede resolver gráficamente, buscando los puntos de intersección entre  $\cot(z)$  (en azul en la gráfica) y  $-\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$  (en rojo en la gráfica), como se presenta en la Fig. 2.7.

De la misma forma que en las soluciones pares, si  $z_0$  disminuye, también sucede lo mismo con la cantidad de estados ligados permitidos, pero en este caso si  $V_0 \leq \frac{\pi^2}{2(2a)^2}$  no hay una solución impar, por lo tanto, para pozos pequeños, existirá solamente un estado ligado (el primer estado ligado par).

Si  $z_0$  es muy grande las intersecciones en la gráfica se dan  $z_n = n\frac{\pi}{2}$  (con  $n$  par) y por lo tanto tenemos

$$\varepsilon_n + V_0 \cong \frac{n^2 \pi^2}{2(2a)^2}; \quad (2.48)$$

De nuevo las energías del pozo con potencial infinito Ec. (2.21). Estas soluciones junto con las soluciones pares con  $z_0$  muy grande nos dan todas las soluciones del pozo de potencial infinito.

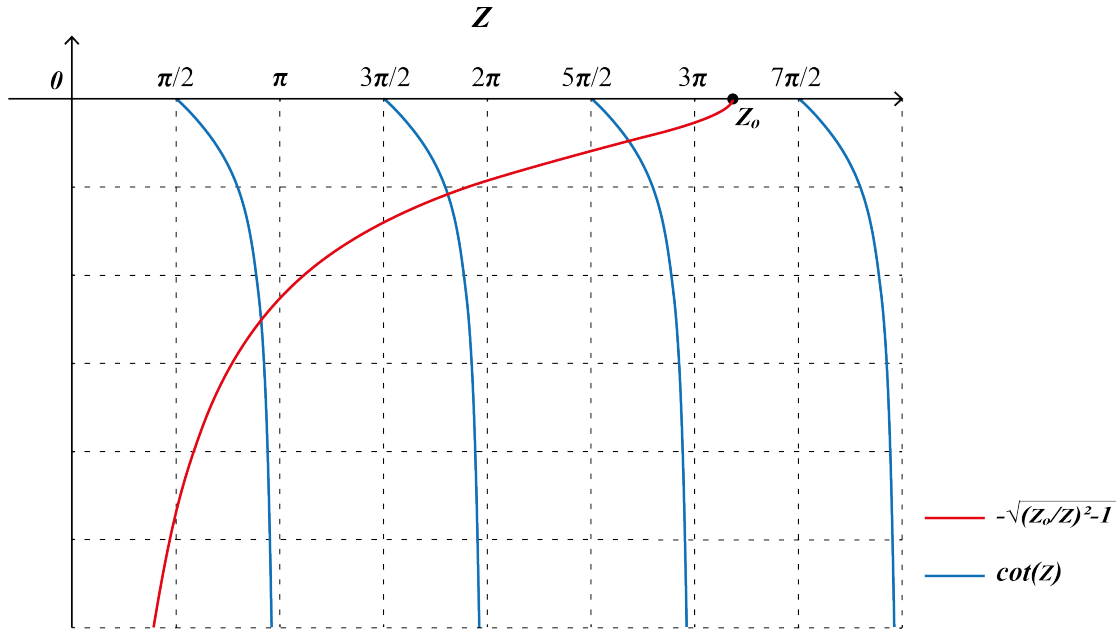


Figura 2.7: Solución gráfica de la Ec. (2.47), para  $z_0 = 10$

Finalmente se pueden obtener las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo buscando las expresiones para las constantes  $F$  y  $C$ , dejando  $C$  como constante de normalización podemos obtener de la Ec. (2.44).

$$F = C e^{\kappa a} \sin(\gamma a) , \tag{2.49}$$

y utilizando de nuevo la Ec. (2.40) obtenemos que la constante  $C$  debe cumplir

$$C^2 \left[ \frac{1}{\kappa} \sin^2(\gamma a) - \frac{1}{2} \sin(2\gamma a) + \gamma a \right] = 1 . \tag{2.50}$$

Y por lo tanto las soluciones impares independientes del tiempo son

$$\psi(x) = \begin{cases} C e^{\kappa a} \sin(\gamma a) e^{-\kappa x}, & \text{Para } x > a \\ C \sin(\gamma x), & \text{para } 0 < x < a \\ -\psi(-x), & \text{Para } x < 0 \end{cases} \tag{2.51}$$

con  $C$  cumpliendo la Ec. (2.50).

Las soluciones impares de la ecuación de Schrödinger son las funciones anteriores multiplicadas por el factor  $e^{-i\omega t}$ .

En la Fig. 2.8, se presenta un ejemplo para  $z_0 = 10$  de las primeras soluciones para el pozo finito. Al analizar el comportamiento en relación con el número de nodos y la variación de la energía, se observa que las soluciones son pares e impares con respecto al centro del pozo. Además, estas soluciones conforman un conjunto de funciones completas que son ortonormales, siguiendo así una pauta similar a la observada en el caso del pozo de potencial infinito. En esencia, el tratamiento cuantitativo del potencial de pozo finito y el potencial de pozo infinito es prácticamente idéntico. Sin embargo, una diferencia significativa surge con el nuevo potencial: se aprecia una penetración de las funciones de onda en las regiones clásicamente prohibidas, algo que no ocurre en el potencial de pozo infinito. A este fenómeno se le conoce como el efecto túnel cuántico.

Ahora obtengamos las soluciones para los estados con  $\varepsilon > 0$ . El método es el mismo, separamos el problema en tres regiones, en el lado izquierdo donde  $V(x) = 0$  tenemos como solución

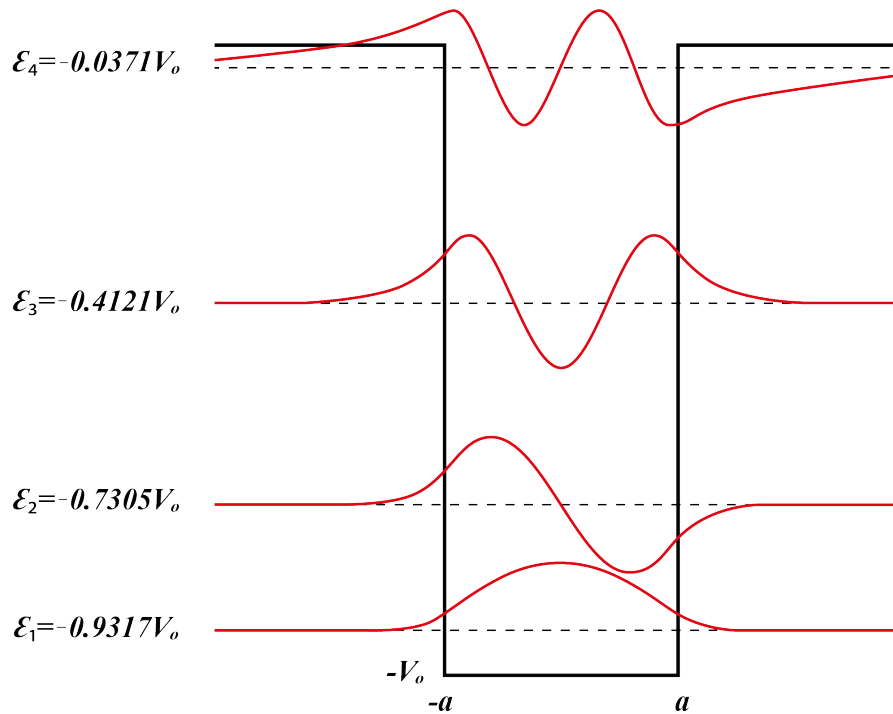


Figura 2.8: Funciones de onda para el caso particular  $z_0 = 10$

$$\psi(x) = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}, \quad \text{Para } x < -a, \quad (2.52)$$

donde  $\kappa = \sqrt{2\varepsilon}$ . Dentro del pozo, donde  $V(x) = -V_0$  tenemos como solución

$$\psi(x) = C \sin(\gamma x) + D \cos(\gamma x), \quad \text{para } -a < x < a \quad (2.53)$$

donde  $\gamma = \sqrt{2(\varepsilon + V_0)}$ . A la derecha del pozo de potencial obtenemos como solución (suponiendo que la onda llega del lado izquierdo solamente)

$$\psi(x) = Fe^{i\kappa x}. \quad (2.54)$$

Aquí  $A$  es la amplitud de la onda incidente,  $B$  es la amplitud de la onda reflejada y  $F$  la amplitud de la onda transmitida. Tenemos las mismas cuatro condiciones de frontera, dos para  $-a$  y dos para  $a$ . De la continuidad de  $\psi(x)$  en  $-a$  tenemos

$$Ae^{-i\kappa a} + Be^{i\kappa a} = -C \sin(\gamma a) + D \cos(\gamma a). \quad (2.55)$$

La continuidad de  $\frac{d\psi}{dx}$  en  $-a$  da

$$i\kappa[Ae^{-i\kappa a} - Be^{i\kappa a}] = \gamma[C \cos(\gamma a) + D \sin(\gamma a)]. \quad (2.56)$$

La continuidad de  $\psi(x)$  en  $a$  nos lleva a

$$C \sin(\gamma a) + D \cos(\gamma a) = Fe^{i\kappa a}, \quad (2.57)$$

y la continuidad de  $\frac{d\psi}{dx}$  en  $a$  requiere

$$\gamma[C \cos(\gamma a) - D \sin(\gamma a)] = iF e^{i\kappa a}. \quad (2.58)$$

Utilizando dos de estas ecuaciones para eliminar  $C$  y  $D$ , y resolviendo las dos restantes para  $B$  y  $F$  obtenemos

$$B = i \frac{\sin(2\gamma a)}{2\kappa\gamma} (\gamma^2 - \kappa^2) F \quad (2.59)$$

$$F = \frac{e^{-2i\kappa a} A}{\cos(2\gamma a) - i \frac{(\gamma^2 + \kappa^2)}{2\kappa\gamma} \sin(2\gamma a)}. \quad (2.60)$$

El coeficiente de transmisión, dado por  $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$ , es

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2 \left( \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \right) \quad (2.61)$$

notemos que  $T = 1$  cuando el argumento del seno es cero, es decir

$$2a\sqrt{2(\varepsilon_n + V_0)} = n\pi \quad (2.62)$$

con  $n$  siendo cualquier número entero, las energías para transmisión perfecta son entonces

$$\varepsilon_n + V_0 = \frac{n^2\pi^2}{2(2a)^2} \quad (2.63)$$

que son exactamente las energías permitidas para un pozo cuadrado infinito. El comportamiento para el valor de  $T$  está graficado en Figura 2.9.

Hemos encontrado en este problema dos tipos de soluciones que son muy diferentes entre sí, ya que para el caso  $\varepsilon < 0$  las soluciones de la ecuación independiente del tiempo son normalizables y para el caso  $\varepsilon > 0$  las soluciones son no normalizables. Las primeras representan estados estacionarios mientras que las segundas no (ya que no existen estados estacionarios reales), pero en ambos casos la solución general de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es una combinación lineal de los estados encontrados. Para entender el significado físico de esta distinción es conveniente pensar en el caso clásico, cuando resolvemos un potencial independiente del tiempo en una sola dimensión podemos obtener dos tipos de comportamientos:

1. Si  $V(x)$  es más grande que la energía total de la partícula ( $E$ ), entonces la partícula queda “atorada” en el potencial, se balancea atrás y adelante entre los límites de  $V(x)$ , pero no puede escapar, llamamos a estos estados “estados ligados”
2. Si sucede que  $E$  excede el valor de  $V(x)$  en uno, o ambos lados, la partícula que llega del “infinito” acelera o se ralentiza bajo la influencia del potencial y luego regresa al “infinito”. Llamamos a estos estados “estados no ligados”.

Los dos tipos de soluciones que obtuvimos corresponden con estados ligados y estados no ligados. En el caso que nos interesa, en el que existe el efecto túnel, lo único que importa es el potencial, por lo que en este caso, y en todos los de este trabajo, tenemos que las soluciones con  $\varepsilon < 0$  corresponden con estados ligados, mientras que las soluciones con  $\varepsilon > 0$  corresponden con estados no ligados. Notemos que en la sección anterior, en el pozo infinito, solamente encontramos estados ligados ya que el potencial va es infinito si  $x$  está fuera del pozo.

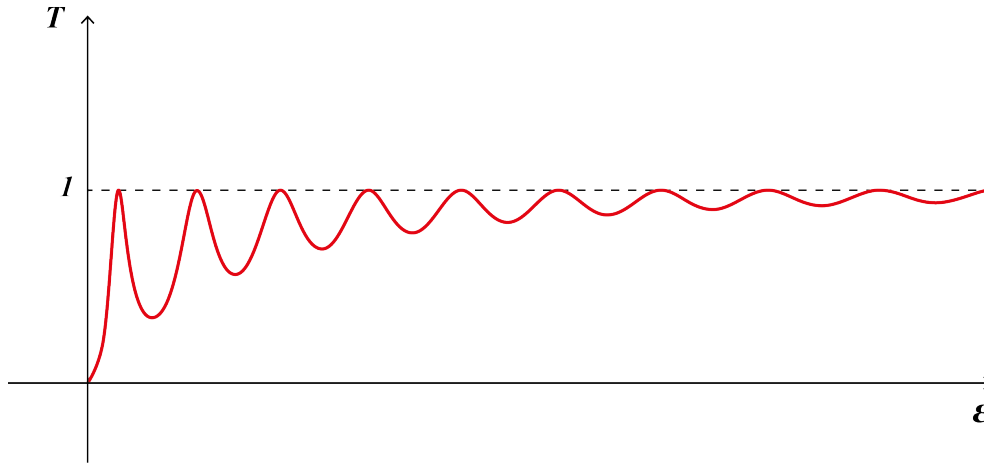


Figura 2.9: Coeficiente de transmisión como función de la energía Ec. (2.61)

## 2.4. Pozo finito integrando directamente

A pesar de que el método más frecuentemente empleado para resolver el problema del pozo finito se ha detallado en la sección 2.3, no representa la única estrategia disponible. Aquí, introduciremos otro enfoque para su resolución, el cual será beneficioso en fases posteriores del análisis, evidenciando que arroja resultados comparables, pero con la ventaja de que nos servirá como base para encontrar soluciones de la ecuación no lineal de Schrödinger.

Consideramos el mismo potencial, pozo cuadrado finito (Fig. 2.5):

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| < a \\ 0 & |x| \geq a \end{cases} \quad (2.64)$$

De nuevo obtendremos las soluciones para los estados ligados ( $-V_0 < \varepsilon < 0$ ), así que resolveremos la ecuación de Schrödinger lineal, en una dimensión y estacionaria:

$$\frac{1}{2}\psi'' + (\varepsilon + V_0)\psi = 0. \quad (2.65)$$

En este caso en vez de proponer la solución general de la ecuación diferencial, integraremos directamente. Para esto primero multiplicamos ambos lados de la ecuación por  $\psi'$  obteniendo:

$$\frac{1}{2}\psi''\psi' + (\varepsilon + V_0)\psi\psi' = 0, \quad (2.66)$$

que es equivalente a escribir:

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{4}\psi'^2 + \frac{1}{2}(\varepsilon + V_0)\psi^2\right) = 0. \quad (2.67)$$

Ahora podemos integrar y multiplicar por 4 para obtener:

$$\psi'^2 + 2(\varepsilon + V_0)\psi^2 = c = cte \quad (2.68)$$

entonces

$$\psi' = \sqrt{c - 2(\varepsilon + V_0)\psi^2}. \quad (2.69)$$

El siguiente paso es integrar directamente, notemos que dentro del pozo  $-(\varepsilon + V_0)$  es real y positivo. De esta manera tenemos

$$\int \frac{d\psi}{\sqrt{c - 2(\varepsilon + V_0)\psi^2}} = \int dx \quad (2.70)$$

recordando que

$$\int \frac{du}{\sqrt{a^2 - u^2}} = \arcsin \frac{u}{a} = \frac{\pi}{2} - \arccos \frac{u}{a} \quad (2.71)$$

Dependiendo de los límites de integración obtendremos una parte de las soluciones del problema, soluciones impares y pares. Veamos primero las soluciones impares.

Utilizando el primer resultado de la Ec. (2.71) obtenemos de la integral anterior

$$\frac{1}{\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}} \sin^{-1} \left( \frac{\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}}{\sqrt{c}} \psi \right) = x, \quad (2.72)$$

y por lo tanto

$$\psi = \frac{\sqrt{c}}{\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}} \sin(\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}x). \quad (2.73)$$

Fuera del pozo (pero con  $\varepsilon < 0$ ) tenemos la ecuación de Schrödinger con forma

$$\frac{1}{2}\psi'' + \varepsilon\psi = 0. \quad (2.74)$$

En la región  $x > a$  el potencial es cero y siguiendo la misma lógica tenemos una integral con solución con forma logarítmica, cuya inversa es una exponencial, por lo tanto la ecuación estacionaria toma la forma

$$\psi(x) = Ae^{-\sqrt{-2\varepsilon}x}. \quad (2.75)$$

El siguiente paso es aplicar las condiciones de frontera, como ya vimos con un potencial simétrico basta con aplicarlas en  $x = a$  y del otro lado se obtienen automáticamente. Se debe cumplir que  $\psi$  y  $\frac{d\psi}{dx}$  son continuas en  $a$ ). Obtengamos la solución impar primero, el seno es impar, por lo que las soluciones son de la forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-\sqrt{-2\varepsilon}x}, & \text{para } x > a \\ \frac{\sqrt{c}}{\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}} \sin(\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}x), & \text{Para } 0 < x < a \\ \psi(-x), & \text{para } x < 0 \end{cases} \quad (2.76)$$

de la continuidad de  $\psi(x)$  en  $x = a$  obtenemos

$$Ae^{-\sqrt{-2\varepsilon}a} = \frac{\sqrt{c}}{\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}} \sin(\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}a), \quad (2.77)$$

y de la continuidad de  $\frac{d\psi}{dx}$  obtenemos

$$-A\sqrt{-2\varepsilon}e^{-\sqrt{-2\varepsilon}a} = \sqrt{c} \cos(\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}a), \quad (2.78)$$

dividiendo estas ecuaciones encontramos que

$$\sqrt{2(\varepsilon + V_0)} \frac{\cos(\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}a)}{\sin(\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}a)} = -\sqrt{-2\varepsilon}, \quad (2.79)$$

y tomando nuevamente el valor de las constantes  $\kappa = \sqrt{-2\varepsilon}$  y  $\gamma = \sqrt{2(\varepsilon + V_0)}$  obtenemos finalmente

$$\gamma \cot(\gamma a) = -\kappa. \quad (2.80)$$

Que es exactamente la misma ecuación trasental para las soluciones impares del problema anterior, Ec. (2.47), graficada en la Fig. 2.8.

Ahora veamos las soluciones par del problema. Recordemos

$$\int \frac{du}{\sqrt{a^2 - u^2}} = -\arccos \frac{u}{a} \quad (2.81)$$

por lo tanto la integral resultante es

$$-\frac{1}{\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}} \cos^{-1}\left(\frac{\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}}{\sqrt{c}}\psi\right) = x, \quad (2.82)$$

y las soluciones quedan como

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-\sqrt{-2\varepsilon}x}, & \text{Para } x > a \\ \frac{\sqrt{c}}{\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}} \cos(\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}x), & \text{Para } 0 < x < a \\ \psi(-x), & \text{Para } x < 0 \end{cases} \quad (2.83)$$

Ahora aplicamos las condiciones de frontera en  $x = a$ . De la continuidad de  $\psi(x)$  en  $x = a$  obtenemos

$$Ae^{-\sqrt{-2\varepsilon}a} = \frac{\sqrt{c}}{\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}} \cos(\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}a), \quad (2.84)$$

y de la continuidad de  $\frac{d\psi}{dx}$  obtenemos

$$-A\sqrt{-2\varepsilon}e^{-\sqrt{-2\varepsilon}a} = -\sqrt{c} \sin(\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}a). \quad (2.85)$$

Dividiendo estas ecuaciones encontramos que

$$\sqrt{2(\varepsilon + V_0)} \frac{\sin(\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}a)}{\cos(\sqrt{2(\varepsilon + V_0)}a)} = \sqrt{-2\varepsilon}, \quad (2.86)$$

y tomando nuevamente el valor de las constantes  $\kappa = \sqrt{-2\varepsilon}$  y  $\gamma = \sqrt{2(\varepsilon + V_0)}$  obtenemos finalmente

$$\gamma \tan(\gamma a) = \kappa. \quad (2.87)$$

La ecuación anterior es la ecuación trascendental para la energía de las soluciones pares, que habíamos obtenido anteriormente, Ec. (2.37), y está graficada en la Fig. 2.6.

Estas dos ecuaciones trascendentales demuestran que éste método es equivalente al anterior, pero con un enfoque diferente para encontrar las soluciones a la ecuación de Schrödinger.

Para cerrar el problema estudiaremos un caso específico que será de interés más adelante y es la solución para la partícula en  $\varepsilon = 0$ , es decir en el borde del pozo, vemos que en éste caso  $\gamma = \sqrt{2V_0}$  y  $\kappa = 0$ . La solución impar queda  $\sqrt{2V_0} \cot(\sqrt{2V_0}a) = 0$  mientras que la solución par nos da  $\sqrt{2V_0} \tan(\sqrt{2V_0}a) = 0$ . Esto solamente puede suceder si  $\cos(\sqrt{2V_0}a) = 0$  y  $\sin(\sqrt{2V_0}a) = 0$ , las cuales se anulan en  $\sqrt{2V_0}a = n\pi$  y  $\sqrt{2V_0}a = n\frac{\pi}{2}$  respectivamente, donde  $n$  es un número entero.

## 2.5. Delta de dirac

Considere el potencial de la Fig. 2.10:

$$V(x) = -\alpha\delta(x), \quad (2.88)$$

donde  $\alpha$  es una constante <sup>2</sup> y  $\delta(x)$  representa la función delta de Dirac. Esta última se caracteriza por ser un pico infinitamente estrecho e infinitamente alto en el origen, con un área total igual a 1.

<sup>2</sup>Dado que la función delta tiene unidades de 1/distancia,  $\alpha$  adquiere dimensiones de energía por distancia.

Es importante destacar que la función delta de Dirac no es una función en el sentido convencional, ya que no es finita en  $x = 0$ , es más precisamente descrita como una distribución.

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & \text{Para } x \neq 0 \\ \infty, & \text{Para } x = 0, \end{cases} \quad (2.89)$$

y cumple

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (2.90)$$

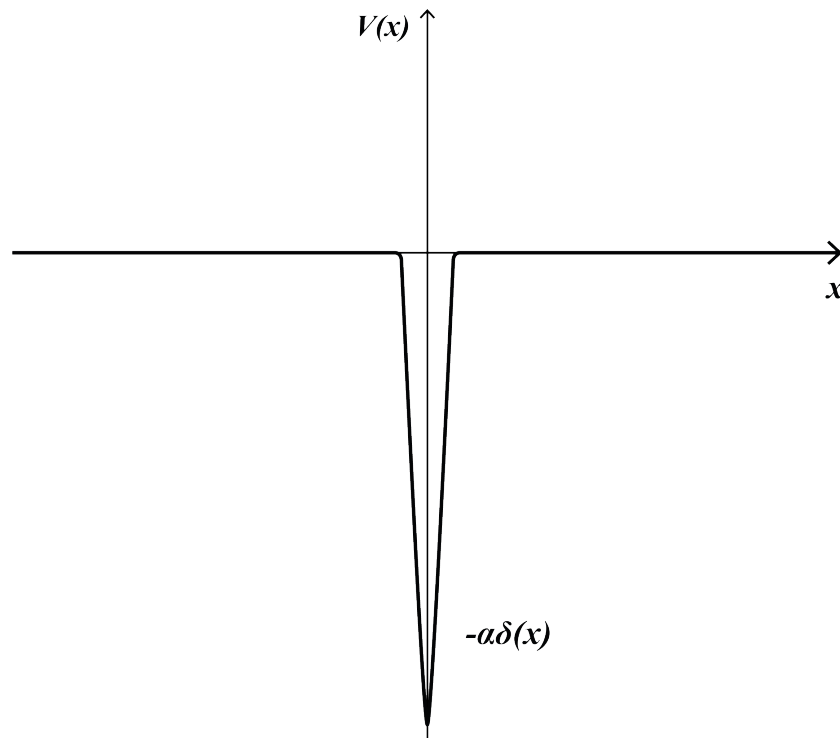


Figura 2.10: Delta de Dirac (2.89).

Con este potencial la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi = \varepsilon\psi. \quad (2.91)$$

Hay dos tipos de soluciones posibles, obtendremos primero las soluciones para los estados ligados ( $\varepsilon < 0$ ). En la región  $x < 0$  el potencial es cero por lo que la ecuación de Schrödinger es

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi, \quad (2.92)$$

donde  $\kappa = \sqrt{-2\varepsilon}$  y  $\varepsilon$  es negativa por lo que  $\kappa$  es real y positivo. La solución general de esta ecuación diferencial es  $\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$  pero el primer término tiende a infinito si  $x$  tiende a menos infinito y por lo tanto la única solución posible es

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}, \quad \text{Para } x < 0. \quad (2.93)$$

Si  $x > 0$  el potencial es cero de nuevo por lo que la solución general vuelve a ser  $\psi(x) = Fe^{\kappa x} + Ge^{-\kappa x}$  pero ahora es el segundo término el que tiende a infinito si  $x$  tiende a infinito y por lo tanto la única solución posible es

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x}, \quad \text{Para } x > 0. \quad (2.94)$$

La solución completa del problema debe cumplir las condiciones de frontera en  $x = 0$ .  $\psi$  siempre debe ser continua en la frontera por lo que al igualar ambas soluciones obtenemos  $F = B$ . Pero ya que nuestro potencial es infinito la condición de frontera para la derivada no puede ser como los casos anteriores<sup>3</sup>. Por esta razón, la delta de Dirac determina la discontinuidad de la derivada de  $\psi$  en  $x = 0$ . Utilizaremos la propiedad mostrada en la Ec. (2.90) e integrando la ecuación de Schrodinger de  $-\epsilon$  a  $\epsilon$ , y luego tomando el límite  $\epsilon \rightarrow 0$  se obtiene

$$-\frac{1}{2} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x)\psi(x)dx = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x)dx . \quad (2.95)$$

La primera integral es simplemente  $\frac{d\psi}{dx}$  evaluada en los extremos, y la última integral es cero ya que es el área de un fragmento con altura finita y con un ancho que va desapareciendo en el límite cuando  $\epsilon \rightarrow 0$ . De esta manera, obtenemos

$$\Delta \left( \frac{d\psi}{dx} \right) = 2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x)\psi(x)dx . \quad (2.96)$$

Notemos que el lado derecho cumple

$$\Delta \left( \frac{d\psi}{dx} \right) = 2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} [-\alpha\delta(x)]\psi(x)dx = -2\alpha \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x)\psi(x)dx = -2\alpha\psi(0) \quad (2.97)$$

Derivando las soluciones de las Ecs. (2.93) y (2.94) tenemos que

$$\frac{d\psi}{dx} = -B\kappa e^{-\kappa x}, \quad \text{Para } x > 0, \quad \text{entonces } \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{0^+} = -B\kappa \quad (2.98)$$

$$\frac{d\psi}{dx} = B\kappa e^{\kappa x}, \quad \text{Para } x < 0, \quad \text{entonces } \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{0^-} = +B\kappa \quad (2.99)$$

por lo que  $\Delta \left( \frac{d\psi}{dx} \right) = -2B\kappa$ . El valor de  $\psi(0)$  lo podemos obtener sustituyendo  $x = 0$  en la solución de cualquiera de los dos lados, y en consecuencia  $\psi(0) = B$ . Entonces  $\Delta \left( \frac{d\psi}{dx} \right) = -2\alpha B$ , por ende

$$\kappa = \alpha \quad (2.100)$$

de esta manera, la energía permitida es

$$\epsilon = -\frac{\kappa^2}{2} = -\frac{\alpha^2}{2} . \quad (2.101)$$

Finalmente normalizamos la ecuación de onda

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 2 |B|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{|B|^2}{\kappa} = 1 , \quad (2.102)$$

y elegimos la raíz positiva para obtener que  $B = \sqrt{\kappa} = \sqrt{\alpha}$ . Esto nos dice que el potencial delta de Dirac independientemente de su intensidad,  $\alpha$ , solamente tiene un estado ligado, que corresponde entonces con el estado base

$$\psi(x) = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|} . \quad (2.103)$$

En la Figura 2.11 se puede encontrar la función de onda anterior, junto con el potencial delta y su energía correspondiente.

<sup>3</sup>Recordemos que  $\frac{d\psi}{dx}$  es continua excepto en los puntos donde el potencial es infinito

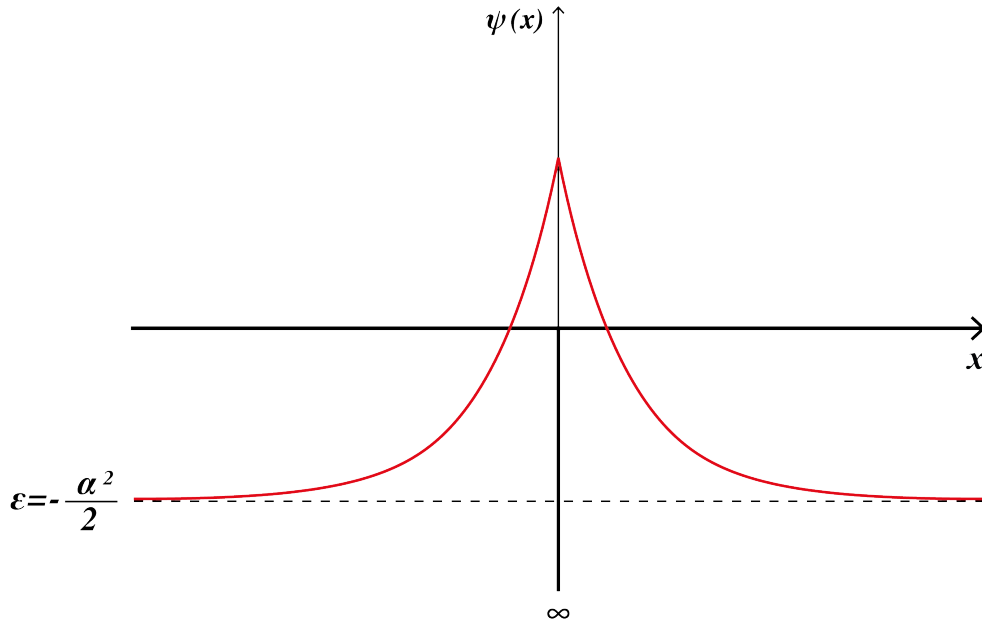


Figura 2.11: Función de onda del estado base del potencial delta de Dirac, Ec. (2.103)

Para estados no ligados (con  $\varepsilon > 0$ ), en la región  $x > 0$  el potencial es cero por lo que la ecuación de Schrodinger es:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\kappa^2\psi \quad (2.104)$$

donde  $\kappa = \sqrt{2\varepsilon}$  es real y positivo. La solución general de esta última ecuación es  $\psi(x) = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}$  pero en este caso no podemos descartar ninguno de los términos. Es similar para  $x < 0$  donde la solución general vuelve a ser  $\psi(x) = Fe^{i\kappa x} + Ge^{-i\kappa x}$  (ver Figura 2.12).

La continuidad de  $\psi(x)$  en  $x = 0$  requiere que

$$F + G = A + B \quad (2.105)$$

derivando las soluciones tenemos

$$\frac{d\psi}{dx} = i\kappa(Fe^{i\kappa x} - Ge^{-i\kappa x}), \quad \text{Para } x > 0, \quad \text{entonces} \quad \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_+ = i\kappa(F - G) \quad (2.106)$$

$$\frac{d\psi}{dx} = i\kappa(Ae^{i\kappa x} - Be^{-i\kappa x}), \quad \text{Para } x < 0, \quad \text{entonces} \quad \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_- = i\kappa(A - B) \quad (2.107)$$

Y por lo tanto  $\Delta \left( \frac{d\psi}{dx} \right) = i\kappa(F - G - A + B)$ . También podemos ver que  $\psi(0) = (A + B)$  y con la segunda condición de frontera tenemos

$$i\kappa(F - G - A + B) = -2\alpha(A + B). \quad (2.108)$$

Tomando  $\beta = \frac{\alpha}{\kappa}$  la última ecuación se convierte en:

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta). \quad (2.109)$$

En este escenario, no es posible realizar la normalización, ya que el estado no es normalizable. Sin embargo, podemos seleccionar  $G=0$  dado que representa la amplitud de la onda que se propaga desde la derecha (suponiendo un experimento en el cual solo existe una onda incidente desde la izquierda). Con esta elección, las amplitudes  $A$ ,  $B$  y  $F$  están asociadas con la onda

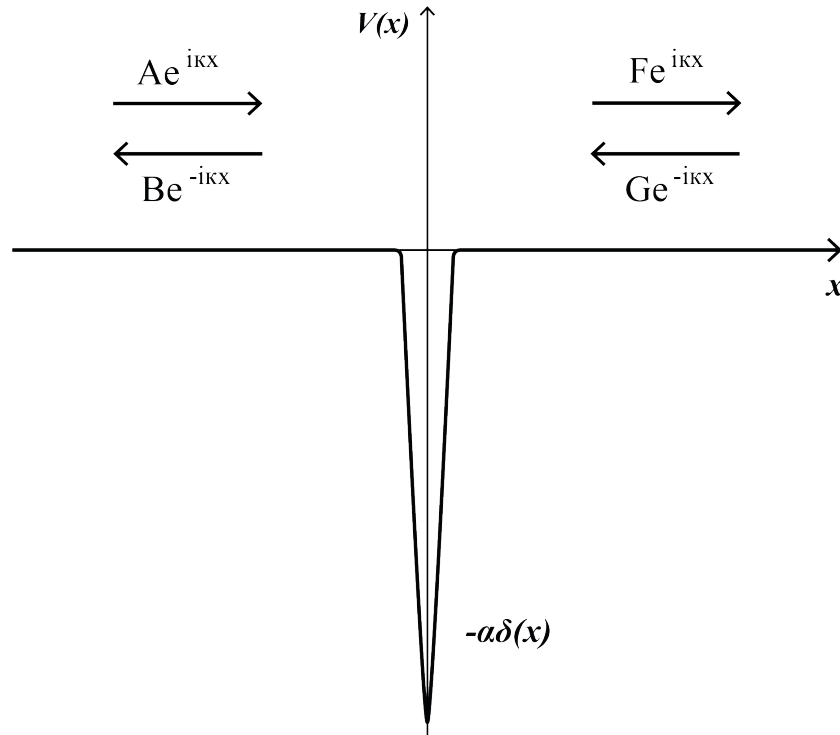


Figura 2.12: Dispersión de un potencial tipo pozo delta

incidente, reflejada y transmitida, respectivamente. Resolviendo las dos ecuaciones anteriores para  $B$  y  $F$  obtenemos

$$B = \frac{i\beta}{1 - i\beta} A; \quad F = \frac{1}{1 - i\beta} A. \quad (2.110)$$

Como no es un estado normalizable la probabilidad de encontrar la partícula no está bien definida, pero podemos obtener la probabilidad de que una partícula incidente se refleje,  $R$ , o la probabilidad de que se transmita,  $T$ , de la siguiente manera:

$$R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2}; \quad T \equiv \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \beta^2}. \quad (2.111)$$

Se debe mantener que la probabilidad de encontrar la partícula en el espacio es 1, es decir que la partícula se debe reflejar o transmitir y por lo tanto  $T + R = 1$ . Además ambos coeficientes están en función de  $\beta$  y las podemos reescribir como

$$R = \frac{1}{1 + (2\varepsilon/\alpha^2)}; \quad T = \frac{1}{1 + (\alpha^2/2\varepsilon)}. \quad (2.112)$$

Entre más grande sea la energía más grande la probabilidad de que se transmita la partícula. Contrario a lo que pasaría en la mecánica clásica, incluso si la energía cumple  $\varepsilon < V_{max}$  existe una probabilidad diferente de cero de que la partícula se transmita (de nuevo, se manifiesta el fenómeno de “tunneling”). Notemos que el potencial puede analizarse aunque no sea un “pozo”, sino una “barrera”, solamente hay que cambiar el signo de  $\alpha$ , y como los coeficientes  $R$  y  $T$  dependen de  $\alpha^2$  el resultado se mantiene igual (aunque el estado ligado desaparece).



## Capítulo 3

# Soluciones de la ecuación de Schrödinger no lineal en una dimensión

### 3.1. Conteo de partículas en una guía de onda de materia ultra fría

Comencemos este capítulo citando la referencia [12] con la siguiente frase “La experimentación con condensados de Bose-Einstein posibilita el estudio de la dinámica colectiva de ensambles macroscópicos de átomos que ocupan el mismo estado cuántico, lo cual ha impulsado la creación de nuevas tecnologías para su investigación”. Una de estas innovaciones es el “chip atómico”, capaz de permitir el enfriamiento y captura de un condensado de Bose-Einstein en una guía de ondas, generada por campos magnéticos sobre circuitos de microcables. Idealmente, el condensado se carga y atrapa transversalmente en la guía de ondas, permitiendo la propagación libre en la tercera dimensión. Dado que el confinamiento en las dos dimensiones transversales es muy fuerte, el condensado se transporta por la guía de onda casi perfectamente en una dimensión. Las propiedades de un condensado a temperatura  $T=0$ , bajo las condiciones mencionadas, se describen a través de la Ec. (1.21), que en una dimensión y en el caso estacionario toma la siguiente forma

$$-\frac{1}{2}\phi'' + V\phi + g\phi^3 = \mu\phi, \quad (3.1)$$

nuevamente  $g$  representa la constante de acoplamiento no lineal, que en una dimensión se expresa como  $g = \frac{g_{3D}}{2\pi}$ , donde  $g_{3D}$  es la constante de acoplamiento tridimensional, según la Ec. (1.22).

Al igual que en la ecuación lineal, para resolver la ecuación no lineal es necesario determinar la forma del potencial  $V(x)$ , que en este trabajo representa una guía de onda. Ésta surge de una modificación local de la guía de onda transversal, como una constricción o una curvatura local, generando la propagación de las ondas básicamente en una dimensión. Esto se modela como un pozo de potencial en una dimensión, con profundidad  $V_0$  y ancho  $2R$ , de manera similar a la Ec. (2.28).

A medida que el número de átomos en el pozo aumenta, también lo hace la energía del sistema hasta volverse comparable con la energía de la trampa transversal, liberando así al sistema de la guía de ondas. Dado que  $g$  es proporcional al valor de  $N$  (número de partículas), se obtiene un valor crítico (o máximo) para  $g$ , representando la máxima cantidad de átomos atrapados en el pozo. Esto ofrece una manera indirecta de “contar” la máxima cantidad de átomos que pueden quedar atrapados en el sistema.

### 3.2. Integración directa de la ecuación de Schrödinger no lineal para un pozo cuadrado

Consideremos de nuevo el potencial<sup>1</sup> de la forma

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| < R \\ 0 & |x| \geq R \end{cases} \quad (3.2)$$

ahora que hemos comprobado que integrar directamente es un método válido para resolver la ecuación de Schrödinger veremos su utilidad en este capítulo. Obtendremos la primera solución para los estados ligados ( $\mu < 0$ ) de la ecuación no lineal en la Ec. (3.1), en una dimensión y estacionaria, que corresponderá con el estado base. Para el potencial anterior tenemos

$$-\frac{1}{2}\phi'' + (-V_0 - \mu)\phi + g\phi^3 = 0. \quad (3.3)$$

El proceso que llevaremos a cabo será análogo al de la sección 2.4. El primer paso será multiplicar ambos lados de la ecuación por  $\phi'$  obteniendo

$$-\frac{1}{2}\phi''\phi' + (-V_0 - \mu)\phi\phi' + g\phi^3\phi' = 0, \quad (3.4)$$

que es equivalente a escribir

$$\frac{d}{dx} \left( -\frac{1}{4}\phi'^2 - \frac{1}{2}(\mu + V_0)\phi^2 + \frac{g}{4}\phi^4 \right) = 0. \quad (3.5)$$

Ahora podemos integrar obteniendo

$$-\frac{1}{4}\phi'^2 - \frac{1}{2}(\mu + V_0)\phi^2 + \frac{g}{4}\phi^4 = c = cte. \quad (3.6)$$

Para ayudarnos a resolver esta ecuación vamos a realizar los siguientes cambios de variable

$$\zeta = \sqrt{\frac{(1+m)g}{2m(V_0 + \mu)}}\phi, \quad (3.7)$$

y

$$t = \sqrt{\frac{2(V_0 + \mu)}{(1+m)}}, \quad (3.8)$$

lo que nos da es

$$\phi' = \sqrt{\frac{m}{g}} \left( \frac{2(V_0 + \mu)}{1+m} \right) \zeta', \quad (3.9)$$

y sustituyendo en la ecuación tenemos

$$-\left( \frac{m(V_0 + \mu)}{g(1+m)^2} \right) \zeta'^2 - \left( \frac{m(V_0 + \mu)^2}{g(1+m)^2} \right) (1+m)\zeta^2 + \left( \frac{m(V_0 + \mu)^2}{g(1+m)^2} \right) m\zeta^4 = cte. \quad (3.10)$$

Lo que se puede reescribir como

$$-\zeta'^2 - (1+m)\zeta^2 + m\zeta^4 = cte = 1, \quad (3.11)$$

y por lo tanto

$$\zeta' = \sqrt{-1 + m\zeta^4 - (1+m)\zeta^2}. \quad (3.12)$$

---

<sup>1</sup>Utilizamos “ $R$ ” en vez de “ $a$ ” como límite del pozo ya que en el caso no lineal utilizamos “ $a$ ” como el radio de interacción de las partículas

Ahora integramos para obtener

$$\int dt = \int \frac{d\zeta}{\sqrt{1 - (1+m)\zeta^2 + m\zeta^4}} = \int \frac{d\zeta}{\sqrt{1 - \zeta^2}\sqrt{1 - m\zeta^2}} = \int \frac{du}{\sqrt{1 - m\sin^2 u}}. \quad (3.13)$$

Utilizando la sustitución  $\zeta = \sin u$  en el último paso de la igualdad, podemos considerar la integral elíptica de primera especie definida como

$$u = \int_0^\varphi \frac{d\theta}{\sqrt{1 - m\sin^2 \theta}}, \quad (3.14)$$

donde el ángulo  $\varphi$  es la amplitud, y por lo tanto  $\varphi = am(u)$ <sup>2</sup>. Si definimos el seno elíptico de Jacobi como  $\text{sn}(u) = \sin \varphi$  entonces<sup>3</sup>

$$\int \frac{du}{\sqrt{1 - m\sin^2 u}} = am(\varphi) + K(m) \quad (3.15)$$

en el que  $K(m)$  es una constante de integración, que representa el cuarto de periodo de onda natural de  $\text{sn}(x|m)$ , y entonces debe cumplir  $K(0) = \pi/2$  y  $K(1) \rightarrow \infty$ . Con esto, y regresando a las variables originales, obtenemos finalmente

$$\phi_{in}(x) = \sqrt{\frac{2m(V_0 + \mu)}{(1+m)g}} \text{sn} \left( \sqrt{\frac{2(V_0 + \mu)}{1+m}} x + K(m) \right). \quad (3.16)$$

La ecuación anterior representa la solución dentro del pozo ( $-R < x < R$ ), destacando su naturaleza como una función elíptica de Jacobi, en la cual  $g$  se presenta como un parámetro libre.

Fuera del pozo tenemos que  $V_0 = 0$ , por lo que la ENLS queda como

$$-\frac{1}{2}\phi'' - \mu\phi + g\phi^3 = 0. \quad (3.17)$$

Para resolver la ecuación anterior podemos multiplicar por 2 ambos lados de la ecuación y hacer el cambio de variable  $\phi' = u(\phi)$ , por lo que  $\phi'' = uu'$ . Quedando el problema como

$$-uu' + 2g\phi^3 - 2\mu\phi = 0. \quad (3.18)$$

Tomando  $u'(\phi) = \frac{du}{d\phi}$  podemos expresar la ecuación anterior como

$$-udu = (2\mu\phi - 2g\phi^3)d\phi, \quad (3.19)$$

que es una ecuación diferencial con las variables ya separadas, podemos integrar directamente ambos lados y regresando a la variable original obtenemos

$$\phi'^2 = 2 \left( \frac{g\phi^4}{2} - \mu\phi^2 + C \right), \quad (3.20)$$

donde  $C$  es una constante de integración. Ahora notemos que sacando raíz de ambos lados y dividiendo entre la raíz que obtenemos del lado izquierdo (para separar las variables) e integrando obtenemos

$$\int \frac{d\phi}{\sqrt{g\phi^4 - 2\mu\phi^2 + 2C}} = C_1 \pm x. \quad (3.21)$$

<sup>2</sup>El parámetro  $\varphi = am(u)$  se llama “amplitud”, ésta viene dada por la inversa de la función anterior. Las funciones elípticas de Jacobi se definen a partir de esta amplitud. Para una explicación más completa de estas funciones puede ver el apéndice B

<sup>3</sup>La notación tradicional para las funciones elípticas de Jacobi es  $\text{sn}(x|m)$ , pero para simplificar en este trabajo, usamos  $\text{sn}(x)$  ya que su módulo  $m$  siempre está implícito en la función

Resolviendo el problema anterior para  $\phi$  tenemos<sup>4</sup>

$$\phi = \sqrt{\frac{2|\mu|}{g}} \operatorname{csch}(\pm\sqrt{2|\mu|x + \zeta}), \quad (3.22)$$

en la ecuación anterior el signo negativo representa la solución del lado izquierdo del pozo, mientras que el signo positivo representa la solución del lado derecho del pozo, al igual que  $m$ ,  $\zeta$  es un parámetro para coincidir entre las regiones.

Vemos que la solución consta de funciones elípticas de Jacobi y funciones hiperbólicas dependiendo de la región considerada para el pozo cuadrado. La solución completa del problema, para  $\mu < 0$  (estados ligados) sería

$$\begin{aligned} \phi_I &= \sqrt{\frac{2|\mu|}{g}} \operatorname{csch}(-\sqrt{2|\mu|x + \zeta}), x < -R \\ \phi_{II} &= \sqrt{\frac{2m(V_0 + \mu)}{(1+m)g}} \operatorname{sn}\left(\sqrt{\frac{2(V_0 + \mu)}{1+m}}x + K(m)\right), |x| < R \\ \phi_{III} &= \sqrt{\frac{2|\mu|}{g}} \operatorname{csch}(\sqrt{2|\mu|x + \zeta}), x > R \end{aligned} \quad (3.23)$$

sin embargo, nuestro interés se centra en determinar el valor máximo de  $g$ , el cual se alcanza cuando la energía del estado se aproxima al umbral de la impureza, caracterizado por  $\mu = 0$ <sup>5</sup>. En esta última situación, fuera del pozo, es decir, para  $|x| > R$ , la ecuación anterior no está bien definida. En este caso podemos integrar directamente la ecuación no lineal de Schrödinger, que adopta la siguiente forma

$$-\frac{1}{2}\phi'' + g^0\phi^3 = 0, \quad (3.24)$$

que tiene como solución general la función tipo hipérbola (ver [14] y [5])

$$\phi_{out}(x) = \frac{1}{a \pm \sqrt{g^0x}}, \quad (3.25)$$

con signo negativo para  $x < -R$  y signo positivo para  $x > R$ . La solución completa para  $\mu = 0$  toma la siguiente forma<sup>6</sup>

$$\begin{aligned} \phi_I &= \frac{1}{a - \sqrt{g^0x}}, x < -R \\ \phi_{II} &= \sqrt{\frac{2mV_0}{(1+m)g^0}} \operatorname{sn}\left(\sqrt{\frac{2V_0}{1+m}}x + K(m)\right), |x| < R \\ \phi_{III} &= \frac{1}{a + \sqrt{g^0x}}, x > R \end{aligned} \quad (3.26)$$

donde  $a$  y  $m$  son parámetros para que coincidan las regiones tomando en cuenta que  $g$  ya no es un parámetro libre, y que en este caso corresponde con su valor máximo.

De las soluciones analíticas presentadas en las Ecs. (3.23) y (3.26) puede apreciarse que tomando los cambios de variable  $\xi = \sqrt{V_0}R$ ,  $\chi = x/R$ ,  $\bar{V}(\chi) = V(\chi)/V_0$ ,  $\bar{g} = g/2\sqrt{V_0}$ ,  $\eta = |\mu|/V_0$  y  $\bar{\phi} = \phi/\sqrt{R}$ , la ENLS puede reescribirse como

$$\left[-\frac{1}{2\xi^2} \frac{d}{d\chi^2} + \bar{V}(\chi) + \frac{2\bar{g}}{\xi} \bar{\phi}^2\right] \bar{\phi} = \eta \bar{\phi}, \quad (3.27)$$

<sup>4</sup>Ver Gradshteyn (2007), sección 2.28, pág. 103, [8]

<sup>5</sup>A partir de este punto, emplearemos la notación  $g^n$  para denotar el valor máximo de  $g$ , siendo  $n = 0$  el valor máximo de  $g$  correspondiente al estado base, mientras que  $n = 1$  representa el valor máximo de  $g$  para el primer estado excitado.

<sup>6</sup>Puede comparar la solución que se muestra con la mostrada en [13]

con la condición de normalización dada por

$$\int_{-\infty}^{\infty} \bar{\phi}^2 d\chi = 1. \quad (3.28)$$

La ventaja de hacer este cambio de escala (a  $\xi$  se le conoce como tamaño de la impureza reducido) es que ahora el potencial puede escribirse como

$$\bar{V}(\chi) = \begin{cases} -1, & |\chi| < 1 \\ 0, & |\chi| \geq 1 \end{cases} \quad (3.29)$$

y para fines numéricos todas las cantidades están simplificadas. Además, para dos diferentes guías de ondas, con el mismo valor de  $\xi$ , tendríamos la misma función de onda reducida  $\bar{\phi}$  y  $\bar{g}$ . Con estos cambios la función de onda de la Ec. (3.26) se puede reescribir como

$$\bar{\phi}_I = \frac{1}{a - \sqrt{g^0} R \chi}, \chi < -1 \quad (3.30)$$

$$\bar{\phi}_{II} = \alpha \sqrt{\frac{mV_0}{g^0}} \operatorname{sn}(\alpha \xi \chi + K(m)), |\chi| < 1 \quad (3.31)$$

$$\bar{\phi}_{III} = \frac{1}{a + \sqrt{g^0} R \chi}, \chi > 1$$

donde se tomó  $\alpha^2 = \frac{2}{1+m}$ .

### 3.3. Solución para un pozo cuadrado finito de la ENLS

Para encontrar la solución completa del problema y encontrar los estados permitidos, tenemos que aplicar las condiciones a la frontera, que análogo al caso lineal, están representadas por la continuidad tanto de la función de onda como su derivada en  $x = R$ . Por lo tanto debemos tomar las Ec. (3.26) y estas deben cumplir

$$\phi_{II}(R) = \phi_{III}(R) \quad (3.32)$$

y

$$\phi'_{II}(R) = \phi'_{III}(R). \quad (3.33)$$

Para aplicar la primer condición de frontera, primero recordemos las siguientes igualdades

$$\operatorname{sn}(u + k) = \operatorname{cd}(u) = \frac{\operatorname{cn}(u)}{\operatorname{dn}(u)} \quad (3.34)$$

y con esto podemos cambiar de

$$\sqrt{\frac{2mV_0}{(1+m)g^0}} \operatorname{sn}\left(\sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R + K\right) = \frac{1}{a + \sqrt{g^0} R} \quad (3.35)$$

a

$$\sqrt{\frac{2mV_0}{(1+m)g^0}} \frac{\operatorname{cn}\left(\sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R\right)}{\operatorname{dn}\left(\sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R\right)} = \frac{1}{a + \sqrt{g^0} R}. \quad (3.36)$$

Para la derivada, utilizamos las identidades

$$\operatorname{cn}(u + k) = -\sqrt{m_1} \operatorname{sd}(u) = -\sqrt{m_1} \frac{\operatorname{sn}(u)}{\operatorname{dn}(u)} \quad (3.37)$$

y

$$\operatorname{dn}(u+k) = \sqrt{m_1} \operatorname{dn}(u) = \sqrt{m_1} \frac{1}{\operatorname{dn}(u)}. \quad (3.38)$$

Esto junto con la definición  $m+m_1=1$ <sup>7</sup> nos ayuda a cambiar

$$\frac{2V_0}{1+m} \sqrt{\frac{m}{g^0}} \operatorname{cn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R + K \right) \operatorname{dn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R + K \right) = -\frac{\sqrt{g^0}}{(a+\sqrt{g^0}R)^2} \quad (3.39)$$

por

$$-\frac{2V_0}{1+m} \sqrt{\frac{m}{g^0}} (1-m) \frac{\operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right)}{\operatorname{dn}^2 \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right)} = -\frac{\sqrt{g^0}}{(a+\sqrt{g^0}R)^2}. \quad (3.40)$$

Las Ec. (3.36) y (3.40) nos dan un sistema de ecuaciones que se resuelve notando que

$$-\sqrt{g^0} \phi_{III}^2(R) = \phi'_{II}(R), \quad (3.41)$$

donde seguimos teniendo que  $\phi_{II}$  es la solución dentro del pozo y  $\phi_{III}$  es la solución fuera del pozo. Entonces obtenemos

$$-\frac{2V_0}{1+m} \sqrt{\frac{m}{g^0}} (1-m) \frac{\operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right)}{\operatorname{dn}^2 \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right)} = -\frac{2mV_0 \sqrt{g^0} \operatorname{cn}^2 \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right)}{(1+m)g^0 \operatorname{dn}^2 \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right)}. \quad (3.42)$$

Simplificando la expresión anterior obtenemos

$$\operatorname{sn}^2 \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right) + \frac{1-m}{\sqrt{m}} \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right) - 1 = 0. \quad (3.43)$$

Notemos que con el cambio de variable  $x = \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right)$  la ecuación anterior se convierte en

$$x^2 + \frac{1-m}{\sqrt{m}} x - 1 = 0, \quad (3.44)$$

que es una ecuación de segundo grado, por lo tanto tiene como soluciones

$$x = -\frac{1-m}{2\sqrt{m}} \left( \frac{1-m}{\sqrt{m}} \pm \sqrt{\frac{(1-m)^2}{m} + 4} \right) = -\frac{(1-m) \pm (1+m)}{2\sqrt{m}}. \quad (3.45)$$

La solución con signo negativo es

$$x_- = -\frac{1}{\sqrt{m}} > 1, \quad (3.46)$$

y debido a que  $0 < m < 1$  y  $|\operatorname{sn}(u)| \leq 1$ , ésta solución no tiene ningún sentido. Solo nos queda la solución con signo positivo

$$x_+ = \sqrt{m}, \quad (3.47)$$

y por lo tanto

$$\operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right) = \sqrt{m}. \quad (3.48)$$

---

<sup>7</sup>Recuerda que “m” es el módulo elíptico. Cuanto mayor sea el valor de “m”, más extenso será el período de la función. El módulo “m” está restringido entre cero y uno. Cuando alcanza su valor máximo, que es uno, la función presenta un período infinito, indicando su comportamiento como una función hiperbólica. En cambio, cuando “m” es igual a cero, la función adopta un comportamiento similar al de una función trigonométrica, con un cuarto de período equivalente a  $\pi/2$ .

El resultado mostrado en la ecuación anterior es una ecuación trascendental que representa los estados pares que son solución. Note que este no depende del valor de  $g$ .

También podemos resolver las Ec. (3.36) y (3.40) para  $a$ , obteniendo

$$a = \sqrt{g^0} \left( \frac{1+m}{\sqrt{2mV_0}} - R \right). \quad (3.49)$$

Para calcular el valor de  $g^0$ , es necesario normalizar la función de onda, similar al caso de la Ec. (2.40) por lo que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi|^2 dx = 2 \int_0^{\infty} |\phi|^2 dx = 2 \int_0^R |\phi_{in}|^2 dx + 2 \int_R^{\infty} |\phi_{out}|^2 dx = 1 \quad (3.50)$$

sustituyendo las funciones de onda dentro y fuera del pozo de potencial se obtiene

$$\frac{4mV_0}{(1+m)g^0} \int_0^R \text{sn}^2 \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} x + K \right) dx + \int_R^{\infty} \frac{2}{(a + \sqrt{g^0 x})^2} dx = 1. \quad (3.51)$$

La primera parte de la integral se hace de la siguiente manera

$$\frac{4mV_0}{(1+m)g^0} \int_0^R \text{sn}^2 \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} x + K \right) dx = \frac{4mV_0}{(1+m)g^0} \int_0^R \text{cd}^2 \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} x \right) dx \quad (3.52)$$

esta integral se puede hacer con ayuda de las identidades en la referencia [1], con lo que se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{4m}{g^0} \sqrt{\frac{V_0}{2(1+m)}} \text{Cd}(u) \Big|_0^{\sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R} = \\ \frac{4}{g^0} \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} \left[ -E \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R | m \right) + \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R + \right. \\ \left. + m \text{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right) \text{cd} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right) \right], \end{aligned}$$

donde  $\text{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right) = \sqrt{m}$  y  $\text{cd} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right) = \sqrt{\frac{1-m}{1-m^2}} = \frac{1}{\sqrt{1+m}}$ , por lo que

$$\begin{aligned} \frac{4mV_0}{(1+m)g^0} \int_0^R \text{sn}^2 \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} x + k \right) dx = \\ \frac{4}{g^0} \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} \left[ -E \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R | m \right) + \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R + m \sqrt{m} \frac{1}{\sqrt{1+m}} \right]. \quad (3.53) \end{aligned}$$

La segunda parte de la integral queda

$$\int_R^{\infty} \frac{2}{(a + \sqrt{g^0 x})^2} dx = - \frac{2}{\sqrt{g^0}} \frac{1}{(a + \sqrt{g^0 x})} \Big|_R^{\infty} = \frac{2}{\sqrt{g^0} (a + \sqrt{g^0 R})}, \quad (3.54)$$

y empleando la misma propiedad que se utilizó previamente, pero en la dirección opuesta, obtenemos

$$\frac{2}{\sqrt{g^0} (a + \sqrt{g^0 R})} = \frac{2}{\sqrt{g^0}} \sqrt{\frac{2mV_0}{(1+m)g^0}} \frac{\text{cn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right)}{\text{dn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right)}, \quad (3.55)$$

que se puede escribir simplemente como

$$\frac{2}{\sqrt{g^0}} \sqrt{\frac{2mV_0}{(1+m)g^0}} \frac{\text{cn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right)}{\text{dn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R \right)} = \frac{2}{\sqrt{g^0}} \sqrt{\frac{2mV_0}{(1+m)g^0}} \sqrt{\frac{1-m}{1-m^2}} = \frac{2}{g^0(1+m)} \sqrt{2mV_0}. \quad (3.56)$$

Uniendo estos dos resultados en (3.51) obtenemos finalmente

$$1 = -\frac{4}{g^0} \sqrt{\frac{V_0}{2(1+m)}} E\left(\sqrt{\frac{2V_0}{2(1+m)}} R|m\right) + \frac{4V_0 R}{g^0(1+m)} + \frac{4}{g^0(1+m)} \sqrt{\frac{V_0}{2}} m\sqrt{m} + \frac{2}{g^0(1+m)} \sqrt{2mV_0}, \quad (3.57)$$

que simplificando queda

$$1 = -\frac{4}{g^0} \sqrt{\frac{V_0}{2(1+m)}} E\left(\sqrt{\frac{2V_0}{2(1+m)}} R|m\right) + \frac{4V_0 R}{g^0(1+m)} + \frac{2}{g^0} \sqrt{2mV_0}, \quad (3.58)$$

y por lo tanto

$$\frac{g^0}{2\sqrt{V_0}} = -\frac{2}{1+m} E\left(\sqrt{\frac{2V_0}{2(1+m)}} R|m\right) + \frac{2\sqrt{V_0} R}{1+m} + \sqrt{2m} \quad (3.59)$$

donde  $E(x|m)$  es la integral elíptica de Jacobi incompleta de segundo tipo<sup>8</sup>. En la ecuación anterior vuelve a aparecer como longitud natural del sistema,  $\xi = \sqrt{V_0} R$ , por lo que con éste cambio de variable y con  $\alpha^2 = \frac{2}{1+m}$  podemos expresar el resultado anterior de forma más conveniente como

$$\frac{g^0}{2\sqrt{V_0}} = \alpha^2 \xi - \alpha E(\alpha \xi|m) + \sqrt{2m}. \quad (3.60)$$

### 3.4. Primer estado excitado para el potencial pozo

Procedemos ahora a encontrar la solución de un nuevo estado de la ecuación no lineal de Schrödinger para el potencial de la Ec. (3.2) (potencial pozo) en el umbral. Es decir la primera solución impar, con  $\mu = 0$ . Al ser el mismo potencial  $V(x)$ , tenemos la misma forma para la Ec. (3.1) y por lo tanto el proceso para encontrar el resultado es similar al anteriormente descrito, pero en este caso obtenemos

$$\begin{aligned} \phi_I &= -\frac{1}{a - \sqrt{g^1} R \chi}, \chi < -1, \\ \phi_{II} &= \alpha \sqrt{\frac{m_e V_0}{g^1}} \operatorname{sn}(\alpha \xi \chi), -1 < \chi < 1, \\ \phi_{III} &= \frac{1}{a + \sqrt{g^1} R \chi}, \chi > 1, \end{aligned} \quad (3.61)$$

En donde tomamos  $m_e$  como el módulo elíptico de Jacobi para el estado excitado y  $g^1$  es la constante de acoplamiento para el primer estado excitado. También utilizamos los cambios de variable  $\chi = \frac{x}{R}$ ,  $\xi = \sqrt{V_0} R$  y  $\alpha_e^2 = \frac{2}{1+m_e}$ .

De nuevo los parámetros  $a$  y  $m_e$  se seleccionan para satisfacer las condiciones de frontera, Ec. (3.32) y Ec. (3.33) que si se resuelven de manera análoga al caso del estado base se obtiene el siguiente resultado:

$$\operatorname{sn}^2(\alpha_e \xi) = \frac{1}{1+m_e}, \quad (3.62)$$

proporcionando de nuevo una ecuación trascendental para  $m_e$  en función de  $\xi$ .

Por otro lado el valor máximo de  $g^1$  se puede encontrar con la normalización de la función de onda. Obteniendo (en términos de  $\xi$ )

$$\frac{g^1}{2\sqrt{V_0}} = \alpha_e^2 \xi - \alpha_e E(\alpha_e \xi|m_e) + \frac{\sqrt{2m_e}}{1+m_e}. \quad (3.63)$$

<sup>8</sup>  $E(x|m) = \int_0^x (1 - m \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}} d\theta$ . Ver apéndice B

Ahora procedemos a calcular la energía del estado base una vez que el valor de  $g^1$  es determinado para el primer estado excitado, con  $\mu = 0$ . En este caso utilizamos la Ec. (3.23) del estado base y las unimos utilizando las mismas condiciones de frontera, mostradas en las Ecs. (3.32) y (3.33), con la correspondiente normalización de la función de onda (exactamente el mismo proceso que usamos en la sección 3.3) para obtener los valores de  $m_g$  y  $\eta = \frac{|\mu|}{V_0}$ . Este proceso nos da el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\operatorname{sn}^2\left(\alpha\xi\sqrt{1-\eta}\right) = \frac{m+\eta}{1+m\eta}, \quad (3.64)$$

y

$$\frac{g^1}{2\sqrt{V_0}} = \alpha^2(1-\eta)\xi - \alpha\sqrt{1-\eta}E(\alpha\sqrt{1-\eta}\xi|m) - \sqrt{2\eta} + \sqrt{\frac{2(m+\eta)}{1+m\eta}}. \quad (3.65)$$

En donde  $g^1$  está dada por la Ec. (3.63), de nuevo  $\alpha^2 = \frac{2}{1+m}$  y  $m$  es el correspondiente módulo elíptico de Jacobi para el estado base. Note que  $\eta$  debe estar en el intervalo  $[0, 1]$  y que  $m$  para el estado base no es la misma que su correspondiente para el primer estado excitado,  $m_e$ , para el mismo valor de  $\xi = \sqrt{V_0}R$ .

### 3.5. Propiedades de las soluciones para conteo de partículas

En el análisis de las Ec. (3.60) y (3.63), se destacan particularmente dos casos de interés. El primero de estos se refiere a la situación en la que el potencial se aproxima al comportamiento de un potencial delta de Dirac, como se detalla en la Ecuación (2.89). Este caso se define que el límite cuando  $V_0 \rightarrow \infty$  y  $R \rightarrow 0$ , de tal manera que  $\xi \rightarrow 0$ ,  $m$  es cercano a cero,  $E(x|m) \rightarrow x$  y bajo estas condiciones, la Ec. (3.48) adopta la forma aproximada de

$$\sqrt{m} \approx \sqrt{\frac{2}{1+m}}\xi = \alpha\xi. \quad (3.66)$$

Con lo que los primeros dos términos de la Ec. (3.60) se cancelan, y finalmente tomando el límite cuando  $m \rightarrow 0$  se obtiene el siguiente resultado

$$\frac{g^0}{2\sqrt{V_0}} = 2\xi \quad \text{o bien} \quad g^0 = 4V_0R. \quad (3.67)$$

En este caso ( $V_0 \rightarrow \infty$ ,  $R \rightarrow 0$ ) el potencial es equivalente a  $V(x) = -\beta\delta(x)$ <sup>9</sup>. Para obtener  $\beta$  podemos utilizar la propiedad mostrada en Ec. (2.90), de forma que

$$\int_{-\infty}^{\infty} V(x)dx = -\beta \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = -\beta, \quad (3.68)$$

y haciéndolo coincidir con el potencial de pozo cuadrado

$$\int_{-\infty}^{\infty} V(x)dx = -V_0 \int_{-R}^R dx = -2V_0R, \quad (3.69)$$

encontramos que  $\beta = 2V_0R$ , y por lo tanto la Ec. (3.67) se reduce a  $g^0 = 2\beta$ .

El segundo resultado de interés es en el límite cuando  $\xi \gg 1$ . En este caso  $m$  está cerca de uno, lo que implica que  $\alpha \rightarrow 1$  y los dos últimos términos de la Ec. (3.60) están acotados, por lo que el resultado queda

$$\frac{g^0}{2\sqrt{V_0}} = \xi \quad \text{o} \quad g^0 = 2V_0R. \quad (3.70)$$

<sup>9</sup>De nuevo nos vemos formados a cambiar de variable a  $\beta$  ya que en el caso no lineal usamos  $\alpha^2 = \frac{2}{1+m}$

Ahora, si analizamos los casos similares para el primer estado excitado tenemos que en el primer caso, el argumento de la función elíptica de Jacobi debe estar en el rango  $K(m_e) < \alpha_e \xi < 2K(m_e)$ . Esto implica que el valor mínimo del argumento es  $\frac{\pi}{2}$ , y por lo tanto, el valor mínimo de  $\xi$  es  $\frac{\pi}{2\sqrt{2}}$ . En otras palabras, si el valor de  $\xi$  es menor o igual que  $\frac{\pi}{2\sqrt{2}}$ , el módulo elíptico debe ser  $m_e = 0$  y nos queda

$$g^1 = 0 \quad (3.71)$$

lo que significa que ninguna partícula estaría en ese estado. Por el contrario, si tomamos el límite opuesto,  $\xi \gg 1$  se obtiene

$$\frac{g^1}{2\sqrt{V_0}} = \xi, \quad (3.72)$$

que coincide con el caso del estado base.

En la Figura 3.1, se observa el comportamiento de la constante de acoplamiento no lineal en el umbral de deslocalización tanto para el estado base, según la Ec. (3.60), como para el primer estado excitado, según la Ecuación (3.63). Esto permite examinar la variación del número de átomos atrapados por el pozo cuadrado en función del tamaño de la impureza,  $\xi$ .

Los resultados de las Ecuaciones (3.67) y (3.71) se evidencian en el comportamiento de  $g^n$  en la parte inferior izquierda de la gráfica, mientras que los resultados de las Ecuaciones (3.70) y (3.72) se identifican en la parte superior derecha. El caso con  $\xi \ll 1$ , se conoce como el caso de gas de interacción débil, mientras que en el caso  $\xi \gg 1$  se identifica como el caso Thomas-Fermi de interacción fuerte. Por comparación puede revisar la segunda Figura en referencia [12] y observar que el acuerdo para ambas Figuras es excelente para todo  $\xi$ .

Es importante recordar que el primer estado excitado solo se manifiesta cuando  $\xi > \pi/2\sqrt{2}$ ; para valores inferiores a este umbral, solo existe un estado. Esta observación concuerda con las expectativas, ya que en ese escenario, el sistema se comporta de manera análoga al caso presentado en la sección 2.5, referente a la ecuación lineal de Schrödinger con un potencial delta, donde solo existe un estado, el estado base.

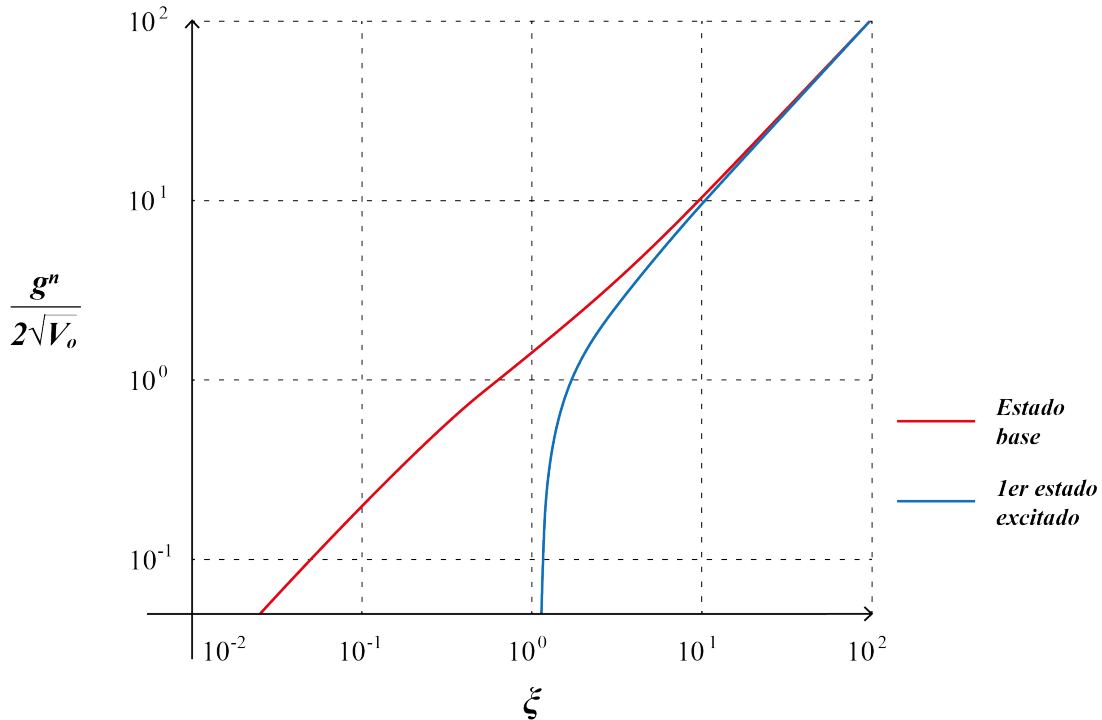


Figura 3.1: Constante de acoplamiento no lineal,  $g^n/2\sqrt{V_0}$ , como función del tamaño de la guía de ondas,  $\xi = \sqrt{V_0}R_0$ . Para el estado base (línea roja continua, Ec. (3.60)) y el primer estado excitado (línea azul, Ec. (3.63)).

Dos observaciones adicionales proporcionarán un contexto más claro para comprender los resultados obtenidos en las secciones anteriores:

1. Al examinar la forma de la Ec. (3.1), notamos que cuando  $g \rightarrow 0$ , dicha ecuación adquiere precisamente la misma forma que la Ec. (2.10). En otras palabras si  $N \rightarrow 1$  ambas ecuaciones de Schrödinger adoptan la misma estructura, eliminándose el término no lineal. Esta observación tiene total coherencia, ya que cuando  $N \rightarrow 1$  (o  $g \rightarrow 0$ ), se corresponde con el escenario de una ecuación de Schrödinger lineal, específicamente para una sola partícula, coincidiendo exactamente con la descripción de la Ecuación (2.10).
2. La Ec. (3.48), cuando  $m = 0$ , se convierte en

$$\operatorname{sn}(\sqrt{2V_0}R) = 0. \quad (3.73)$$

Lo que solo se puede dar si el argumento de la función es igual a  $n\pi$ , es decir que tenemos

$$\sqrt{2V_0}R = n\pi, \quad (3.74)$$

que coincide con la condición para todos los estados excitados de la parte lineal, Ec. (2.39) y Ec. (2.21).



## Capítulo 4

# Resultados y discusión

A diferencia del caso lineal, la ecuación no lineal de Schrödinger no admite como solución general la superposición de funciones individuales. Como se vio en el Capítulo anterior, se pueden obtener varios estados que son solución de la ENLS. Sin embargo, éstos no se puede utilizar como combinación lineal para describir el estado completo del sistema. Dado que esta situación no es común, en este Capítulo utilizaremos las relaciones encontradas para mostrar la forma en la que se pueden obtener varios estados de la ENLS en coexistencia y mostrar las diferencias con el caso lineal.

### 4.1. Comportamiento del estado base

En la sección 3.2, se expone la solución analítica para el estado base de la ENLS con el potencial de pozo cuadrado, representado en la Ec. (3.31). Para una comprensión más completa de su comportamiento, se realizará una representación gráfica de la ecuación. Este resultado corresponde al escenario donde  $\mu = 0$ , indicando el umbral de atrapamiento de la guía de ondas. La Figura 4.1 exhibe el perfil de la función de onda reducida,  $\bar{\phi}$ , para el estado base, expresado como una función de  $\chi = \frac{x}{R}$ , considerando un potencial con  $\xi = 2.6012$ .

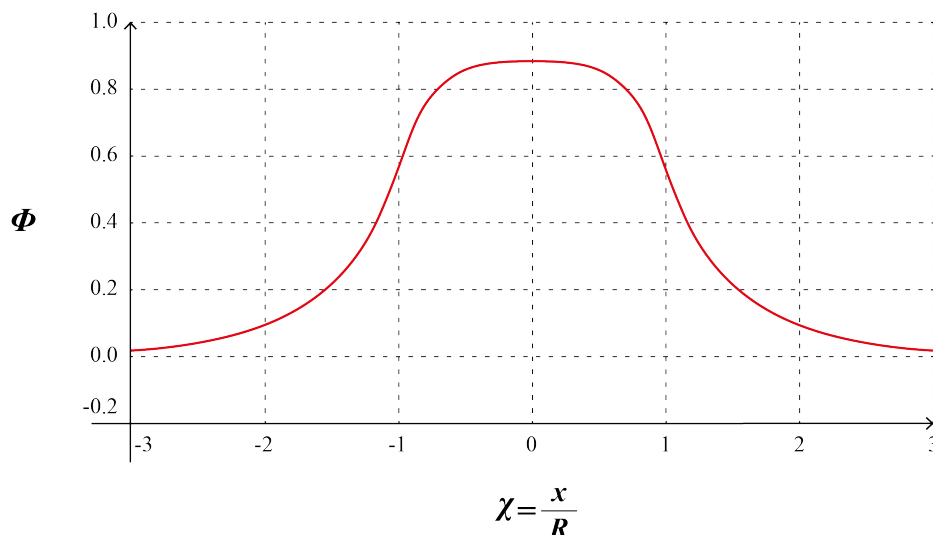


Figura 4.1: Función de onda reducida,  $\bar{\phi}$ , para el estado base en un potencial pozo finito con tamaño reducido  $\xi = \sqrt{V_0}R_0 = 2.6012$ . Solución mostrada en la Ec. (3.31).

Además vimos que el resultado derivado en las Ec. (3.36) y (3.40) puede ser resuelto para  $m$ , independientemente del valor de  $g$ , como se ilustra en la Ec. (3.48). A partir de esta ecuación y el resultado en la Ec. (3.59), observamos que de nuevo podemos seleccionar  $\xi = \sqrt{V_0}R$  como

la longitud natural del sistema, que representa el tamaño reducido del potencial. De esta forma obtenemos, después de igualar a cero, lo siguiente

$$\operatorname{sn}\left(\frac{\sqrt{2}\xi}{1+m}\right) - \sqrt{m} = 0. \quad (4.1)$$

En la Figura (4.2) se presenta un ejemplo de la solución de la ecuación anterior para  $\xi = 1$ . La raíz de la ecuación nos da el valor de  $m$  para cada  $\xi$  dada, en este caso obteniendo un valor de  $m = 0,6844$

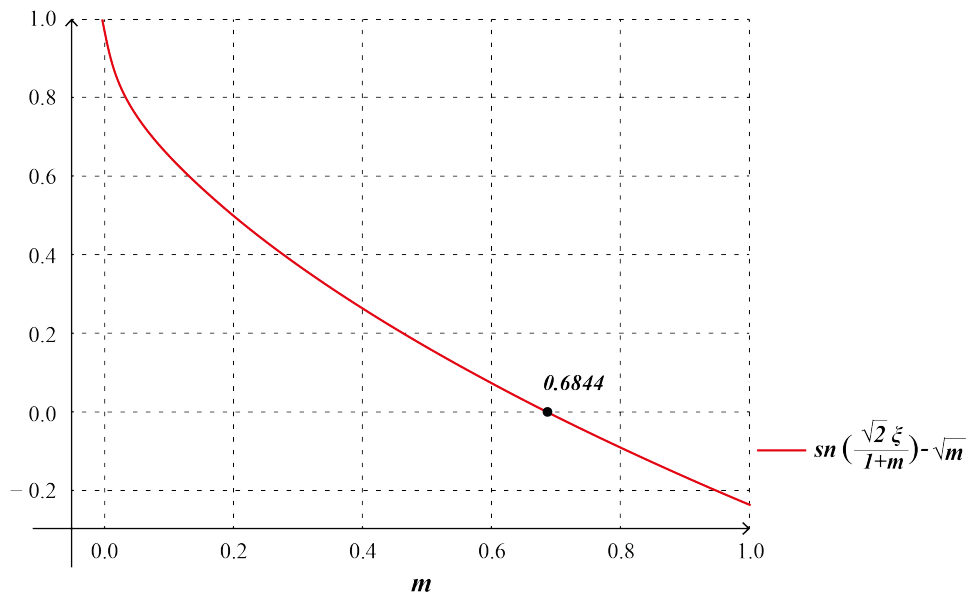


Figura 4.2: Solución de la Ec. (4.1), para  $\xi = 1$ .

Observamos que al variar  $\xi$  podemos cambiar el valor de  $m$ , por lo que para entender el comportamiento completo de la solución hay que ver el comportamiento de  $m$  en función de  $\xi$ . Esto último se muestra en la gráfica de la Figura (4.3).

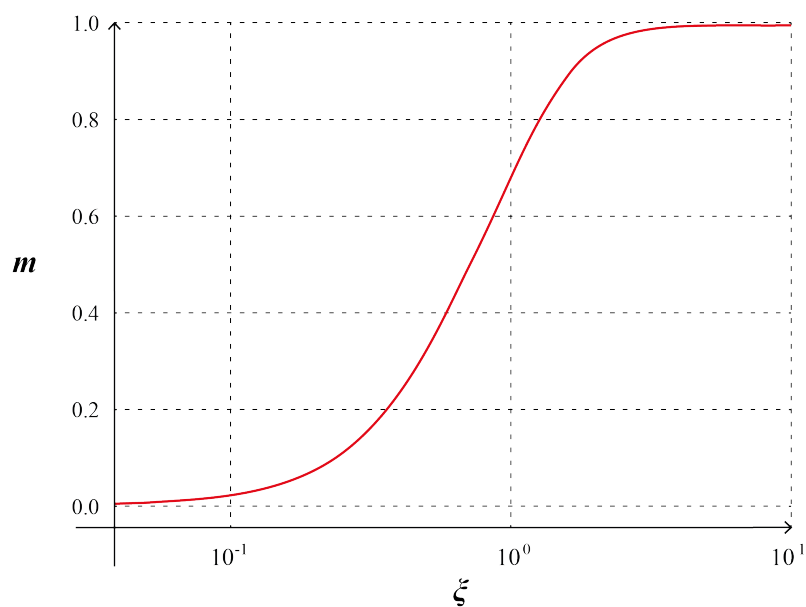


Figura 4.3: Comportamiento del módulo elíptico  $m$  en función del tamaño del pozo de potencial reducido  $\xi = \sqrt{V_0}R$ , Ec. (4.1).

Como se puede observar, vemos que  $m$  es casi constante en dos regiones de la gráfica. Es decir,  $m$  tiene un valor cercano a cero para valores pequeños de  $\xi$ , en realidad si  $\sqrt{V_0}R < 0,1$  vemos que  $m \rightarrow 0$ , y en este caso la función elíptica de Jacobi se convierte en una función trigonométrica. También  $m$  toma un valor cercano a uno para valores grandes de  $\xi$ , precisamente cuando  $\sqrt{V_0}R > 2$  vemos que  $m \rightarrow 1$ , y en este caso la función elíptica de Jacobi se convierte en una función hiperbólica. Notemos que se usó en el eje  $x$  con una escala logarítmica, ya que el cambio es muy abrupto y si no se hace de esta manera, no se podría apreciar el cambio del comportamiento lineal al no lineal.

## 4.2. Comportamiento del primer estado excitado para el potencial pozo cuadrado

Análogo a la sección anterior presentamos primero la solución analítica para la ENLS, en este caso para el primer estado excitado en el umbral de la deslocalización y para el potencial del pozo cuadrado. Esta solución se encuentra representada en la Ec. (3.61), y corresponde de nuevo al caso donde  $\mu = 0$  de la función de onda reducida,  $\bar{\phi}$ , para el primer estado excitado, Ec. (3.61), como una función de  $\chi = \frac{x}{R}$ , para un potencial con  $\xi = 2.6012$ .

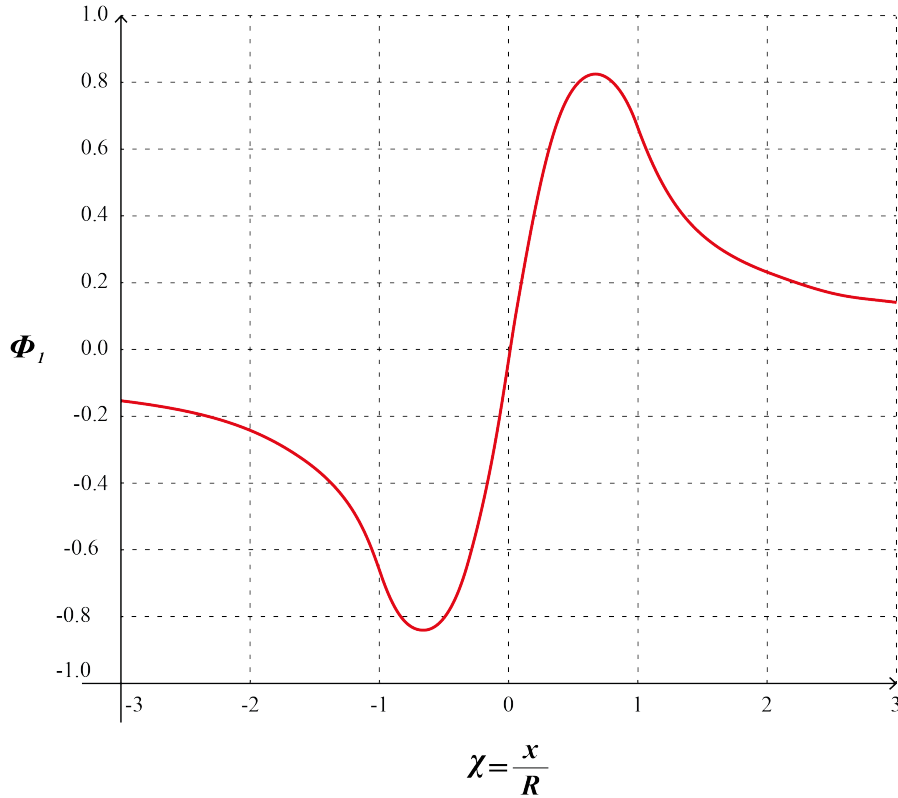


Figura 4.4: Función de onda reducida, denotada como  $\bar{\phi}$ , correspondiente al primer estado excitado en un potencial de pozo finito con tamaño reducido  $\xi = \sqrt{V_0}R_0 = 2.6012$ .

En la Figura anterior tenemos que para un valor de  $\xi = 2.6012$ , el valor correspondiente de  $\frac{g^1}{2V_0} = 1.9754$ , que se obtuvo resolviendo la Ec. (3.60). Si el primer estado excitado está en el umbral podemos utilizar el sistema de ecuaciones en (3.64) y (3.65), para encontrar la energía correspondiente del estado base. Para el ejemplo que se está ocupando, el valor de la energía de este estado base es  $\mu = -0.1982 V_0$ .

Con el fin de mejorar la comprensión del problema, vamos a representar gráficamente estas dos soluciones de la ENLS utilizando el potencial de pozo cuadrado como referencia. Los resultados se muestran en las Figura 4.5.

Se puede apreciar que el estado base se asemeja a la forma del potencial, mientras que el primer estado excitado tiene una gran cola de túnel como consecuencia de estar en el umbral de deslocalización del potencial. Aún así al igual que para la ecuación lineal de Schrödinger con potencial de pozo cuadrado finito, las soluciones que observamos en la Figura 4.5 se construyen haciendo coincidir soluciones afuera y adentro del pozo, y en ambos casos obtenemos como resultado soluciones oscilatorias dentro del pozo, sujetas a la continuidad de la función de onda y su primera derivada en los extremos del potencial. También en ambos casos, las soluciones decaen fuera del pozo, lo cuál era de esperarse, ya que es una condición necesaria para la normalización de la función de onda. Aunque las funciones de onda se asemejan tienen una diferencia importante, como dice Carr L, et al. [3]: “En la ecuación lineal de Schrödinger los parámetros del pozo  $V_0$  y  $a$  determinan completamente los estados estacionarios, mientras que en la ENLS  $g$  es un parámetro externo adicional que determina la extensión del efecto túnel y por lo tanto la localización de la función de onda”.

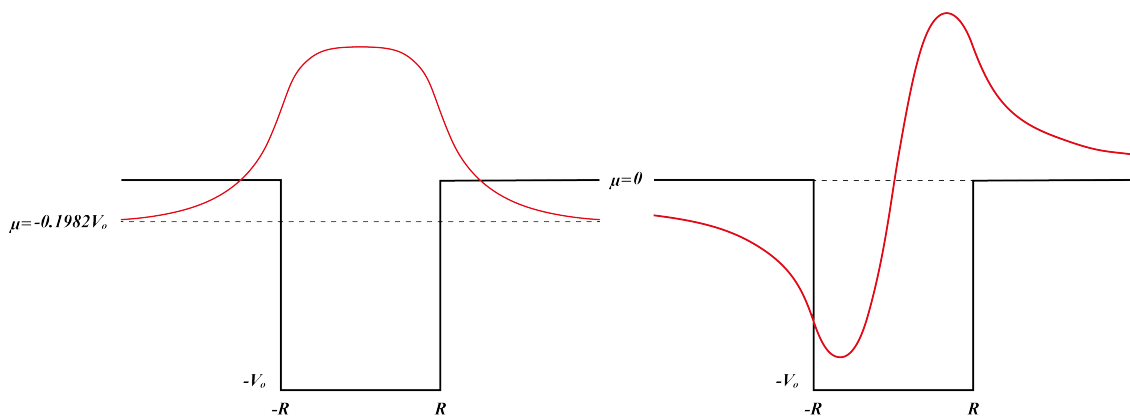


Figura 4.5: A la izquierda se muestra la función de onda para el estado base, mostrada en Ec. (3.23) con el correspondiente pozo de potencial, cuando el primer estado excitado está en el umbral de deslocalización como se muestra en la figura de la derecha. Los resultados se muestran para un tamaño reducido del potencial de  $\xi = 2.6012$  obtenemos con valores para el potencial químico de  $\mu = 0$  para el primer estado excitado y  $\mu = -0.1982 V_0$  para el estado base en coexistencia.

# Capítulo 5

## Conclusiones

### 5.1. Discusión

En este trabajo se analizaron algunos comportamientos sobre los fenómenos de la mecánica cuántica, las cuales se obtuvieron al resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tanto para el caso lineal, presentado en la Ec. (2.5), como para el caso no lineal, presentado en la Ec. (3.1), para diferentes formas de la función de energía potencial  $V(x)$ . Se determinaron las soluciones analíticas tanto para la función de onda como para la energía, detallando el procedimiento en cada caso y utilizando estos resultados para interpretar el significado físico de estas cantidades. Se exploró en detalle un potencial particular, el pozo cuadrado finito definido en la Ec. (2.12), que sirvió como marco para analizar las soluciones correspondientes a las ecuaciones independientes del tiempo.

En primer lugar, se consideró el caso del pozo cuadrado infinito, donde la partícula está confinada entre dos barreras infinitas. Se demostró que dentro del pozo, donde el potencial es cero, la ecuación de Schrödinger se convierte en la de un oscilador armónico simple, cuyas soluciones están cuantizadas. Estos estados estacionarios presentan propiedades interesantes como su carácter par e impar, el aumento del número de nodos con la energía, y su ortogonalidad y completitud como conjunto de funciones. Además, se proporcionó la solución general para la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, la cual es una combinación lineal de estos estados estacionarios.

Posteriormente, se examinó el caso del pozo cuadrado finito, donde la partícula experimenta un potencial finito dentro de un rango definido y cero fuera de este. Aquí, las soluciones de la ecuación de Schrödinger involucran una combinación de exponenciales y funciones trigonométricas debido a la naturaleza del potencial en diferentes regiones. Se identificaron soluciones pares e impares en cada región, y se demostró la cuantización de las energías permitidas mediante la resolución de ecuaciones trascendentales.

Para el pozo cuadrado finito, se abordó el desafío adicional de trabajar con soluciones en regiones donde el potencial es distinto de cero, lo que requirió dividir el espacio en regiones y “pegar” las soluciones utilizando condiciones de frontera adecuadas.

Al igual que en el caso del pozo infinito, las energías también están cuantizadas, pero con la adición de un potencial finito, se observa un fenómeno interesante: la penetración de las funciones de onda en las regiones clásicamente prohibidas, conocido como el efecto túnel cuántico. A pesar de esta diferencia, las soluciones para el pozo finito mantienen propiedades fundamentales similares a las del pozo infinito, como la ortogonalidad y la completitud del conjunto de funciones de onda que son solución. Aunque los detalles de los potenciales difieren, el tratamiento cuantitativo de ambos casos es prácticamente idéntico, lo que demuestra un camino claro para encontrar las soluciones independientemente de la forma específica del potencial.

Por otro lado, el potencial delta de Dirac, con su singularidad en  $x = 0$ , produce un único estado ligado, independientemente de la intensidad del potencial representada por el parámetro

$\alpha$ . La resolución de las condiciones de frontera en este caso revela una característica interesante: la función delta de Dirac determina la discontinuidad de la derivada de la función de onda en  $x = 0$ , lo que lleva a la determinación única de la energía permitida y la forma funcional de la función de onda.

En resumen, el estudio detallado de estos sistemas cuánticos proporciona una comprensión profunda de los principios básicos de la física cuántica, con importantes implicaciones prácticas en campos como la nanotecnología, la electrónica de estado sólido y la física de partículas. La capacidad de modelar y comprender el comportamiento de las partículas a escala microscópica es fundamental para el avance de la tecnología y el desarrollo de nuevas aplicaciones en diversas áreas de la ciencia y la ingeniería. Una de estos grandes avances, es el estudio de condensados de Bose-Einstein, sobre todo cuando se tiene confinado en un guía de onda como en un “chip atómico”. En éste se permite la manipulación y estudio de ensamblajes macroscópicos de átomos en el mismo estado cuántico.

En este trabajo se demostró que un condensado, confinado en un “chip atómico”, puede ser modelado por la Ec. (3.1) y un potencial de tipo pozo cuadrado finito, mismo que representa una guía de ondas. La solución obtenida muestra que el número máximo de átomos atrapados en el pozo está limitado por el valor crítico de la constante de acoplamiento no lineal  $g$ . Este límite se alcanza cuando la energía del estado se aproxima al umbral de deslocalización, lo que permite “contar” la cantidad máxima de átomos que pueden quedar atrapados en el sistema. Se obtuvo analíticamente una solución para el valor máximo de  $g$ , tanto para el estado base Ec. (3.60) como para el primer estado excitado, Ec. (3.63). Esto representa un ensamble de átomos ultrafríos en una guía de ondas en una dimensión.

Se mostró que, similar al caso de la ecuación lineal de Schrödinger, la ENLS tiene estados excitados que aparecen con un tamaño de pozo de potencial más grande que un valor crítico. Encontramos que  $\xi = \frac{\pi}{2\sqrt{2}}$  es el mínimo tamaño del potencial que puede tener un estado excitado en la ENLS. Adicionalmente, vimos que la ENLS admite coexistencia de estados aún cuando no se tiene superposición para la descripción del sistema. En particular se abordó el caso de cómo encontrar estas situaciones cuando el primer estado está en el umbral de deslocalización,  $\mu = 0$ , al mismo tiempo que se puede encontrar un estado base con energía menor.

Además, se ha demostrado que la reescritura de la ENLS en términos de variables adimensionales simplifica el análisis numérico y proporciona una descripción más clara de la dinámica del sistema. Esta reescritura revela que la función de onda reducida y la constante de acoplamiento no lineal son independientes del tamaño y la intensidad específica del potencial, lo que facilita la comparación entre diferentes sistemas.

A pesar de las similitudes en la distribución y otras propiedades entre los casos lineales y no lineales, existe una diferencia crucial que define su abordaje. Mientras que en los casos lineales podemos utilizar el principio de superposición con las soluciones, es decir cualquier solución se puede encontrar como una combinación lineal de las demás, esta característica no existe en los casos no lineales. Hay que destacar que, en el caso de ecuaciones de onda no lineales, cada solución debe encontrarse para toda la región en cada instancia, lo que añade complejidad al proceso de resolución. La pérdida de esta propiedad no disminuye la importancia didáctica de comparar ambos casos. Los problemas lineales son fundamentales para comprender los fundamentos, y aunque se sacrifique la propiedad de superposición, se conservan otras propiedades esenciales.

En resumen, el estudio teórico de condensados de Bose-Einstein en presencia de impurezas proporciona información invaluable sobre la física de sistemas cuánticos altamente correlacionados. El futuro de la investigación en este campo promete descubrimientos aún más emocionantes que transformarán nuestra comprensión de la naturaleza a escalas microscópicas.

## Apéndice A

# La ecuación de Schrödinger no lineal en óptica

Como complemento mostraremos a continuación otra formulación de la ENLS a partir de la función amplitud compleja  $a(x, t) \in \mathbb{C}$  de una onda arbitraria y la relación de dispersión no lineal (función que relaciona  $\omega$  con  $k$  y el módulo al cuadrado de la amplitud  $|a|^2$ ) dada por

$$\omega = \omega(k, |a|^2), \quad (\text{A.1})$$

asumimos que  $mx|a(x, t)|$  es suficientemente pequeño en la relación de dispersión A.1 y procedemos a realizar un desarrollo de Taylor hasta orden dos de la función  $\omega$  en torno a  $k = k_0$  y  $|a|^2 = 0$ .

Sea  $f = f(x, y)$  una función de dos variables con derivadas parciales hasta orden 2, su desarrollo de Taylor de orden dos en torno al punto  $s = (x_0, y_0)$  está dado por

$$f \approx f(s) + \frac{\partial f}{\partial x}(s)(x - x_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(s)(y - y_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(s)(x - x_0)^2 + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(s)(x - x_0)(y - y_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(s)(y - y_0)^2, \quad (\text{A.2})$$

tomando  $f = \omega$ ,  $(x, y) = (k, |a|^2)$  y  $s = (x_0, y_0) = (k_0, 0)$ , se tiene

$$\omega \approx \omega(s) + \frac{\partial \omega}{\partial k}(s)(k - k_0) + \frac{\partial \omega}{\partial |a|^2}(s)|a|^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2}(s)(k - k_0)^2 + \frac{\partial^2 \omega}{\partial k \partial |a|^2}(s)(k - k_0)|a|^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \omega}{\partial (|a|^2)^2}(s)|a|^4, \quad (\text{A.3})$$

como  $a$  es pequeña entonces  $|a|^2$  también, de modo que podemos despreciar los últimos dos sumandos. Por otro lado, definamos

$$\omega_0 = \omega(s), \quad \omega'_0 = \frac{\partial \omega}{\partial k}(s), \quad \omega''_0 = \frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2}(s), \quad (\text{A.4})$$

y, además, denotemos a

$$\mu = - \left( \frac{\partial \omega}{\partial |a|^2} \right)_{|a|^2=0} = cte > 0 \quad (\text{A.5})$$

como el parámetro de no linealidad. Con estas consideraciones la Ec. (A.3) se convierte en

$$\omega = \omega_0 + (k - k_0)\omega'_0 + \frac{1}{2}(k - k_0)^2\omega''_0 - \mu|a|^2. \quad (\text{A.6})$$

Para continuar recurrimos al principio de correspondencia, que establece una relación límite entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica. En otras palabras, la física clásica se obtiene como límite de la física cuántica, y las cantidades conocidas en la física clásica, como el momento cinético  $p$  y la energía  $E$ , se les asignan los operadores  $\hat{p}$  y  $\hat{E}$ , respectivamente. En una dimensión, las formas de estos operadores son las siguientes:

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad (\text{A.7})$$

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + V(x). \quad (\text{A.8})$$

Conociendo la fórmula de Plank,  $E = h\nu = \hbar\omega$ , que describe la cuantización de energía y la hipótesis de De Broglie,  $p = \hbar k$ , que establece la relación onda-partícula, podemos identificar las cantidades  $\omega$  y  $k$ , respectivamente. Así, mediante A.7 y A.8 se tiene la siguiente correspondencia

$$\omega \rightarrow i\left(\frac{\partial}{\partial t}\right), \quad (\text{A.9})$$

$$k \rightarrow -i\left(\frac{\partial}{\partial x}\right), \quad (\text{A.10})$$

donde los operadores A.9 y A.10 actúan sobre la amplitud  $a(x, t)$ . Luego Ec. (A.6) se transforma en <sup>1</sup>

$$i(a_t + \omega'_0 a_x) + \frac{1}{2}\omega_0'' a_{xx} - \mu|a|^2 a = Va \quad (\text{A.11})$$

y realizando el cambio de variable  $y = x - \omega'_0 t$  y  $\tau = t$ , donde  $a(x, t) = A(x - \omega'_0 t, t) = A(y, \tau)$ , de modo que se tiene

$$\begin{aligned} a_x &= \left(\frac{\partial a}{\partial x}\right) = \left(\frac{\partial A}{\partial y}\right)\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial A}{\partial \tau}\right)\left(\frac{\partial \tau}{\partial x}\right) = A_y, \\ a_t &= \left(\frac{\partial a}{\partial t}\right) = \left(\frac{\partial A}{\partial y}\right)\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial A}{\partial \tau}\right)\left(\frac{\partial \tau}{\partial t}\right) = -\omega'_0 A_y + A_\tau, \\ a_{xx} &= \left(\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}\right) = \left(\frac{\partial A_y}{\partial y}\right)\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial A_y}{\partial \tau}\right)\left(\frac{\partial \tau}{\partial x}\right) = A_{yy}, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

así conseguimos eliminar  $a_x$  en la Ec. (A.11) y obtenemos

$$iA_\tau + \frac{1}{2}\omega_0'' A_{yy} - VA - \mu|A|^2 A = 0 \quad (\text{A.13})$$

y si multiplicamos la ecuación anterior por  $\hbar$  y hacemos las siguientes identificaciones

$$\omega_0'' = \frac{\hbar}{m_0}, \quad \mu = \frac{\lambda}{\hbar}, \quad \Psi(z, \tilde{\tau}) = A(y, \tau) \quad (\text{A.14})$$

llegamos a la ecuación no lineal de Schrödinger

$$i\hbar\Psi_{\tilde{\tau}} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\Psi_{zz} - V\Psi - \lambda|\Psi|^2\Psi = 0. \quad (\text{A.15})$$

Si en la ecuación anterior se hacen los cambios de variable  $x = \frac{z}{X_c}$ ,  $t = \frac{\tilde{\tau}}{T_c}$  y  $\psi = \frac{\Psi}{S_c}$ , donde  $X_c = \sqrt{\frac{\hbar^2 g}{2m_0 \lambda}}$ ,  $T_c = \frac{g\hbar}{\lambda}$ ,  $S_c = 1$ . Tratando  $\psi(x, t)$  como la función de onda, entonces la Ec. (A.15) se transforma en la siguiente

$$i\psi_t + \psi_{xx} - V\psi - g|\psi|^2\psi = 0, \quad (\text{A.16})$$

<sup>1</sup>utilizamos al subíndice para denotar la variable de la derivada parcial, por ejemplo  $a_x = \frac{\partial a}{\partial x}$

y tomando  $\psi(x, t) = \phi(x)e^{i\mu t}$  buscamos resolver la ecuación anterior usando el método de separación de variables, obteniendo finalmente

$$-\phi'' + V\phi + g\phi^3 = \mu\phi \tag{A.17}$$

que es la ENLS independiente del tiempo, Ec. (3.1) (vease para más detalle [4]), cuya solución se expresa a través de las funciones elípticas de Jacobi.



## Apéndice B

# Propiedades de las funciones elípticas de Jacobi

Hemos visto que las soluciones de la NLS se expresan a través de las funciones elípticas de Jacobi. Por lo que aprovecharemos para introducir las siguientes definiciones <sup>1</sup>:

Sea  $\kappa \in \mathbb{R}$  con  $0 \leq \kappa^2 \leq 1$ . Se define la integral elíptica incompleta de primera especie como

$$w = E(x|\kappa^2) = \int_0^x \frac{dv}{\sqrt{(1-v^2)(1-\kappa^2v^2)}} \quad (\text{B.1})$$

la inversa de E nos da la primera de las funciones elípticas de Jacobi

$$\text{sn}(w|\kappa^2) = x = E^{-1}(w|\kappa^2). \quad (\text{B.2})$$

A partir de la función anterior se pueden expresar otras dos funciones elípticas importantes en nuestro trabajo

$$\text{cn}^2(w|\kappa^2) = 1 - \text{sn}^2(w|\kappa^2), \quad (\text{B.3})$$

$$\text{dn}^2(w|\kappa^2) = 1 - \kappa^2 \text{sn}^2(w|\kappa^2). \quad (\text{B.4})$$

Las derivadas de las tres funciones elípticas de Jacobi son

$$\frac{d}{dw}[\text{sn}(w|\kappa^2)] = \text{cn}(w|\kappa^2)\text{dn}(w|\kappa^2), \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{d}{dw}[\text{cn}(w|\kappa^2)] = -\text{sn}(w|\kappa^2)\text{dn}(w|\kappa^2), \quad (\text{B.6})$$

$$\frac{d}{dw}[\text{dn}(w|\kappa^2)] = -\kappa^2 \text{sn}(w|\kappa^2)\text{cn}(w|\kappa^2). \quad (\text{B.7})$$

Para demostrar la afirmación anterior podemos partir de la Ec. (B.1) y la derivamos

$$\frac{dw}{dx} = \frac{d}{dx} \int_0^x \frac{dv}{\sqrt{(1-v^2)(1-\kappa^2v^2)}} = \frac{1}{\sqrt{(1-v^2)(1-\kappa^2v^2)}}, \quad (\text{B.8})$$

dado que la inversa de E se define como  $\text{sn}(w|\kappa^2)$ , podemos concluir de la expresión anterior que

$$\frac{d}{dw}[\text{sn}(w|\kappa^2)] = \frac{dx}{dw} = \sqrt{(1-x^2)(1-\kappa^2x^2)} \quad (\text{B.9})$$

---

<sup>1</sup>Puede obtener una más completa redacción del tema en [1] en su capítulo 16. y en el artículo [4]

y utilizando las relaciones mostradas en las Ec. (B.3) y Ec. (B.4) podemos transformar la expresión anterior en

$$\frac{d}{dw}[\text{sn}(w|\kappa^2)] = \sqrt{(1-x^2)(1-\kappa^2x^2)} = \sqrt{(1-\text{sn}^2(w|\kappa^2))(1-\kappa^2\text{sn}^2(w|\kappa^2))} = \text{cn}(w|\kappa^2)\text{dn}(w|\kappa^2). \quad (\text{B.10})$$

llegando al resultado mostrado en Ec. (B.5).

Para la segunda expresión podemos partir de la Ec. (B.3) y la derivamos, obteniendo

$$2\text{cn}(w|\kappa^2)\frac{d}{dw}[\text{cn}(w|\kappa^2)] + 2\text{sn}(w|\kappa^2)\frac{d}{dw}[\text{sn}(w|\kappa^2)] = 0 \quad (\text{B.11})$$

y utilizando la derivada de  $\text{sn}(w|\kappa^2)$  que probamos anteriormente, llegamos a la expresión

$$2\text{cn}(w|\kappa^2)\left[\frac{d}{dw}[\text{cn}(w|\kappa^2)] + \text{sn}(w|\kappa^2)\text{dn}(w|\kappa^2)\right] = 0. \quad (\text{B.12})$$

Como  $2\text{cn}(w|\kappa^2) \neq 0$  se obtiene la derivada en Ec. (B.6) directamente.

Finalmente para la última expresión podemos partir de la Ec. (B.4) y la derivamos, obteniendo

$$2\text{dn}(w|\kappa^2)\frac{d}{dw}[\text{dn}(w|\kappa^2)] + 2\kappa^2\text{sn}(w|\kappa^2)\frac{d}{dw}[\text{sn}(w|\kappa^2)] = 0 \quad (\text{B.13})$$

y utilizando la derivada de  $\text{sn}(w, \kappa^2)$ , tenemos

$$2\text{dn}(w|\kappa^2)\left[\frac{d}{dw}[\text{dn}(w|\kappa^2)] + \kappa^2\text{sn}(w|\kappa^2)\text{cn}(w|\kappa^2)\right] = 0. \quad (\text{B.14})$$

Como  $2\text{dn}(w|\kappa^2) \neq 0$  se obtiene la derivada en Ec. (B.7) directamente.

Por último nos interesa mostrar que

$$\text{dn}(BX|\kappa^2) = \text{cn}(B\kappa X|1/\kappa^2), \quad (\text{B.15})$$

para hacerlo partiremos de la Ec. (B.1) y la aplicaremos para  $w=BX$ , obtenemos

$$BX = E(x|\kappa^2) = \int_0^x \frac{dv}{\sqrt{(1-v^2)(1-\kappa^2v^2)}}, \quad (\text{B.16})$$

expresión que multiplicando por  $\kappa$  conseguimos

$$B\kappa X = \int_0^x \frac{\kappa dv}{\sqrt{(1-v^2)(1-\kappa^2v^2)}}. \quad (\text{B.17})$$

Si realizamos un cambio de variable de la forma  $\kappa v = u$ , la integral se ajusta a

$$B\kappa X = \int_0^{\kappa x} \frac{\kappa du}{\sqrt{(1-\frac{1}{\kappa^2}u^2)(1-u^2)}} \quad (\text{B.18})$$

pero por la definición en la Ec. (B.1) resulta

$$\text{sn}(B\kappa X|1/\kappa^2) = \kappa x = E(\kappa X|1/\kappa^2) \quad (\text{B.19})$$

y sabiendo que  $x = \text{sn}(BX|\kappa^2)$ , se sigue que  $\text{sn}(B\kappa X|1/\kappa^2) = \kappa x = \kappa \text{sn}(BX|\kappa^2)$ . Así

$$\text{dn}^2(BX|\kappa^2) = 1 - \kappa^2\text{sn}^2(BX|\kappa^2) = 1 - \text{sn}^2(B\kappa X|1/\kappa^2) = \text{cn}^2(B\kappa X|1/\kappa^2). \quad (\text{B.20})$$

Tomando la raíz cuadrada del resultado anterior, llegamos a la expresión de la Ec. (B.15).

Por último y para ayudar a entender los casos límites en las soluciones de la ENLS se puede observar los valores límites cuando  $m = 1$  y  $m = 0$  para las funciones y las integrales elípticas de Jacobi la Fig. B.1, obtenida de [2].

	$m = 0$	$m = 1$
$\operatorname{sn}(u m)$	$\sin(u)$	$\tanh(u)$
$\operatorname{cn}(u m)$	$\cos(u)$	$\operatorname{sech}(u)$
$\operatorname{dn}(u m)$	1	$\operatorname{sech}(u)$
$\operatorname{ds}(u m)$	$\operatorname{csc}(u)$	$\operatorname{csch}(u)$
$\operatorname{ns}(u m)$	$\operatorname{csc}(u)$	$\operatorname{coth}(u)$
$K(m)$	$\pi/2$	$\infty$
$E(m)$	$\pi/2$	1

Figura B.1: Límites de funciones e integrales elípticas de Jacobi. Las primeras tres, es decir,  $\operatorname{sn}$ ,  $\operatorname{cn}$  y  $\operatorname{dn}$ , son soluciones periódicas en el pozo, mientras que los límites con  $m = 1$  de  $\operatorname{dn}$ ,  $\operatorname{ds}$  y  $\operatorname{ns}$ , es decir,  $\operatorname{sech}$ ,  $\operatorname{csch}$  y  $\operatorname{coth}$ , constituyen las colas en decaimiento de la función de onda fuera del pozo.  $4K(m)$  es la periodicidad y las integrales elípticas  $K(m)$  y  $E(m)$  ambas juegan un papel en el sistema de ecuaciones que describe las soluciones.



# Bibliografía

- [1] M. ABRAMOWITZ AND I. STEGUN, *Handbook of Mathematical Functions*, United States Department of Commerce, tenth edition ed., 1972.
- [2] L. D. CARR, C. W. CLARK, AND W. P. REINHARDT, *Stationary solutions of the one-dimensional nonlinear schrödinger equation. i. case of repulsive nonlinearity*, *Physical Review A*, 62 (2000), p. 063610.
- [3] L. D. CARR, K. W. MAHMUD, AND W. P. REINHARDT, *Tunable tunneling: An application of stationary states of bose-einstein condensates in traps of finite depth*, *Physical Review A*, 64 (2001), p. 033603.
- [4] J. CERVERO, *Unveiling the solitons mystery: The jacobi elliptic functions*, *American Journal of Physics*, 54 (1986), pp. 35–38.
- [5] L. DEBNATH, *Nonlinear Partial Differential Equations*, Birkhauser, third edition ed., 2005.
- [6] J. DEREZIŃSKI AND H. SIEDENTOP, eds., *Large Coulomb Systems*, vol. 695, Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [7] R. EISBERG AND R. RESNICK, *Quantum Physics*, Limusa Wiley, 2012.
- [8] I. GRADSHTEYN AND I. RYZHIK, *Table of Integrals, Series, and Products*, Elsevier, seventh edition ed., 2007.
- [9] D. J. GRIFFITHS, *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson Education, second edition ed., 2005.
- [10] D. R. HARTREE, *The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. part ii. some results and discussion*, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24 (1928), pp. 111–132.
- [11] B. G. LEVICH, *Mecánica Cuántica*, vol. Vol. 3, Reverté S.A., 1976.
- [12] R. MÉNDEZ-FRAGOSO AND R. CABRERA-TRUJILLO, *On a Hyperbolic Solution to the Non-linear Schrödinger Equation for a Square Well Potential Coupled to a Contact Impurity at the Delocalization Threshold*, Elsevier, 2015, pp. 341–352.
- [13] R. MÉNDEZ-FRAGOSO AND R. CABRERA-TRUJILLO, *Confinement of an ultra-cold-matter wave packet near the delocalization threshold by a waveguide bend with two or more contact impurities*, *European Physical Journal D*, 75 (2021).
- [14] A. P. PRUDNIKOV, B. Y. A., AND M. O. I., *Integrals and series*, vol. Vol. 1, Gordon and Breach Science Publishers, 2002.