



**Algunos Potenciales Singulares.**  
**Integrabilidad, Supersimetría**  
**y**  
**Fluctuaciones Cuánticas**

Asdrúbal Moreno Mosquera  
Area de Física Teórica  
Instituto de Física Fundamental y Matemáticas  
Universidad de Salamanca

# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Mecánica cuántica supersimétrica extendida <math>\mathcal{N} = 2</math>: sistemas con <math>N</math> grados de libertad</b>	<b>11</b>
1.1. Sistemas con $N = 1$ grados de libertad	12
1.1.1. El espacio de Hilbert de estados	12
1.1.2. Representación del álgebra de Clifford: estados supersimétricos como espinores de Pauli	14
1.1.3. El espectro del Hamiltoniano supersimétrico	15
1.1.4. Ruptura espontánea de supersimetría	17
1.2. Sistemas con $N = 2$ grados de libertad	18
1.2.1. El espacio de Hilbert de estados	19
1.2.2. Representación del álgebra de Clifford	20
1.3. Sistemas con $N = 3$ grados de libertad	21
1.3.1. El espacio de Hilbert de estados	22
1.3.2. Representación del álgebra de Clifford	23
1.4. Sistemas con $N$ grados de libertad	25
1.4.1. El espacio de Hilbert de estados	26
1.4.2. Operadores fermiónicos y el álgebra de Clifford de $\mathbb{R}^{2N}$	29
1.4.3. Dinámica cuántica supersimétrica	30
1.4.4. Determinación de los estados fundamentales: el núcleo de $\hat{H}$	31
<b>2. Dinámica de una partícula en potenciales delta de Dirac</b>	<b>33</b>
2.1. El potencial delta de Dirac	33
2.1.1. Soluciones de scattering	34
2.1.2. Soluciones de estado ligado/antiligado	34
2.2. El potencial escalón con una delta de Dirac	35
2.2.1. Soluciones de scattering	35

2.2.2.	Soluciones de estado ligado/antiligado . . . . .	37
2.3.	El Hamiltoniano doble delta de Dirac supersimétrico $\mathcal{N} = 2$ : dos deltas de igual intensidad . . . . .	38
2.3.1.	Soluciones de scattering . . . . .	39
2.3.2.	Soluciones de estado ligado/antiligado . . . . .	40
2.4.	El Hamiltoniano doble delta de Dirac supersimétrico $\mathcal{N} = 2$ : dos deltas de diferente intensidad . . . . .	45
2.4.1.	Soluciones de scattering doblemente degeneradas . . . . .	46
2.4.2.	Sólo ondas de scattering “diestro” . . . . .	47
2.4.3.	Soluciones de estado ligado/antiligado . . . . .	47
2.5.	El Hamiltoniano triple delta de Dirac supersimétrico $\mathcal{N} = 2$ : tres deltas de diferente intensidad . . . . .	50
2.5.1.	Ondas de scattering . . . . .	51
2.5.2.	Ondas de scattering doblemente degeneradas . . . . .	51
2.5.3.	Soluciones de estado ligado/antiligado . . . . .	52
2.6.	Tres barreras/pozos delta supersimétricas $\mathcal{N} = 2$ de igual intensidad: $\alpha = \beta = \mu$ . . . . .	55
2.6.1.	Ondas de scattering . . . . .	55
2.6.2.	Soluciones de estado ligado/antiligado . . . . .	57
2.7.	El potencial con $N$ deltas de Dirac alternadamente atractivas y repulsivas . . . . .	57
2.7.1.	El potencial con tres deltas de Dirac alternadamente atractivas y repulsivas . . . . .	58
2.7.2.	El potencial con cinco deltas de Dirac alternadamente atractivas y repulsivas . . . . .	60
2.7.3.	El potencial con siete deltas de Dirac alternadamente atractivas y repulsivas . . . . .	63
2.8.	El potencial con infinitas deltas de Dirac alternadamente atractivas y repulsivas . . . . .	67
2.8.1.	Estados fundamentales: el problema de la ruptura espontánea de supersimetría . . . . .	74
<b>3.</b>	<b>Dinámica del sistema de Lieb-Liniger-Yang de <math>N</math> partículas bosónicas en una línea</b> . . . . .	<b>79</b>
3.1.	Dinámica cuántica del sistema de Lieb-Liniger-Yang de $N$ partículas bosónicas sobre una línea . . . . .	79
3.1.1.	$N = 2$ bosones: el sistema de Lieb-Liniger-Yang de dos partículas . . . . .	80
3.1.2.	$N = 3$ bosones: el sistema de Lieb-Liniger-Yang de tres partículas . . . . .	85
3.1.3.	$N$ bosones: el sistema de Yang de $N$ partículas . . . . .	91
3.1.4.	$N$ bosones en un anillo: el límite termodinámico . . . . .	96
3.1.5.	El límite de bosones impenetrables . . . . .	97

3.1.6.	El sistema de Yang de $N$ bosones con $l$ grados internos de libertad . . .	99
3.2.	Dinámica cuántica supersimétrica del sistema de Lieb-Liniger-Yang de $N$ partículas bosónicas sobre una línea . . . . .	101
3.2.1.	$N = 2$ partículas con estructura supersimétrica e interacción generalizada de Lieb-Liniger-Yang . . . . .	101
3.2.2.	$N = 3$ partículas con estructura supersimétrica e interacción generalizada de Lieb-Liniger-Yang . . . . .	106
<b>4.</b>	<b>Dinámica del problema de Kepler-Coulomb</b>	<b>117</b>
4.1.	El problema de Kepler-Coulomb clásico en dos dimensiones . . . . .	117
4.2.	El problema de Kepler-Coulomb cuántico en dos dimensiones . . . . .	118
4.2.1.	Espectro discreto de $\hat{H}$ . . . . .	119
4.2.2.	Funciones propias de estado ligado de $\hat{H}$ . . . . .	120
4.2.3.	Figuras y Tablas . . . . .	123
4.3.	El problema de Kepler-Coulomb clásico en tres dimensiones . . . . .	129
4.4.	El problema de Kepler-Coulomb cuántico en el espacio Euclideo tridimensional	130
4.4.1.	La simetría dinámica $\mathbb{SO}(4)$ . . . . .	131
4.4.2.	Espectro discreto de $\hat{H}$ . . . . .	132
4.4.3.	Funciones propias de $\hat{H}$ de estado ligado . . . . .	133
4.4.4.	Invariantes como operadores diferenciales en coordenadas polares esféricas	134
4.4.5.	Los tres primeros niveles de energía . . . . .	135
4.4.6.	El nivel genérico: Figuras y Tablas . . . . .	141
4.5.	El problema de Kepler-Coulomb supersimétrico en dos dimensiones . . . . .	149
4.5.1.	El espectro discreto de $\hat{H}$ en el sector bosónico: $\hat{F} = 0$ . . . . .	150
4.5.2.	Funciones propias de $\hat{H}$ de estado ligado en el sector fermiónico $\hat{F} = 1$	152
4.5.3.	Estados de scattering y descomposición espectral de Hodge supersimétrica	154
4.5.4.	Estructura Clifford de los invariantes en el problema supersimétrico de Kepler-Coulomb en el plano . . . . .	156
4.6.	El problema de Kepler-Coulomb supersimétrico en el espacio Euclideo tridimensional . . . . .	160
4.6.1.	El espectro discreto de $\hat{H}$ . . . . .	162
4.6.2.	Estados de scattering . . . . .	163
4.6.3.	Estructura Clifford de los invariantes del problema supersimétrico de Kepler-Coulomb en el espacio . . . . .	165
<b>5.</b>	<b>Dinámica del problema de Euler-Coulomb</b>	<b>169</b>
5.1.	El problema de Euler-Coulomb clásico en dos dimensiones . . . . .	169

5.2.	El problema de Euler-Coulomb cuántico en el plano . . . . .	170
5.2.1.	Separabilidad de la ecuación de Schrödinger en coordenadas elípticas . . . . .	172
5.2.2.	Las ecuaciones de Razavy y Whittaker-Hill algebraicas como problema de Sturm-Liouville . . . . .	174
5.3.	Funciones de onda estacionarias: soluciones combinadas de las ecuaciones de Razavy y Whittaker-Hill . . . . .	175
5.3.1.	Soluciones “finitas” de la ecuación “radial” . . . . .	176
5.3.2.	Soluciones “finitas” de la ecuación “angular” . . . . .	182
5.4.	Funciones de onda hidrogenoideas . . . . .	185
5.4.1.	Funciones de onda de Demkov en el plano . . . . .	188
5.4.2.	El caso de dos centros iguales: la ecuación de Mathieu . . . . .	194
5.4.3.	Colapso de los dos centros en uno . . . . .	198
5.4.4.	Fuga de uno de los dos centros al infinito . . . . .	206
5.5.	El problema de Euler-Coulomb clásico y cuántico en tres dimensiones . . . . .	209
5.5.1.	Separabilidad de la ecuación de Schrödinger en coordenadas elípticas prolatas . . . . .	210
5.5.2.	Funciones de onda estacionarias: soluciones de las ecuaciones esferoidales generalizadas “radial” y “angular” . . . . .	212
5.5.3.	Soluciones “finitas” de las ecuaciones radial y angular para los niveles más bajos de energía . . . . .	215
5.5.4.	Funciones de onda hidrogenoideas . . . . .	219
5.6.	El problema de Euler-Coulomb supersimétrico en dos dimensiones . . . . .	233
5.6.1.	Estados ligados bosónicos: reaparición de las ecuaciones de Razavy y Whittaker-Hill . . . . .	236
5.6.2.	Los estados fundamentales singletes . . . . .	239
5.6.3.	Dos centros de igual intensidad: funciones propias y valores propios de estado ligado en el caso $Z_1 = Z$ . . . . .	240
5.6.4.	Comparación entre el espectro supersimétrico $\mathcal{N} = 2$ y el espectro $\mathcal{N} = 0$ . . . . .	242
<b>6.</b>	<b>Fluctuaciones cuánticas de campos escalares 1+1 dimensionales en un campo de fondo clásico</b> . . . . .	<b>247</b>
6.1.	Energía de Casimir . . . . .	247
6.2.	La ecuación de campo y la función de Green . . . . .	249
6.3.	El tensor momento-energía . . . . .	250
6.4.	El método <b>TGTG</b> en teorías escalares 1 + 1 dimensionales . . . . .	252
6.5.	Energía de Casimir, la traza del núcleo del calor y la función zeta . . . . .	254

6.6.	Fluctuaciones de un campo escalar en un campo de fondo de potenciales delta de Dirac . . . . .	256
6.6.1.	Campo de fondo de una delta de Dirac . . . . .	256
6.6.2.	Campo de fondo de dos deltas de Dirac . . . . .	258
6.6.3.	Tensor de tensiones de una delta y energía de Casimir . . . . .	259
6.6.4.	Tensor de tensiones de dos deltas y energía de Casimir . . . . .	260
6.7.	Energías de Casimir a partir de la matriz de transferencia . . . . .	262
6.7.1.	La matriz de transferencia para potenciales concentrados en puntos . . . . .	262
6.7.2.	Matriz de transferencia de una delta y energía de Casimir . . . . .	264
6.7.3.	Regularización ultravioleta de la energía de Casimir de una delta en el formalismo <b>TG</b> . . . . .	264
6.7.4.	Matriz de transferencia de dos deltas y energía de Casimir . . . . .	265
6.7.5.	Comparación entre las energías de Casimir en los formalismos <b>TG</b> y del tensor de tensiones . . . . .	270
6.8.	Energías de Casimir a partir de funciones espectrales . . . . .	271
6.8.1.	La fórmula de Dashen-Hasslacher-Neveu para la energía de Casimir inducida sobre una única placa delta . . . . .	272
6.8.2.	La traza del calor de una delta y función zeta espectral . . . . .	274
6.8.3.	Energía de Casimir de dos deltas a partir de las funciones espectrales del calor y zeta . . . . .	277
<b>Conclusiones</b>		<b>281</b>
<b>A. Scattering unidimensional</b>		<b>285</b>
A.1.	Amplitudes de scattering . . . . .	285
A.2.	Matriz $S$ , defasajes y densidad espectral . . . . .	287
A.3.	Ecuación de Lippmann-Schwinger . . . . .	289
A.4.	El potencial delta de Dirac . . . . .	291
A.4.1.	Soluciones de scattering . . . . .	292
A.4.2.	Soluciones de estado ligado . . . . .	292
A.5.	El potencial escalón con una delta de Dirac . . . . .	293
A.5.1.	Soluciones de scattering . . . . .	293
A.5.2.	Soluciones de estado ligado/antiligado . . . . .	294
A.6.	El potencial doble delta de Dirac . . . . .	295
A.6.1.	Soluciones de scattering . . . . .	295
A.6.2.	Soluciones de estado ligado/antiligado . . . . .	296
A.7.	El potencial triple delta de Dirac . . . . .	300

A.7.1. Soluciones de scattering . . . . .	301
A.7.2. Soluciones de estado ligado/antiligado . . . . .	302
A.7.3. Estados ligados de tres pozos delta de igual intensidad . . . . .	303
A.7.4. Estados ligados si los dos pozos delta externos son iguales: $\alpha = \beta$ . . . . .	305
A.7.5. Estados ligados en el caso en que $\beta = \mu$ . . . . .	309
A.7.6. Estados ligados de tres pozos delta de diferente intensidad . . . . .	311
<b>B. Mecánica Cuántica Supersimétrica <math>\mathcal{N} = 2</math>: sistemas separables en coordenadas curvilíneas</b>	<b>313</b>
B.1. Mecánica clásica supersimétrica . . . . .	313
B.2. Formalismo de Cartan . . . . .	315
B.2.1. Vielbeins . . . . .	316
B.2.2. Caso de sistemas ortogonales . . . . .	316
B.2.3. Cambios de coordenadas . . . . .	317
B.2.4. Caso especial: cambio a coordenadas cartesianas . . . . .	318
B.3. Mecánica clásica supersimétrica . . . . .	318
B.4. Mecánica cuántica supersimétrica: cuantización . . . . .	320
B.5. Sistemas separables en mecánica cuántica supersimétrica . . . . .	321
B.5.1. Sistemas separables en coordenadas elípticas . . . . .	323
<b>Bibliografía</b>	<b>327</b>

# Introducción

El objetivo de esta memoria es el estudio de una serie de problemas cuánticos cuyas dinámicas están determinadas por operadores de Hamilton todos ellos con energías potenciales singulares. En un primer tipo, trataremos sistemas de un grado de libertad, una partícula que se mueve en una recta encontrando distintas configuraciones de pozos o barreras de potencial de tipo “delta” de Dirac. En el límite de infinitas deltas, el llamado “peine” de Dirac, encontramos una idealización del modelo de Kronig-Penney [1, 2] que explica el fenómeno cuántico básico que determina ciertas propiedades de la conducción de carga eléctrica en metales. Es por tanto el peine de Dirac un sistema cuántico pertinente en la Física del estado sólido, en particular ayuda en la comprensión de la existencia de bandas de conducción y de valencia en materiales conductores y semiconductores. Un segundo tipo de sistemas con potenciales delta de Dirac que también estudiaremos abarca los modelos de Lieb-Liniger y Yang, véase [2, 3, 4], que describen conjuntos de  $N$  cuerpos que se mueven también sobre una línea con interacciones únicamente de contacto. Estos potenciales de tipo distribucional resultan pues de interés en el campo de la Mecánica Estadística.

En un marco conceptualmente distinto, pues la singularidad de los potenciales se reduce a polos simples, abordaremos problemas de una partícula cargada que se mueve en un plano o en el espacio en el campo electrostático creado por un centro o dos centros de fuerzas Coulombianos fijos. No hay que insistir en la importancia que estos sistemas han tenido en el desarrollo de la Mecánica Celeste, obviamente reemplazando carga eléctrica por masa y Coulomb por Newton, en el ámbito de la Física Clásica. En el dominio cuántico su trascendencia no ha sido menor: en el problema de Kepler-Coulomb se basa gran parte de la Física Atómica. La estructura “grosera” del espectro del átomo de hidrógeno queda explicada mediante la resolución del problema de Kepler cuántico. En cuanto al problema de Euler-Coulomb su posible trascendencia en el estudio del espectro del ion molecular de hidrógeno se remonta a Pauli [5].

La investigación de sistemas tan estudiados se centrará en tres aspectos en que se obtendrán resultados de diverso alcance. Todos estos sistemas son integrables. En este terreno crucial se compararán los distintos niveles de integrabilidad y se analizará la relación entre



integrabilidades de distintos tipos. Supersimetría: Se extenderán todos estos sistemas al marco supersimétrico. En un tratamiento original se propondrán distintas alternativas. Finalmente, en un salto a la Teoría Cuántica de Campos, se utilizará el conocimiento de los problemas espectrales de una partícula en el estudio de las fuerzas de tipo Casimir generadas por las fluctuaciones cuánticas sobre objetos externos modelados mediante deltas de Dirac. Detallamos a continuación brevemente estos tres aspectos.

## Integrabilidad y Solubilidad

Los problemas Hamiltonianos de un grado de libertad son todos integrables de modo que la dinámica cuántica unidimensional de una partícula en el potencial de una configuración de pozos/barreras delta es soluble analíticamente. Existe, sin embargo, un problema de definición del operador Hamiltoniano, que de forma rigurosa, ha de elegirse como una extensión autoadjunta del Hamiltoniano de partícula libre, véase [6] y [7]. Una vez garantizada la hermiticidad del Hamiltoniano, puede presentar el espectro tres tipos de autoestados: estados ligados, estados de scattering, véase [8] y, en el caso de infinitas deltas, espectro de bandas, véase [9]. En el modelo de Lieb-Liniger de  $N$ -bosones interactuando vía potenciales delta de Dirac la integrabilidad está garantizada por la existencia de  $N$ -integrales de movimiento que permiten reducir la ecuación de Schrödinger a  $N$  ecuaciones diferenciales ordinarias desacopladas. Más aún, ello conduce a la factorización de la matriz  $S$  entre  $N$  partículas en términos de la matriz  $S$  entre dos partículas. En el caso de dotar a los bosones de una estructura interna mediante la adición, por ejemplo de espín o color, esta factorización da lugar a una estructura de integrabilidad muy poderosa materializada en la ecuación o álgebra de Yang-Baxter [10].

La resolución del problema de Kepler, la inteligencia del movimiento de una partícula con masa o carga eléctrica en el campo de un potencial de tipo Newtoniano, inversamente proporcional a la distancia entre el cuerpo y el centro de fuerzas, ha jugado el papel clave en la descripción de las interacciones gravitatorias o electrostáticas entre dos cuerpos. Dada la importancia en la Física de ambos problemas no se puede dejar de ponderar suficientemente la gran fortuna de ser el de Kepler un sistema Hamiltoniano sobreintegrable, véase la referencia [11] para encontrar un estudio completo sobre estos sistemas<sup>1</sup>. En sistemas  $N$ -dimensionales máximalmente sobreintegrables existen  $2N - 1$  invariantes independientes funcionalmente. Se dispone así de más constantes del movimiento de las necesarias para que la ecuación de Hamilton-Jacobi, en el marco clásico, o la de Schrödinger, en el dominio cuántico, puedan ser reducidas a un sistema de  $N$  ecuaciones diferenciales desacopladas. En el problema de Kepler es

---

<sup>1</sup>La terminología inglesa “superintegrable” será traducida como sobreintegrable para evitar confusión con conceptos supersimétricos que aparecerán profusamente en esta memoria.

el vector de Runge-Lenz el que, junto al momento angular, da lugar a dicha sobreabundancia de constantes del movimiento. Se puede en esta situación elegir diversos conjuntos de  $N$  invariantes en involución que, por ejemplo, en el caso  $N = 3$ , llevan a la separabilidad de las ecuaciones de Hamilton-Jacobi y de Schrödinger en dos sistemas de coordenadas distintas:  $H, \vec{L}^2, L_z$ , polares esféricas, o,  $H, L_z, R_z$ , donde  $R_z$  es la componente  $z$  del vector de Runge-Lenz, parabólicas.

El problema cuántico de Kepler-Coulomb exhibe una simetría mayor que la derivada de ser un problema de fuerzas centrales relacionada con el vector de Runge-Lenz : en  $N$  dimensiones el sistema, restringido al subespacio de energía negativa, es invariante con respecto al grupo  $\mathbb{SO}(N + 1)$  generado por combinaciones lineales apropiadas de las componentes del vector de Runge-Lenz (apropiadamente normalizado) y los generadores de las rotaciones en el espacio de configuración. Más aún, el Hamiltoniano es una función del operador de Casimir cuadrático de  $\mathbb{SO}(N + 1)$  y los autovalores de energía se deducen algebraicamente como los valores de este operador en cada representación irreducible. Las autofunciones en cada nivel de energía pertenecen así a una representación irreducible de  $\mathbb{SO}(N + 1)$ , y después de identificar la que corresponde al peso más alto mediante la resolución de una ecuación diferencial de primer orden, las demás se obtienen a través de la acción de los generadores con raíces negativas. Las dimensiones de los espacios en que se representa el grupo irreduciblemente constituyen las degeneraciones “accidentales” del sistema.

El problema de una partícula moviéndose en el campo de fuerzas creado por dos centros Newtonianos es completamente integrable pero no soluble: existen  $N$  constantes del movimiento, incluyendo el Hamiltoniano, en involución que permiten reducir las ecuaciones de Hamilton-Jacobi y/o Schrödinger a  $N$  ecuaciones diferenciales ordinarias no acopladas que, sin embargo, no pueden integrarse en general en términos de funciones, elementales o especiales, conocidas. Si se considera el problema como una familia uniparamétrica de sistemas caracterizado cada miembro por la distancia entre los centros de fuerza encontramos el problema de Kepler en dos límites distintos: (1) cuando los dos centros colapsan en uno. (2) Cuando uno de los centros escapa a infinito mientras que el otro migra al origen. El invariante característico del problema de dos centros deviene el cuadrado del momento angular en el primer caso y una componente del vector de Runge-Lenz en el segundo. Ello muestra que la familia de modelos integrables interpola entre las dos versiones separables del problema de Kepler sobre-integrable. La sorpresa consiste en que los autovalores del Hamiltoniano de Kepler-Coulomb son también autovalores del Hamiltoniano de Euler-Coulomb resultando así problemas parcialmente isoespectrales. Aunque las autofunciones se deforman en el proceso, la degeneración se mantiene toda vez que la ecuación de Heuen confluyente a resolver es cuasi-exactamente soluble para cualquier distancia entre los centros pudiéndose escribir en términos de los generadores

del grupo  $\text{SL}_2(\mathbb{R})$ , véase [12].

## Supersimetría

Habiendo sido la integrabilidad de estos sistemas singulares objeto de estudio exhaustivo en el ámbito de la Física Matemática durante al menos los últimos 150 años la parte central de esta memoria se dedicará a la construcción a partir de ellos de posibles generalizaciones en el marco de la Mecánica Cuántica Supersimétrica. El ingrediente esencial de un sistema supersimétrico mecano cuántico es la existencia de variables “fermiónicas” que complementan las variables de posición y momento asociadas a los grados de libertad “bosónicos”. Mientras que estas últimas satisfacen las relaciones de conmutación habituales impuestas por el principio de cuantificación canónica, la cuantificación sobre el nuevo tipo de variables se materializa mediante anticonmutadores de modo que pueden ser representadas como generadores de álgebras de Clifford sobre espacios Euclídeos en varias dimensiones finitas, véase [13]. El espacio de estados en estos sistemas es el producto de espinores Euclídeos de dimensión  $2^N$ , donde opera irreduciblemente el álgebra de Clifford de  $\mathbb{R}^{2N}$ , producto tensor con el espacio de Hilbert  $L^2(\mathbb{R}^N)$ . El operador Hamiltoniano puede ser factorizado como el “cuadrado” de un cierto número de supercargas que son operadores construidos en términos de operadores diferenciales de primer orden y los generadores del álgebra de Clifford, es decir son operadores del tipo del operador de Dirac. Las supercargas conmutan con el Hamiltoniano, son cantidades conservadas y generan así un tipo de transformaciones que mezclan variables bosónicas con fermiónicas y viceversa siendo además simetrías del sistema.

Interacciones compatibles con esta estructura supersimétrica quedan determinadas a partir de una función denominada superpotencial, véase por ejemplo el texto introductorio [14]. En sistemas de un solo grado de libertad uno obtiene el superpotencial resolviendo una ecuación de Riccati que incorpora como dato la energía potencial del sistema mecano cuántico sobre el que se quiere construir una extensión supersimétrica. En este punto de la discusión es importante poner de manifiesto que los procesos de cuantificación canónica y extensión supersimétrica no conmutan. La identificación del superpotencial requerido para extender al marco supersimétrico un sistema Hamiltoniano en mecánica clásica -las variables fermiónicas son aquí variables Grassman- demanda la solución de la ecuación de Hamilton-Jacobi con potencial inverso. En este proceso el superpotencial es por tanto la función característica de Hamilton y la cuantificación canónica implementada sobre este sistema supersimétrico clásico difiere del sistema cuántico supersimétrico construido a partir de la solución de la ecuación de Riccati. Los sistemas supersimétricos con un grado de libertad a tratar en esta memoria usarán como superpotenciales los obtenidos mediante soluciones de la ecuación de Riccati.

La elección más frecuente, no la única, para representar las variables fermiónicas en sistemas de un solo grado de libertad se basa en las matrices de Pauli. Tanto las supercargas como el Hamiltoniano serán entonces operadores diferenciales matriciales  $2 \times 2$  que se representan en el espacio de espinores de dos componentes. El Hamiltoniano, en particular, es un operador formado por dos operadores de Schrödinger en la diagonal, con espectros positivos idénticos, aunque pueden diferir en el núcleo. Fijada esta estructura, la labor siguiente es la búsqueda de superpotenciales que permitan la extensión supersimétrica de sistemas Hamiltonianos mecano cuánticos con varias configuraciones de deltas de Dirac. Este problema fue investigado en los trabajos [15]-[16] donde un potencial formado por una única delta de Dirac da lugar a un sistema supersimétrico en que el superpotencial es la función signo. Los Hamiltonianos que actúan respectivamente sobre las componentes superior e inferior del espinor obedecen a potenciales delta de Dirac con acoplamiento de signo distinto, es decir, el Hamiltoniano supersimétrico incluye tanto el pozo como la barrera delta, aunque desplazados, pues la existencia de autovalores de energía negativos está descartada por construcción en Hamiltonianos supersimétricos. Más exóticos superpotenciales que incluyen productos de la función signo por potencias pares de la posición conducen también a sistemas mecano cuánticos supersimétricos interesantes, véase la referencia [17].

Partiendo del estudio de la extensión supersimétrica de un sistema en que una partícula se mueve en una recta encontrando en un mismo punto un potencial delta junto con un salto, se abordarán después las extensiones supersimétricas de dos, tres, hasta un número finito de deltas. Resulta que la supersimetrización conlleva la generación no sólo de los potenciales delta sino también de pozos cuadrados o cuasi-cuadrados que terminan precisamente en los puntos donde se localizan los potenciales singulares de modo que el primer sistema aludido en este párrafo es el fundamental. En particular proporciona uno de los pocos casos conocidos donde explícitamente ocurre la ruptura de supersimetría en un cierto régimen relativo entre la intensidad de la interacción delta y la amplitud del salto. Ello es interesante pues fué en relación con este fenómeno cuando Witten [18, 19] propuso la formulación e investigación de la Mecánica Cuántica Supersimétrica. Mientras que en el caso de un número finito de deltas el estado fundamental aparece en uno de los dos operadores de Schrödinger cuyos espectros están relacionados a través de las supercargas cuando hay infinitas deltas, con signos alternos, hay dos espinores que dan lugar a estados fundamentales no relacionados por las supercargas. Es un caso peculiar donde la supersimetría es compartida por los estados fundamentales pero el índice de Witten es cero.

El salto a sistemas con dos y tres grados de libertad complica la construcción de los sistemas supersimétricos en varios aspectos. En primer lugar las variables fermiónicas pasan a ser representadas en el marco de álgebras de Clifford de dimensión superior. En concreto, en

sistemas de dos grados de libertad los generadores del álgebra de Clifford de  $\mathbb{R}^4$  representan las variables fermiónicas mientras que en general, los grados de libertad fermiónicos asociados a los  $N$  grados de libertad bosónicos son los generadores de  $Cliff(\mathbb{R}^{2N})$ . El Hamiltoniano supersimétrico es por tanto una matriz  $2^N \times 2^N$  de operadores diferenciales, diagonal por cajas

$$\binom{N}{j} \times \binom{N}{j}, \quad j = 0, 1, \dots, N, \quad , \quad \sum_{j=0}^N \binom{N}{j} = 2^N,$$

de modo que los Hamiltonianos escalares  $j = 0$  y  $j = N$  no están entrelazados. Se planteará la elaboración de esta estructura primeramente sobre el modelo de Lieb y Liniger de dos y tres partículas, donde no hay problemas con la elección del superpotencial, con especial atención a la existencia de posibles estados fundamentales en sectores no bosónicos.

En segundo lugar, surge una dificultad mayor en la elección de superpotencial. Dada la energía potencial de un sistema no supersimétrico la determinación de un superpotencial que permita su extensión supersimétrica requiere resolver una ecuación de tipo Riccati en derivadas parciales, en general una dificultad insuperable. Dos estrategias distintas se han utilizado en el pasado reciente para abordar este problema. En el DAMTP (Cambridge U. K.) Manton y su colaborador Heumann eligieron para proceder a la extensión supersimétrica del problema de Kepler, véase [20], construir primero la versión en mecánica clásica supersimétrica. El superpotencial fue elegido mediante la resolución de la ecuación de Hamilton-Jacobi con potencial de Kepler repulsivo. Dada la separabilidad Hamilton-Jacobi en coordenadas polares del problema de Kepler la determinación del superpotencial fué factible y estos autores eligieron  $W \propto r^{\frac{1}{2}}$ . El problema surge al proceder a continuación a cuantificar la extensión supersimétrica del problema de Kepler clásico [21]. El uso del superpotencial anterior induce un término  $\propto r^{-\frac{3}{2}}$  vía la derivada segunda en el potencial del sistema cuántico supersimétrico. El vector de Runge-Lenz deja de ser un invariante y el proceso de extensión supersimétrica estropea el carácter sobreintegrable del problema de Kepler-Coulomb en el marco mecano cuántico supersimétrico.

En el Instituto Fock de San Petersburgo (Rusia) Ioffe y colaboradores, [22], propusieron una elección distinta de superpotencial,  $W \propto r$ , en orden a formular directamente la extensión supersimétrica del problema de Kepler. Ello equivale a resolver la ecuación de Laplace para determinar el superpotencial o, equivalentemente, la de Riccati en la coordenada radial, para el potencial desplazado en una constante que es exactamente el modulo del estado fundamental. Este mismo camino tomado por Wipf y su grupo en Jena, [23], permitió demostrar la compatibilidad entre supersimetría e integrabilidad. Una extensión supersimétrica del problema de Kepler requiere ir directamente al marco cuántico si se pretender construir un sistema en el que el vector de Runge-Lenz siga siendo invariante. De hecho, de la misma manera que se construye un “super-Hamiltoniano”, Wipf et al. obtienen un “super-vector” de Runge-Lenz

que deja invariante el Hamiltoniano de Kepler supersimétrico.

El problema de Euler-Coulomb en que se estudia la dinámica de una partícula cargada en el campo de dos centros de fuerza Newtonianos fijos es solamente integrable. El invariante que garantiza la integrabilidad es cuadrático en los momentos, de tipo Stäckel, un hecho que garantiza la separabilidad de las ecuaciones de Hamilton-Jacobi y Schrödinger en este caso en variables elípticas<sup>2</sup>. Se puede comprobar que la ruta de Manton y Heumann aplicada a la formulación de una versión supersimétrica del problema de Euler-Coulomb conlleva la destrucción de la integrabilidad del sistema. En [24, 25], sin embargo, se adopta el punto de vista de Ioffe y Wipf eligiendo el superpotencial como una solución de la ecuación de Laplace en el caso de dos grados de libertad. Como en el problema de Kepler-Coulomb sigue existiendo un super-invariante que en la otra formulación desaparece pero en este sistema, al contrario que en el de Kepler-Coulomb, la compatibilidad entre supersimetría e integrabilidad tiene un precio. En este caso el módulo al cuadrado del gradiente del superpotencial no es constante y en el modelo supersimétrico aparecen potenciales aparentemente más complicados que el de Euler-Coulomb. Esto es necesario pues la separabilidad de la ecuación de Schrödinger en coordenadas elípticas demanda que la energía sea multiplicada por potencias de dichas coordenadas. Habida cuenta que supersimetría “empuja” al menos hasta cero los posibles autovalores del Hamiltoniano han de aparecer potenciales que respondan a los términos que multiplican a  $E$ . Es sin embargo notabilísimo, como se demostrará en la memoria, que los espectros del problema no supersimétrico y el extendido son cualitativamente idénticos. Cabe advertir que será también objeto de estudio en este trabajo la versión en tres dimensiones de estos problemas donde surgirá de una forma muy general el concepto de solubilidad cuasi-exacta como clave en la estructura de estos sistemas.

## Fluctuaciones cuánticas

El tercer tipo de fenómeno, en este caso puramente cuántico, que analizaremos en relación con los sistemas mencionados es la energía inducida en el vacío por fluctuaciones asociadas al espectro de estados de una partícula en, por ejemplo, una cierta configuración de deltas. De forma más precisa: se trata de estudiar una teoría cuántica de campos donde los quanta ocupen estados de los Hamiltonianos aludidos anteriormente y medir ciertos observables con respecto a los mismos observables cuando los quanta ocupan estados de partícula libre. El paradigma de fenómeno físico de este tipo es el efecto Casimir [26] donde el observable pertinente es la energía

---

<sup>2</sup>Puede elegirse la variante de estas variables más adecuada en cada problema específico. Por ejemplo para tratar los sectores fermiónicos son útiles las elípticas trigonométricas pues el cambio de coordenadas preserva la orientación.

inducida por las fluctuaciones del campo electromagnético entre dos placas metálicas respecto a la inducida por fluctuaciones similares en el vacío. Bastante después de su concepción en forma idealizada en 1948, este tópico ha florecido explosivamente a partir de los años 90 tanto en sus aspectos teórico/conceptuales como experimentales e incluso se ha revelado como una útil herramienta en nanotecnología, veáse por ejemplo la referencia enciclopédica [27].

Se desarrollará en esta memoria un tratamiento analítico completo de este efecto mediante una simulación de las placas metálicas por potenciales de Dirac. Esta construcción permite ir más allá de las condiciones de contorno de Dirichlet, que describen materiales conductores ideales, y adaptar situaciones en que las placas son parcialmente transparentes, característica incompatible con las condiciones de Dirichlet. Se simplificará no obstante el problema realista tomando en cuenta las fluctuaciones de un campo escalar real en vez del campo electromagnético. No obstante esta simplificación captura la esencia del problema. El cálculo de la energía inducida por las fluctuaciones cuánticas de un campo escalar en presencia de un objeto externo localizado en dos puntos sobre una recta y modelado por dos potenciales delta de Dirac se llevará a cabo por tres procedimientos complementarios, veáse [28]:

1. El conocimiento de los datos de scattering por dos potenciales delta de Dirac, así como los inducidos por una delta aislada, permite obtener las funciones de Green pertinentes y por ende el valor esperado en el vacío del tensor de tensiones, en particular el valor esperado de la densidad de energía. Este es el procedimiento directo de obtención de la energía de Casimir, aunque hay que advertir sobre varios puntos delicados. En primer lugar las funciones de Green han de manejarse en el sentido distribucional. En segundo lugar hay varias renormalizaciones implicadas, No sólo ha de abstraerse la energía de las fluctuaciones cuánticas en ausencia de las placas (el vacío perfecto) si no también la producida en presencia de una sola delta, algo así como la “autoenergía” de Casimir.
2. El estudio de fenómenos de scattering por muchos centros, tan fecundo en Optica Cuántica, ha producido una fórmula notable para las energías y fuerzas de Casimir entre dos cuerpos compactos cualesquiera. La matriz  $T$  del scattering definida vía la ecuación de Lippman-Schwinger caracteriza las propiedades de cada uno de los cuerpos mientras que la relación de uno con otro se establece mediante la función de Green libre. De ahí la denominación: fórmula  $TGTG$  para la energía de Casimir entre dos objetos compactos, veáse [29]. Dado que no hay nada más compacto que un punto, una configuración de dos deltas es ideal como test de la fórmula  $TGTG$ . La aplicación de dicha fórmula puede completarse con facilidad pues las integrales implicadas se calculan rápidamente por la presencia de las distribuciones delta en el integrando. El cálculo se generalizará a configuraciones de  $N$  deltas y al caso de deltas supersimétricas como aplicación del mismo método en situaciones más complejas.

3. Es notable por último la similitud de la propagación de fluctuaciones bosónicas en el potencial creado por una delta con la propagación sobre un kink infinitamente abrupto, veáse [30]. Ello permite abordar el cálculo de la energía de Casimir de una sola delta en perfecta analogía con la estimación del desplazamiento de la masa del kink a orden un lazo en la expansión en potencias de la constante de Planck  $\hbar$ . La única diferencia es la no consideración de la contribución del contratermino de renormalización de la masa pues no se introducirán vértices de tipo  $\phi^4$  en el modelo. En este proceso será conveniente y posible desarrollar la expansión asintótica del núcleo integral de la ecuación del calor, veáse por ejemplo [31], para potenciales singulares, un terreno inexplorado hasta el momento. Se generalizará también este tercer método a configuraciones con dos deltas y se ofrecerá una comparación entre los resultados obtenidos por las tres vías.

## Breve comentario bibliográfico:

Aparte de los artículos especializados consultados y/o trabajados durante la elaboración de esta memoria señalamos los libros de texto que han sido utilizados principalmente en la fijación de ideas, conceptos, notaciones, convenciones y “todo eso”.

En el contexto de la Mecánica Cuántica se han utilizado principalmente las monografías de Galindo y Pascual, [8], Faddeev, [32], y Takhtajan, [33]. Las convenciones de Física Atómica se han acomodado a las del texto de Weissbluth, [35]. El libro de Perelomov, [36], ha dado la pauta para tratar los sistemas integrables. Finalmente, en el texto de Ó Mathúna, [37], se ha basado en buena medida la formulación del problema de Euler-Coulomb de dos centros de fuerza Newtonianos fijos.





# Capítulo 1

## Mecánica cuántica supersimétrica extendida $\mathcal{N} = 2$ : sistemas con $N$ grados de libertad

La supersimetría en mecánica cuántica fue considerada por primera vez por E. Witten en 1981 con el fin de estudiar las características básicas de la simetría bosón-fermión en una teoría supersimétrica y su posible ruptura [18, 19]. En este trabajo Witten introduce la supersimetría en una teoría de campos en (1+0) dimensiones que da lugar a la mecánica cuántica supersimétrica.

Los componentes básicos de la mecánica cuántica supersimétrica son las supercargas  $\hat{Q}_i$ , un conjunto de  $\mathcal{N}$  operadores cuánticos que obedecen el superalgebra de Heisenberg<sup>1</sup>, ver e.g. [14]:

$$\begin{aligned}\hat{Q}_i \hat{Q}_j + \hat{Q}_j \hat{Q}_i &= \{\hat{Q}_i, \hat{Q}_j\} = \delta_{ij} \hat{H} \quad , \quad i, j = 1, \dots, \mathcal{N} \quad , \quad [\hat{Q}] = M^{\frac{1}{2}} L T^{-1} \\ \hat{H} \hat{Q}_i - \hat{Q}_i \hat{H} &= [\hat{H}, \hat{Q}_i] = 0 \quad , \quad i = 1, \dots, \mathcal{N} \quad , \quad [\hat{H}] = M L^2 T^{-2} .\end{aligned}$$

El operador  $\hat{H}$  es el Hamiltoniano cuántico que gobierna la dinámica y las supercargas  $\hat{Q}_i$  son invariantes que generan las “supersimetrías” del sistema. En el caso  $\mathcal{N} = 2$ , nuestra finalidad en esta memoria, es conveniente pasar a las supercargas hermíticas  $\hat{Q}_1$  y  $\hat{Q}_2$  por las combinaciones no hermíticas:  $\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q}_1 + i\hat{Q}_2)$  y  $\hat{Q}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q}_1 - i\hat{Q}_2)$ . El superalgebra de Heisenberg se ve ahora [51], en la forma más simple:

$$\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\} = 2\hat{H} \quad , \quad (1.1)$$

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = 0 \quad , \quad [\hat{H}, \hat{Q}^\dagger] = 0 \quad , \quad [\hat{Q}, \hat{Q}] = 0 \quad , \quad [\hat{Q}^\dagger, \hat{Q}^\dagger] = 0 \quad , \quad (1.2)$$

donde  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$  son los generadores de las supersimetrías del sistema.

---

<sup>1</sup>Denotamos la dimensión física del observable  $\mathcal{O}$  en la forma  $[\mathcal{O}]$ .

## 1.1. Sistemas con $N = 1$ grados de libertad

Para implementar la estructura algebraica de la mecánica cuántica supersimétrica sobre un sistema con un grado de libertad bosónico  $\hat{x}$  es necesario agregar dos grados de libertad fermiónicos  $\hat{\psi}$  y  $\hat{\psi}^\dagger$  tales que:  $(\hat{\psi})^2 = (\hat{\psi}^\dagger)^2 = 0$ , véase las referencias [38]-[42].

En la representación de coordenadas el operador posición  $\hat{x} = x$  actúa sobre las funciones de cuadrado integrable  $f(x) \in L_2(\mathbb{R})$ , las cuales forman el espacio de Hilbert del sistema, por multiplicación. El operador momento canónicamente conjugado  $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$  actúa sobre el mismo espacio de estados como el operador derivada.

Es tradición en mecánica cuántica que esta representación irreducible de las relaciones de conmutación de la cuantización canónica

$$[\hat{x}, \hat{x}] = 0 = [\hat{p}, \hat{p}] \quad , \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad , \quad (1.3)$$

es unitariamente equivalente a cualquier otra representación irreducible (teorema de Stone-von Neumann)<sup>2</sup>.

Los operadores fermiónicos (describiendo los grados de libertad fermiónicos) satisfacen las relaciones de anticonmutación

$$\{\hat{\psi}, \hat{\psi}\} = 0 = \{\hat{\psi}^\dagger, \hat{\psi}^\dagger\} \quad , \quad \{\hat{\psi}, \hat{\psi}^\dagger\} = \frac{1}{m} \quad , \quad [\hat{\psi}] = M^{-\frac{1}{2}} \quad , \quad (1.4)$$

donde  $m$  es un parámetro del sistema con dimensiones de masa.

Las supercargas y el Hamiltoniano supersimétrico son definidos como:

$$\hat{Q} = i\hat{\psi} \left( \hbar \frac{d}{dx} + \frac{dW}{dx} \right) = i\hat{\psi} \hat{D} \quad , \quad \hat{Q}^\dagger = i\hat{\psi}^\dagger \left( \hbar \frac{d}{dx} - \frac{dW}{dx} \right) = i\hat{\psi}^\dagger \hat{D}^\dagger \quad , \quad (1.5)$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \left( \hbar \frac{d}{dx} + \frac{dW}{dx} \right) \left( \hbar \frac{d}{dx} - \frac{dW}{dx} \right) \hat{\mathbb{I}}_2 - \hbar \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \frac{d^2 W}{dx^2} \quad ,$$

donde  $W(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  es el superpotencial,  $[W] = ML^2T^{-1}$ .

### 1.1.1. El espacio de Hilbert de estados

La extensión del espacio de estados requerida por la adición de los grados de libertad fermiónicos es provista por el espacio de Fock fermiónico bidimensional. La construcción de este espacio es bien conocida y se sigue de la construcción previamente descrita en la subsección 1.1.

<sup>2</sup>Recordamos que no hay representaciones de dimensión finita del álgebra de Heisenberg (1.3). La prueba de esta afirmación es sencilla: supongamos que hay una, evaluamos las trazas en ambos lados de la identidad de la derecha y usamos la propiedad cíclica de la traza para encontrar el absurdo  $0 = \text{constante} \neq 0$ .

Se parte del estado de vacío fermiónico abstractamente definido como el estado  $|0\rangle$  aniquilado por  $\hat{\psi}$ :  $\hat{\psi}|0\rangle = 0$ .  $|0\rangle$  es por tanto un estado propio que pertenece al núcleo del operador número de Fermi  $\hat{F} = \hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}$ , i.e.,  $\hat{F}|0\rangle = 0|0\rangle$ .

El significado físico es claro: en este estado el grado de libertad fermiónico está desocupado. La acción del operador de creación  $\hat{\psi}^\dagger$  sobre el estado de vacío produce un nuevo estado  $|1\rangle = \hat{\psi}^\dagger|0\rangle$  donde el grado de libertad fermiónico está ocupado:  $\hat{F}|1\rangle = 1|1\rangle$ . Estos estados son por lo tanto ortogonales y pueden ser apropiadamente normalizados:  $\langle 0|0\rangle = 1$ ,  $\langle 0|1\rangle = 0$ ,  $\langle 1|0\rangle = 0$  y  $\langle 1|1\rangle = 1$ . El espacio de Fock fermiónico es pues generado por los estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  y es isomorfo a  $\mathbb{C}^2$ :  $\mathcal{F} \equiv \{|\Psi\rangle = f_0|0\rangle + f_1|1\rangle\}/f_0 \in \mathbb{C}, f_1 \in \mathbb{C}$ .

Hay una  $\mathbb{Z}_2$ -graduación en el espacio de Fock fermiónico determinada por el operador de Klein fermiónico  $\hat{K}_F = (-1)^{\hat{F}}$ :  $\hat{K}_F|0\rangle = +|0\rangle$  y  $\hat{K}_F|1\rangle = -|1\rangle$ . Esta graduación induce una estructura de suma directa en el espacio de Fock en la forma:  $\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1$ . Aquí, el subespacio unidimensional  $\mathcal{F}_0$  generado por  $|0\rangle$ , respectivamente  $\mathcal{F}_1$  generado por  $|1\rangle$ , es el subespacio donde el grado de libertad fermiónico está desocupado, respectivamente ocupado. El operador número de Bose  $\hat{B} = \hat{\psi}\hat{\psi}^\dagger$  actúa sobre la base de estados en la forma:  $\hat{B}|0\rangle = |0\rangle$  y  $\hat{B}|1\rangle = 0|1\rangle$ . El correspondiente operador de Klein bosónico  $\hat{K}_B = (-1)^{\hat{B}}$  en consecuencia etiqueta los estados de la base:  $\hat{K}_B|0\rangle = -|0\rangle$  y  $\hat{K}_B|1\rangle = |1\rangle$ .

El espacio de Hilbert de estados total del sistema mecano cuántico supersimétrico es obtenido como el producto tensorial del espacio ordinario de funciones de cuadrado integrable con el espacio de Fock fermiónico:  $\mathcal{SH} = L_2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{F}$ . La estructura inducida por la graduación es heredada por el espacio de estados total:  $\mathcal{SH} = \mathcal{SH}_0 \oplus \mathcal{SH}_1$  donde  $\mathcal{SH}_0 = L_2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{F}_0$  y  $\mathcal{SH}_1 = L_2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{F}_1$ .

Así, las funciones de onda en el sistema supersimétrico tienen la forma general:

$$|\Psi(x)\rangle = f_0(x)|0\rangle + f_1(x)|1\rangle$$

donde  $f_0(x)$  y  $f_1(x)$  son funciones de cuadrado integrable de la recta real al plano complejo:  $\int_{-\infty}^{\infty} dx |f_0^*(x)f_0(x)| < +\infty$ ,  $\int_{-\infty}^{\infty} dx |f_1^*(x)f_1(x)| < +\infty$ . Las funciones de onda pueden ser entendidas como  $f_0(x) = \langle f_0|x\rangle$  y  $f_1(x) = \langle f_1|x\rangle$  donde  $|x\rangle$  son kets propios del operador posición:  $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$  en el formalismo bracket de Dirac.

Debido a que es un operador par el Hamiltoniano supersimétrico preserva la descomposición  $\mathcal{SH} = \mathcal{SH}_0 \oplus \mathcal{SH}_1$  actuando diagonalmente sobre cada componente. Las supercargas  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$ , no obstante, son operadores impares que mueven los estados entre diferentes sectores fermiónicos, en tal forma que se establece el complejo  $\mathbb{Z}_2$ -graduado

$$\mathcal{SH}_0 \begin{array}{c} \xrightarrow{\hat{Q}^\dagger} \\ \xleftarrow{\hat{Q}} \end{array} \mathcal{SH}_1$$

### 1.1.2. Representación del álgebra de Clifford: estados supersimétricos como espinores de Pauli

Las relaciones de anticonmutación fermiónicas (1.4) son isomorfas al álgebra de Clifford de  $\mathbb{R}^2$  tal que los operadores de Fermi pueden ser representados por medio de las matrices de Pauli. Contrariamente al álgebra de Heisenberg el álgebra de Clifford admite representaciones irreducibles de dimensión finita. La más simple en nuestro caso consiste en identificar el vacío y el estado de un fermión con los espinores básicos de Pauli:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ahora bien,  $\hat{\psi}|0\rangle = 0 = \hat{\psi}^\dagger|1\rangle$  y las ecuaciones (1.4) son satisfechas por las matrices  $2 \times 2$

$$\hat{\psi} = \frac{1}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\psi}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

mientras que los operadores número de Fermi/Bose y sus contrapartes de Klein son:

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{K}_F = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{K}_B = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Las supercargas en (1.5) se hacen matrices  $2 \times 2$  de operadores diferenciales de primer orden

$$\hat{Q} = \frac{i}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 & \hat{D} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Q}^\dagger = \frac{i}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hat{D}^\dagger & 0 \end{pmatrix},$$

y el Hamiltoniano es la matriz diagonal  $2 \times 2$  de operadores de Schrödinger:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_0 & 0 \\ 0 & \hat{H}_1 \end{pmatrix},$$

donde

$$\hat{H}_0 \equiv \hat{H}|_{S\mathcal{H}_0} = -\frac{\hat{D}\hat{D}^\dagger}{2m} = \frac{1}{2m} \left[ -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + W'^2 + \hbar W'' \right]$$

$$\hat{H}_1 \equiv \hat{H}|_{S\mathcal{H}_1} = -\frac{\hat{D}^\dagger\hat{D}}{2m} = \frac{1}{2m} \left[ -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + W'^2 - \hbar W'' \right]$$

Finalmente, los estados supersimétricos se hacen funciones de onda espinoriales de Pauli:

$$|\Psi(x)\rangle = \Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi^{(0)}(x) \\ \psi^{(1)}(x) \end{pmatrix}.$$

### 1.1.3. El espectro del Hamiltoniano supersimétrico

El espectro de un Hamiltoniano supersimétrico  $\hat{H}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle$  es no negativo. Esta característica principal es fácil de demostrar:

$$E = \frac{\langle \Psi_E | \hat{H} | \Psi_E \rangle}{\langle \Psi_E | \Psi_E \rangle} = \frac{1}{2\langle \Psi_E | \Psi_E \rangle} \left( \langle \hat{Q}\Psi_E | \hat{Q}\Psi_E \rangle + \langle \hat{Q}^\dagger\Psi_E | \hat{Q}^\dagger\Psi_E \rangle \right) \geq 0 .$$

Los estados propios de energía son también estados propios del operador número de Fermi de dos tipos:

$$\begin{aligned} \hat{F}|\Psi_E\rangle_0 &= \hat{F}(f_{0E}|0\rangle) = 0|\Psi_E\rangle_0 \quad , \quad \hat{K}_F|\Psi_E\rangle_0 = |\Psi_E\rangle_0 \\ \hat{F}|\Psi_E\rangle_1 &= \hat{F}(f_{1E}|1\rangle) = 1|\Psi_E\rangle_1 \quad , \quad \hat{K}_F|\Psi_E\rangle_1 = -|\Psi_E\rangle_1 \end{aligned}$$

que llamaremos “bosónico” y “fermiónico”.

#### 1.1.3.1. Estados ligados singletes y dobletes

Clasificados por energías hay dos categorías de estados ligados

1. Modos cero: Estos estados pertenecen al kernel de las supercargas

$$\hat{Q}^\dagger|\Psi_{E_0}\rangle_0 = 0 \quad \text{y/o} \quad \hat{Q}|\Psi_{E_0}\rangle_1 = 0 \quad , \quad E_0 = 0 .$$

Es claro que  $\hat{Q}$  aniquila también los modos cero bosónicos y  $\hat{Q}^\dagger$  hace lo mismo con los modos cero fermiónicos. Con solo un grado de libertad hay a lo sumo dos estados de este tipo, cada uno de ellos formando un estado singlete (multipletes cortos) del álgebra supersimétrica.

2. Pares de estados ligados de energía positiva: Las energías potenciales

$$V_0(x) = \frac{1}{2m}W'^2 + \frac{\hbar}{2m}W'' \quad , \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V_0(x) = v_\pm^2$$

$$V_1(x) = \frac{1}{2m}W'^2 - \frac{\hbar}{2m}W'' \quad , \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V_1(x) = v_\pm^2$$

pueden dar lugar a  $j = 1, 2, \dots, n_b$  estados propios ligados de energía positiva en el Hamiltoniano supersimétrico que se dan en pares y forman dobletes (multipletes largos) del álgebra supersimétrica:

$$\hat{H}|\Psi_{E_j}\rangle_0 = \frac{1}{2}\hat{Q}\hat{Q}^\dagger|\Psi_{E_j}\rangle_0 = E_j|\Psi_{E_j}\rangle_0 \quad , \quad |\Psi_{E_j}\rangle_0 = \hat{Q}|\Psi_{E_j}\rangle_1$$

$$\hat{H}|\Psi_{E_j}\rangle_1 = \frac{1}{2}\hat{Q}^\dagger\hat{Q}|\Psi_{E_j}\rangle_1 = E_j|\Psi_{E_j}\rangle_1 \quad , \quad |\Psi_{E_j}\rangle_1 = \hat{Q}^\dagger|\Psi_{E_j}\rangle_0$$

$$E_0 = 0 < E_1 < E_2 < \dots < E_{n_b} \quad , \quad n_b \in \mathbb{N} .$$

Si  $v_\pm^2 = \infty$  el número natural  $n_b$  va a  $\infty$ , i.e., el espectro de  $\hat{H}$  es puramente discreto.

### 1.1.3.2. Amplitudes de scattering supersimétricas

Si  $v_{\pm}^2 < +\infty$  hay un umbral para estados propios de scattering en  $E = \min(v_-, v_+)$ , vease el Apéndice A. Consideremos una base de ondas planas en la complejión de  $L^2(\mathbb{R})$ :  $\hat{p}|k\rangle = \hbar k|k\rangle$ ,  $f_k(x) = \langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$ . Definiendo  $\hbar k_{\pm} = \sqrt{E - v_{\pm}^2}$  y considerando energías  $E \geq \max(v_-, v_+)$  los estados propios de scattering del Hamiltoniano tienen la forma asintótica:

$$|\Psi_E^r\rangle_{\iota} = \begin{cases} |k_-\rangle_{\iota} + \rho_{\iota}^r(E)|-k_-\rangle_{\iota} \\ \sigma_{\iota}^r(E)|k_+\rangle_{\iota} \end{cases}, \quad |\Psi_E^l\rangle_{\iota} = \begin{cases} \sigma_{\iota}^l(E)|-k_-\rangle_{\iota} \\ |-k_+\rangle_{\iota} + \rho_{\iota}^l(E)|k_+\rangle_{\iota} \end{cases}, \quad \begin{matrix} x \ll 0 \\ x \gg 0 \end{matrix}$$

donde  $|\Psi_E^r\rangle_{\iota}$  corresponde a scattering “diestro” y  $|\Psi_E^l\rangle_{\iota}$  a scattering “zurdo”, ambas en los sectores bosónico y fermiónico  $\iota = 0, 1$ .

Excepto cuando el umbral se encuentra exactamente en 0,  $v_{\pm} = 0$ , estos estados forman también dobles del álgebra supersimétrica:

$$|\Psi_E^r\rangle_1 = \hat{Q}^{\dagger}|\Psi_E^r\rangle_0, \quad |\Psi_E^l\rangle_1 = \hat{Q}^{\dagger}|\Psi_E^l\rangle_0. \quad (1.6)$$

Recordando que la supercarga tiene la forma  $\hat{Q}^{\dagger} = -\hat{\psi}^{\dagger}(\hat{p} + iW'(x))$  y tomando en cuenta (1.6) las siguientes identidades entre las amplitudes de scattering se verifican [38]-[42]:

$$\sigma_1^r(E) = \frac{i\hbar k_+ - v_+}{i\hbar k_- + v_-} \sigma_0^r(E), \quad \rho_1^r(E) = -\frac{i\hbar k_- - v_-}{i\hbar k_+ + v_+} \rho_0^r(E) \quad (1.7)$$

$$\sigma_1^l(E) = \frac{i\hbar k_- + v_-}{i\hbar k_+ - v_+} \sigma_0^l(E), \quad \rho_1^l(E) = \frac{i\hbar k_+ + v_+}{i\hbar k_- - v_-} \rho_0^l(E). \quad (1.8)$$

En la derivación de las fórmulas (1.7) y (1.8) hemos asumido condiciones muy suaves para  $W(x)$ :

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} W'(x) = v_+, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} W'(x) = -v_-, \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} W''(x) = 0.$$

Por lo tanto, la supersimetría se manifiesta en el hecho de que los módulos de las amplitudes de scattering son invariantes:

$$|\sigma_0^r(E)| = |\sigma_1^r(E)|, \quad |\rho_0^r(E)| = |\rho_1^r(E)|, \quad |\sigma_0^l(E)| = |\sigma_1^l(E)|, \quad |\rho_0^l(E)| = |\rho_1^l(E)|.$$

Por otra parte, como en los sistemas no supersimétricos hay conservación de los flujos de densidad de probabilidad:

$$\frac{k_+}{k_-} |\sigma_0^r(E)|^2 + |\rho_0^r(E)|^2 = \frac{k_+}{k_-} |\sigma_1^r(E)|^2 + |\rho_1^r(E)|^2 = 1,$$

$$\frac{k_-}{k_+} |\sigma_0^l(E)|^2 + |\rho_0^l(E)|^2 = \frac{k_-}{k_+} |\sigma_1^l(E)|^2 + |\rho_1^l(E)|^2 = 1.$$

### 1.1.4. Ruptura espontánea de supersimetría

La ausencia de evidencia experimental acerca de la existencia de pares degenerados de partículas supersimétricas en la naturaleza hace imperiosa la búsqueda de ruptura de la supersimetría, ya sea explícita o espontánea, en cualquier teoría de campo supersimétrica que pretenda describir la fenomenología de la física de partículas, digamos el modelo estándar supersimétrico o cualquier modelo de gran unificación supersimétrico. Fue la idea extremadamente fértil de Witten con mayor trascendencia en la física matemática para investigar este problema en la teoría de campos supersimétrica en cero dimensiones espaciales, i.e., mecánica cuántica supersimétrica [18, 19]. La importante observación de Witten es la siguiente: “La ruptura espontánea de supersimetría ocurre en cualquier sistema mecano cuántico supersimétrico que no tenga modos cero en su espectro”. Si el espectro de  $\hat{H}$  es puramente discreto el índice de Witten  $I_W = z_0 - z_1$  [14, 19], la diferencia entre el modo cero bosónico  $z_0$  ( $\hat{H}_0$ ) y el modo cero fermiónico  $z_1$  ( $\hat{H}_1$ ), es útil:  $I_W = 0$  si, pero no solo si, hay ruptura espontánea de supersimetría. Supersimetría explícita no es descartada por  $I_W = 0$  cuando  $z_0 = z_1 \neq 0$ . En el caso de espectro mixto -discreto mas continuo- es conveniente introducir la siguiente regularización del índice de Witten:

$$I_W = \lim_{t \rightarrow 0} \text{Tr}_{L^2} \hat{K}_f e^{-\frac{t\hat{H}}{\hbar}}$$

donde  $t$  puede ser entendido como tiempo euclideo. En particular, si  $v_+ = v_- = v$  tal que  $k_+ = k_- = k$  y  $\sigma^r(k) = \sigma^l(k)$ , haciendo  $\hbar = 1$ , obetemos:

$$I_W = z_0 - z_1 + \lim_{t \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dk (\varrho_0(k) - \varrho_1(k)) \exp[-t(k^2 + v^2)] .$$

Las densidades espectrales son definidas a partir de los defasajes cuando el sistema se limita a un intervalo finito de longitud muy larga  $L$  y sometido a las condiciones de frontera periódicas en la forma:

$$\begin{aligned} \varrho_0(k) &= \frac{L}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \frac{d\delta_0}{dk}(k) \quad , \quad \delta_0(k) = \delta_{0+}(k) + \delta_{0-}(k) \\ \varrho_1(k) &= \frac{L}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \frac{d\delta_1}{dk}(k) \quad , \quad \delta_1(k) = \delta_{1+}(k) + \delta_{1-}(k) \end{aligned}$$

Los defasajes supersimétricos son:

$$\delta_{0\pm}(k) = \frac{1}{2i} \log \left[ \sigma_0(k) \pm \sqrt{\rho_0^r(k)\rho_0^l(k)} \right] \quad , \quad \delta_{1\pm}(k) = \frac{1}{2i} \log \left[ \sigma_1(k) \pm \sqrt{\rho_1^r(k)\rho_1^l(k)} \right]$$

mientras que las amplitudes de scattering supersimétricas están relacionadas en la forma:

$$\sigma_1(k) = \frac{ik - v}{ik + v} \sigma_0(k) \quad , \quad \rho_1^r(k) = -\frac{ik - v}{ik + v} \rho_0^r(k) \quad , \quad \rho_1^l(k) = -\frac{ik - v}{ik + v} \rho_0^l(k) .$$



Por tanto

$$\varrho_0(k) - \varrho_1(k) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{d}{dk} \left( \log \left[ \frac{ik - v}{ik + v} \right] \right) = \frac{v}{\pi} \frac{1}{k^2 + v^2}$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left( \frac{v}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-t(k^2 + v^2)] \frac{dk}{k^2 + v^2} \right) = \lim_{t \rightarrow 0} \left( 1 - \text{Erf}[v\sqrt{t}] \right) = 1$$

y finalmente se obtiene:  $I_W = z_0 - z_1 + 1$ . En problemas de scattering el índice de Witten se desplaza en 1 debido a las diferentes densidades espectrales. Para potenciales periódicos, no obstante, la situación es aún más intrincada, véase las referencias [43]-[46].

## 1.2. Sistemas con $N = 2$ grados de libertad

El formalismo de la mecánica cuántica supersimétrica de sistemas con más de un par de grados de libertad bosónico/fermiónico fue primero desarrollado por Andrianov, Ioffe y colaboradores en una serie de artículos publicados en los años ochenta [22],[47]-[49]. Para formular la mecánica cuántica supersimétrica extendida  $\mathcal{N} = 2$  sobre un sistema con  $N = 2$  grados de libertad bosónicos  $\hat{x}_j$  se requiere agregar cuatro grados de libertad fermiónicos  $\hat{\psi}_j$  y  $\hat{\psi}_j^\dagger$  tales que  $(\hat{\psi}_j)^2 = (\hat{\psi}_j^\dagger)^2 = 0$ ,  $\forall j = 1, 2$ , véase la referencia [51].

Los operadores posición  $\hat{x}_j$  y momento  $\hat{p}_j$  satisfacen las relaciones de conmutación

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0 = [\hat{p}_j, \hat{p}_k] \quad , \quad [\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk} \quad \forall \quad j, k = 1, 2$$

en el marco de la cuantización canónica.

En la representación de coordenadas el espacio de Hilbert de estados (bosónico) del sistema es el espacio  $L_2(\mathbb{R}^2)$  de funciones de cuadrado integrable de  $\mathbb{R}^2$  a  $\mathbb{C}$ . La acción de los operadores  $\hat{x}_j$  y  $\hat{p}_j$  sobre una función de onda  $\psi(x_1, x_2) \in L_2(\mathbb{R}^2)$  es:

$$\hat{x}_j \psi(x_1, x_2) = x_j \psi(x_1, x_2) \quad , \quad \hat{p}_j \psi(x_1, x_2) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x_1, x_2) \quad , \quad j = 1, 2$$

Los operadores fermiónicos satisfacen las relaciones de anticonmutación

$$\{\hat{\psi}_j, \hat{\psi}_k\} = 0 = \{\hat{\psi}_j^\dagger, \hat{\psi}_k^\dagger\} \quad , \quad \{\hat{\psi}_j, \hat{\psi}_k^\dagger\} = \frac{1}{m} \delta_{jk} \quad \forall \quad j, k = 1, 2 \quad , \quad [\hat{\psi}_k] = M^{-\frac{1}{2}} \quad (1.9)$$

donde  $m$  es un parámetro del sistema con dimensiones de masa.

Las supercargas y el Hamiltoniano supersimétrico son definidos como:

$$\hat{Q} = i \sum_{j=1}^2 \hat{\psi}_j \left( \hbar \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial W}{\partial x_j} \right) = i \sum_{j=1}^2 \hat{\psi}_j \hat{D}_j \quad , \quad \hat{Q}^\dagger = i \sum_{j=1}^2 \hat{\psi}_j^\dagger \left( \hbar \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial W}{\partial x_j} \right) = i \sum_{j=1}^2 \hat{\psi}_j^\dagger \hat{D}_j^\dagger \quad ,$$

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{1}{2m} \sum_{j=1}^2 \hat{D}_j \hat{D}_j^\dagger \hat{\mathbb{I}}_{2^2} - \hbar \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 \hat{\psi}_k^\dagger \hat{\psi}_j \frac{\partial^2 W}{\partial x_k \partial x_j} \\ &= -\frac{1}{2m} \sum_{j=1}^2 \hat{D}_j^\dagger \hat{D}_j \hat{\mathbb{I}}_{2^2} + \hbar \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 \hat{\psi}_k \hat{\psi}_j^\dagger \frac{\partial^2 W}{\partial x_k \partial x_j},\end{aligned}$$

donde  $W(x_1, x_2) : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  es el superpotencial,  $[W] = ML^2T^{-1}$ , y  $\hat{\mathbb{I}}_{2^2}$  es la matriz identidad  $4 \times 4$ .

### 1.2.1. El espacio de Hilbert de estados

Para construir el espacio de Fock fermiónico  $\mathcal{F}$  partimos del estado de vacío fermiónico definido como el estado  $|0\rangle$  tal que  $\hat{\psi}_j |0\rangle = 0$ ,  $\forall j = 1, 2$ .  $|0\rangle$  es por tanto un estado propio que pertenece al núcleo del operador número de Fermi  $\hat{F}|0\rangle = \left[ \sum_{k=1}^2 \hat{\psi}_k^\dagger \hat{\psi}_k \right] |0\rangle = 0|0\rangle$ . En este estado todos los grados de libertad fermiónicos están desocupados. Los estados  $|1_j\rangle = \hat{\psi}_j^\dagger |0\rangle$ ,  $j = 1, 2$  -obtenidos a partir del vacío por la acción de uno de los operadores de creación  $\hat{\psi}_j^\dagger$ -son estados propios del operador número fermiónico con valor propio 1,  $\hat{F}|1_k\rangle = |1_k\rangle$ , por tanto corresponden a estados donde uno de los grados de libertad fermiónicos está ocupado. Finalmente, el estado  $|1_2 1_1\rangle = \hat{\psi}_2^\dagger \hat{\psi}_1^\dagger |0\rangle$  es tal que  $\hat{F}|1_2 1_1\rangle = 2|1_2 1_1\rangle$  así que es el único estado en el cual los dos grados de libertad fermiónicos están ocupados. El espacio de Fock fermiónico  $\mathcal{F}$  es pues generado por el conjunto de estados  $\{|0\rangle, |1_1\rangle, |1_2\rangle, |1_2 1_1\rangle\}$  y tiene una estructura de suma directa:  $\mathcal{F} = \bigoplus_{j=0}^2 \mathcal{F}_j = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2$ .

El espacio de Hilbert de estados total del sistema mecano cuántico supersimétrico es obtenido como el producto tensorial del espacio ordinario de funciones de cuadrado integrable con el espacio de Fock fermiónico:  $\mathcal{SH} = L_2(\mathbb{R}^2) \otimes \mathcal{F}$ . Ahora bien, la estructura de suma directa de  $\mathcal{F}$  (inducida por la  $\mathbb{Z}_2$ -graduación) es heredada por el espacio de estados total, esto es:  $\mathcal{SH} = \bigoplus_{n=0}^2 \mathcal{SH}_n = \mathcal{SH}_0 \oplus \mathcal{SH}_1 \oplus \mathcal{SH}_2$  donde  $\mathcal{SH}_n = L_2(\mathbb{R}^2) \otimes \mathcal{F}_n$ .

Las funciones de onda en el sistema supersimétrico tienen la forma general:

$$|\Psi(x_1, x_2)\rangle = f_0(x_1, x_2)|0\rangle + f_1(x_1, x_2)|1_1\rangle + f_2(x_1, x_2)|1_2\rangle + f_{21}(x_1, x_2)|1_2 1_1\rangle,$$

donde  $f_0$ ,  $f_1$ ,  $f_2$  y  $f_{21}$  son funciones de cuadrado integrable.

Debido a que el Hamiltoniano supersimétrico es un operador par este preserva la descomposición  $\mathcal{SH} = \bigoplus_{n=0}^2 \mathcal{SH}_n = \mathcal{SH}_0 \oplus \mathcal{SH}_1 \oplus \mathcal{SH}_2$  y actúa diagonalmente sobre cada componente. Contrariamente las supercargas  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$  son operadores impares que mueven los estados entre diferentes sectores fermiónicos, en tal forma que se establece el complejo  $\mathbb{Z}_2$ -graduado

$$\mathcal{SH}_0 \begin{array}{c} \xrightarrow{\hat{Q}^\dagger} \\ \xleftarrow{\hat{Q}} \end{array} \mathcal{SH}_1 \begin{array}{c} \xrightarrow{\hat{Q}^\dagger} \\ \xleftarrow{\hat{Q}} \end{array} \mathcal{SH}_2$$

### 1.2.2. Representación del álgebra de Clifford

El álgebra anticonmutativa (1.9) cerrada por los operadores  $\hat{\psi}_j$  y  $\hat{\psi}_j^\dagger$  puede ser representada como el álgebra de Clifford de  $\mathbb{R}^4$ . El álgebra  $C(\mathbb{R}^4)$  es generada por las matrices gamma euclideas  $\gamma^j$ ,  $\gamma^{2+j}$ ,  $j = 1, 2$  tales que:

$$\begin{aligned} \{\gamma^j, \gamma^k\} &= 2\delta^{jk} = \{\gamma^{2+j}, \gamma^{2+k}\} \quad , \quad \{\gamma^j, \gamma^{2+k}\} = 0 \quad \forall \quad j, k = 1, 2 \\ (\gamma^j)^\dagger &= \gamma^j \quad , \quad (\gamma^{2+j})^\dagger = \gamma^{2+j} . \end{aligned}$$

Estas matrices hermíticas de dimensión  $4 \times 4$  forman la representación irreducible de  $C(\mathbb{R}^4)$  actuando sobre el espacio de espinores euclideos de dimensión 4, explícitamente están dadas por:

$$\gamma^1 = \begin{pmatrix} \sigma^1 & 0 \\ 0 & \sigma^1 \end{pmatrix} \quad , \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^3 \\ \sigma^3 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 \\ 0 & \sigma^2 \end{pmatrix} \quad , \quad \gamma^4 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^3 \\ i\sigma^3 & 0 \end{pmatrix}$$

donde  $\sigma^i$ ,  $i = 1, 2, 3$  son las matrices de Pauli.

Los operadores fermiónicos son así representados como las siguientes combinaciones de estas matrices gamma:

$$\hat{\psi}_j = \frac{1}{2\sqrt{m}} (\gamma^j + i\gamma^{2+j}) = \hat{\psi}_1^j + i\hat{\psi}_2^j \quad , \quad \hat{\psi}_j^\dagger = \frac{1}{2\sqrt{m}} (\gamma^j - i\gamma^{2+j}) = \hat{\psi}_1^j - i\hat{\psi}_2^j .$$

Por tanto  $\hat{\psi}_1$ ,  $\hat{\psi}_2$  toman la forma:

$$\hat{\psi}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \hat{\psi}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

El estado de vacío y los estados de uno y dos fermiones en esta representación de álgebra de Clifford son los espinores euclideos

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad |1_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad |1_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad |1_2 1_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

La supercargas  $\hat{Q}$  y el operador número de Fermi  $\hat{F}$  son:

$$\hat{Q} = \frac{i}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 & D_1 & D_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -D_2 \\ 0 & 0 & 0 & D_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \hat{F} = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

mientras que el Hamiltoniano es la matriz diagonal por cajas

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{H}_1 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{H}_2 \end{pmatrix}.$$

Los Hamiltonianos escalares  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_2$  son dados por:

$$\hat{H}_0 = \hat{H} \Big|_{\mathcal{S}\mathcal{H}_0} = -\frac{1}{2m} \left( \hat{D}_1 \hat{D}_1^\dagger + \hat{D}_2 \hat{D}_2^\dagger \right) = \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \Delta + \vec{\nabla} W \cdot \vec{\nabla} W + \hbar \Delta W \right)$$

$$\hat{H}_2 = \hat{H} \Big|_{\mathcal{S}\mathcal{H}_2} = -\frac{1}{2m} \left( \hat{D}_1^\dagger \hat{D}_1 + \hat{D}_2^\dagger \hat{D}_2 \right) = \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \Delta + \vec{\nabla} W \cdot \vec{\nabla} W - \hbar \Delta W \right)$$

$$\Delta = \sum_{k=1}^{N=2} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \quad , \quad \vec{\nabla} = \sum_{k=1}^{N=2} \frac{\partial}{\partial x_k} \vec{e}_k$$

con  $\vec{e}_j$ ,  $j = 1, 2$ ,  $\vec{e}_j \cdot \vec{e}_k = \delta_{jk}$  una base ortonormal en  $\mathbb{R}^2$ .

El Hamiltoniano matricial  $\hat{H}_1$  de dimensión  $2 \times 2$  es

$$\hat{H}_1 = \hat{H} \Big|_{\mathcal{S}\mathcal{H}_1} = \begin{pmatrix} -D_1^\dagger D_1 - D_2 D_2^\dagger & D_1^\dagger D_2 + D_2 D_1^\dagger \\ D_1 D_2^\dagger - D_2^\dagger D_1 & -D_1 D_1^\dagger - D_2^\dagger D_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_0 - \frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_1^2} & -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_1 \partial x_2} \\ -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_2 \partial x_1} & \hat{H}_0 - \frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_2^2} \end{pmatrix}$$

### 1.3. Sistemas con $N = 3$ grados de libertad

El formalismo de la mecánica cuántica supersimétrica extendida  $\mathcal{N} = 2$  sobre un sistema con  $N = 3$  grados de libertad bosónicos  $\hat{x}_j$  puede ser desarrollado de forma bastante explícita. En este caso es necesario introducir seis grados de libertad fermiónicos  $\hat{\psi}_j$  y  $\hat{\psi}_j^\dagger$  tales que  $(\hat{\psi}_j)^2 = (\hat{\psi}_j^\dagger)^2 = 0$ ,  $\forall j = 1, 2, 3$ .

Los operadores posición  $\hat{x}_j$  y momento  $\hat{p}_j$  satisfacen las relaciones de conmutacion

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0 = [\hat{p}_j, \hat{p}_k] \quad , \quad [\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \delta_{jk} \quad \forall \quad j, k = 1, 2, 3$$

en el marco de la cuantización canónica. Ahora el espacio de Hilbert de estados (bosónico) del sistema es el espacio  $L_2(\mathbb{R}^3)$  de funciones de cuadrado integrable de  $\mathbb{R}^3$  a  $\mathbb{C}$ . La acción de los operadores  $\hat{x}_j$  y  $\hat{p}_j$  sobre una función de onda  $\psi(x_1, x_2, x_3) \in L_2(\mathbb{R}^3)$  es:

$$\hat{x}_j \psi(x_1, x_2, x_3) = x_j \psi(x_1, x_2, x_3) \quad , \quad \hat{p}_j \psi(x_1, x_2, x_3) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x_1, x_2, x_3) \quad , \quad j = 1, 2, 3$$

Los operadores fermiónicos satisfacen las relaciones de anticonmutacion

$$\{\hat{\psi}_j, \hat{\psi}_k\} = 0 = \{\hat{\psi}_j^\dagger, \hat{\psi}_k^\dagger\} \quad , \quad \{\hat{\psi}_j, \hat{\psi}_k^\dagger\} = \frac{1}{m} \delta_{jk} \quad \forall \quad j, k = 1, 2, 3 \quad , \quad [\hat{\psi}_k] = M^{-\frac{1}{2}} \quad (1.12)$$

donde  $m$  es un parámetro del sistema con dimensiones de masa.

Las supercargas y el Hamiltoniano supersimétrico son definidos como:

$$\hat{Q} = i \sum_{j=1}^3 \hat{\psi}_j \left( \hbar \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial W}{\partial x_j} \right) = i \sum_{j=1}^3 \hat{\psi}_j \hat{D}_j \quad , \quad \hat{Q}^\dagger = i \sum_{j=1}^3 \hat{\psi}_j^\dagger \left( \hbar \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial W}{\partial x_j} \right) = i \sum_{j=1}^3 \hat{\psi}_j^\dagger \hat{D}_j^\dagger \quad ,$$

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{1}{2m} \sum_{j=1}^3 \hat{D}_j \hat{D}_j^\dagger \hat{\mathbb{I}}_{2^3} - \hbar \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \hat{\psi}_k^\dagger \hat{\psi}_j \frac{\partial^2 W}{\partial x_k \partial x_j} \\ &= -\frac{1}{2m} \sum_{j=1}^3 \hat{D}_j^\dagger \hat{D}_j \hat{\mathbb{I}}_{2^3} + \hbar \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \hat{\psi}_k \hat{\psi}_j^\dagger \frac{\partial^2 W}{\partial x_k \partial x_j} \quad , \end{aligned}$$

donde  $W(x_1, x_2, x_3) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  es el superpotencial,  $[W] = ML^2T^{-1}$ , y  $\hat{\mathbb{I}}_{2^3}$  es la matriz identidad  $8 \times 8$ .

### 1.3.1. El espacio de Hilbert de estados

La construcción del espacio de Fock fermiónico  $\mathcal{F}$  es similar a los casos anteriores. Ahora  $\mathcal{F}$  es generado por el conjunto de estados  $\{|0\rangle, |1_1\rangle, |1_2\rangle, |1_3\rangle, |1_2 1_1\rangle, |1_3 1_1\rangle, |1_3 1_2\rangle, |1_3 1_2 1_1\rangle\}$  y tiene una estructura de suma directa:  $\mathcal{F} = \bigoplus_{j=0}^3 \mathcal{F}_j = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2 \oplus \mathcal{F}_3$ .

El estado de vacío fermiónico se define como el estado  $|0\rangle$  tal que  $\hat{\psi}_j |0\rangle = 0$ ,  $\forall j = 1, 2, 3$  y es por tanto un estado propio que pertenece al núcleo del operador número de Fermi  $\hat{F}|0\rangle = \left[ \sum_{k=1}^3 \hat{\psi}_k^\dagger \hat{\psi}_k \right] |0\rangle = 0|0\rangle$ . En este estado todos los grados de libertad fermiónicos están desocupados. Los estados  $|1_j\rangle = \hat{\psi}_j^\dagger |0\rangle$ ,  $j = 1, 2, 3$  -obtenidos a partir del vacío por la acción de uno de los operadores de creación  $\hat{\psi}_j^\dagger$ - son estados propios del operador número fermiónico con valor propio 1,  $\hat{F}|1_k\rangle = |1_k\rangle$ , por tanto corresponden a estados donde uno de los grados de libertad fermiónicos está ocupado. Los estados  $|1_{j_2} 1_{j_1}\rangle = \hat{\psi}_{j_2}^\dagger \hat{\psi}_{j_1}^\dagger |0\rangle$ ,  $j_1, j_2 = 1, 2, 3$  ( $j_2 > j_1$ ) son tales que  $\hat{F}|1_{j_2} 1_{j_1}\rangle = 2|1_{j_2} 1_{j_1}\rangle$  y corresponden a estados en los cuales dos grados de libertad fermiónicos están ocupados. Finalmente  $|1_3 1_2 1_1\rangle = \hat{\psi}_3^\dagger \hat{\psi}_2^\dagger \hat{\psi}_1^\dagger |0\rangle$  aparece como el único estado donde todos los tres grados de libertad fermiónicos están ocupados ya que  $\hat{F}|1_3 1_2 1_1\rangle = 3|1_3 1_2 1_1\rangle$ .

El espacio de Hilbert de estados total del sistema mecano cuántico supersimétrico es obtenido como el producto tensorial del espacio ordinario de funciones de cuadrado integrable con el espacio de Fock fermiónico:  $\mathcal{SH} = L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathcal{F}$ . De nuevo la estructura de suma directa de  $\mathcal{F}$  (inducida por la  $\mathbb{Z}_2$ -graduación) es heredada por el espacio de estados total:  $\mathcal{SH} = \bigoplus_{n=0}^3 \mathcal{SH}_n = \mathcal{SH}_0 \oplus \mathcal{SH}_1 \oplus \mathcal{SH}_2 \oplus \mathcal{SH}_3$  donde  $\mathcal{SH}_n = L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathcal{F}_n$ .



mientras que el operador número de Fermi es:

$$\hat{F} = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

El estado de vacío y los estados de uno, dos y tres fermiones en esta representación de álgebra de Clifford son los espinores euclideos

$$\begin{aligned} |0\rangle &= (1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T, & |1_1\rangle &= (0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T, & |1_2\rangle &= (0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T \\ |1_3\rangle &= (0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0)^T, & |1_2 1_1\rangle &= (0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0)^T, & |1_3 1_1\rangle &= (0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0)^T \\ |1_3 1_2\rangle &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0)^T, & |1_3 1_2 1_1\rangle &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0)^T. \end{aligned}$$

El Hamiltoniano es la matriz diagonal por cajas

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{H}_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{H}_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{H}_3 \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

Los Hamiltonianos escalares  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_3$  están dados por:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \hat{H} \Big|_{\mathcal{SH}_0} = -\frac{1}{2m} \left( \hat{D}_1 \hat{D}_1^\dagger + \hat{D}_2 \hat{D}_2^\dagger + \hat{D}_3 \hat{D}_3^\dagger \right) = \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \Delta + \vec{\nabla} W \cdot \vec{\nabla} W + \hbar \Delta W \right) \\ \hat{H}_3 &= \hat{H} \Big|_{\mathcal{SH}_3} = -\frac{1}{2m} \left( \hat{D}_1^\dagger \hat{D}_1 + \hat{D}_2^\dagger \hat{D}_2 + \hat{D}_3^\dagger \hat{D}_3 \right) = \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \Delta + \vec{\nabla} W \cdot \vec{\nabla} W - \hbar \Delta W \right) \\ \Delta &= \sum_{k=1}^{N=3} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}, \quad \vec{\nabla} = \sum_{k=1}^{N=3} \frac{\partial}{\partial x_k} \vec{e}_k \end{aligned}$$

con  $\vec{e}_j$ ,  $j = 1, 2, 3$ ,  $\vec{e}_j \cdot \vec{e}_k = \delta_{jk}$  una base ortonormal en  $\mathbb{R}^3$ .

Los Hamiltonianos matriciales  $\hat{H}_1$  y  $\hat{H}_2$  de dimensión  $3 \times 3$  son:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \hat{H} \Big|_{\mathcal{SH}_1} = \begin{pmatrix} \hat{H}_0 - \frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_1^2} & -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_1 \partial x_2} & -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_1 \partial x_3} \\ -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_2 \partial x_1} & \hat{H}_0 - \frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_2^2} & -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_2 \partial x_3} \\ -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_3 \partial x_1} & -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_3 \partial x_2} & \hat{H}_0 - \frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_3^2} \end{pmatrix}, \\ \hat{H}_2 &= \hat{H} \Big|_{\mathcal{SH}_2} = \begin{pmatrix} \hat{H}_0 - \frac{\hbar}{m} \left( \frac{\partial^2 W}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial x_2^2} \right) & -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_2 \partial x_3} & \frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_1 \partial x_3} \\ -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_3 \partial x_2} & \hat{H}_0 - \frac{\hbar}{m} \left( \frac{\partial^2 W}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial x_3^2} \right) & -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_3 \partial x_1} & -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial x_2 \partial x_1} & \hat{H}_0 - \frac{\hbar}{m} \left( \frac{\partial^2 W}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial x_3^2} \right) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Cabe señalar ahora que a partir de los años noventa una mecánica cuántica supersimétrica no lineal basada en supercargas que son operadores diferenciales de segundo orden ha sido desarrollada por el grupo de San Petersburgo, veáse la revisión [50]. Dos puntos muy interesantes a señalar sobre este formalismo son: (a) Incluso en sistemas de dos grados de libertad los pares de Hamiltonianos supersimétricos son iso-espectrales. (2) En el álgebra de supersimetría entra no sólo el Hamiltoniano si no un nuevo invariante que es un operador diferencial de cuarto orden. Surgen así sistemas integrables no conocidos anteriormente que no son de la forma de Stäckel, esto es, no dan lugar a separación de variables en la ecuación de Schrödinger.

## 1.4. Sistemas con $N$ grados de libertad

La implementación de la estructura algebraica de la mecánica cuántica supersimétrica extendida  $\mathcal{N} = 2$  sobre un sistema con  $N$  grados de libertad “bosónicos”  $\hat{x}_j$  requiere agregar  $2N$  grados de libertad “fermiónicos”  $\hat{\psi}_j$  y  $\hat{\psi}_j^\dagger$  tales que  $(\hat{\psi}_j)^2 = (\hat{\psi}_j^\dagger)^2 = 0$ ,  $\forall j = 1, \dots, N$ , véase la referencia [51].

Los operadores posición  $\hat{x}_j$  y momento  $\hat{p}_j$  satisfacen las relaciones de conmutación

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0 = [\hat{p}_j, \hat{p}_k] \quad , \quad [\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk} \quad \forall \quad j, k = 1, 2, \dots, N \quad (1.15)$$

en el marco de la cuantización canónica. En la representación de “coordenadas” el espacio de Hilbert de estados (bosónico) del sistema es el espacio  $L_2(\mathbb{R}^N)$  de funciones de cuadrado integrable de  $\mathbb{R}^N$  a  $\mathbb{C}$ . La acción de los operadores  $\hat{x}_j$  y  $\hat{p}_j$  sobre una función de onda  $\psi(x_1, \dots, x_N) \in L_2(\mathbb{R}^N)$  es<sup>3</sup>:

$$\begin{aligned} \hat{x}_j \psi(x_1, \dots, x_N) &= x_j \psi(x_1, \dots, x_N) \quad , \quad j = 1, \dots, N \\ \hat{p}_j \psi(x_1, \dots, x_N) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x_1, \dots, x_N) \quad , \quad j = 1, \dots, N \end{aligned}$$

Los operadores fermiónicos (describiendo los grados de libertad fermiónicos) satisfacen las relaciones de anticonmutación

$$\{\hat{\psi}_j, \hat{\psi}_k\} = 0 = \{\hat{\psi}_j^\dagger, \hat{\psi}_k^\dagger\} \quad , \quad \{\hat{\psi}_j, \hat{\psi}_k^\dagger\} = \frac{1}{m} \delta_{jk} \quad \forall \quad j, k = 1, 2, \dots, N \quad , \quad [\hat{\psi}_k] = M^{-\frac{1}{2}} \quad (1.16)$$

donde  $m$  es un parámetro del sistema con dimensiones de masa.

Las supercargas son definidas a partir del “superpotencial” -una función de valor real <sup>4</sup>

<sup>3</sup>Cualquier otra representación de las relaciones de conmutación es unitariamente equivalente. Teorema de Stone-Von Neumann.

<sup>4</sup>Al tratar con potenciales delta de Dirac será necesario extender la naturaleza matemática de los superpotenciales al espacio de distribuciones en  $\mathbb{R}^N$ .



$W(x_1, x_2, \dots, x_N) : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  con dimensión  $[W] = ML^2T^{-1}$  de acción- y los operadores fermiónicos en la forma:

$$\hat{Q} = i \sum_{j=1}^N \hat{\psi}_j \left( \hbar \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial W}{\partial x_j} \right) = i \sum_{j=1}^N \hat{\psi}_j \hat{D}_j \quad , \quad \hat{Q}^\dagger = i \sum_{j=1}^N \hat{\psi}_j^\dagger \left( \hbar \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial W}{\partial x_j} \right) = i \sum_{j=1}^N \hat{\psi}_j^\dagger \hat{D}_j^\dagger \quad , \quad (1.17)$$

tales que  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$  son operadores fermiónicos.

El Hamiltoniano supersimétrico es en consecuencia el operador diferencial

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N \hat{D}_j \hat{D}_j^\dagger \hat{\mathbb{I}}_{2^N} - \hbar \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \hat{\psi}_k^\dagger \hat{\psi}_j \frac{\partial^2 W}{\partial x_k \partial x_j} \\ &= -\frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N \hat{D}_j^\dagger \hat{D}_j \hat{\mathbb{I}}_{2^N} + \hbar \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \hat{\psi}_k \hat{\psi}_j^\dagger \frac{\partial^2 W}{\partial x_k \partial x_j} \quad , \end{aligned} \quad (1.18)$$

donde  $\hat{\mathbb{I}}_{2^N}$  es la matriz identidad  $2^N \times 2^N$ .

La razón para el nombre superpotencial es evidente aquí. En la fórmula (1.18) los acoplamientos de Yukawa son determinados a partir de las segundas derivadas parciales de  $W$ . El resto de energías de interacción se ven en:

$$\sum_{j=1}^N \hat{D}_j^\dagger \hat{D}_j = \Delta - \sum_{j=1}^N \partial_j W \partial_j W + \hbar \Delta W \quad .$$

### 1.4.1. El espacio de Hilbert de estados

El espacio de Hilbert (fermiónico) es el espacio de Fock fermiónico finitamente generado  $\mathcal{F} = \bigoplus_{j=0}^N \mathcal{F}_j = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{F}_N$ . La estructura de  $\mathcal{F}$  es la siguiente:

1. Estado de cero-fermiones (vacío):  $|0\rangle$  perteneciente al núcleo de todos los operadores de aniquilación fermiónicos  $\hat{\psi}_j |0\rangle = 0, \forall j = 1, 2, \dots, N$ . El estado de vacío también pertenece al núcleo del operador número fermiónico  $\hat{F}|0\rangle = \left[ \sum_{k=1}^N \hat{\psi}_k^\dagger \hat{\psi}_k \right] |0\rangle = 0|0\rangle$ . La interpretación es clara: en este estado todos los grados de libertad fermiónicos están desocupados.  $|0\rangle$  es el único estado en la base de  $\mathcal{F}_0$  que es por lo tanto unidimensional.
2. Estados de 1-fermión:  $|1_j\rangle = \hat{\psi}_j^\dagger |0\rangle, j = 1, 2, \dots, N$ . Todos estos  $N$  estados obtenidos a partir del vacío por la acción de uno de los operadores de creación  $\hat{\psi}_j^\dagger$  son estados propios del operador número fermiónico con valor propio 1:  $\hat{F}|1_k\rangle = |1_k\rangle$ . Estos corresponden a estados donde uno de los grados de libertad fermiónicos está ocupado y forma una base ortonormal  $\langle 1_j | 1_k \rangle = \delta_{jk}$  de  $\mathcal{F}_1$  la cual tiene dimensión  $N$ . Un estado arbitrario en  $\mathcal{F}_1$  se puede escribir como la combinación lineal  $|F_1\rangle = \sum_{j=1}^N c_j |1_j\rangle$  con  $c_j \in \mathbb{C}$ .

3. Estados de 2-fermiones:  $|1_{j_2}1_{j_1}\rangle = \hat{\psi}_{j_2}^\dagger \hat{\psi}_{j_1}^\dagger |0\rangle$ ,  $j_1, j_2 = 1, 2, \dots, N$  ( $j_2 > j_1$ ). Debido a que  $\hat{F}|1_{j_2}1_{j_1}\rangle = 2|1_{j_2}1_{j_1}\rangle$  en estos estados dos grados de libertad fermiónicos están ocupados. Las relaciones de anticonmutación implican antisimetría con respecto al orden de ocupación  $|1_{j_2}1_{j_1}\rangle = -|1_{j_1}1_{j_2}\rangle$  y esto a su vez significa que el número de ocupación fermiónico individual  $\hat{F}_k = \hat{\psi}_k^\dagger \hat{\psi}_k$  tiene valores propios 0 y 1, el principio de exclusión. Hay  $\binom{N}{2} = \frac{N(N-1)}{2}$  estados de este tipo que forman una base ortonormal en  $\mathcal{F}_2$ :  $\langle 1_{k_2}1_{k_1} | 1_{j_2}1_{j_1} \rangle = \delta_{k_1 j_1} \delta_{k_2 j_2}$ . Ahora un estado arbitrario en  $\mathcal{F}_2$  tiene la forma  $|F_2\rangle = \sum_{j_2 > j_1}^N c_{j_2 j_1} |1_{j_2}1_{j_1}\rangle$  con  $c_{j_2 j_1} \in \mathbb{C}$ .
4. Estados de  $n$ -fermiones: La acción de  $n$  operadores de creación sobre el estado de vacío  $|0\rangle$  da lugar a  $\binom{N}{n} = \frac{N!}{(N-n)!n!}$  estados de  $n$  fermiones

$$|1_{j_n}1_{j_{n-1}} \cdots 1_{j_1}\rangle = \hat{\psi}_{j_n}^\dagger \hat{\psi}_{j_{n-1}}^\dagger \cdots \hat{\psi}_{j_1}^\dagger |0\rangle \quad , \quad j_1, j_2 \dots j_n = 1, 2, \dots, N \quad , \quad j_n > j_{n-1} > \cdots > j_1$$

Debido a que  $\hat{F}|1_{j_n}1_{j_{n-1}} \cdots 1_{j_1}\rangle = n|1_{j_n}1_{j_{n-1}} \cdots 1_{j_1}\rangle$  en estos estados  $n$  grados de libertad fermiónicos están ocupados. Las relaciones de anticonmutación inducen antisimetría bajo el intercambio del orden de ocupación de  $j_a$  y  $j_b$

$$|1_{j_n} \cdots 1_{j_a} 1_{j_b} \cdots 1_{j_1}\rangle = -|1_{j_n} \cdots 1_{j_b} 1_{j_a} \cdots 1_{j_1}\rangle .$$

Se satisfacen las siguientes condiciones de ortonormalidad

$$\langle 1_{k_n}1_{k_{n-1}} \cdots 1_{k_1} | 1_{j_n}1_{j_{n-1}} \cdots 1_{j_1} \rangle = \delta_{k_n j_n} \delta_{k_{n-1} j_{n-1}} \cdots \delta_{k_1 j_1}$$

En consecuencia, los  $\binom{N}{n}$  estados  $|1_{j_n}1_{j_{n-1}} \cdots 1_{j_1}\rangle$  forman una base en  $\mathcal{F}_n$ . Por tanto un estado arbitrario en el subespacio  $\mathcal{F}_n$  del espacio de Fock fermiónico es de la forma:

$$|F_n\rangle = \sum_{j_n > j_{n-1} > \cdots > j_1}^N f_{j_n j_{n-1} \cdots j_1} |1_{j_n}1_{j_{n-1}} \cdots 1_{j_1}\rangle \quad , \quad f_{j_n j_{n-1} \cdots j_1} \in \mathbb{C} .$$

5. Estados de  $N$ -fermiones: Finalmente  $|1_N1_{N-1} \dots 1_1\rangle = \hat{\psi}_N^\dagger \hat{\psi}_{N-1}^\dagger \cdots \hat{\psi}_1^\dagger |0\rangle$  aparece como el único estado donde todos los  $N$  grados de libertad fermiónicos están ocupados ya que  $\hat{F}|1_N1_{N-1} \dots 1_1\rangle = N|1_N1_{N-1} \dots 1_1\rangle$ .

Debido a la ortogonalidad entre estados con diferente número de grados de libertad fermiónicos ocupados

$$\langle 1_{k_m}1_{k_{m-1}} \cdots 1_{k_1} | 1_{j_n}1_{j_{n-1}} \cdots 1_{j_1} \rangle = 0 \quad \text{si} \quad m < n \quad , \quad k_1, k_2, \dots, k_m = 1, 2, \dots, N .$$

El espacio de Fock fermiónico  $\mathcal{F}$  tiene pues la estructura de suma directa discutida y su dimensión es la suma de las dimensiones de los subespacios  $\mathcal{F}_n$

$$\dim \mathcal{F} = \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} = 2^N .$$

El espacio de Hilbert de estados del sistema mecano cuántico supersimétrico es el “producto directo”  $\mathcal{SH} = L_2(\mathbb{R}^N) \otimes \mathcal{F}$  que hereda la estructura de suma directa de  $\mathcal{F}$

$$\mathcal{SH} = \bigoplus_{n=0}^N \mathcal{SH}_n = \mathcal{SH}_0 \oplus \mathcal{SH}_1 \oplus \cdots \oplus \mathcal{SH}_N ,$$

donde  $\mathcal{SH}_n = L_2(\mathbb{R}^N) \otimes \mathcal{F}_n$ .

La forma practica de construir el producto directo es permitir que los coeficientes  $f_{j_n j_{n-1} \dots j_1}$  sean funciones de cuadrado integrable de  $\mathbb{R}^N$  a  $\mathbb{C}$ . Así las funciones de onda en el sistema SUSY son de la forma:

$$\begin{aligned} |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)\rangle &= f_0(x_1, x_2, \dots, x_N) |0\rangle + \sum_{j=1}^N f_j(x_1, x_2, \dots, x_N) |1_j\rangle + \\ &+ \sum_{\substack{j_2 j_1 \\ j_2 > j_1}} f_{j_2 j_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) |1_{j_2} 1_{j_1}\rangle + \cdots \\ &\cdots + \sum_{\substack{j_n j_{n-1} \dots j_1 \\ j_n > j_{n-1} > \dots > j_1}} f_{j_n j_{n-1} \dots j_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) |1_{j_n} 1_{j_{n-1}} \cdots 1_{j_1}\rangle + \cdots \\ &\cdots + \sum_{\substack{j_{N-1} j_{N-2} \dots j_1 \\ j_{N-1} > j_{N-2} > \dots > j_1}} f_{j_{N-1} j_{N-2} \dots j_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) |1_{j_{N-1}} 1_{j_{N-2}} \cdots 1_{j_1}\rangle + \\ &+ f_{NN-1 \dots 1}(x_1, x_2, \dots, x_N) |1_N 1_{N-1} \cdots 1_1\rangle , \end{aligned}$$

donde  $f_{j_n j_{n-1} \dots j_1}(x_1, x_2, \dots, x_N)$  son funciones de cuadrado integrable.

El operador número de Fermi  $\hat{F} = \sum_{j=1}^N \hat{\psi}_j^\dagger \hat{\psi}_j$  y el operador de Klein fermiónico  $\hat{K}_F = (-1)^{\hat{F}}$  etiquetan los estados en el espacio de Fock fermiónico Fock y subsidiariamente en  $\mathcal{SH}$

$$\hat{F} |F_n\rangle = n |F_n\rangle \quad , \quad \hat{K}_F |F_n\rangle = (-1)^n |F_n\rangle .$$

Sus contrapartes bosónicas, i.e., el operador número de Bose  $\hat{B} = \sum_{j=1}^N \hat{\psi}_j \hat{\psi}_j^\dagger$  y el operador de Klein bosónico  $\hat{K}_B = (-1)^{\hat{B}}$  actúan igual en un etiquetado dual

$$\hat{B} |F_n\rangle = (N - n) |F_n\rangle \quad , \quad \hat{K}_B |F_n\rangle = (-1)^{N-n} |F_n\rangle .$$

En general, el operador  $\hat{A}$  actuando sobre  $\mathcal{SH}$  es clasificado como bosónico o par si  $[\hat{A}, \hat{K}_F] = 0$  y  $\hat{A}$  es fermiónico o impar si  $\{\hat{A}, \hat{K}_F\} = 0$ . Por tanto, el operador de Klein  $\hat{K}_F$  define una  $\mathbb{Z}_2$ -graduación sobre  $\mathcal{SH}$  tal que si  $\hat{A}$  es par preserva el grado en  $\mathcal{SH}$  pero si  $\hat{A}$  es impar revierte este grado.

En particular, los operadores que definen el álgebra SUSY (1.1) y (1.2) satisfacen:

$$[\hat{H}, \hat{K}_F] = 0 \quad , \quad \{\hat{Q}, \hat{K}_F\} = 0 \quad , \quad \{\hat{Q}^\dagger, \hat{K}_F\} = 0 \quad .$$

El primer conmutador nos dice, por un lado, que  $\hat{K}_F$  es una cantidad conservada y, por otro lado, que  $\hat{H}$  es par. Los otros dos conmutadores significan que  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$  son operadores impares. Debido a que es un operador par el Hamiltoniano supersimétrico preserva la descomposición  $\mathcal{SH} = \bigoplus_{n=0}^N \mathcal{SH}_n = \mathcal{SH}_0 \oplus \mathcal{SH}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{SH}_N$  actuando diagonalmente sobre cada componente. Las supercargas  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$ , no obstante, son operadores impares que mueven los estados entre diferentes sectores fermiónicos, en tal forma que se establece el complejo  $\mathbb{Z}_2$ -graduado

$$\mathcal{SH}_0 \begin{array}{c} \xleftarrow{\hat{Q}^\dagger} \\ \xrightarrow{\hat{Q}} \end{array} \mathcal{SH}_1 \begin{array}{c} \xleftarrow{\hat{Q}^\dagger} \\ \xrightarrow{\hat{Q}} \end{array} \mathcal{SH}_2 \cdots \mathcal{SH}_{N-2} \begin{array}{c} \xleftarrow{\hat{Q}^\dagger} \\ \xrightarrow{\hat{Q}} \end{array} \mathcal{SH}_{N-1} \begin{array}{c} \xleftarrow{\hat{Q}^\dagger} \\ \xrightarrow{\hat{Q}} \end{array} \mathcal{SH}_N$$

y su cohomología SUSY definida por los núcleos e imágenes de  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$

$$b_n^S = \dim \left. \frac{\text{Ker} \hat{Q}^\dagger}{\text{Im} \hat{Q}^\dagger} \right|_{\mathcal{H}_n} .$$

Adicionalmente se tiene la descomposición de Hodge

$$\mathcal{SH} = \text{Ker} \hat{H} \oplus \hat{Q} \mathcal{SH} \oplus \hat{Q}^\dagger \mathcal{SH} .$$

### 1.4.2. Operadores fermiónicos y el álgebra de Clifford de $\mathbb{R}^{2N}$

Contrariamente al álgebra conmutativa de Heisenberg (1.15) que no admite representaciones de dimensión finita el álgebra anticonmutativa (1.16) cerrada por  $\hat{\psi}_j$  y  $\hat{\psi}_j^\dagger$  puede ser representada como el álgebra de Clifford de  $\mathbb{R}^{2N}$ . El álgebra  $C(\mathbb{R}^{2N})$  es generada por las matrices gamma euclideas  $\gamma^j$ ,  $\gamma^{N+j}$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$  tales que:

$$\{\gamma^j, \gamma^k\} = 2\delta^{jk} = \{\gamma^{N+j}, \gamma^{N+k}\} \quad , \quad \{\gamma^j, \gamma^{N+k}\} = 0 \quad \forall \quad j, k = 1, 2$$

$$(\gamma^j)^\dagger = \gamma^j \quad , \quad (\gamma^{N+j})^\dagger = \gamma^{N+j} .$$

Estas matrices hermíticas de dimensión  $2^N \times 2^N$  forman la representación irreducible de  $C(\mathbb{R}^{2N})$  actuando sobre el espacio de espinores euclideos de dimensión  $2^N$ .

Los operadores fermiónicos son así representados como las siguientes combinaciones de estas matrices gamma:

$$\hat{\psi}_j = \frac{1}{2\sqrt{m}} (\gamma^j + i\gamma^{N+j}) = \hat{\psi}_1^j + i\hat{\psi}_2^j \quad , \quad \hat{\psi}_j^\dagger = \frac{1}{2\sqrt{m}} (\gamma^j - i\gamma^{N+j}) = \hat{\psi}_1^j - i\hat{\psi}_2^j .$$

El estado de  $n$  fermiones  $|1_{j_n} 1_{j_{n-1}} \dots 1_{j_1}\rangle$  en esta representación de álgebra de Clifford se hace el espinor euclideo

$$|1_{j_n} 1_{j_{n-1}} \dots 1_{j_1}\rangle \rightarrow (0, \overbrace{0, \dots, 0}^N, \dots, \overbrace{0, \dots, -1, \dots, 0}^{\binom{N}{n}}, \dots, \overbrace{0, \dots, 0, 0}^N)^T ,$$

mientras que el operador número de Fermi es la matriz diagonal  $2^N \times 2^N$

$$\hat{F} = \text{diag}(0, \overbrace{1, \dots, 1}^N, \overbrace{2, \dots, 2}^{\binom{N}{2}}, \dots, \overbrace{n, \dots, n}^{\binom{N}{n}}, \dots, \overbrace{N-1, \dots, N-1}^N, N) .$$

El operador Hamiltoniano es diagonal por cajas

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \hat{H}_1 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \hat{H}_2 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \hat{H}_n & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & \hat{H}_N \end{pmatrix}$$

donde las cajas son como sigue:  $\hat{H}_0 = \hat{H}|_{\mathcal{SH}_0}$ ,  $\hat{H}_N = \hat{H}|_{\mathcal{SH}_N}$  son Hamiltonianos escalares mientras que  $\hat{H}_1 = \hat{H}|_{\mathcal{SH}_1}$ ,  $\hat{H}_{N-1} = \hat{H}|_{\mathcal{SH}_{N-1}}$  son Hamiltonianos matriciales de dimensión  $N \times N$  y  $\hat{H}_n = \hat{H}|_{\mathcal{SH}_n}$ ,  $\hat{H}_{N-n} = \hat{H}|_{\mathcal{SH}_{N-n}}$  son Hamiltonianos matriciales de dimensión  $\binom{N}{n} \times \binom{N}{n}$ .

### 1.4.3. Dinámica cuántica supersimétrica

La formulación de la mecánica cuántica Supersimétrica asociada a un determinado sistema físico, puede ser acometida utilizando dos métodos [?]. El primer método consiste en cuantizar un sistema supersimétrico clásico, en donde se supone que se ha realizado la extensión supersimétrica clásica del correspondiente sistema clásico, mientras que en el segundo método se

lleva a cabo la supersimetrización del sistema cuántico. Estos dos métodos suponen diferentes prescripciones para la determinación del superpotencial, y en general no son equivalentes, llevando a diferentes resultados para el superpotencial [?].

La dinámica de un sistema cuántico supersimétrico está determinada completamente por el superpotencial  $W(x_1, x_2, \dots, x_N)$  ya que las supercargas  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$  están definidas en términos de este. No obstante, en general la identificación del superpotencial no es una tarea sencilla debido a que para un potencial dado  $V(x_1, x_2, \dots, x_N)$  se debe solucionar la ecuación diferencial parcial<sup>5</sup>

$$\frac{1}{2m} \vec{\nabla} W(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla} W(\vec{x}) + \frac{\hbar}{2m} \Delta W(\vec{x}) = V(\vec{x}),$$

$$\Delta = \sum_{k=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \quad , \quad \vec{\nabla} = \sum_{k=1}^N \frac{\partial}{\partial x_k} \vec{e}_k$$

con  $\vec{e}_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$ ,  $\vec{e}_j \cdot \vec{e}_k = \delta_{jk}$  una base ortonormal en  $\mathbb{R}^N$ .

Una primera alternativa para determinar el superpotencial consiste en hallar la solución de la ecuación de Hamilton-Jacobi [20, 21]. La identificación del superpotencial clásico requiere la solución de la ecuación diferencial parcial

$$\frac{1}{2} \vec{\nabla} W(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla} W(\vec{x}) = V(\vec{x}),$$

en este caso el superpotencial se identifica con la función característica de Hamilton para energía  $E = 0$  y potencial  $U(\vec{x}) = -V(\vec{x})$ . La cuantización canónica provee todas las interacciones en el sistema cuántico en términos de la función característica de Hamilton [20, 21].

Una segunda alternativa para determinar el superpotencial consiste en hallar la solución de la ecuación de Poisson [13, 52]

$$\frac{\hbar}{2m} \Delta W(\vec{x}) = V(\vec{x}). \quad (1.19)$$

#### 1.4.4. Determinación de los estados fundamentales: el núcleo de $\hat{H}$

A partir del álgebra SUSY (1.1) y (1.2) podemos escribir el operador Hamiltoniano en la forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\} = \frac{1}{2} \left( \hat{Q} + \hat{Q}^\dagger \right)^2 ,$$

lo que implica que la energía es definida positiva y por tanto un estado con energía cero es un estado de energía mínima o estado fundamental.

Un estado  $|\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)\rangle$  tiene energía cero si y solo si es aniquilado por los operadores  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$

$$\hat{H} |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{Q} |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)\rangle = \hat{Q}^\dagger |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)\rangle = 0 ,$$

---

<sup>5</sup> $\vec{x} \equiv (x_1, x_2, \dots, x_N)$

así pues, la determinación de los estados fundamentales implica la búsqueda de estados  $|\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)\rangle$  que son aniquilados por las supercargas.

En general, la invariancia del estado fundamental bajo la acción del generador  $\hat{R}$  de una transformación de simetría de  $\hat{H}$  implica que dicha simetría es exacta, en este caso  $\hat{R}|0\rangle = 0$  y se satisface  $[\hat{H}, \hat{R}] = 0$ . Si la acción del generador  $\hat{R}$  sobre el estado fundamental  $|0\rangle$  es tal que  $\hat{R}|0\rangle \neq 0$  se dice que la simetría generada por  $\hat{R}$  está espontáneamente rota.

La supersimetría en mecánica cuántica es espontáneamente rota si todos los niveles de energía son degenerados, incluso el estado fundamental que no tendrá energía cero. En efecto, si  $|G\rangle$  es un estado fundamental con energía  $E_G \neq 0$  la ecuación de valores propios  $\hat{H}|G\rangle = E_G|G\rangle$  es equivalente a  $\hat{H}\hat{Q}^\dagger|G\rangle = E_G\hat{Q}^\dagger|G\rangle$  lo que implica que existen dos estados con energía mínima dada por  $E_G$ . Naturalmente, los estados  $|G\rangle$  y  $\hat{Q}^\dagger|G\rangle$  no son supersimétricos debido a que no son aniquilados por ambos generadores  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$ .

# Capítulo 2

## Dinámica de una partícula en potenciales delta de Dirac

### 2.1. El potencial delta de Dirac

Para implementar la extensión supersimétrica  $\mathcal{N} = 2$  de este sistema se elige el superpotencial [15, 16]:

$$W(x) = \frac{\mu}{2} |x| .$$

Los Hamiltonianos  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  actuando respectivamente en los subespacios con número de Fermi cero y uno son<sup>1</sup>:

$$\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\mu^2}{4} + \mu\delta(x) \quad , \quad \hat{H}_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\mu^2}{4} - \mu\delta(x) .$$

Asumiendo  $\mu > 0$  vemos que  $V_0$  y  $V_1$  corresponden respectivamente a potenciales delta de Dirac repulsivo y atractivo de intensidad  $\mu$ .

Los problemas espectrales de los Hamiltonianos autoadjuntos  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  corresponden a las ecuaciones de Schrödinger

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\psi^{(0)}}{dx^2} + V_0\psi^{(0)}(x) &= -\frac{d^2\psi^{(0)}}{dx^2} + \left[ \frac{\mu^2}{4} + \mu\delta(x) \right] \psi^{(0)}(x) = E^{(0)}\psi^{(0)}(x) , \\ -\frac{d^2\psi^{(1)}}{dx^2} + V_1\psi^{(1)}(x) &= -\frac{d^2\psi^{(1)}}{dx^2} + \left[ \frac{\mu^2}{4} - \mu\delta(x) \right] \psi^{(1)}(x) = E^{(0)}\psi^{(1)}(x) , \end{aligned}$$

junto con la continuidad de  $\psi^{(\iota)}$  y la discontinuidad de  $\frac{d\psi^{(\iota)}}{dx}$ ,  $\iota = 0, 1$ , en el punto  $x = 0$ , esto es, las condiciones de empalme (A.26).

---

<sup>1</sup>Se ha hecho la redefinición  $\frac{2m}{\hbar^2} E \rightarrow E$  y  $\frac{2m}{\hbar^2} V(x) \rightarrow V(x)$



### 2.1.1. Soluciones de scattering

Las funciones de onda de scattering “diestro” y “zurdo”, ambas en los sectores bosónico y fermiónico, son de la forma:

$$\psi^{r(\iota)}(x, E) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho_\iota^r(E)e^{-ikx} \\ \sigma_\iota^r(E)e^{ikx} \end{cases}, \quad \psi^{l(\iota)}(x, E) = \begin{cases} \sigma_\iota^l(E)e^{-ikx} \\ e^{-ikx} + \rho_\iota^l(E)e^{ikx} \end{cases}, \quad \begin{matrix} x \in \text{I} \\ x \in \text{II} \end{matrix}$$

donde  $k = \sqrt{E^{(\iota)}}$ .

Las condiciones de empalme (A.26) sobre estas ondas de scattering dan lugar a un sistema de dos ecuaciones lineales en las dos incógnitas  $\sigma$  y  $\rho$  cuya solución es:

$$\begin{aligned} \sigma_0^r = \sigma_0^l = \sigma_0 &= \frac{2ik}{2ik - \mu}, & \rho_0^r = \rho_0^l = \rho_0 &= \frac{\mu}{2ik - \mu}, \\ \sigma_1^r = \sigma_1^l = \sigma_1 &= \frac{2ik}{2ik + \mu}, & \rho_1^r = \rho_1^l = \rho_1 &= -\frac{\mu}{2ik + \mu}. \end{aligned}$$

Las identidades (1.7) entre las amplitudes de scattering en los sectores fermiónico y bosónico del problema de una delta SUSY son:

$$\rho_1^r = \frac{-ik + \frac{\mu}{2}}{ik + \frac{\mu}{2}} \rho_0^r, \quad \sigma_1^r = \frac{ik - \frac{\mu}{2}}{ik + \frac{\mu}{2}} \sigma_0^r,$$

por tanto las funciones de onda de scattering en los sectores bosónico y fermiónico están vinculadas a través de las supercargas. Es fácil verificar que las ondas de scattering “zurdo” bosónicas y fermiónicas satisfacen las mismas relaciones. Aunque  $\rho_0 \neq \rho_1$  y  $\sigma_0 \neq \sigma_1$ , los coeficientes de reflexión y de transmisión son iguales en los sectores bosónico y fermiónico:  $|\rho_0|^2 = |\rho_1|^2$ ,  $|\sigma_0|^2 = |\sigma_1|^2$ . Más aún, hay conservación del flujo de densidad de probabilidad:  $|\sigma_0|^2 + |\rho_0|^2 = |\sigma_1|^2 + |\rho_1|^2 = 1$ .

### 2.1.2. Soluciones de estado ligado/antiligado

El polo en las amplitudes de transmisión  $\sigma_0^r$  y  $\sigma_0^l$  aparece en  $k = -i\kappa = -i\frac{\mu}{2}$  mientras que el polo de  $\sigma_1^r$  y  $\sigma_1^l$  aparece en  $k = i\kappa = i\frac{\mu}{2}$  [16]. Los estados ligado/antiligado “normalizados” son respectivamente:

$$\psi^{(1)}(x) = \sqrt{-\frac{\mu}{2}} \exp\left[\frac{\mu}{2}|x|\right], \quad \psi^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{\mu}{2}} \exp\left[-\frac{\mu}{2}|x|\right].$$

En consecuencia, hay un único estado fundamental no degenerado, que en este caso es fermiónico, y por tanto para el potencial delta de Dirac la supersimetría es manifiesta.

## 2.2. El potencial escalón con una delta de Dirac

Estudiemos ahora el caso sencillo dado por el superpotencial

$$W(x) = \frac{\mu}{2} |x| + \frac{g}{2\mu} x .$$

Los Hamiltonianos  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  actuando respectivamente en los subespacios con número de Fermi cero y uno son:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &\equiv \hat{H} \Big|_{\mathcal{S}\mathcal{H}_0} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{g}{2}\epsilon(x) + \frac{\mu^2}{4} + \frac{g^2}{4\mu^2} + \mu\delta(x) , \\ \hat{H}_1 &\equiv \hat{H} \Big|_{\mathcal{S}\mathcal{H}_1} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{g}{2}\epsilon(x) + \frac{\mu^2}{4} + \frac{g^2}{4\mu^2} - \mu\delta(x) . \end{aligned}$$

Asumiendo  $\mu > 0$  y  $g > 0$  vemos que  $V_0$  y  $V_1$  corresponden respectivamente a potenciales delta de Dirac repulsivo y atractivo de intensidad  $\mu$  más un potencial escalón de altura  $g$  desplazado sobre el cero de energía por la cantidad  $\frac{1}{4}(\mu - \frac{g}{\mu})^2$ . Cambiando el signo de  $\mu$  unicamente se intercambia el carácter repulsivo/atractivo del potencial  $\delta$  entre  $V_0$  and  $V_1$ . Para  $\mu$  fijo el cambio de signo de  $g$  hace que el escalón se invierta de derecha a izquierda o viceversa. El punto crucial es que el desplazamiento en la energía del umbral de scattering con respecto al umbral no SUSY empuja la energía del estado fundamental a cero. Esto es necesario, ya que el espectro de un Hamiltoniano supersimétrico es no negativo.

Las ecuaciones de Schrödinger a ser solucionadas son:

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\psi^{(0)}}{dx^2} + V_0\psi^{(0)}(x) &= -\frac{d^2\psi^{(0)}}{dx^2} + \left[ \frac{g}{2}\epsilon(x) + \frac{\mu^2}{4} + \frac{g^2}{4\mu^2} + \mu\delta(x) \right] \psi^{(0)}(x) = E^{(0)}\psi^{(0)}(x) , \\ -\frac{d^2\psi^{(1)}}{dx^2} + V_1\psi^{(1)}(x) &= -\frac{d^2\psi^{(1)}}{dx^2} + \left[ \frac{g}{2}\epsilon(x) + \frac{\mu^2}{4} + \frac{g^2}{4\mu^2} + \mu\delta(x) \right] \psi^{(1)}(x) = E^{(0)}\psi^{(1)}(x) , \end{aligned}$$

junto con la continuidad de  $\psi^{(\iota)}$  y la discontinuidad de  $\frac{d\psi^{(\iota)}}{dx}$ ,  $\iota = 0, 1$ , en el punto  $x = 0$ , esto es, las condiciones de empalme (A.28).

### 2.2.1. Soluciones de scattering

Las soluciones de scattering de estas ecuaciones son similares a aquellas del problema no SUSY, la única diferencia radica en las relaciones entre los momentos y las energías, las cuales en este caso son:

$$k^2 = E^{(0)} - \frac{1}{4} \left( \mu - \frac{g}{\mu} \right)^2 , \quad p^2 = E^{(0)} - \frac{1}{4} \left( \mu + \frac{g}{\mu} \right)^2 ,$$

$$k^2 = E^{(1)} - \frac{1}{4} \left( \mu - \frac{g}{\mu} \right)^2, \quad p^2 = E^{(1)} - \frac{1}{4} \left( \mu + \frac{g}{\mu} \right)^2.$$

De estas identidades es claro que  $E^{(0)} = E^{(1)} = E$  para las soluciones de scattering como el álgebra SUSY requiere. No obstante, las condiciones de empalme (A.28) sobre las ondas de scattering “diestro” y “zurdo”:

$$\psi^{r(\iota)}(x, E) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho_\iota^r(E)e^{-ikx} \\ \sigma_\iota^r(E)e^{ipx} \end{cases}, \quad \psi^{l(\iota)}(x, E) = \begin{cases} \sigma_\iota^l(E)e^{-ikx} \\ e^{-ipx} + \rho_\iota^l(E)e^{ipx} \end{cases}, \quad \begin{matrix} x \in \text{I} \\ x \in \text{II} \end{matrix}$$

dan como resultado diferentes amplitudes de scattering<sup>2</sup>:

$$\begin{aligned} \sigma_0^r(E) &= \frac{2k}{k+p+i\mu}, \quad \rho_0^r(E) = \frac{k-p-i\mu}{k+p+i\mu}, \quad \sigma_0^l(E) = \frac{2p}{k+p+i\mu}, \quad \rho_0^l(E) = \frac{-k+p-i\mu}{k+p+i\mu} \\ \sigma_1^r(E) &= \frac{2k}{k+p-i\mu}, \quad \rho_1^r(E) = \frac{k-p+i\mu}{k+p-i\mu}, \quad \sigma_1^l(E) = \frac{2p}{k+p-i\mu}, \quad \rho_1^l(E) = \frac{-k+p+i\mu}{k+p-i\mu} \end{aligned}$$

Estas ondas de scattering son supersimétricas en el sentido que

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \psi_1^r(x; E) \end{pmatrix} \propto \hat{Q}^\dagger \begin{pmatrix} \psi_0^r(x; E) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Q}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{d}{dx} - \frac{\mu}{2}\varepsilon(x) - \frac{g}{2\mu} & 0 \end{pmatrix}$$

y en consecuencia

$$\begin{aligned} \left[ \frac{d}{dx} - \frac{\mu}{2}\varepsilon(x) - \frac{g}{2\mu} \right] \psi_0^r(x; E) &= \left( ik + \frac{\mu}{2} - \frac{g}{2\mu} \right) \times \\ &\times \left\{ \left[ e^{ikx} + \frac{-ik + \frac{\mu}{2} - \frac{g}{2\mu}}{ik + \frac{\mu}{2} - \frac{g}{2\mu}} \rho_0^r(E) e^{-ikx} \right] H(-x) + \frac{ip - \frac{\mu}{2} - \frac{g}{2\mu}}{ik + \frac{\mu}{2} - \frac{g}{2\mu}} \sigma_0^r(E) e^{ipx} H(x) \right\}. \end{aligned}$$

Por tanto,  $\psi_1^r(x; E)$  y  $\psi_0^r(x; E)$  están vinculadas por supersimetría si las amplitudes de scattering están relacionadas en la forma:

$$\rho_1^r = \frac{-ik + \frac{\mu}{2} - \frac{g}{2\mu}}{ik + \frac{\mu}{2} - \frac{g}{2\mu}} \rho_0^r, \quad \sigma_1^r = \frac{ip - \frac{\mu}{2} - \frac{g}{2\mu}}{ik + \frac{\mu}{2} - \frac{g}{2\mu}} \sigma_0^r \quad (2.1)$$

De la forma explícita de las amplitudes de scattering no es dificultoso verificar que las identidades (2.1), así como las relaciones análogas para las amplitudes de scattering “zurdo”, son satisfechas. Aunque  $\sigma_0^r \neq \sigma_1^r$  ( $\sigma_0^l \neq \sigma_1^l$ ) y  $\rho_0^r \neq \rho_1^r$  ( $\rho_0^l \neq \rho_1^l$ ), no obstante, los coeficientes de scattering de los Hamiltonianos  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  son idénticos:

$$|\rho_0^r|^2 = |\rho_1^r|^2 = 1 - \frac{4kp}{\mu^2 + (k+p)^2} = |\rho_0^l|^2 = |\rho_1^l|^2,$$

<sup>2</sup>Las amplitudes bosónicas y fermiónicas solo difieren en el signo de  $\mu$ .

$$|\sigma_0^r|^2 = |\sigma_1^r|^2 = \frac{4k^2}{\mu^2 + (k+p)^2} \quad , \quad |\sigma_0^l|^2 = |\sigma_1^l|^2 = \frac{4p^2}{\mu^2 + (k+p)^2} \quad .$$

Se insiste en que a pesar de ser  $\sigma^r \neq \sigma^l$  hay conservación del flujo de densidad de probabilidad:  $\frac{k_{\pm}}{k_{\mp}} |\sigma|^2 + |\rho|^2 = 1$  en los dos sectores.

### 2.2.2. Soluciones de estado ligado/antiligado

Como en el sistema no SUSY el polo en las amplitudes de transmisión  $\sigma_0^r$  y  $\sigma_0^l$  del Hamiltoniano  $\hat{H}_0$  aparecen en:

$$\kappa_0 = -\frac{1}{2} \left( \mu - \frac{g}{\mu} \right) \quad , \quad \pi_0 = -\frac{1}{2} \left( \mu + \frac{g}{\mu} \right) \quad .$$

Ya que  $\kappa_1 + \pi_1 = \mu$  es el polo de  $\sigma_1^r$  y  $\sigma_1^l$  pero  $\kappa_1^2 - \pi_1^2 = -g$  los valores separados de  $\kappa_1$  y  $\pi_1$  en el polo son:

$$\kappa_1 = \frac{1}{2} \left( \mu - \frac{g}{\mu} \right) \quad , \quad \pi_1 = \frac{1}{2} \left( \mu + \frac{g}{\mu} \right) \quad .$$

Los estado ligado/antiligado “normalizados” son respectivamente:

$$\begin{aligned} \psi^{(0)}(x) &= \sqrt{\frac{g^2 - \mu^4}{2\mu^3}} \left\{ \exp \left[ \frac{g - \mu^2}{2\mu} x \right] \theta(-x) + \exp \left[ \frac{\mu^2 + g}{2\mu} x \right] \theta(x) \right\} , \\ \psi^{(1)}(x) &= \sqrt{\frac{\mu^4 - g^2}{2\mu^3}} \left\{ \exp \left[ \frac{\mu^2 - g}{2\mu} x \right] \theta(-x) + \exp \left[ -\frac{\mu^2 + g}{2\mu} x \right] \theta(x) \right\} . \end{aligned}$$

donde  $\theta(x)$  es la función escalón de Heaviside

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & , \quad x > 0 \\ 0 & , \quad x < 0 \end{cases} \quad (2.2)$$

Hay cuatro posibilidades si asumimos (sin pérdida de generalidad)  $g > 0$ :

#### 1. Caso $\mu^2 > g$ :

- $\mu < 0$ :  $\psi_0(x)$  es normalizable pero  $\psi_1(x)$  no lo es. Hay un único estado fundamental que en este caso es bosónico.
- $\mu > 0$ :  $\psi_1(x)$  is normalizable pero  $\psi_0(x)$  no lo es. Hay un único estado fundamental que en este caso es fermiónico.

El índice de Witten, la diferencia entre el número de estados fundamentales bosónicos y fermiónicos, es uno y la supersimetría no es espontáneamente rota en este caso.

2. Caso  $\mu^2 < g$ :

- $\mu < 0$ : Ni  $\psi_0(x)$  ni  $\psi_1(x)$  son normalizables. Todos los estados en el espectro de  $\hat{H}_S$  son degenerados en energía y están vinculados a través de las supercargas.
- $\mu > 0$ : De nuevo ni  $\psi_0(x)$  ni  $\psi_1(x)$  son normalizables. Todos los estados en el espectro de  $\hat{H}_S$  son degenerados en energía y están vinculados a través de las supercargas.

No hay modo cero y la supersimetría es espontáneamente rota.

Finalmente, si consideramos el límite  $g \rightarrow 0$  recuperamos el potencial delta de Dirac en su versión supersimétrica [15]-[17].

### 2.3. El Hamiltoniano doble delta de Dirac supersimétrico $\mathcal{N} = 2$ : dos deltas de igual intensidad

Para trabajar la extensión supersimétrica  $\mathcal{N} = 2$  de este sistema es conveniente tratar separadamente los casos de igual y diferente intensidad. En el caso simétrico elegimos el siguiente superpotencial:

$$W(x) = \frac{\alpha}{2} |x + a| + \frac{\alpha}{2} |x - a| .$$

Los Hamiltonianos escalares son:

$$\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \alpha\delta(x + a) + \alpha\delta(x - a) + \frac{\alpha^2}{2}\epsilon(x + a)\epsilon(x - a) + \frac{\alpha^2}{2} ,$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{d^2}{dx^2} - \alpha\delta(x + a) - \alpha\delta(x - a) + \frac{\alpha^2}{2}\epsilon(x + a)\epsilon(x - a) + \frac{\alpha^2}{2} ,$$

en tanto que los problemas espectrales de los Hamiltonianos autoadjuntos  $\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x)$  y  $\hat{H}_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x)$  corresponden a las ecuaciones de Schrödinger

$$-\frac{d^2\psi^{(0)}}{dx^2} + \left[ \alpha\delta(x + a) + \alpha\delta(x - a) + \frac{\alpha^2}{2}\epsilon(x + a)\epsilon(x - a) + \frac{\alpha^2}{2} \right] \psi^{(0)}(x) = E^{(0)}\psi^{(0)}(x) ,$$

$$-\frac{d^2\psi^{(1)}}{dx^2} + \left[ -\alpha\delta(x + a) - \alpha\delta(x - a) + \frac{\alpha^2}{2}\epsilon(x + a)\epsilon(x - a) + \frac{\alpha^2}{2} \right] \psi^{(1)}(x) = E^{(1)}\psi^{(1)}(x) ,$$

que deben ser solucionadas junto con con la continuidad de  $\psi^{(\iota)}$  y la discontinuidad de  $\frac{d\psi^{(\iota)}}{dx}$ ,  $\iota = 0, 1$ , en los puntos  $x = \pm a$ , esto es, las condiciones de empalme (A.32). La línea real es dividida en tres zonas

- 1) Zona II :  $x < -a$  ,    2) Zona I :  $-a < x < a$  ,    3) Zona III :  $x > a$

### 2.3.1. Soluciones de scattering

Además de las dos deltas en los puntos  $x = \pm a$ , con signos opuestos de  $\alpha$  respectivamente para  $V_0$  y  $V_1$ , los potenciales  $V_0(x) = \frac{dW}{dx} \frac{dW}{dx} + \frac{d^2W}{dx^2}$  y  $V_1(x) = \frac{dW}{dx} \frac{dW}{dx} - \frac{d^2W}{dx^2}$  exhiben un pozo cuadrado idéntico:

$$V_0(x) = V_1(x) = \alpha^2 \quad , \quad |x| > a \quad (\text{en las zonas II y III})$$

$$V_0(x) = V_1(x) = 0 \quad , \quad |x| < a \quad (\text{en la zona I})$$

Las funciones de onda de scattering “diestro” y “zurdo”, ambas en los sectores bosónico y fermiónico, son de la forma:

$$\psi^{r(l)}(x, E) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho_l^r(E)e^{-ikx} \\ A_l^r(E)e^{iqx} + B_l^r(E)e^{-iqx} \\ \sigma_l^r(E)e^{ikx} \end{cases} \quad , \quad \psi^{l(l)}(x, E) = \begin{cases} \sigma_l^l(E)e^{-ikx} \\ A_l^l(E)e^{iqx} + B_l^l(E)e^{-iqx} \\ e^{-ikx} + \rho_l^l(E)e^{ikx} \end{cases} \quad , \quad \begin{matrix} x \in \text{II} \\ x \in \text{I} \\ x \in \text{III} \end{matrix}$$

donde<sup>3</sup>  $k = \sqrt{E^{(l)} - \alpha^2}$  y  $q = \sqrt{E^{(l)}}$ .

Como en el caso no SUSY, el sistema de cuatro ecuaciones lineales en las cuatro incógnitas  $\sigma$ ,  $A$ ,  $B$ ,  $\rho$  establecidas por las condiciones de empalme es fácil de resolver, encontrándose, e.g., en el sector bosónico la siguiente matriz de scattering:

$$S = \left( \begin{array}{cc} -\frac{4e^{-2ia(k-q)}kq}{e^{4iaq}(k-q+i\alpha)^2 - (k+q+i\alpha)^2} & \frac{e^{-2iak}[(e^{4iaq}-1)k^2 - e^{4iaq}(q-i\alpha)^2 + (q+i\alpha)^2]}{e^{4iaq}(k-q+i\alpha)^2 - (k+q+i\alpha)^2} \\ \frac{e^{-2iak}[(e^{4iaq}-1)k^2 - e^{4iaq}(q-i\alpha)^2 + (q+i\alpha)^2]}{e^{4iaq}(k-q+i\alpha)^2 - (k+q+i\alpha)^2} & -\frac{4e^{-2ia(k-q)}kq}{e^{4iaq}(k-q+i\alpha)^2 - (k+q+i\alpha)^2} \end{array} \right)$$

que codifica las amplitudes de dispersión  $\sigma_0^r = \sigma_0^l = \sigma_0$  y  $\rho_0^r = \rho_0^l = \rho_0^4$ . Los valores propios de la matriz  $S$  unitaria

$$\lambda_{0+} = e^{2i\delta_{0+}} = \frac{e^{-2iak}[(k-i\alpha)\cos qa + iq\sin qa]}{(k+i\alpha)\cos qa - iq\sin qa}$$

$$\lambda_{0-} = e^{2i\delta_{0-}} = -\frac{e^{-2iak}[(k-i\alpha)\sin qa - iq\cos qa]}{(k+i\alpha)\sin qa + iq\cos qa}$$

proveen el defasaje total en el sector bosónico:

$$\delta_0 = \delta_{0+} + \delta_{0-} = \frac{1}{2i} \ln \left[ \frac{e^{-4iak}(\alpha + ik)(q \cos 2qa + ik \sin 2qa)}{(k+i\alpha)(k \sin 2qa + iq \cos 2qa)} \right],$$

<sup>3</sup>Habría diferentes etiquetas en cada sector:  $\psi^{r(0)}$ ,  $\psi^{r(1)}$ ,  $\psi^{l(0)}$ ,  $\psi^{l(1)}$ ,  $E^{(0)}$ ,  $E^{(1)}$ , etc.

<sup>4</sup> $V_0$  (y  $V_1$ ) es par bajo el cambio  $x \rightarrow -x$  y respecto a la inversión temporal.

donde  $q = \sqrt{E^{(0)}} = \sqrt{k^2 + \alpha^2}$  para las soluciones de scattering.

Así, la densidad espectral para las ondas de scattering bosónicas con condiciones de frontera periódicas sobre una línea de muy larga longitud  $L$  se hace:

$$\begin{aligned} \varrho_0(k) &= \frac{L}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \frac{d\delta_0}{dk} \\ &= \frac{L}{2\pi} + \frac{\alpha q [\alpha^2 - 2a\alpha^3 + k^2(2 - 2a\alpha)] + \alpha^2 q^2 \sin 4qa + \alpha^2 q (\alpha - 2aq^2) \cos 4qa}{2\pi q^3 (\alpha^2 + \alpha^2 \cos 4qa + 2k^2)}. \end{aligned}$$

Las amplitudes de scattering en el sector fermiónico definidas por  $V_1$  son las mismas cambiando  $\alpha$  por  $-\alpha$ . Las identidades análogas a (2.1) entre las amplitudes de scattering en los sectores fermiónico y bosónico del problema de dos deltas SUSY son:

$$\rho_1^r = \frac{-ik + \alpha}{ik + \alpha} \rho_0^r, \quad \sigma_1^r = \frac{ik - \alpha}{ik + \alpha} \sigma_0^r,$$

significando esto que las funciones de onda de scattering en los sectores con diferente número de Fermi están vinculadas a través de las supercargas. Es fácil verificar que las ondas de scattering “zurdo” bosónicas y fermiónicas satisfacen las mismas relaciones cambiando  $\alpha$  por  $-\alpha$ . Aunque  $\rho_0 \neq \rho_1$  y  $\sigma_0 \neq \sigma_1$ , los coeficientes de reflexión y de transmisión son iguales en los sectores bosónico y fermiónico:  $|\rho_0^r|^2 = |\rho_1^r|^2$ ,  $|\sigma_0^r|^2 = |\sigma_1^r|^2$ . Más aún, hay conservación del flujo de densidad de probabilidad:  $|\sigma_0|^2 + |\rho_0|^2 = |\sigma_1|^2 + |\rho_1|^2 = 1$  como se puede verificar explícitamente (pero de forma penosa) con Mathematica.

### 2.3.2. Soluciones de estado ligado/antiligado

Los estados ligados, las funciones de onda de energía  $0 < E < \alpha^2$ , son soluciones de la forma (A.33) con  $iq$  en lugar de  $\kappa$  en la zona I. Los valores de  $\kappa$  que proporcionan las soluciones de estado ligado/antiligado corresponden a la parte imaginaria positiva/negativa de los polos puramente imaginarios de las amplitudes de transmisión. Comenzando en el sector bosónico los polos puramente imaginarios de  $\sigma_0$  son las soluciones de la ecuación trascendente

$$\begin{aligned} e^{4iaq} [i(\kappa + \alpha) - q]^2 &= [i(\kappa + \alpha) + q]^2, \quad \kappa = \sqrt{\alpha^2 - E^{(0)}}, \\ e^{4iaq} &= \left[ \frac{q^2 - (\alpha + \kappa)^2 + 2iq(\kappa + \alpha)}{q^2 + (\kappa + \alpha)^2} \right]^2 \equiv \tan 2aq = \frac{2q(\alpha + \kappa)}{q^2 - (\kappa + \alpha)^2}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Ya que  $\tan 2z = \frac{2}{\cot z - \tan z}$  la ecuación trascendente (2.3) es equivalente a:

$$\cot qa - \tan qa = \frac{q}{\alpha + \kappa} - \frac{\alpha + \kappa}{q}.$$

La condición espectral de estados ligados (2.3) se descompone en dos clases de condiciones espectrales alternativas (más simples):

$$(e) \quad \sin qa = \frac{\kappa + \alpha}{q} \cos qa \quad , \quad (o) \quad \cos qa = -\frac{\kappa + \alpha}{q} \sin qa . \quad (2.4)$$

Esta factorización es debido al hecho que hay simetría de paridad cuando las dos deltas son iguales y las funciones propias son funciones pares o impares de  $x$ .

- Estados ligados pares: Los coeficientes de las soluciones de estado ligado pares en las zonas II y III deben ser iguales:  $A = D$ . La función de onda en la zona I debe ser par:  $C = B$ . Por tanto, solo es necesario considerar el par de (A.32) en  $x = -a$ , i.e., el sistema lineal homogéneo:

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & -2\cos aq \\ (\kappa + \alpha)e^{-\kappa a} & -2q\sin aq \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Es inmediato verificar que la anulación del determinante de esta matriz es precisamente la ecuación trascendente (2.4)(e):

$$\sin\sqrt{E_+^{(0)}}a = \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - E_+^{(0)}}}{\sqrt{E_+^{(0)}}} \cos\sqrt{E_+^{(0)}}a .$$

Las soluciones positivas  $\kappa_B > 0$  de esta ecuación son los estados ligados pares de  $\hat{H}_0$  (bosónico):

$$\psi_{B+II}^{(0)}(x) = Ae^{\kappa_{B+}x} , \quad \psi_{B+I}^{(0)}(x) = A \left( \frac{e^{-\kappa_{B+}a}}{\cos q_{B+}a} \right) \cos q_{B+}x , \quad \psi_{B+III}^{(0)}(x) = Ae^{-\kappa_{B+}x} .$$

- Estados ligados impares: Los coeficientes de las soluciones de estado ligado impares en las zonas II y III son opuestos:  $A = -D$ . La función de onda en la zona I debe ser impar:  $C = -B$ . El sistema lineal homogéneo se hace:

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & -2i\sin aq \\ (\kappa + \alpha)e^{-\kappa a} & 2iq\cos aq \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

La anulación del determinante de la matriz de estados impares es la otra ecuación trascendente (2.4)(o):

$$\cos\sqrt{E_-^{(0)}}a = -\frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - E_-^{(0)}}}{\sqrt{E_-^{(0)}}} \sin\sqrt{E_-^{(0)}}a .$$



Las soluciones positivas  $\kappa_B > 0$  de esta ecuación son los estados ligados impares de  $\hat{H}_0$  (bosónico):

$$\psi_{B-II}^{(0)}(x) = Ae^{\kappa_{B-}x}, \quad \psi_{B-I}^{(0)}(x) = A \left( \frac{e^{-\kappa_{B-}a}}{\sin q_{B-}a} \right) \sin q_{B-}x, \quad \psi_{B-III}^{(0)}(x) = -Ae^{-\kappa_{B-}x}.$$

Las ecuaciones espectrales solo pueden ser resueltas por métodos gráficos, ver Tabla 2.1. Los valores positivos de  $\kappa$  donde las curvas en las partes izquierda y derecha de (2.4)(e) y (2.4)(o) se intersectan proporcionan los respectivos estados ligados pares e impares bosónicos. Es claro que la condición espectral par admite una solución  $\kappa_0 = -\alpha$ ,  $q_0 = 0 = E_{0+}^{(0)}$  que corresponde a un estado fundamental si  $\alpha < 0$ . Este estado ligado (siempre par) es el estado fundamental bosónico. Independientemente del signo de  $\alpha$ , la condición espectral impar no presenta estado ligado de energía cero debido a que la cotangente para un ángulo cero es infinita. Sin embargo, la primera intersección en (2.4)(o) es el siguiente estado ligado en energía  $E_{1-}^{(0)}$ , hay entonces un estado ligado par y así sucesivamente:  $0 = E_{0+}^{(0)} < E_{1-}^{(0)} < E_{2+}^{(0)} < \dots < \alpha^2$ .

En cuanto a los estados ligados fermiónicos positivos de  $\hat{H}_1$  todo es lo mismo si uno cambia  $\alpha$  by  $-\alpha$ . Debido a que

$$\begin{aligned} \tan \sqrt{E^{(1)}}a &= \frac{-\alpha + \sqrt{\alpha^2 - E^{(1)}}}{\sqrt{E^{(1)}}} \equiv \cot \sqrt{E^{(1)}}a = -\frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - E^{(1)}}}{\sqrt{E^{(1)}}} \\ \cot \sqrt{E^{(1)}}a &= -\frac{-\alpha + \sqrt{\alpha^2 - E^{(1)}}}{\sqrt{E^{(1)}}} \equiv \tan \sqrt{E^{(1)}}a = \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 - E^{(1)}}}{\sqrt{E^{(1)}}} \end{aligned}$$

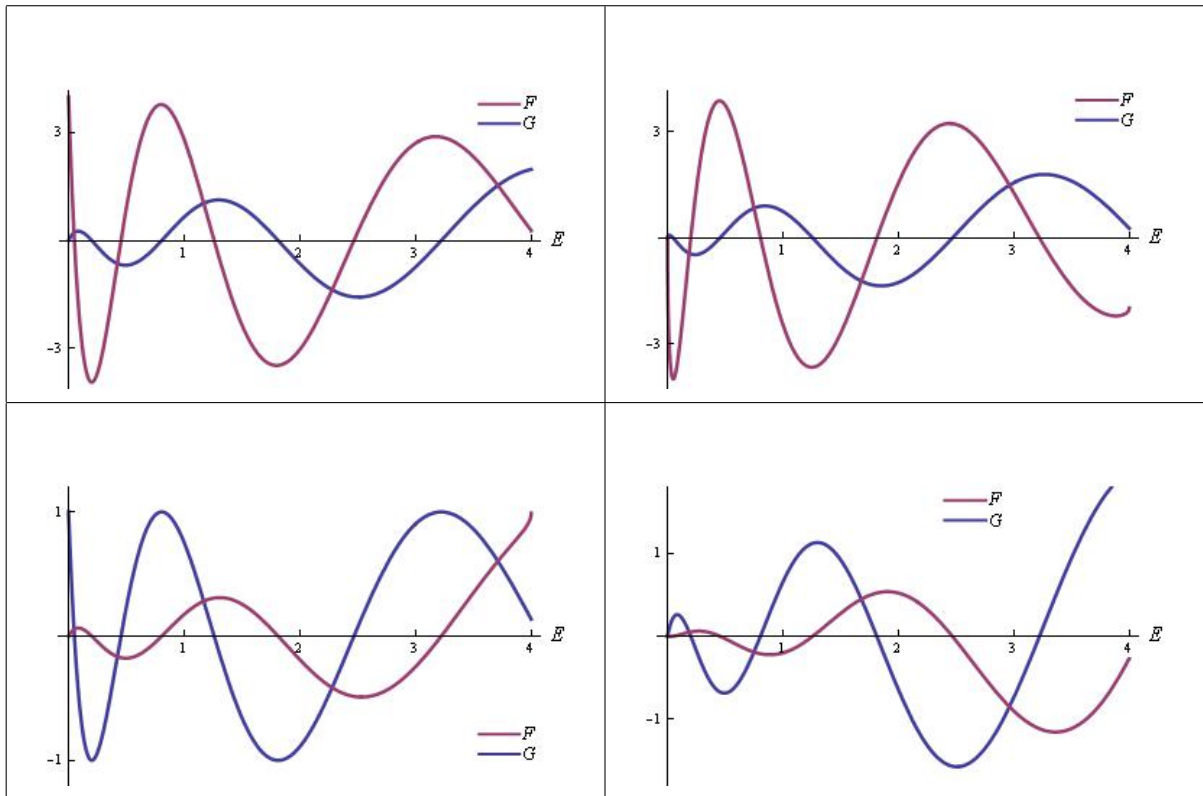
$E_{(n+1)+}^{(1)} = E_{(n+1)-}^{(0)}$ ,  $E_{(n+2)-}^{(1)} = E_{(n+2)+}^{(0)}$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  y los estados ligados fermiónicos y bosónicos están vinculados por supersimetría. Nótese que las supercargas necesariamente cambian la paridad:

$$\hat{Q}^\dagger \begin{pmatrix} \psi_B^{(0)}(x) \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_B^{(1)}(x) \end{pmatrix}, \quad \hat{Q} \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_B^{(1)}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_B^{(0)}(x) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

$\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$ , no obstante, no son completamente isoenergéticas. El estado fundamental de energía cero es o bien bosónico, si  $\alpha < 0$ , o fermiónico, cuando  $\alpha$  es positivo. Nótese que  $\kappa_0^{(0)} = -\alpha \equiv E_0^{(0)} = 0$  mientras que  $\kappa_0^{(1)} = \alpha \equiv E_0^{(1)} = 0$ . Así, uno de los dos modos cero es un estado antiligado ya que o bien  $\kappa_0^{(0)}$  o  $\kappa_0^{(1)}$  es negativo. El índice de Witten es uno<sup>5</sup> y la supersimetría no es espontáneamente rota. Los estados fundamentales (energía cero) pertenecen simultáneamente al núcleo de  $\hat{Q}$  y al núcleo de  $\hat{Q}^\dagger$  siendo la exponencial de cualquiera menos (bosónico) o más (fermiónico) el superpotencial. El hecho clave es que los estados fundamentales son singletes, no son estados vinculados a través del álgebra supersimétrica.

<sup>5</sup>En efecto, hay una contribución infinita al índice de Witten debido al espectro continuo. Convenientemente regularizada, la diferencia entre las densidades espectrales bosónica y fermiónica induce el resultado:  $I_W = 2$ .

Tabla 2.1: Gráficas de las curvas en las dos partes de las ecuaciones espectrales (2.4) . Los valores particulares  $a = 7$  y  $\alpha = 2$  han sido seleccionados para las gráficas. En la columna izquierda las curvas correspondientes a (2.4)(e) para  $\alpha = 2$  (caja superior  $F = [\sqrt{4-E} + 2] \cos 7\sqrt{E}$ ,  $G = \sqrt{E} \sin 7\sqrt{E}$ ) y (2.4)(o) para  $\alpha = -2$  (caja inferior  $F = -\frac{[\sqrt{4-E}-2] \sin 7\sqrt{E}}{\sqrt{E}}$ ,  $G = \cos 7\sqrt{E}$ ) son representadas como funciones de  $E$ . Por tanto, los valores de  $E$  para los cuales las curvas se intersectan son los valores propios de los estados ligados pares de  $\hat{H}_0$  y los valores propios de los estados ligados impares de  $\hat{H}_1$ . Debido a que los cortes se dan entre 0 and 4 los correspondientes valores de  $\kappa_B^{(0)}$  y  $\kappa_B^{(1)}$  están entre 2 y 0. Observe que en todos los casos  $\kappa_B^{(0)} = \kappa_B^{(1)} > 0$  como puede ser probado analíticamente. En la columna derecha graficamos las curvas en (2.4)(e) para  $\alpha = -2$  (caja inferior  $F = [\sqrt{4-E} - 2] \cos 7\sqrt{E}$ ,  $G = \sqrt{E} \sin 7\sqrt{E}$ ) y (2.4)(o) para  $\alpha = 2$  (caja superior  $F = [-\sqrt{4-E} - 2] \sin 7\sqrt{E}$ ,  $G = \sqrt{E} \cos 7\sqrt{E}$ ). Ya que  $\alpha = 2$  el único modo cero es fermiónico.



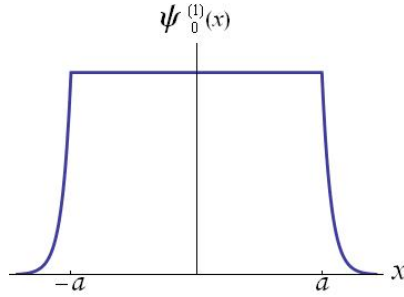


Figura 2.1: La función de onda del estado fundamental fermiónico para  $a = 7$  y  $\alpha = 2$ .

Ahora elegimos  $\alpha > 0$  para trabajar las funciones de onda explícitas. El único estado fundamental de energía cero  $q_0 = E^{(1)} = 0$ ,  $\kappa_0 = \alpha$  (normalizado) es fermiónico y par:

$$\psi_0^{(1)}(x) = N \exp \left[ -\frac{\alpha}{2}|x-a| - \frac{\alpha}{2}|x+a| \right] = \sqrt{\frac{\alpha}{1+2\alpha a}} \begin{cases} e^{\alpha(x+a)} & , x \in \text{II} \\ 1 & , x \in \text{I} \\ e^{-\alpha(x-a)} & , x \in \text{III} \end{cases}$$

ver Figura 2.1.

Tabla 2.2: Primeras tres funciones de onda de estado ligado con energía positiva de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  para  $a = 7$  y  $\alpha = 2$ .

$E_1^{(0)+} = 0.0469$	$E_2^{(0)-} = 0.187$	$E_3^{(0)+} = 0.421$
$E_1^{(1)-} = 0.0469$	$E_2^{(1)+} = 0.187$	$E_3^{(1)-} = 0.421$

Las restantes energías no nulas de los estados ligados bosónicos y fermiónicos  $E^{(0)} = E^{(1)} \neq 0$  no pueden ser dadas analíticamente porque estas son gráficamente determinadas como las

intersecciones de las curvas en las dos partes de las ecuaciones trascendentes (2.4)(e)-(o).

De los valores de la  $n$ -ésima intersección  $\kappa_n = \sqrt{\alpha^2 - E_n^{(0)}}$  y  $q_n = \sqrt{E^{(0)}}$  se obtiene:

$$\psi_{n+}^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{\kappa_n}{1 + \kappa_n a + \frac{\alpha}{q_n} \sin q_n a \cos q_n a}} \begin{cases} \cos q_n a e^{\kappa_n(x+a)} & , x \in \text{II} \\ \cos q_n x & , x \in \text{I} \\ \cos q_n a e^{-\kappa_n(x-a)} & , x \in \text{III} \end{cases}$$

$$\psi_{n-}^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{\kappa_n}{1 + \kappa_n a + \frac{\alpha}{q_n} \sin q_n a \cos q_n a}} \begin{cases} -\sin q_n a e^{\kappa_n(x+a)} & , x \in \text{II} \\ \sin q_n x & , x \in \text{I} \\ \sin q_n a e^{-\kappa_n(x-a)} & , x \in \text{III} \end{cases}$$

Las correspondientes funciones de onda de estado ligado fermiónico son fácilmente obtenidas:  $\psi_{n-}^{(1)}(x) = \hat{Q}^\dagger \psi_{n+}^{(0)}(x)$ ,  $\psi_{n+}^{(1)}(x) = \hat{Q}^\dagger \psi_{n-}^{(0)}(x)$ . Recordamos que la jerarquía de estados ligados es:  $E_{0+}^{(1)} = 0 < E_{1+}^{(0)} = E_{1-}^{(1)} < E_{2-}^{(0)} = E_{2+}^{(1)} < \dots$ .

La razón secreta de la necesidad de añadir un pozo cuadrado a las dos deltas con el fin de lograr un sistema mecano cuántico supersimétrico puede ser explicada como sigue. La factorización análoga de la condición espectral en las dos ecuaciones (2.4)(e)-(o) en el problema de las dos deltas no SUSY es:

$$(e) e^{-2a\sqrt{|E|}} = -1 - \frac{2\sqrt{|E|}}{\alpha} \quad , \quad (o) e^{-2a\sqrt{|E|}} = 1 + \frac{2\sqrt{|E|}}{\alpha} . \quad (2.5)$$

Si  $|E_0|$  y  $|E_1|$  son respectivamente las soluciones de (2.5)(e) y (2.5)(o) entonces  $|E_1| < |E_0|$  lo cual significa que el estado ligado par tiene menos energía que el impar porque ambos estados ligados son de energía negativa. Por tanto, el papel del pozo es empujar el estado ligado de energía más baja a cero.

En la Tabla 2.2 varias gráficas de las funciones de onda propias de  $\hat{H}_0(x)$  y  $\hat{H}_1(x)$  así como sus valores propios identificados gráficamente son mostrados.

## 2.4. El Hamiltoniano doble delta de Dirac supersimétrico $\mathcal{N} = 2$ : dos deltas de diferente intensidad

Si las dos deltas son de diferente intensidad elegimos el superpotencial:

$$W(x) = \frac{\alpha}{2} |x + a| + \frac{\beta}{2} |x - a| - \frac{1}{2}(\alpha - \beta)x; \quad v_- = -\alpha, \quad v_+ = \beta$$

la razón de esta elección quedará clara más adelante.

Los Hamiltonianos SUSY son:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= -\frac{d^2}{dx^2} + \alpha\delta(x+a) + \beta\delta(x-a) + \frac{\alpha\beta}{2}\epsilon(x+a)\epsilon(x-a) \\ &\quad - (\alpha - \beta) \left[ \frac{\alpha}{2}\epsilon(x+a) + \frac{\beta}{2}\epsilon(x-a) \right] + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\beta^2}{2} - \frac{\alpha\beta}{2} \\ \hat{H}_1 &= -\frac{d^2}{dx^2} - \alpha\delta(x+a) - \beta\delta(x-a) + \frac{\alpha\beta}{2}\epsilon(x+a)\epsilon(x-a) \\ &\quad - (\alpha - \beta) \left[ \frac{\alpha}{2}\epsilon(x+a) + \frac{\beta}{2}\epsilon(x-a) \right] + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\beta^2}{2} - \frac{\alpha\beta}{2}\end{aligned}$$

La línea real es dividida en tres zonas

$$1) \text{ Zona II : } x < -a \quad , \quad 2) \text{ Zona I : } -a < x < a \quad , \quad 3) \text{ Zona III : } x > a$$

Las energías potenciales  $V_0(x)$  y  $V_1(x)$  son las dos deltas más un pozo cuasicuadrado:

$$\begin{aligned}V_0(x) &= \alpha\delta(x+a) + \beta(x-a) + \begin{cases} \alpha^2 & , x \in \text{II} \\ 0 & , x \in \text{I} \\ \beta^2 & , x \in \text{III} \end{cases} \\ V_1(x) &= -\alpha\delta(x+a) - \beta(x-a) + \begin{cases} \alpha^2 & , x \in \text{II} \\ 0 & , x \in \text{I} \\ \beta^2 & , x \in \text{III} \end{cases}\end{aligned}$$

En consecuencia el momento de las funciones de onda en las tres zonas son diferentes: Zona II,  $k = \sqrt{E^{(\iota)} - \alpha^2}$  ; Zona I,  $q = \sqrt{E^{(\iota)}}$  ; Zona III,  $p = \sqrt{E^{(\iota)} - \beta^2}$  . Aquí asumimos sin pérdida de generalidad que  $\alpha^2 < \beta^2$ . Nótese la similitud con el potencial delta/escalón. Hay tres rangos de energías:

### 2.4.1. Soluciones de scattering doblemente degeneradas

Si  $E^{(\iota)} > \beta^2$  hay soluciones de scattering “diestro” y “zurdo” de las ecuaciones de Schrödinger bosónica y fermiónica:

$$\psi^{r(\iota)}(x, E) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho_l^r(E)e^{-ikx} \\ A_l^r(E)e^{iqx} + B_l^r(E)e^{-iqx} \\ \sigma_l^r(E)e^{ipx} \end{cases} \quad , \quad \psi^{l(\iota)}(x, E) = \begin{cases} \sigma_l^l(E)e^{-ikx} & , x \in \text{II} \\ A_l^l(E)e^{iqx} + B_l^l(E)e^{-iqx} & , x \in \text{I} \\ e^{-ipx} + \rho_l^l(E)e^{ipx} & , x \in \text{III} \end{cases}$$

Solucionando el sistema lineal que surge de imponer las condiciones de empalme (A.32) sobre las ondas planas de scattering encontramos las amplitudes de scattering:

$$\rho_0^r(E) = \frac{e^{-2iak} [e^{4iaq}(k+q-i\alpha)(-p+q-i\beta) + (k-q-i\alpha)(p+q+i\beta)]}{\Delta_0(E, \alpha, \beta, a)}$$

$$\rho_0^l(E) = \frac{e^{-2ia p} [e^{4ia q} (-k + q - i\alpha)(p + q - i\beta) + (k + q + i\alpha)(p - q - i\beta)]}{\Delta_0(E, \alpha, \beta, a)}$$

$$\sigma_0^r(E) = \frac{4kq e^{-ia(k+p-2q)}}{\Delta_0(E, \alpha, \beta, a)} \quad , \quad \sigma_0^l(E) = \frac{4p q e^{-ia(k+p-2q)}}{\Delta_0(E, \alpha, \beta, a)}$$

$$\Delta_0(E, \alpha, \beta, a) = (k + q + i\alpha)(p + q + i\beta) - e^{4ia q} (k - q + i\alpha)(p - q + i\beta)$$

Hacemos hincapié en que el momento en la zona III es  $p$  y es la única diferencia con respecto al caso simétrico en el que este es idéntico al momento  $k$  en la zona I.

Debido a que las amplitudes de scattering fermiónicas se obtienen de las bosónicas simplemente cambiando  $\alpha$  por  $-\alpha$  y  $\beta$  por  $-\beta$ , los coeficientes de scattering bosónicos (de  $\hat{H}_0$ ) son idénticos a los coeficientes de scattering fermiónicos (de  $\hat{H}_1$ ). En efecto, las siguientes identidades entre las amplitudes de scattering bosónica y fermiónica se verifican:

$$\rho_1^r(E) = \frac{-ik + \alpha}{ik + \alpha} \rho_0^r(E) \quad , \quad \sigma_1^r(E) = \frac{ip - \beta}{ik + \alpha} \sigma_0^r(E) \quad ,$$

y las correspondientes entre las amplitudes de scattering “zurdo”. Por tanto las probabilidades de transmisión y de reflexión bosónica y fermiónica son iguales:  $|\rho_0^r|^2 = |\rho_1^r|^2$  y  $|\sigma_0^r|^2 = |\sigma_1^r|^2$ ,  $|\rho_0^l|^2 = |\rho_1^l|^2$  y  $|\sigma_0^l|^2 = |\sigma_1^l|^2$ . Además tenemos  $\Delta_1(E, \alpha, \beta, a) = \Delta_0(E, -\alpha, -\beta, a)$ .

### 2.4.2. Sólo ondas de scattering “diestro”

Cuando  $\alpha^2 < E^{(\iota)} < \beta^2$  el momento en la zona III se hace puramente imaginario:  $p = i\pi = i\sqrt{\beta^2 - E^{(\iota)}}$ . No hay ondas incidentes moviéndose hacia la izquierda mientras que las ondas moviéndose hacia la derecha son en parte reflejadas y en parte transmitidas decayendo exponencialmente.

### 2.4.3. Soluciones de estado ligado/antiligado

Para energías tales que  $0 \leq E^{(\iota)} \leq \alpha^2$ , correspondiendo a momentos puramente imaginarios  $k^{(\iota)} = i\kappa^{(\iota)} = i\sqrt{\alpha^2 - E^{(\iota)}}$  y  $p^{(\iota)} = i\pi^{(\iota)} = i\sqrt{\beta^2 - E^{(\iota)}}$  (parte imaginaria positiva:  $\kappa^{(\iota)}, \pi^{(\iota)} > 0$ ), los polos de las amplitudes de scattering ocurren en las energías de estados ligados. Los polos son obviamente los ceros de  $\Delta_\iota(E, \alpha, \beta, a)$ . De aquí en adelante, e.g. en el sector bosónico, solucionando para  $E$  la ecuación espectral

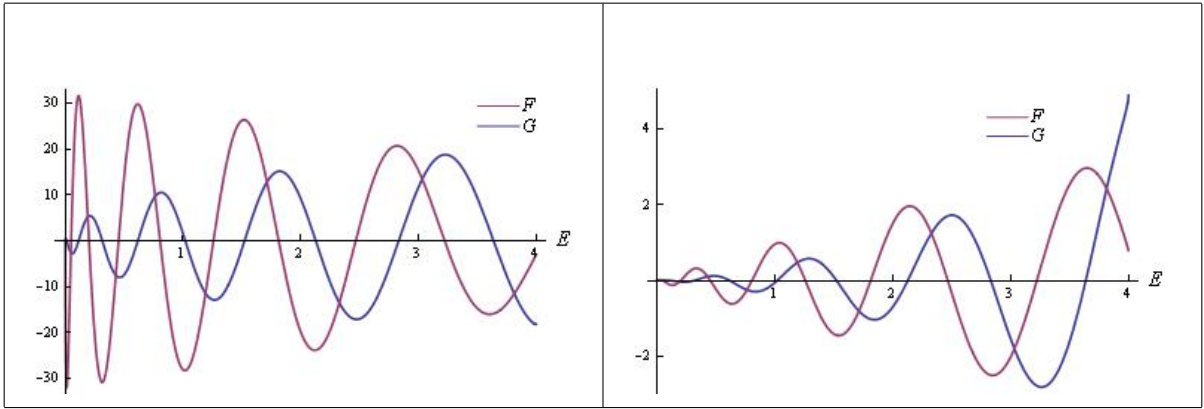
$$\Delta_0(E^{(0)}, \alpha, \beta, a) = 0 \equiv \frac{q(\kappa^{(0)} + \pi^{(0)} + \alpha + \beta)}{q^2 - (\kappa^{(0)} + \alpha)(\pi^{(0)} + \beta)} \cos 2qa = \sin 2qa \quad (2.6)$$

obtenemos las energías de los estados ligados de  $\hat{H}_0$ . De igual forma, en el sector fermiónico las soluciones en  $E$  de la ecuación espectral

$$\Delta_1(E^{(1)}, \alpha, \beta, a) = 0 \equiv \frac{q(\kappa^{(1)} + \pi^{(1)} - \alpha - \beta)}{q^2 - (\kappa^{(1)} - \alpha)(\pi^{(1)} - \beta)} \cos 2qa = \sin 2qa. \quad (2.7)$$

son los valores propios de estados ligados.

Tabla 2.3: Gráficas de las curvas en las ecuaciones espectrales (2.6) (izquierda) y (2.7) (derecha) para  $a = 7$ ,  $\alpha = 2$  y  $\beta = 4$ . Los puntos de intersección dan los valores propios de estado ligado para  $\hat{H}_0$  (izquierda  $F = [x - (\sqrt{4-x} + 2)(\sqrt{16-x} + 4)] \sin 14\sqrt{x}$ ,  $G = [\sqrt{4-x} + \sqrt{16-x} + 6]\sqrt{x} \cos 14\sqrt{x}$ ) y  $\hat{H}_1$  (derecha  $F = [x - (\sqrt{4-x} - 2)(\sqrt{16-x} - 4)] \sin 14\sqrt{x}$ ,  $G = [\sqrt{4-x} + \sqrt{16-x} - 6]\sqrt{x} \cos 14\sqrt{x}$ ). Observe que  $E_B^{(0)} = E_B^{(1)}$ .



Ya que

$$\begin{aligned} \frac{q(\sqrt{\alpha^2 - E} + \sqrt{\beta^2 - E} - \alpha - \beta)}{q^2 - (\sqrt{\alpha^2 - E} - \alpha)(\sqrt{\beta^2 - E} - \beta)} &= -\frac{\beta\sqrt{\alpha^2 - E} - \alpha\sqrt{\beta^2 - E}}{(\alpha - \beta)q} = \\ &= \frac{q(\sqrt{\alpha^2 - E} + \sqrt{\beta^2 - E} + \alpha + \beta)}{q^2 - (\sqrt{\alpha^2 - E} + \alpha)(\sqrt{\beta^2 - E} + \beta)} \end{aligned}$$

para  $\alpha$  y  $\beta$  arbitrarios, las soluciones para  $E^{(0)}$  y  $E^{(1)}$  de las ecuaciones trascendentes (2.6) y (2.7) son las mismas. Tal como se esperaba, existe un vínculo entre los estados ligados de los operadores  $\hat{H}_0(x)$  y  $\hat{H}_1(x)$ , ver la Tabla 2.3.

Ambos  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  tienen un estado propio de energía cero, como se puede comprobar tomando el límite  $E \rightarrow 0$  de las ecuaciones espectrales. Sin embargo, para la elección particular donde  $\alpha$  y  $\beta$  son positivos, la función de onda propia en el núcleo de  $\hat{H}_0$  es no normalizable debido a que  $W \rightarrow +\infty$  en los límites  $x \rightarrow \pm\infty$ . La función de onda de energía cero de  $\hat{H}_1$ , no obstante, es normalizable:  $\psi_0^{(1)}(x) \propto e^{-W(x)}$  tiende a cero en ambos extremos de la recta real. En efecto, la función de onda del modo cero fermiónico normalizada es:<sup>6</sup>

$$\psi_0^{(1)} = \sqrt{\frac{2\alpha}{\alpha + 4a\alpha\beta + \beta}} \begin{cases} e^{\alpha(x+a)} & , x \in \text{II} \\ 1 & , x \in \text{I} \\ e^{-\beta(x-a)} & , x \in \text{III} \end{cases}$$

<sup>6</sup>Recordemos las redefiniciones:  $\frac{2m}{\hbar^2}E \rightarrow E$  y  $\frac{2m}{\hbar^2}V(x) \rightarrow V(x)$

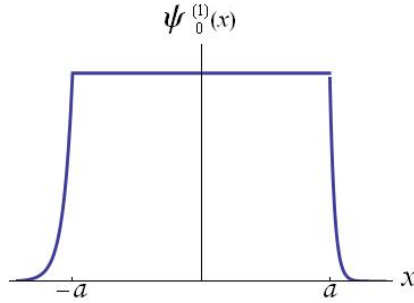


Figura 2.2: Función de onda del modo cero fermiónico para  $a = 7$ ,  $\alpha = 2$ , y  $\beta = 4$ .

ver Figura 2.2 donde la gráfica de  $\psi_0^{(1)}$  para  $a = 7$ ,  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 4$  es representada. Para energías en el rango  $0 < E^{(0)} < \alpha^2$  llamamos  $\kappa_n, \pi_n, q_n$  a los momentos en las tres zonas correspondiendo a las energías de los estados ligados que solucionan la ecuación espectral bosónica trascendente.

Tabla 2.4: Primeras tres funciones de onda de estado ligado con energía positiva de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  para  $a = 7$ ,  $\alpha = 2$  y  $\beta = 4$ .

$E_1^{(0)} = 0.0478$	$E_2^{(0)} = 0.191$	$E_3^{(0)} = 0.429$
$E_1^{(1)} = 0.0478$	$E_2^{(1)} = 0.191$	$E_3^{(1)} = 0.429$



Las funciones de onda bosónicas normalizadas son:

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{\kappa_n}{\frac{r_n}{2} + \kappa_n(m_n + \frac{1}{2\pi_n})}} \begin{cases} \left( \cos 2q_n a + \frac{\pi_n - \beta}{q_n} \sin 2q_n a \right) e^{\kappa_n(x+a)} & , x \in \text{II} \\ \cos q_n(x-a) - \frac{\pi_n - \beta}{q_n} \sin q_n(x-a) & , x \in \text{I} \\ e^{-\pi_n(x-a)} & , x \in \text{III} \end{cases}$$

donde  $r_n$  y  $m_n$  son definidas como:

$$r_n = \left( \cos 2q_n a + \frac{\pi_n - \beta}{q_n} \sin 2q_n a \right)^2 ,$$

$$m_n = \frac{2q_n a [q_n^2 + (\pi_n - \beta)^2] + \sin 2q_n a \{ [q_n^2 - (\pi_n - \beta)^2] \cos 2q_n a + 2(\pi_n - \beta) q_n \sin 2q_n a \}}{2q_n^3} .$$

Las funciones de onda de estado ligado fermiónico son obtenidas mediante la aplicación de la supercarga a las las funciones de onda de estado ligado bosónico:  $\psi_n^{(1)}(x) = \hat{Q}^\dagger \psi_n^{(0)}(x)$ .

En la Tabla 2.4 las gráficas de las primeras funciones de onda de estado ligado de los Hamiltonianos  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  son mostradas. Los valores propios de energía de estos estados ligados son determinados solucionando en forma gráfica (2.6) y (2.7) respectivamente.

A partir de (A.10) se encuentra para los valores propios de  $S$  el resultado

$$\begin{aligned} \lambda_\pm = & - \frac{2q(k+p)e^{-ia(k+p-2q)}}{e^{4iaq}(k-q+i\alpha)(p-q+i\beta) - (k+q+i\alpha)(p+q+i\beta)} \pm \\ & \pm \frac{e^{-ia(k+p)}}{e^{4iaq}(k-q+i\alpha)(p-q+i\beta) - (k+q+i\alpha)(p+q+i\beta)} \times \\ & \times \sqrt{\{ [e^{4iaq}(-k+q-i\alpha)(p+q-i\beta) + (k+q+i\alpha)(p-q-i\beta)] \times \\ & \times [e^{4iaq}(k+q-i\alpha)(-p+q-i\beta) + (k-q-i\alpha)(p+q+i\beta)] + \\ & + 4q^2(k-p)^2 e^{4iaq} \}} \end{aligned}$$

Por otro lado, en el intervalo de energía  $(\alpha^2, \beta^2)$  solo podemos considerar scattering “diestro” así que la única solución admisible está dada por (??), además el espectro es no degenerado y hay reflexión total.

## 2.5. El Hamiltoniano triple delta de Dirac supersimétrico $\mathcal{N} = 2$ : tres deltas de diferente intensidad

La mecánica cuántica supersimétrica de las configuraciones con tres deltas de diferente intensidad es determinada por el superpotencial

$$W(x) = \frac{\alpha}{2} |x+a| + \frac{\mu}{2} |x| + \frac{\beta}{2} |x-a| - \frac{1}{2}(\alpha - \beta)x ,$$

donde  $\alpha \neq \beta$ ,  $\alpha \neq \mu$ ,  $\beta \neq \mu$  son tres constantes positivas diferentes. Es claro que

$$W'(x) = \frac{\alpha}{2}\varepsilon(x+a) + \frac{\mu}{2}\varepsilon(x) + \frac{\beta}{2}\varepsilon(x-a) - \frac{\alpha-\beta}{2} \quad , \quad v_+ = \beta + \frac{\mu}{2} \quad , \quad v_- = -\alpha - \frac{\mu}{2}$$

$$\lim_{x \rightarrow 0_{\pm}} W'(x) = \pm \frac{\mu}{2} \quad , \quad \pm W''(x) = \pm [\alpha\delta(x+a) + \mu\delta(x) + \beta\delta(x-a)]$$

El Hamiltoniano bosónico escalar es el operador de Schrödinger para tres deltas repulsivas más un pozo cuasicuadrado mientras que el Hamiltoniano fermiónico es obtenido reemplazando las barreras delta repulsivas por pozos delta atractivos:

$$\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x) \quad , \quad \hat{H}_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x)$$

$$V_0(x) = \alpha\delta(x+a) + \mu\delta(x) + \beta(x-a) + \begin{cases} (\alpha + \frac{\mu}{2})^2 & , \quad x \in \text{III} \\ \frac{\mu^2}{4} & , \quad x \in \text{I, II} \\ (\beta + \frac{\mu}{2})^2 & , \quad x \in \text{IV} \end{cases}$$

$$V_1(x) = -\alpha\delta(x+a) - \mu\delta(x) - \beta(x-a) + \begin{cases} (\alpha + \frac{\mu}{2})^2 & , \quad x \in \text{III} \\ \frac{\mu^2}{4} & , \quad x \in \text{I, II} \\ (\beta + \frac{\mu}{2})^2 & , \quad x \in \text{IV} \end{cases}$$

Como en el caso de dos deltas diferentes introducimos un pozo cuasicuadrado, en este caso diferente de cero en la región media, para que sea compatible con la supersimetría.

### 2.5.1. Ondas de scattering

Hay cuatro zonas separadas por las tres barreras/pozos. Hay, no obstante, solo tres diferentes momentos: Zona III,  $k = \sqrt{E^{(\iota)} - (\alpha + \frac{\mu}{2})^2}$  ; Zona I y Zona II,  $q = \sqrt{E^{(\iota)} - \frac{\mu^2}{4}}$  ; Zona IV,  $p = \sqrt{E^{(\iota)} - (\beta + \frac{\mu}{2})^2}$  . Asumimos sin pérdida de generalidad que  $\alpha^2 < \beta^2$ . Hay tres rangos de energías:

### 2.5.2. Ondas de scattering doblemente degeneradas

Si  $E^{(\iota)} > (\beta + \frac{\mu}{2})^2$  hay soluciones de onda de scattering “diestro” y “zurdo” de las ecuaciones de Schrödinger bosónica y fermiónica:

$$\psi^{r(\iota)}(x, E) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho_l^r(E)e^{-ikx} \\ A_l^r(E)e^{iqx} + B_l^r(E)e^{-iqx} \\ C_l^r(E)e^{iqx} + D_l^r(E)e^{-iqx} \\ \sigma_l^r(E)e^{ipx} \end{cases} \quad , \quad \psi^{l(\iota)}(x, E) = \begin{cases} \sigma_l^l(E)e^{-ikx} & , \quad x \in \text{III} \\ A_l^l(E)e^{iqx} + B_l^l(E)e^{-iqx} & , \quad x \in \text{I} \\ C_l^l(E)e^{iqx} + D_l^l(E)e^{-iqx} & , \quad x \in \text{II} \\ e^{-ipx} + \rho_l^l(E)e^{ipx} & , \quad x \in \text{IV} \end{cases}$$

La solución del sistema lineal de seis ecuaciones en seis incógnitas que surge de las condiciones de empalme (A.37) en los puntos  $x = \pm a$  y  $x = 0$  sobre las ondas de scattering, e.g., para scattering “diestro” y “zurdo” en el sector bosónico, da las amplitudes de scattering:

$$\begin{aligned}\sigma_0^r(E) &= \frac{8kq^2 e^{-ia(k-3q)}}{\Delta_0^r} \quad , \quad \sigma_0^l(E) = \frac{8pq^2 e^{-ia(p-3q)}}{\Delta_0^l} \\ \rho_0^r(E) &= e^{-2iak} \frac{k+q-i\alpha}{k-q+i\alpha} - \frac{4kqe^{ia(p+q-2k)}}{(k-q+i\alpha)\Delta_0^r} [\mu e^{2iaq}(\beta-ip+iq) + (2q+i\mu)(i\beta+p+q)] \\ \rho_0^l(E) &= -e^{-2iap} + \\ &+ \frac{4pe^{ia(k+3q-2p)}}{\Delta_0^l} [\cos(2qa)(-\alpha\mu+ik\mu+2q^2) + q\sin(2qa)(2\alpha-2ik+\mu) + \mu(\alpha-ik)] \\ \Delta_0^r(E, \alpha, \mu, \beta, a) &= 2\mu e^{ia(p+3q)} [(\alpha-ik)(p+i\beta) + iq^2] + \\ &+ e^{ia(p+q)}(2q+i\mu)(k+q+i\alpha)(p+q+i\beta) + e^{ia(p+5q)}(2q-i\mu)(k-q+i\alpha)(-p+q-i\beta) \\ \Delta_0^l(E, \alpha, \mu, \beta, a) &= 2\mu e^{ia(k+3q)} [(\alpha-ik)(p+i\beta) + iq^2] + \\ &+ e^{ia(k+q)}(2q+i\mu)(k+q+i\alpha)(p+q+i\beta) + e^{ia(k+5q)}(2q-i\mu)(k-q+i\alpha)(-p+q-i\beta)\end{aligned}$$

Las amplitudes de scattering en el sector fermiónico son pues, para scattering “diestro”  $\sigma_1^r(E)$ ,  $\rho_1^r(E)$ , determinadas a partir de la supersimetría:

$$\sigma_1^r(E) = \frac{ip - \beta - \frac{\mu}{2}}{ik + \alpha + \frac{\mu}{2}} \sigma_0^r(E) \quad , \quad \rho_1^r(E) = \frac{-ik + \alpha + \frac{\mu}{2}}{ik + \alpha + \frac{\mu}{2}} \rho_0^r(E)$$

### 2.5.3. Soluciones de estado ligado/antiligado

Para energías tales que  $(\alpha + \frac{\mu}{2})^2 < E < (\beta + \frac{\mu}{2})^2$  no hay ondas de scattering incidentes moviéndose a la izquierda solo ondas transmitidas moviéndose a la derecha decayendo exponencialmente. Si  $\frac{\mu^2}{4} < E < (\alpha + \frac{\mu}{2})^2$ , no obstante, los dos momentos asintóticos se hacen puramente imaginarios:  $k^{(\iota)} = i\kappa^{(\iota)} = i\sqrt{(\alpha + \frac{\mu}{2})^2 - E^{(\iota)}}$  y  $p^{(\iota)} = i\pi^{(\iota)} = i\sqrt{(\beta + \frac{\mu}{2})^2 - E^{(\iota)}}$ . Los polos puramente imaginarios de  $\sigma_0^r(E)$  y  $\sigma_0^l(E)$  tales que  $\kappa^{(0)} > 0$  y  $\pi^{(0)} > 0$  proveen los valores propios y las funciones propias de estado ligado bosónico. Por tanto, necesitamos identificar los ceros de los determinantes  $\Delta_0^r(E, \alpha, \mu, \beta, a) = 0 = \Delta_0^l(E, \alpha, \mu, \beta, a)$  como funciones de  $E$ . Un cálculo rutinario muestra que estos ceros son dados por la ecuación espectral:

$$\begin{aligned}(2q \cos 2aq + \mu \sin 2aq) \frac{q(\kappa^{(0)} + \pi^{(0)} + \alpha + \beta)}{(\kappa^{(0)} + \alpha)(\pi^{(0)} + \beta) - q^2} &= (\mu \cos 2aq - 2q \sin 2aq) - \\ &- \mu \frac{(\kappa^{(0)} + \alpha)(\pi^{(0)} + \beta) + q^2}{(\kappa^{(0)} + \alpha)(\pi^{(0)} + \beta) - q^2} . \quad (2.8)\end{aligned}$$

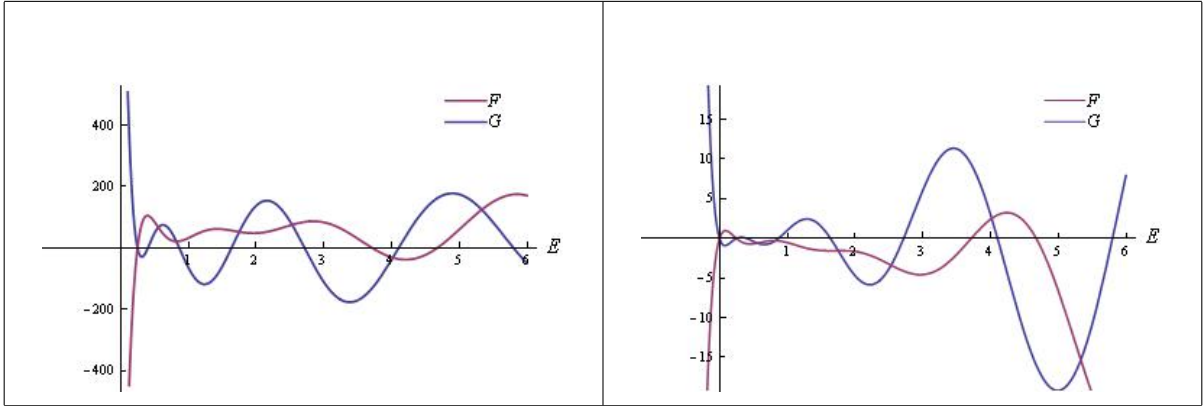
Es obvio en la fórmula (2.8) que en el límite  $\mu = 0$  recuperamos la ecuación espectral para los valores propios de estado ligado bosónico de las dos deltas SUSY. Los valores propios

de estado ligado fermiónico son determinados de la misma ecuación (2.8) reemplazando las barreras delta por pozos, i.e., cambiando  $\alpha$ ,  $\mu$  y  $\beta$  por  $-\alpha$ ,  $-\mu$  y  $-\beta$ :

$$(2q \cos 2aq - \mu \sin 2aq) \frac{q(\kappa^{(1)} + \pi^{(1)} - \alpha - \beta)}{(\kappa^{(1)} - \alpha)(\pi^{(1)} - \beta) - q^2} = (-\mu \cos 2aq - 2q \sin 2aq) + \mu \frac{(\kappa^{(1)} - \alpha)(\pi^{(1)} - \beta) + q^2}{(\kappa^{(1)} - \alpha)(\pi^{(1)} - \beta) - q^2}. \quad (2.9)$$

Una prueba laboriosa nos permite verificar que las soluciones de las ecuaciones trascendentes (2.8) and (2.9) son las mismas. De aquí en adelante, los valores propios de estado ligado de los Hamiltonianos  $\hat{H}_0(x)$  y  $\hat{H}_1(x)$  son idénticos como es requerido por las supersimetría. En la Tabla 2.5 las dos partes de las ecuaciones espectrales (2.8)-(2.9) para  $\hat{H}_0$  (izquierda) y  $\hat{H}_1$  (derecha) son representadas como funciones de  $E$ .

Tabla 2.5: Gráficas de las dos curvas en las dos partes de las ecuaciones espectrales de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  para  $a = 4$ ,  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 6$  y  $\mu = 1$ . Las curvas sobre la izquierda y sobre la derecha tienen las mismas intesecciones lo cual significa que los estados ligados bosónicos y fermiónicos forman dobletes supersimétricos.



Nuestra elección de signos para los acoplamientos determina que solo el valor propio de energía cero  $E_0^{(1)} = 0$  de  $\hat{H}_1$  es un estado ligado mientras que el valor propio de energía cero  $E_0^{(0)} = 0$  de  $\hat{H}_0$  es un estado antiligado (no normalizable). La función de onda normalizada del modo cero fermiónico es:

$$\psi_0^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{e^{a(\alpha+\beta+\mu)}}{\frac{2(e^{a\mu}-1)}{\mu} + \frac{1}{2\alpha+\mu} + \frac{1}{2\beta+\mu}}} \begin{cases} e^{(\alpha+\frac{\mu}{2})x+\frac{1}{2}(\alpha-\beta)a} & , x \in \text{III} \\ e^{\frac{\mu}{2}x-\frac{1}{2}(\alpha+\beta)a} & , x \in \text{I} \\ e^{-\frac{\mu}{2}x-\frac{1}{2}(\alpha+\beta)a} & , x \in \text{II} \\ e^{-(\beta+\frac{\mu}{2})x+\frac{1}{2}(\beta-\alpha)a} & , x \in \text{IV} \end{cases}$$

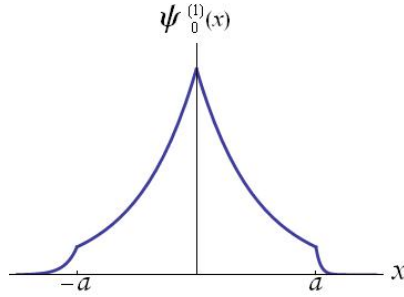


Figura 2.3: Función de onda del modo cero fermiónico para  $a = 4$ ,  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 6$  y  $\mu = 1$

Esta es representada en la Figura 2.3 para los valores  $a = 4$ ,  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 6$  y  $\mu = 1$ . En suma, el único estado fundamental del Hamiltoniano supersimétrico  $\hat{H}$  es fermiónico:

$$\Psi_0^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_0^{(1)}(x) \end{pmatrix}.$$

Tabla 2.6: Primeras tres funciones de onda de estado ligado con energía positiva de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  para  $a = 4$ ,  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 6$  y  $\mu = 1$ .

$E_1^{(0)} = 0.557$	$E_2^{(0)} = 0.822$	$E_3^{(0)} = 1.752$
$E_1^{(1)} = 0.557$	$E_2^{(1)} = 0.822$	$E_3^{(1)} = 1.752$

Es claro que  $\hat{Q}^\dagger \left| \Psi_0^{(1)} \right\rangle = 0$ , pero también esta pertenece al núcleo de la otra supercarga,

esto es:  $\hat{Q} \left| \Psi_0^{(1)} \right\rangle = 0$ :

$$\hat{D}\psi_0^{(1)}(x) = \left[ \frac{d}{dx} + \frac{\alpha}{2}\varepsilon(x+a) + \frac{\mu}{2}\varepsilon(x) + \frac{\beta}{2}\varepsilon(x-a) - \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \right] \psi_0^{(1)}(x) = 0.$$

El estado ligado bosónico de energía positiva, perteneciente al espectro discreto de  $\hat{H}_0$ , cumpliendo las condiciones de empalme (A.37), es construido a partir de las soluciones de scattering para los momentos externos imaginarios que son polos de las amplitudes de transmisión:

$$\psi_n^{(0)}(x) = N \cdot \begin{cases} \frac{1}{4} \left[ \left( \frac{4\pi_n}{q_n} + \frac{4\beta}{q_n} + \frac{2\mu}{q_n} \right) \sin 2q_n a + \left( -\frac{2\mu\pi_n}{q_n^2} - \frac{2\beta\mu}{q_n^2} + 4 \right) \cos 2q_n a \right. \\ \left. + \frac{2\mu\pi_n}{q_n^2} + \frac{2\beta\mu}{q_n^2} \right] e^{\kappa_n x + \kappa_n a - \pi_n a} & , \quad x \in \text{III} \\ \frac{1}{4} e^{-\pi_n a} \left[ \left( -\frac{4\pi_n}{q_n} - \frac{4\beta}{q_n} - \frac{2\mu}{q_n} \right) \sin q_n(x-a) - \frac{2\mu}{q_n} \sin q_n(x+a) \right. \\ \left. + \left( -\frac{2\mu\pi_n}{q_n^2} - \frac{2\beta\mu}{q_n^2} + 4 \right) \cos q_n(x-a) + \left( \frac{2\mu\pi_n}{q_n^2} + \frac{2\beta\mu}{q_n^2} \right) \cos q_n(x+a) \right] & , \quad x \in \text{I} \\ e^{-\pi_n a} \left[ \cos q_n(x-a) - \left( \frac{\pi_n}{q_n} + \frac{\beta}{q_n} \right) \sin q_n(x-a) \right] & , \quad x \in \text{II} \\ e^{-\pi_n x} & , \quad x \in \text{IV} \end{cases}$$

donde  $N$  es una constante de normalización.

En la Tabla 2.6 varias gráficas de las funciones propias de estado ligado de los Hamiltonianos  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  junto con sus correspondientes valores propios de energía son mostradas. Los valores propios son obtenidos gráficamente como los puntos de intersección de las curvas en las ecuaciones espectrales (2.8)-(2.9). Las funciones de onda de estados ligados fermiónicos son obtenidas fácilmente:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \psi_n^{(1)}(x) \end{pmatrix} = \hat{Q}^\dagger \begin{pmatrix} \psi_n^{(0)}(x) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

## 2.6. Tres barreras/pozos delta supersimétricas $\mathcal{N} = 2$ de igual intensidad: $\alpha = \beta = \mu$

### 2.6.1. Ondas de scattering

En este caso muchas cosas se simplifican, especialmente los momentos asintóticos los cuales se hacen iguales:  $k^{(\iota)} = p^{(\iota)} = \sqrt{E^{(\iota)} - \frac{9}{4}\mu^2}$ , aunque el momento intermedio permanece sin modificar:  $q^{(\iota)} = \sqrt{E^{(\iota)} - \frac{1}{4}\mu^2} = \sqrt{k^{(\iota)^2 + 2\mu^2}$ . Para  $E^{(\iota)} > \frac{9}{4}\mu^2$  las funciones propias son ondas de scattering. Las amplitudes de transmisión para scattering “diestro” y “zurdo” tampoco se

ven modificadas,  $\sigma_0^r(k) = \sigma_0^l(k) = \sigma_0(k)$ ,  $\sigma_1^r(k) = \sigma_1^l(k) = \sigma_1(k)$  debido a la invariancia bajo inversión temporal, y la invariancia bajo reflexión espacial hace el mismo trabajo en lo que se refiere a las amplitudes de reflexión:  $\rho_0^r(k) = \rho_0^l(k) = \rho_0(k)$ ,  $\rho_1^r(k) = \rho_1^l(k) = \rho_1(k)$ . En el sector bosónico, por ejemplo, encontramos

$$\sigma_0(k) = \frac{8kq^2 e^{-ia(k-3q)}}{\Delta(k, q; \mu, a)}$$

donde el denominador  $\Delta(k, q; \mu, a)$  es definido como:

$$\begin{aligned} \Delta(k, q; \mu, a) = & e^{ia(k+q)}(k+q+i\alpha) [2\alpha e^{2iaq}(\alpha-ik+iq) + (2q+i\alpha)(k+q+i\alpha)] \\ & - e^{ia(k+5q)}(2q-i\alpha)(k-q+i\alpha)^2 . \end{aligned}$$

La amplitud de reflexión, no obstante, es más complicada:

$$\begin{aligned} \rho_0(k) = & - \frac{e^{-ia(k-q)}}{\Delta} \{ 2i\alpha e^{2iaq} (\alpha^2 + k^2 + q^2) + e^{4iaq}(2q-i\alpha) [k^2 - (q-i\alpha)^2] \\ & + (2q+i\alpha) [-k^2 + (q+i\alpha)^2] \} . \end{aligned}$$

Las supercargas proporcionan a su vez las amplitudes de transmisión y de reflexión fermiónicas  $\sigma_1(k)$  y  $\rho_1(k)$ :

$$\sigma_1(k) = \frac{ik - \frac{3\mu}{2}}{ik + \frac{3\mu}{2}} \sigma_0(k) \quad , \quad \rho_1(k) = \frac{-ik + \frac{3\mu}{2}}{ik + \frac{3\mu}{2}} \rho_0(k) .$$

Debido a que los momentos asintóticos son iguales las matrices  $S_i$  bosónica y fermiónica

$$S_0(k, \mu, a) = \begin{pmatrix} \sigma_0(k) & \rho_0(k) \\ \rho_0(k) & \sigma_0(k) \end{pmatrix} \quad , \quad S_1(k, \mu, a) = \begin{pmatrix} \sigma_1(k) & \rho_1(k) \\ \rho_1(k) & \sigma_1(k) \end{pmatrix}$$

son matrices unitarias bien definidas. Sus valores propios, e.g. de  $S_0$ , son así números complejos de módulo unidad:

$$\begin{aligned} \lambda_0^+(k, \mu, a) &= \frac{e^{-2iak} [k(1 - e^{2iaq}) + i\mu(-1 + e^{2iaq}) - q(1 + e^{2iaq})]}{k(-1 + e^{2iaq}) + i\mu(-1 + e^{2iaq}) - q(1 + e^{2iaq})} \\ \lambda_0^-(k, \mu, a) &= \frac{e^{-2iak} [e^{2iaq}(2q - i\mu)(k + q - i\alpha) + (2q + i\mu)(k - q - i\mu)]}{e^{2iaq}(2q - i\mu)(k - q + i\alpha) + (2q + i\alpha)(k + q + i\alpha)} \end{aligned}$$

mientras que los valores propios de la matriz  $S$  fermiónica están relacionados a través de las supercargas:  $\lambda_1^\pm(k, \mu, a) = \sigma_1(k) \pm \rho_1(k)$ . El defasaje bosónico total es:

$$\begin{aligned} \delta_0(k; \mu, a) = & \frac{1}{2i} \left\{ \log \left( \frac{e^{-2iak} [k(1 - e^{2iaq}) + i\alpha(-1 + e^{2iaq}) - q(1 + e^{2iaq})]}{k(-1 + e^{2iaq}) + i\alpha(-1 + e^{2iaq}) - q(1 + e^{2iaq})} \right) \right. \\ & \left. + \log \left( \frac{e^{-2iak} [e^{2iaq}(2q - i\alpha)(k + q - i\alpha) + (2q + i\alpha)(k - q - i\alpha)]}{e^{2iaq}(2q - i\alpha)(k - q + i\alpha) + (2q + i\alpha)(k + q + i\alpha)} \right) \right\} \end{aligned}$$

a partir del cual se puede calcular la densidad espectral.

### 2.6.2. Soluciones de estado ligado/antiligado

Si  $\frac{\mu^2}{4} < E^{(l)} < \frac{9}{4}\mu^2$  las funciones propias de estado ligado surgen para ambos Hamiltonianos tanto el bosónico como el fermiónico. En términos del momento externo puramente imaginario  $\kappa^{(0)} = \sqrt{\frac{9}{4}\mu^2 - E^{(0)}}$  la ecuación espectral para los estados ligados bosónicos es:

$$\begin{aligned} & \left( 2\sqrt{2\mu^2 - \kappa^2} \cos 2a\sqrt{2\mu^2 - \kappa^2} + \mu \sin 2a\sqrt{2\mu^2 - \kappa^2} \right) \frac{2\sqrt{2\mu^2 - \kappa^2}(\kappa + \mu)}{(\kappa + \mu)^2 - 2\mu^2 + \kappa^2} = \\ & = \mu \cos 2a\sqrt{2\mu^2 - \kappa^2} - 2\sqrt{2\mu^2 - \kappa^2} \sin 2a\sqrt{2\mu^2 - \kappa^2} - \mu \frac{(\kappa + \mu)^2 + 2\mu^2 - \kappa^2}{(\kappa + \mu)^2 - 2\mu^2 + \kappa^2} . \end{aligned}$$

La ecuación espectral fermiónica es exactamente la misma intercambiando  $\mu$  por  $-\mu$ . Las soluciones de estas dos ecuaciones trascendentes, las intersecciones entre las curvas en las dos partes de cada ecuación espectral, son las mismas como es requerido por la supersimetría.

## 2.7. El potencial con $\mathbb{N}$ deltas de Dirac alternadamente atractivas y repulsivas

Las características generales del espectro de Hamiltonianos mecano cuánticos que describen la dinámica de una partícula moviéndose en un “background” o fondo de  $\mathbb{N}$  potenciales delta de Dirac son bastante claras. En el marco no supersimétrico, además del espectro continuo caracterizado por los defasajes, hay a lo sumo  $\mathbb{N}$  estados ligados si todas las interacciones delta son atractivas y la distancia entre los  $\mathbb{N}$  puntos,  $a_j \in \mathbb{R}$ ,  $j = 1, 2, \dots, \mathbb{N}$ , es lo suficientemente grande. La situación genérica, no obstante, es la siguiente: hay un número finito de estados ligados  $0 \leq n_b \leq \mathbb{N}$  en diferentes zonas del espacio de parámetros  $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\mathbb{N}}) \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}}$  **dependiendo del número de pozos y la distancia entre pozos y paredes.**

En el dominio supersimétrico las cosas son un poco más complicadas en el sentido de que pozos cuasicuadrados con un número finito de pasos entran junto con los potenciales delta. Ya que la situación es conceptualmente clara a pesar de que la complejidad de las fórmulas crece exponencialmente abordaremos ahora solo la versión supersimétrica de una particular configuración de  $\mathbb{N}$  potenciales delta.

El punto de partida es la elección del siguiente superpotencial:

$$W(x) = \frac{\alpha}{2} \sum_{n=-\mathbb{N}}^{\mathbb{N}} (-1)^n |x - na| , \quad n = -\mathbb{N}, -\mathbb{N} + 1, -\mathbb{N} + 2, \dots, \mathbb{N} - 2, \mathbb{N} - 1, \mathbb{N} \quad (2.10)$$

donde el parámetro  $\alpha$  es una constante positiva con dimensiones de inverso de longitud. El Hamiltoniano mecano cuántico supersimétrico asociado a este superpotencial es una matriz



diagonal  $2 \times 2$  compuesta de los Hamiltonianos escalares

$$\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\alpha}{2} \sum_{n=-\mathbb{N}}^{\mathbb{N}} (-1)^n \delta(x - na) + \frac{\alpha^2}{4} \quad , \quad \hat{H}_1 = -\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\alpha}{2} \sum_{n=-\mathbb{N}}^{\mathbb{N}} (-1)^n \delta(x - na) + \frac{\alpha^2}{4}$$

los cuales actúan sobre las funciones de onda “bosónicas” y “fermiónicas” respectivamente. El Hamiltoniano  $\hat{H}_0$  describe la siguiente colección de  $\mathbb{N}$  potenciales delta distribuidos a lo largo de la recta real  $x$  igualmente desplazados uno con respecto a otro en una distancia  $a$ . Una barrera delta está localizada en el origen  $x = 0$ , dos pozos delta están respectivamente colocados en  $x = \pm a$ , dos barreras delta se sitúan respectivamente sobre  $x = \pm 3a$ , y, así, en esta forma alternada, hasta  $x = \pm \mathbb{N}a$  donde hay barreras si  $\mathbb{N}$  es par y pozos si  $\mathbb{N}$  es impar. El Hamiltoniano  $\hat{H}_1$  responde a una serie idéntica de  $\mathbb{N}$  deltas de Dirac solo que reemplazando pozos por barreras y viceversa.

### 2.7.1. El potencial con tres deltas de Dirac alternadamente atractivas y repulsivas

Haciendo  $\mathbb{N} = 1$  en (2.10) el superpotencial toma la forma

$$W = \frac{\alpha}{2}|x| - \frac{\alpha}{2}|x - a| - \frac{\alpha}{2}|x + a| \quad ,$$

y los Hamiltonianos escalares se hacen:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= -\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\alpha}{2}\delta(x) - \frac{\alpha}{2}\delta(x - a) - \frac{\alpha}{2}\delta(x + a) + \frac{\alpha^2}{4} \quad , \\ \hat{H}_1 &= -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) = -\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\alpha}{2}\delta(x) + \frac{\alpha}{2}\delta(x - a) + \frac{\alpha}{2}\delta(x + a) + \frac{\alpha^2}{4} \quad . \end{aligned}$$

Por tanto las ecuaciones de Schrödinger que definen los problemas espectrales de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  son respectivamente:

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\psi^{(0)}}{dx^2} + \left[ \frac{\alpha}{2}\delta(x) - \frac{\alpha}{2}\delta(x - a) - \frac{\alpha}{2}\delta(x + a) + \frac{\alpha^2}{4} \right] \psi^{(0)}(x) &= E^{(0)}\psi(x) \quad , \\ -\frac{d^2\psi^{(1)}}{dx^2} - \left[ \frac{\alpha}{2}\delta(x) - \frac{\alpha}{2}\delta(x - a) - \frac{\alpha}{2}\delta(x + a) - \frac{\alpha^2}{4} \right] \psi^{(1)}(x) &= E^{(1)}\psi(x) \quad . \end{aligned}$$

Este es exactamente el problema espectral solucionado en la Sección A.7 restringido a la línea recta  $(-\alpha, \alpha, -\alpha)$  en el espacio de parámetros. En este caso los potenciales son pares y las amplitudes de transmisión y de reflexión son iguales para scattering “diestro” y “zurdo”:

$$\sigma_1^r(k) = \sigma_1^l(k) = \sigma_1(k) \quad , \quad \rho_1^r(k) = \rho_1^l(k) = \rho_1(k) \quad ; \quad E^{(1)} = k^2 + \frac{\alpha^2}{4} \quad ,$$

$$\sigma_1(k) = \frac{ik + \frac{\alpha}{2}}{ik - \frac{\alpha}{2}} \sigma_0(k) \quad , \quad \rho_1(k) = \frac{-ik - \frac{\alpha}{2}}{ik - \frac{\alpha}{2}} \rho_0(k) \quad ; \quad E^{(0)} = k^2 + \frac{\alpha^2}{4} \quad ,$$

donde las identidades en la segunda fila entre las amplitudes en diferentes sectores provienen de la supersimetría. De las amplitudes de scattering derivadas en la Sección A.7 podemos fácilmente obtener las matrices  $S$  asociadas a los Hamiltonianos  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  :

$$S_0 = \left( \begin{array}{cc} \frac{8ik^3}{(2ik+\alpha)[4k^2+(-1+e^{2iak})^2\alpha^2]} & \frac{-2\alpha[(4k^2+\alpha^2)\cos 2ka-\alpha^2-2k^2]}{(2ik+\alpha)[4k^2+(-1+e^{2iak})^2\alpha^2]} \\ \frac{-2\alpha[(4k^2+\alpha^2)\cos 2ka-\alpha^2-2k^2]}{(2ik+\alpha)[4k^2+(-1+e^{2iak})^2\alpha^2]} & \frac{8ik^3}{(2ik+\alpha)[4k^2+(-1+e^{2iak})^2\alpha^2]} \end{array} \right)$$

$$S_1 = \left( \begin{array}{cc} \frac{8ik^3}{(2ik-\alpha)[4k^2+(-1+e^{2iak})^2\alpha^2]} & \frac{2\alpha[(4k^2+\alpha^2)\cos 2ka-\alpha^2-2k^2]}{(2ik-\alpha)[4k^2+(-1+e^{2iak})^2\alpha^2]} \\ \frac{2\alpha[(4k^2+\alpha^2)\cos 2ka-\alpha^2-2k^2]}{(2ik-\alpha)[4k^2+(-1+e^{2iak})^2\alpha^2]} & \frac{8ik^3}{(2ik-\alpha)[4k^2+(-1+e^{2iak})^2\alpha^2]} \end{array} \right)$$

Los polos de las amplitudes de transmisión  $\sigma_0(k)$  y  $\sigma_1(k)$  sobre el semieje imaginario positivo  $k = i\kappa$ ,  $\kappa > 0$ , en el plano complejo  $k$  dan los estados ligados respectivamente de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$ . Las raíces de las ecuaciones trascendentes

$$(2\kappa - \alpha) (2\kappa + \alpha - \alpha e^{-2a\kappa}) (2\kappa - \alpha + \alpha e^{-2a\kappa}) = 0 \quad . \quad (2.11)$$

$$(2\kappa + \alpha) (2\kappa + \alpha - \alpha e^{-2a\kappa}) (2\kappa - \alpha + \alpha e^{-2a\kappa}) = 0 \quad . \quad (2.12)$$

caracterizan las energías de los estados ligados y las funciones de onda de ambos  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$ . Hay una o dos soluciones de (2.11) para  $\kappa$  positiva dependiendo de los valores relativos de  $\alpha$  y  $a$ . El estado fundamental del sistema supersimétrico es el estado ligado de menor energía de  $\hat{H}_0$ :

1.  $\kappa_0 = \frac{\alpha}{2}$  es un polo de  $\sigma_0(k)$  correspondiente al valor propio  $E_0^{(0)} = 0$  de  $\hat{H}_0$ . Debido a que  $\kappa > 0$  la función de onda de estado ligado  $\psi_0(x)$  es normalizable y la supersimetría permanece intacta.
2. El segundo factor en el lado izquierdo de (2.11) es nulo solo para  $\kappa = 0$  dando lugar a un estado no físico.
3. El tercer factor, no obstante, presenta una raíz positiva  $\kappa_1 > \kappa_0 > 0$  de (2.11) si y solo si la distancia entre las deltas es tal que  $a > \frac{1}{\alpha}$ . Hay un segundo estado ligado de  $\hat{H}_0$  de energía  $E_1^{(0)} = \frac{\alpha^2}{4} - \kappa_1^2 > 0 = E_0^{(0)}$ .

El espectro puntual de  $\hat{H}_1$  es ahora fácil de establecer. Hay un estado antiligado de energía cero ya que la raíz  $\kappa_a = -\frac{\alpha}{2}$  da lugar a una función de onda no normalizable. La otra raíz, positiva,

de (2.12) existe con tal que  $a > \frac{1}{\alpha}$ . Esta raíz es exactamente la misma que la segunda raíz positiva de (2.11). Por tanto, puede haber solo un estado ligado positivo en el espectro puntual de  $\hat{H}_1$ , vinculado con el segundo estado ligado de  $\hat{H}_0$ ,  $E_1^{(1)} = E_1^{(0)} > 0$ , como es requerido por la supersimetría. La función de onda normalizada del estado ligado de menor energía de  $\hat{H}_0$

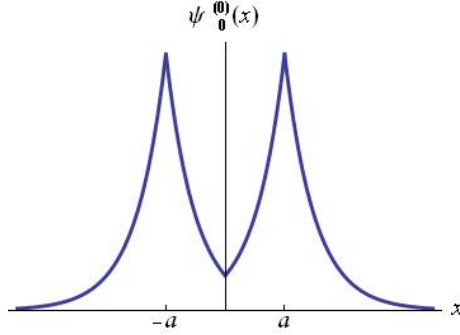


Figura 2.4: Función de onda del estado fundamental: el modo cero de  $\hat{H}_0$ , graficado para  $a = 1$  y  $\alpha = 2$

es de la forma:

$$\psi_0^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{4e^{-\alpha a} - 2e^{-2\alpha a}}} \begin{cases} e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x < -a \\ e^{-\alpha a} e^{\frac{\alpha}{2}|x|} & , \quad -a < x < a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x > a \end{cases}$$

Una gráfica de  $\psi_0^{(0)}(x)$  es mostrada en la Figura 2.4 para los valores  $a = 1$  y  $\alpha = 2$ .

### 2.7.2. El potencial con cinco deltas de Dirac alternadamente atractivas y repulsivas

La elección  $\mathbb{N} = 2$  en la ecuación (2.10) lleva al superpotencial:

$$W(x, \alpha, a) = \frac{\alpha}{2}|x| - \frac{\alpha}{2}|x - a| - \frac{\alpha}{2}|x + a| + \frac{\alpha}{2}|x - 2a| + \frac{\alpha}{2}|x + 2a| ,$$

tal que los Hamiltonianos escalares son:

$$\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\alpha}{2}\delta(x) - \frac{\alpha}{2}\delta(x - a) - \frac{\alpha}{2}\delta(x + a) + \frac{\alpha}{2}\delta(x - 2a) + \frac{\alpha}{2}\delta(x + 2a) + \frac{\alpha^2}{4} ,$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) = -\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\alpha}{2}\delta(x) + \frac{\alpha}{2}\delta(x - a) + \frac{\alpha}{2}\delta(x + a) - \frac{\alpha}{2}\delta(x - 2a) - \frac{\alpha}{2}\delta(x + 2a) + \frac{\alpha^2}{4} .$$

De nuevo los potenciales  $V_0(x)$  y  $V_1(x)$  son pares bajo la reflexión  $x \rightarrow -x$  y las amplitudes de scattering “diestro” y “zurdo” en cada sector son iguales. Dado que la identificación de

los estados ligados solo requiere el conocimiento de los polos de las amplitudes de transmisión solo damos estos datos.

$$\sigma_0(k) = \frac{32ik^5}{\Delta_0(k, \alpha, a)} \quad , \quad \sigma_1(k) = \frac{32ik^5}{\Delta_1(k, \alpha, a)}$$

$$\Delta_0(k, \alpha, a) = (2ik - \alpha) \left[ 4\alpha^2 k^2 (-1 + e^{2iak})^2 (2 + e^{4iak}) + \alpha^4 (-1 + e^{2iak})^4 + 16k^4 \right]$$

$$\Delta_1(k, \alpha, a) = (2ik + \alpha) \left[ 4\alpha^2 k^2 (-1 + e^{2iak})^2 (2 + e^{4iak}) + \alpha^4 (-1 + e^{2iak})^4 + 16k^4 \right]$$

$$E^{(0)} = k^2 + \frac{\alpha^2}{4} \quad , \quad E^{(1)} = k^2 + \frac{\alpha^2}{4} .$$

Recordemos también que la supersimetría relaciona las amplitudes de transmisión fermiónicas y bosónicas en la forma:

$$\sigma_1(k) = \frac{2ik + \alpha}{2ik - \alpha} \sigma_0(k) .$$

Los polos puramente imaginarios de  $\sigma_0(k)$  y  $\sigma_1(k)$  con  $k = i\kappa$ ,  $\kappa > 0$  dan los estados ligados respectivamente de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$ , i.e., las raíces de las ecuaciones trascendentes:

$$(2\kappa + \alpha) \left\{ 2\alpha\kappa e^{-2a\kappa} (e^{-2a\kappa} - 1) - \left[ 4\kappa^2 - \alpha^2 (e^{-2\kappa a} - 1)^2 \right] \right\} \times \\ \times \left\{ 2\alpha\kappa e^{-2a\kappa} (e^{-2a\kappa} - 1) + \left[ 4\kappa^2 - \alpha^2 (e^{-2\kappa a} - 1)^2 \right] \right\} = 0 , \quad (2.13)$$

$$(2\kappa - \alpha) \left\{ 2\alpha\kappa e^{-2a\kappa} (e^{-2a\kappa} - 1) - \left[ 4\kappa^2 - \alpha^2 (e^{-2\kappa a} - 1)^2 \right] \right\} \times \\ \times \left\{ 2\alpha\kappa e^{-2a\kappa} (e^{-2a\kappa} - 1) + \left[ 4\kappa^2 - \alpha^2 (e^{-2\kappa a} - 1)^2 \right] \right\} = 0 . \quad (2.14)$$

Hay tres tipos diferentes de raíces en la ecuación (2.14).

1. El estado fundamental de  $\hat{H}_1$  es el polo  $\kappa_0 = \frac{\alpha}{2}$  de  $\sigma_1(k)$  at  $k = i\kappa$ . La energía de este estado ligado es  $E_0^{(1)} = 0$ . El modo cero aparece en el caso de cinco deltas en el sector fermiónico.
2. La siguiente raíz surge como la solución de la ecuación trascendente que aniquila el tercer factor en (2.14).

$$4\kappa^2 - \alpha^2 (e^{-2\kappa a} - 1)^2 = -2\alpha\kappa e^{-2\kappa a} (e^{-2\kappa a} - 1) . \quad (2.15)$$

Definiendo las funciones

$$y(\kappa) = 4\kappa^2 - \alpha^2 (e^{-2\kappa a} - 1)^2 \quad , \quad z(\kappa) = -2\alpha\kappa e^{-2\kappa a} (e^{-2\kappa a} - 1)$$

tenemos que  $y(0) = z(0) = 0$  y  $y'(0) = z'(0) = 0$ , i.e., las curvas  $y(\kappa)$  y  $z(\kappa)$  se intersectan en  $\kappa = 0$ , punto en el que comparten la misma tangente. Las segundas derivadas en el origen son respectivamente:  $y''(0) = 8(1 - \alpha^2 a^2)$ ,  $z''(0) = 8\alpha a$ . Por tanto, las segundas derivadas en el origen son idénticas si y solo si :

$$\alpha^2 a^2 + \alpha a - 1 = 0 \quad \equiv \quad a_{c_1} = \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} \frac{1}{\alpha} .$$

Hay una segunda intersección de las curvas  $y(\kappa)$  y  $z(\kappa)$  tal que  $\kappa > 0$  si se satisface la desigualdad  $a > \frac{-1 + \sqrt{5}}{2\alpha} = \frac{1}{\varphi\alpha} = a_{c_1}$  donde  $\varphi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}$  es la proporción aurea. La razón es que esta desigualdad garantiza que la segunda derivada en el origen de la función en el lado izquierdo de la ecuación (2.15) es más negativa que la segunda derivada en el origen de la función en el lado derecho de la misma ecuación. De este modo se asegura que hay una intersección de las dos curvas en el punto  $\kappa_1$  tal que  $\kappa_0 > \kappa_1 > 0$  y hay un estado ligado de  $\hat{H}_1$  con energía  $E_1^{(1)} = \frac{\alpha^2}{4} - \kappa_1^2 > 0$  si  $a_{c_1} = \frac{1}{\varphi\alpha} < a$ .

3. Una posible tercer raíz aniquilando el segundo factor en (2.14) es solución de la ecuación trascendente:

$$4\kappa^2 - \alpha^2 (e^{-2\kappa a} - 1)^2 = 2\alpha\kappa e^{-2\kappa a} (e^{-2\kappa a} - 1) . \quad (2.16)$$

Observe que solo el signo en lado derecho de la ecuación difiere de la ecuación previa, uno simplemente cambia  $z(\kappa)$  por  $-z(\kappa)$  y  $z''(\kappa)$  por  $-z''(\kappa)$ . La desigualdad entre las segundas derivadas en el origen involucra directamente la proporción aurea. Hay una solución  $\kappa_2$  positiva de (2.16) tal que  $\kappa_1 > \kappa_2 > 0$  solo si  $a > \frac{1 + \sqrt{5}}{2\alpha} = \frac{\varphi}{\alpha} = a_{c_2}$ . Hay un tercer estado ligado de  $\hat{H}_1$  con energía  $E_2^{(1)} = \frac{\alpha^2}{4} - \kappa_2^2 > E_1^{(1)} > 0$  si  $a_{c_2} = \frac{\varphi}{\alpha} < a$ .

En resumen, hay siempre un estado fundamental (modo cero) de  $\hat{H}_1$ . Además, en el sector fermiónico hay un estado ligado (positivo) más si  $\frac{1}{\varphi\alpha} < a < \frac{\varphi}{\alpha}$  y dos mas cuando  $\frac{\varphi}{\alpha} < a$ .

En el sector bosónico las cosas son muy similares. Excepto el modo cero que es un estado antiligado ( $\kappa_a = -\frac{\alpha}{2}$ ) los otros estados ligados (positivos) existen en las mismas circunstancias y con las mismas energías que en el sector fermiónico como es requerido por supersimetría:  $E_j^{(1)} = E_j^{(0)} > 0$ ,  $j = 1, 2$ . Recordemos que los potenciales SUSY  $V_1(x)$  y  $V_0(x)$  están relacionados a través del intercambio  $\alpha \rightarrow -\alpha$ .

La gráfica del estado fundamental de  $\hat{H}_1$  es mostrada en la Figura 2.5 para  $a = 1$  y  $\alpha = 2$ . La expresión analítica  $\forall a, \alpha$  de la función de onda del modo cero normalizada es:

$$\psi_0^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{6e^{-2\alpha a} - 4e^{-3\alpha a}}} \begin{cases} e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x < -2a \\ e^{-2\alpha a} e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad -2a < x < -a \\ e^{-\alpha a} e^{-\frac{\alpha}{2}|x|} & , \quad -a < x < a \\ e^{-2\alpha a} e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad a < x < 2a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x > 2a \end{cases}$$

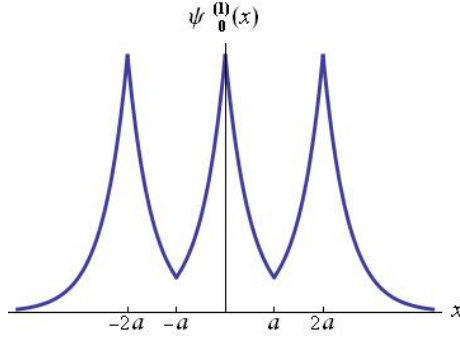


Figura 2.5: Función de onda del modo cero de  $\hat{H}_1$  para  $a = 1$  y  $\alpha = 2$

### 2.7.3. El potencial con siete deltas de Dirac alternadamente atractivas y repulsivas

El caso  $\mathbb{N} = 3$  de la ecuación (2.10) da el superpotencial

$$W(x, a) = \frac{\alpha}{2} \sum_{n=-3}^3 (-1)^n |x - na|$$

y por tanto, los Hamiltonianos escalares:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= -\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\alpha}{2} \sum_{n=-3}^3 (-1)^n \delta(x - na) + \frac{\alpha^2}{4}, \\ \hat{H}_1 &= -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) = -\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\alpha}{2} \sum_{n=-3}^3 (-1)^n \delta(x - na) + \frac{\alpha^2}{4}. \end{aligned}$$

Las amplitudes de scattering “diestro” y “zurdo” son idénticas así que solo escribimos las amplitudes de transmisión que se obtienen luego de imponer las condiciones de empalme de la delta de Dirac en los siete puntos  $x = na$ ,  $n = -3, -2, \dots, 2, 3$ . Debido a que la supersimetría vincula la amplitud de transmisión del sector fermiónico con la del sector bosónico

$$\sigma_1(k) = \frac{2ik + \alpha}{2ik - \alpha} \sigma_0(k)$$

solo escribimos la amplitud de transmisión fermiónica:

$$\sigma_1(k) = \frac{128ik^7}{\Delta_1(k, \alpha, a)}, \quad E^{(1)} = k^2 + \frac{\alpha^2}{4}$$

$$\Delta_1(k, \alpha, a) = (2ik - \alpha) \left[ 16\alpha^2 k^4 (-1 + e^{2iak})^2 (2e^{4iak} + e^{8iak} + 3) + \alpha^6 (-1 + e^{2iak})^6 + 4\alpha^4 k^2 (-1 + e^{2iak})^4 (3 + 2e^{4iak}) + 64k^6 \right].$$

Los polos de  $\sigma_0(k)$  y  $\sigma_1(k)$  sobre el semieje imaginario positivo del plano complejo  $k$  dan respectivamente los valores propios de estado ligado de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$ . Así, el momento imaginario discreto  $k_n = i\kappa_n = i\sqrt{\frac{\alpha^2}{4} - E_n^{(0)}} = i\sqrt{\frac{\alpha^2}{4} - E_n^{(1)}}$  da las energías de estado ligado degeneradas de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  si  $\kappa_n$  son respectivamente las raíces positivas de las ecuaciones espectrales :

■ Espectro discreto de  $\hat{H}_0$ :

$$(2\kappa - \alpha) \left[ e^{6a\kappa} (2\kappa - \alpha)(\alpha + 2\kappa)^2 - 4\alpha\kappa^2 + \alpha e^{4a\kappa} (2\kappa + \alpha)(3\alpha - 2\kappa) + \alpha^3 + \alpha e^{2a\kappa} (-3\alpha^2 + 4\kappa^2 - 2\alpha\kappa) \right] \times \\ \times \left[ e^{6a\kappa} (\alpha - 2\kappa)^2 (\alpha + 2\kappa) + 4\alpha\kappa^2 + \alpha e^{4a\kappa} (2\kappa - \alpha)(3\alpha + 2\kappa) - \alpha^3 + \alpha e^{2a\kappa} (3\alpha^2 - 4\kappa^2 - 2\alpha\kappa) \right] = 0. \quad (2.17)$$

■ Espectro discreto de  $\hat{H}_1$ :

$$(2\kappa + \alpha) \left[ e^{6a\kappa} (\alpha - 2\kappa)^2 (\alpha + 2\kappa) + 4\alpha\kappa^2 + \alpha e^{4a\kappa} (2\kappa - \alpha)(3\alpha + 2\kappa) - \alpha^3 + \alpha e^{2a\kappa} (3\alpha^2 - 4\kappa^2 - 2\alpha\kappa) \right] \times \\ \times \left[ e^{6a\kappa} (2\kappa - \alpha)(\alpha + 2\kappa)^2 - 4\alpha\kappa^2 + \alpha e^{4a\kappa} (\alpha + 2\kappa)(3\alpha - 2\kappa) + \alpha^3 + \alpha e^{2a\kappa} (-3\alpha^2 + 4\kappa^2 - 2\alpha\kappa) \right] = 0. \quad (2.18)$$

Vemos que el segundo y tercer factores en (2.18) se intercambian con el tercer y segundo factores en (2.17). Esto es debido al hecho que  $\hat{H}_1$  se obtiene por la simple sustitución  $\alpha \rightarrow -\alpha$  en  $\hat{H}_0$ . Por tanto, estos Hamiltonianos comparten todos los valores propios positivos así que son (cuasi) isoenergéticos. La posible excepción es el estado fundamental (energía cero) como se vera a continuación.

Las raíces de (2.17) aniquilan uno de los tres factores:

1. Factor Uno = 0: la raíz  $2\kappa_0 - \alpha = 0$  es el primer polo de  $\sigma_0(k)$ :  $\kappa_0 = \frac{\alpha}{2}$  que es el estado fundamental de  $\hat{H}_0$  (recordar la convención  $\alpha > 0$ ) de energía cero:  $E_0^{(0)} = \frac{\alpha^2}{4} - \kappa_0^2 = 0$ .
2. Factor Dos = 0: mayores raíces positivas aniquilan el segundo factor en (2.17), i.e., son las soluciones de la ecuación trascendente:

$$4\alpha\kappa^2 - \alpha^3 = e^{2a\kappa} \left[ e^{4a\kappa} (2\kappa - \alpha)(\alpha + 2\kappa)^2 + \alpha e^{2a\kappa} (3\alpha - 2\kappa)(\alpha + 2\kappa) + \alpha (-3\alpha^2 + 4\kappa^2 - 2\alpha\kappa) \right]$$

sobre el semieje  $\kappa$  positivo. Esto nos lleva a estudiar las intersecciones de la parábola definida por  $f(\kappa) = 4\alpha\kappa^2 - \alpha^3$  con la curva trascendente

$$g(\kappa) = e^{2a\kappa} \left[ e^{4a\kappa} (2\kappa - \alpha)(\alpha + 2\kappa)^2 + \alpha e^{2a\kappa} (3\alpha - 2\kappa)(\alpha + 2\kappa) + \alpha (-3\alpha^2 + 4\kappa^2 - 2\alpha\kappa) \right]$$

sobre el semieje  $\kappa$  positivo. Sucede que estas curvas se intersectan en el origen donde sus primeras y segundas derivadas también coinciden:

$$f(0) = g(0) = -\alpha^2 \quad , \quad f'(0) = g'(0) = 0 \quad , \quad f''(0) = g''(0) = 8\alpha \quad .$$

Por tanto, es el valor relativo de las terceras derivadas  $g'''(0) = -48(\alpha^3 a^3 + \alpha^2 - 2\alpha a - 1)$  y  $f'''(0) = 0$  lo que determina el número de intersecciones con  $\kappa > 0$  entre  $g(\kappa)$  y  $f(\kappa)$ . En efecto, hay valores críticos de  $a$  como funciones de  $\alpha$  donde el número de intersecciones varia. Esto sucede siempre que las terceras derivadas de  $f$  y  $g$  en el origen sean iguales, i.e., en las raíces positivas de la ecuación cubica:

$$a^3 + \frac{1}{\alpha}a^2 - \frac{2}{\alpha^2}a - \frac{1}{\alpha^3} = 0 \quad .$$

En la notación estándar de [53] uno fácilmente encuentra  $q^3 + r^2 = -0.453704 \frac{1}{\alpha^6} < 0$  con  $q = -\frac{7}{9} \frac{1}{\alpha^2}$  y  $r = \frac{7}{54} \frac{1}{\alpha^3}$ . La aplicación de las fórmulas de Cardano-Vieta muestra que solo una de las tres raíces reales diferentes es positiva:  $a_{c_2} = 1.24698 \cdot \frac{1}{\alpha}$ . Si  $a > a_{c_2}$  hay una intersección de  $f(\kappa)$  y  $g(\kappa)$  at  $\kappa_2 > 0$ . Este valor del momento imaginario corresponde a un estado ligado de energía:  $E_2^{(0)} = \frac{\alpha^2}{4} - \kappa_2^2$ . Si  $a < a_{c_2}$ , no obstante, el segundo factor no es nulo sobre el semieje  $\kappa > 0$ .

3. Factor Tres = 0: el tercer factor en la ecuación (2.17) es nulo si la siguiente ecuación trascendente

$$4\alpha k^2 - \alpha^3 = -e^{2ak} \left[ e^{4ak} (\alpha + 2k)(\alpha - 2k)^2 + \alpha e^{2ak} (2k - \alpha)(3\alpha + 2k) + \alpha (3\alpha^2 - 4k^2 - 2\alpha k) \right]$$

se satisface. Por tanto, otras raíces de la ecuación (2.17) surgen y mas estados ligados aparecen en las intersecciones con  $\kappa > 0$  entre la parábola  $f(\kappa) = 4\alpha\kappa^2 - \alpha^3$  y la curva trascendente:

$$h(\kappa) = -e^{2ak} \left[ e^{4ak} (\alpha + 2k)(\alpha - 2k)^2 + \alpha e^{2ak} (2k - \alpha)(3\alpha + 2k) + \alpha (3\alpha^2 - 4k^2 - 2\alpha k) \right] \quad .$$

Nótese que, además de un signo menos global,  $h(\kappa)$  se obtiene de  $f(\kappa)$  simplemente cambiando el signo de  $\alpha$ . El análisis es idéntico pero ahora los valores críticos de  $a$  donde el número de intersecciones cambia son las raíces positivas de la ecuación cubica:

$$a^3 - \frac{1}{\alpha}a^2 - \frac{2}{\alpha^2}a + \frac{1}{\alpha^3} = 0 \quad ,$$

que determina el valor de los parámetros para los cuales las terceras derivadas de  $f(\kappa)$  y  $h(\kappa)$  en el origen son iguales. En este caso tenemos  $q = -\frac{7}{9} \frac{1}{\alpha^2}$  y  $r = -\frac{7}{54} \frac{1}{\alpha^3}$  encontramos dos valores críticos positivos de  $a$ :  $a_{c_1} = 0.405042 \cdot \frac{1}{\alpha}$  y  $a_{c_3} = 1.80194 \cdot \frac{1}{\alpha}$ . Hay tres



regímenes: (1) no existen intersecciones positivas entre  $f(\kappa)$  y  $h(\kappa)$  si  $a < a_{c_1}$ . (2) Hay una intersección en  $\kappa = \kappa_1 > 0$  en el rango  $a_{c_1} < a < a_{c_3}$ . Un estado ligado de energía  $E_1^{(0)} = \frac{\alpha^2}{4} - \kappa_1^2$  aparece. (3) Si  $a$  es lo suficientemente grande,  $a_{c_3} < a$ , surge un segundo estado ligado correspondiente a la segunda intersección en  $\kappa = \kappa_3 > 0$  con energía  $E_3^{(0)} = \frac{\alpha^2}{4} - \kappa_3^2$ .

En resumen, hay dos regímenes extremos dependiendo de ciertas proporciones entre el ancho del pozo y la intensidad del pozo. En todo el rango  $0 < a < a_{c_1}$  solo el estado fundamental de energía cero existe como estado ligado. La supersimetría es siempre manifiesta. **For wide enough wells as compared to their strength** tal que  $a > a_{c_3}$  hay un máximo de cuatro estados ligados de energías:  $E_0^{(0)} < E_1^{(0)} < E_2^{(0)} < E_3^{(0)}$ . Estos estados ligados corresponden a las raíces  $\kappa_0, \kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$  de (2.17) identificadas anteriormente. Regímenes intermedios evidentes son: (1)  $a_{c_1} < a < a_{c_2}$ : dos estados ligados. (2)  $a_{c_2} < a < a_{c_3}$ : tres estados ligados.

El espectro discreto de  $\hat{H}_1$ , identificado a partir de la ecuación espectral (2.18), comprende casi los mismos valores propios. La única diferencia se presenta en el estado debido a la aniquilación del primer factor. El polo puramente imaginario  $\kappa_0 = -\frac{\alpha}{2}$  de  $\sigma_1(k)$  se encuentra sobre el semieje imaginario negativo del plano complejo  $k$ , correspondiendo así a un estado antiligado (no admisible). El segundo y tercer factores en (2.18) son respectivamente el tercer y segundo factores en (2.17). Las raíces críticas son por tanto las mismas y el espectro discreto de  $\hat{H}_1$  comprende 0,1 ó 2 estados ligados en los regímenes discutidos anteriormente. Por otra parte, es claro que  $E_1^{(1)} = E_1^{(0)}$ ,  $E_2^{(1)} = E_2^{(0)}$  y  $E_3^{(1)} = E_3^{(0)}$  ya que las intersecciones que dan los estados ligados son caracterizadas por las mismas ecuaciones excepto el modo cero con lo cual los estados ligados positivos de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  están vinculados por supersimetría. Para finalizar

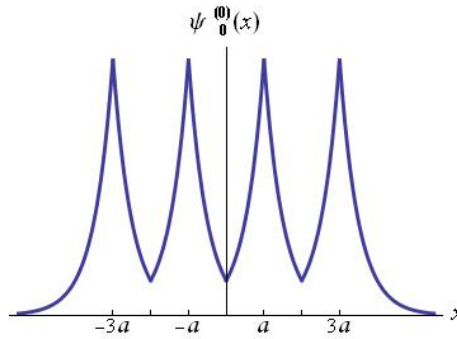


Figura 2.6: Estado fundamental de energía cero de  $\hat{H}_0$  para  $a = 1$  y  $\alpha = 2$

esta subsección escribimos la función de onda del estado fundamental de  $\hat{H}_0$

$$\psi_0^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{8e^{-3\alpha a} - 6e^{-4\alpha a}}} \begin{cases} e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x < -3a \\ e^{-3\alpha a} e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad -3a < x < -2a \\ e^{-\alpha a} e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad -2a < x < -a \\ e^{-2\alpha a} e^{-\frac{\alpha}{2}|x|} & , \quad -a < x < a \\ e^{-\alpha a} e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad a < x < 2a \\ e^{-3\alpha a} e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad 2a < x < 3a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x > 3a \end{cases}$$

y presentamos una gráfica de esta función de onda en la Figura 2.6 para los valores  $a = 1$  y  $\alpha = 2$ .

Siendo claro el patrón general no discutiremos más casos con  $N$  finito.

## 2.8. El potencial con infinitas deltas de Dirac alternadamente atractivas y repulsivas

Consideramos ahora el límite  $N = \infty$  del modelo supersimétrico estudiado en la Sección previa. A partir del superpotencial ( $\alpha > 0$ )

$$W(x) = \frac{\alpha}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n |x - na| \quad , \quad n \in \mathbb{Z}$$

los siguientes Hamiltonianos escalares son derivados:

$$\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + W'^2 + W'' = -\frac{d^2}{dx^2} + \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \delta(x - na) + \frac{\alpha^2}{4} \quad ,$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + W'^2 - W'' = -\frac{d^2}{dx^2} - \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \delta(x - na) + \frac{\alpha^2}{4} \quad .$$

Con el fin de resolver las ecuaciones espectrales para los operadores de Schrödinger  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$

$$-\frac{d^2\psi^{(0)}}{dx^2} + V_0(x)\psi^{(0)}(x) = -\frac{d^2\psi^{(0)}}{dx^2} + \left[ \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \delta(x - na) + \frac{\alpha^2}{4} \right] \psi^{(0)}(x) = E^{(0)}\psi^{(0)}(x) \quad ,$$

$$-\frac{d^2\psi^{(1)}}{dx^2} + V_1(x)\psi^{(1)}(x) = -\frac{d^2\psi^{(1)}}{dx^2} + \left[ -\alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \delta(x - na) + \frac{\alpha^2}{4} \right] \psi^{(1)}(x) = E^{(1)}\psi^{(1)}(x) \quad .$$

enfaticamos que  $V_0$  y  $V_1$  son potenciales periódicos cuyo período es  $2a$ :  $V_0(x + 2a) = V_0(x)$  y  $V_1(x + 2a) = V_1(x)$ . De acuerdo con el teorema de Bloch las funciones de onda son cuasi-periódicas

$$\psi_q(x + 2a) = e^{i2aq}\psi_q(x) \quad , \quad -\frac{\pi}{2a} \leq q \leq \frac{\pi}{2a}$$

el cuasi-momento  $q$  caracterizando una función de onda particular dentro de cada banda (permitida). Esto es suficiente para buscar la solución en una celda primitiva, e.g., en el intervalo  $[2na, 2(n + 1)a]$ , donde la solución puede ser escrita como la combinación lineal

$$\psi_{qn}(x) = \begin{cases} A_n e^{ik(x-2na)} + B_n e^{-ik(x-2na)} & , \quad 2na < x < (2n + 1)a \\ C_n e^{ik(x-2na)} + D_n e^{-ik(x-2na)} & , \quad (2n + 1)a < x < 2(n + 1)a \end{cases}$$

siempre que:  $k^2 = E - \frac{\alpha^2}{4}$ . El teorema de Bloch relaciona las amplitudes entre cualquier par de celdas primitivas, e.g.,  $[0, 2a]$  y  $[2na, 2(n + 1)a]$ , de tal forma que,  $\forall n$  y  $k \neq q$ ,

$$A_n = e^{2iqna} A_0 \quad , \quad B_n = e^{2iqna} B_0 . \quad (2.19)$$

En la celda primitiva  $[0, 2a]$  escribimos pues  $\psi_{q0}(x)$  como

$$\psi_{q0}(x) = \begin{cases} A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx} & , \quad 0 < x < a \\ C_0 e^{ikx} + D_0 e^{-ikx} & , \quad a < x < 2a \end{cases} \quad (2.20)$$

mientras que  $\psi_{q1}(x)$  en el siguiente intervalo  $[2a, 4a]$  es:

$$\psi_{q1}(x) = e^{2iqa} \begin{cases} A_0 e^{ik(x-2a)} + B_0 e^{-ik(x-2a)} & , \quad 2a < x < 3a \\ C_0 e^{ik(x-2a)} + D_0 e^{-ik(x-2a)} & , \quad 3a < x < 4a \end{cases} \quad (2.21)$$

Las condiciones de empalme en  $x = a$ ,  $\psi_{q0}(a_{<}) = \psi_{q0}(a_{>})$  y  $\psi'_{q0}(a_{>}) - \psi'_{q0}(a_{<}) = \pm\alpha\psi_{q0}(a)$  inducen las dos ecuaciones algebraicas:

$$-e^{iak} A_0 - e^{-iak} B_0 + e^{iak} C_0 + e^{-iak} D_0 = 0 , \quad (2.22)$$

$$(\mp\alpha e^{iak} - ike^{iak}) A_0 + (ike^{-iak} \mp \alpha e^{-iak}) B_0 + ike^{iak} C_0 - ike^{-iak} D_0 = 0 , \quad (2.23)$$

donde el signo  $-$  responde al potencial  $V_0$  y el signo  $+$  surge en el potencial  $V_1$ . Dos ecuaciones algebraicas más se obtienen de las ecuaciones de empalme en los puntos de frontera entre las dos celdas primitivas:  $\psi_{q0}(2a_{<}) = \psi_{q1}(2a_{>})$  y  $\psi'_{q1}(2a_{>}) - \psi'_{q0}(2a_{<}) = \mp\alpha\psi_{q0}(2a)$ . Con los signos  $\pm$  describiendo respectivamente los potenciales  $V_0$  y  $V_1$  estas ecuaciones son:

$$-e^{2iaq} A_0 - e^{2iaq} B_0 + e^{2iak} C_0 + e^{-2iak} D_0 = 0 , \quad (2.24)$$

$$ike^{2iaq} A_0 - ike^{2iaq} B_0 + (\pm\alpha e^{2iak} - ike^{2iak}) C_0 + (\pm\alpha e^{-2iak} + ike^{-2iak}) D_0 = 0 . \quad (2.25)$$

Estas cuatro ecuaciones (2.22)-(2.25) forman un sistema homogéneo de cuatro ecuaciones algebraicas. Las cuatro incógnitas  $A_0$ ,  $B_0$ ,  $C_0$  y  $D_0$  dan lugar a soluciones no triviales de (2.20)-(2.21) si el determinante de la matriz  $4 \times 4$  de este sistema algebraico es cero, i.e., si la ecuación espectral

$$\cos 2qa = \frac{(4k^2 + \alpha^2) \cos 2ka - \alpha^2}{4k^2}, \quad (2.26)$$

es satisfecha. OBSERVACION: el determinante del sistema y por lo tanto la ecuación (2.26) es invariante bajo el intercambio de  $\alpha \rightarrow -\alpha$  y  $k \rightarrow -k$ . Los puntos de intersección de las curvas  $f(q) = \cos 2qa$  y  $g(k) = \frac{(4k^2 + \alpha^2) \cos 2ka - \alpha^2}{4k^2}$  determinan los valores correlacionados de los cuasimomentos  $q$  y el momento de onda  $k$  a partir de los cuales las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger para ambos  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  pueden ser construidas mediante la extensión de las soluciones en una celda primitiva a cualquier otra celda primitiva usando las fórmulas (2.19). En la Figura 2.7 se muestra una gráfica de la relación de dispersión (2.26). Cuatro bandas de energía son representadas con el borde inferior de las bandas dado por las intersecciones de la curva  $g(k)$  con la línea recta  $y(q) = -1$  mientras que el borde superior de las bandas está dado por las intersecciones de  $g(k)$  con  $y(q) = 1$ . Debido a la invariancia con respecto

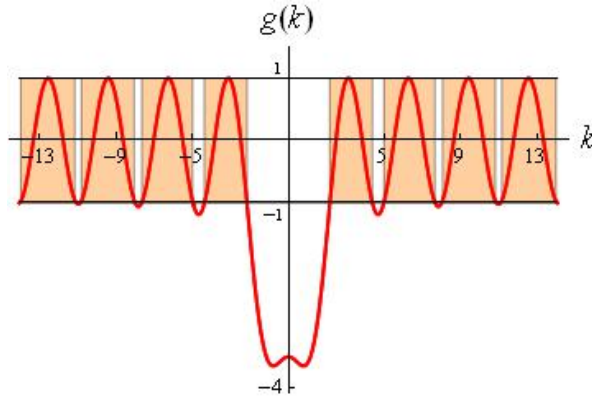


Figura 2.7: Gráficas de la curva  $g(k) = \frac{1}{4k^2}(4k^2 + \alpha^2) \cos 2ka - \alpha^2$  para  $a = 1$  y  $\alpha = 3$  entre  $k = 0$  y  $k = 14$  (rojo). Las zonas donde  $g(k)$  varía entre  $-1$  y  $1$ , el mínimo y el máximo de  $f(q)$  (**brown**). Las cuatro bandas mas bajas son mostradas. Los bordes inferiores de las bandas corresponden a  $q = \pm \frac{\pi}{2a} + 2\pi n$ , los bordes superiores de las bandas surgen para los cuasimomentos  $q = 2\pi n$ .

al signo de  $\alpha$  estas bandas están vinculadas por supersimetría y pertenecen tanto al espectro de  $\hat{H}_0$  como al espectro de  $\hat{H}_1$ . Se advierte también que debido a la invariancia con respecto al signo de  $k$  todas estas funciones de onda están doblemente degeneradas y corresponden a ondas propagantes moviéndose ya sea de izquierda a derecha o viceversa.

En las bandas permitidas la solución del sistema homogéneo (2.22)-(2.25) nos da las amplitudes  $B_0(k)$ ,  $C_0(k)$  y  $D_0(k)$  como funciones de  $A_0(k)$  para cualquier par  $(q, k)$  que satisfaga

(2.26). Reemplazando estas soluciones en (2.20) obtenemos las funciones de onda propagantes en la celda primitiva  $[0, 2a]$  en la forma:

$$\psi_{q0}^{(0)}(x) = A_0(q, k) \begin{cases} e^{ikx} + \frac{(2k-i\alpha)e^{4iak} - 2ke^{2ia(k+q)} + i\alpha e^{2iak}}{i\alpha(e^{2iak} - 1) - 2k + 2ke^{2ia(k+q)}} e^{-ikx} & , \quad 0 < x < a \\ \frac{(2k-i\alpha)e^{2ia(k+q)} + i\alpha e^{2iaq} - 2k}{i\alpha(e^{2iak} - 1) - 2k + 2ke^{2ia(k+q)}} e^{ikx} + \frac{i\alpha e^{2ia(2k+q)} - (2k+i\alpha)e^{2ia(k+q)} + 2ke^{4iak}}{i\alpha(e^{2iak} - 1) - 2k + 2ke^{2ia(k+q)}} e^{-ikx} & , \quad a < x < 2a \end{cases}$$

$$\psi_{q0}^{(1)}(x) = A_0(q, k) \begin{cases} e^{ikx} + \frac{(2k+i\alpha)e^{4iak} - 2ke^{2ia(k+q)} - i\alpha e^{2iak}}{-i\alpha(e^{2iak} - 1) - 2k + 2ke^{2ia(k+q)}} e^{-ikx} & , \quad 0 < x < a \\ \frac{(2k+i\alpha)e^{2ia(k+q)} - i\alpha e^{2iaq} - 2k}{-i\alpha(e^{2iak} - 1) - 2k + 2ke^{2ia(k+q)}} e^{ikx} + \frac{-i\alpha e^{2ia(2k+q)} - (2k-i\alpha)e^{2ia(k+q)} + 2ke^{4iak}}{-i\alpha(e^{2iak} - 1) - 2k + 2ke^{2ia(k+q)}} e^{-ikx} & , \quad a < x < 2a \end{cases}$$

respectivamente en los sectores bosónico y fermiónico.

Pueden existir también bandas de estados no propagantes si la relación de dispersión (2.26) admite soluciones con momentos puramente imaginarios:  $k = i\kappa$ ,  $\kappa \in \mathbb{R}$ . En el lado derecho de esta ecuación trascendente las funciones trigonométricas se sustituyen por hiperbólicas:

$$\cos 2qa = \frac{(4\kappa^2 - \alpha^2) \cosh 2\kappa a + \alpha^2}{4\kappa^2}. \quad (2.27)$$

Debido a que el módulo de  $g(\kappa) = \frac{(4\kappa^2 - \alpha^2) \cosh 2\kappa a + \alpha^2}{4\kappa^2}$  es mayor que uno para un valor relativamente bajo de  $\kappa$  (dependiendo de los valores de  $a$  y  $\alpha$ ) hay como máximo una banda de esta clase de estados. Como es requerido por supersimetría la energía de cualquier estado en esta banda es tal que  $0 \leq E_q < \frac{\alpha^2}{4}$ , este ultimo valor siendo el umbral para las bandas propagantes. Las funciones de onda no propagantes bosónica y fermiónica en la banda con energía menor que  $\frac{\alpha^2}{4}$  tienen la siguiente forma en la celda primitiva  $[0, 2a]$ :

$$\psi_{q0}^{(0)}(x) = A_0(q, \kappa) \begin{cases} e^{-\kappa x} + \frac{(2\kappa - \alpha)e^{-4a\kappa} - 2\kappa e^{2a(iq - \kappa)} + \alpha e^{-2a\kappa}}{\alpha(e^{-2a\kappa} - 1) - 2\kappa + 2\kappa e^{2a(iq - \kappa)}} e^{\kappa x} & , \quad 0 < x < a \\ \frac{(2\kappa - \alpha)e^{2a(iq - \kappa)} + \alpha e^{2iaq} - 2\kappa}{\alpha(e^{-2a\kappa} - 1) - 2\kappa + 2\kappa e^{2a(iq - \kappa)}} e^{-\kappa x} + \frac{\alpha e^{2a(iq - 2\kappa)} - (2\kappa + \alpha)e^{2a(iq - \kappa)} + 2\kappa e^{-4a\kappa}}{\alpha(e^{-2a\kappa} - 1) - 2\kappa + 2\kappa e^{2a(iq - \kappa)}} e^{\kappa x} & , \quad a < x < 2a \end{cases} \quad (2.28)$$

$$\psi_{q0}^{(1)}(x) = A_0(q, \kappa) \begin{cases} e^{-\kappa x} - \frac{(2\kappa + \alpha)e^{-4a\kappa} - 2\kappa e^{2a(iq - \kappa)} - \alpha e^{-2a\kappa}}{\alpha(e^{-2a\kappa} - 1) + 2\kappa - 2\kappa e^{2a(iq - \kappa)}} e^{\kappa x} & , \quad 0 < x < a \\ -\frac{(2\kappa + \alpha)e^{2a(iq - \kappa)} - \alpha e^{2iaq} - 2\kappa}{\alpha(e^{-2a\kappa} - 1) + 2\kappa - 2\kappa e^{2a(iq - \kappa)}} e^{-\kappa x} + \frac{\alpha e^{2a(iq - 2\kappa)} + (2\kappa - \alpha)e^{2a(iq - \kappa)} - 2\kappa e^{-4a\kappa}}{\alpha(e^{-2a\kappa} - 1) + 2\kappa - 2\kappa e^{2a(iq - \kappa)}} e^{\kappa x} & , \quad a < x < 2a \end{cases} \quad (2.29)$$

Surge la pregunta: ¿cuales son los valores relativos de  $a$  y  $\alpha$  para los cuales un elemento determinado de la banda no propagante caracterizado por el cuasi-momento  $q$  es una verdadera solución de la ecuación de Schrödinger? Para responder esta pregunta reescribimos la ecuación (2.27) en la forma

$$\frac{4\kappa^2}{\alpha^2} = \frac{1 - \cosh 2\kappa a}{\cos 2qa - \cosh 2\kappa a}. \quad (2.30)$$

Observamos que (2.30), como (2.27), es también invariante bajo  $\alpha \rightarrow -\alpha$  y  $\kappa \rightarrow -\kappa$ . Esto significa que hay una banda no propagante bosónica y una fermiónica vinculadas por supersimetría. Las funciones de onda obtenidas a partir de (2.28) y (2.29) mediante la aplicación del teorema de Bloch son, no obstante, no degeneradas. A pesar de la invariancia  $\kappa \rightarrow -\kappa$  de la ecuación espectral solo soluciones con  $\kappa > 0$  son físicamente admisibles. A continuación damos una lista de las relaciones críticas entre  $a$  y  $\alpha$  para la existencia de esta clase de soluciones.

- Soluciones de borde de banda con la menor energía,  $q = 0 \Rightarrow \cos 2qa = 1$ . En este caso (2.30) reduce a:

$$\frac{4\kappa^2}{\alpha^2} = 1 .$$

Hay dos puntos de intersección,  $\kappa = \pm \frac{\alpha}{2}$ , entre la parábola de la izquierda y la línea recta de la derecha para cualquier valor de  $a$  y  $\alpha$ . Es conveniente discutir estas dos soluciones por separado

1.  $\kappa = +\frac{\alpha}{2}$ . Este es el estado de energía (cero) mas bajo (siendo el borde inferior en la banda no propagante). Haciendo  $A_0(0, \frac{\alpha}{2}) = 1$  la función de onda del estado fundamental en la celda primitiva es:

$$\psi_{00}^{(1)}(x) = \begin{cases} e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad 0 < x < a \\ e^{\frac{\alpha}{2}x - a\alpha} & , \quad a < x < 2a \end{cases} \quad (2.31)$$

En consecuencia, graficamos la función de onda del estado fundamental (de  $\hat{H}_1$ ) aplicando a (2.31) el teorema de Bloch, como se muestra en la Figura 2.7. Concluimos que la función de onda correspondiente es un modo cero aceptable del Hamiltoniano  $\hat{H}_1$  ya que estamos asumiendo que  $\alpha$  es positiva. Nótese que  $V_1(x)$  presenta pozos en  $x = na$  si  $n$  es impar pero barreras para  $n$  par.  $\psi_{0n}^{(1)}(x)$  exhibe picos en  $x = na$  para ambos  $n$  par e impar pero los picos son máximos en los pozos y mínimos en las paredes como debe ser. Este estado se comporta mal, no obstante, con respecto a  $V_0(x)$  debido a que los máximos están en las paredes y los mínimos en los pozos, una situación físicamente absurda que debe ser rechazada debido a la naturaleza de este estado como el análogo a un estado antiligado surgiendo en el espectro de  $\hat{H}_0$ .

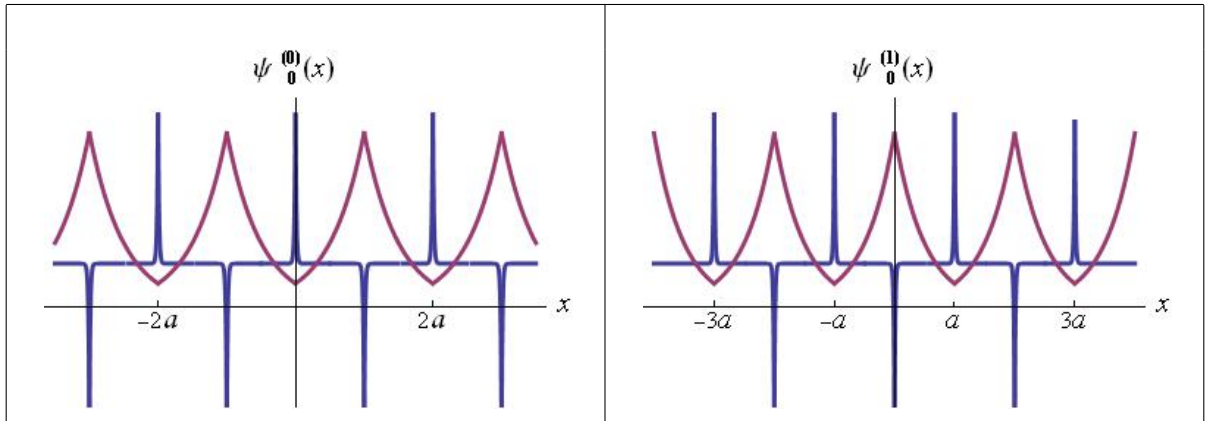
2.  $\kappa = -\frac{\alpha}{2}$ . Este estado también está en el borde inferior de la banda de funciones de onda no propagantes. Este es exactamente el estado fundamental (modo cero) de  $\hat{H}_0$ . En efecto, esta función de onda en la celda primitiva es:

$$\psi_{00}^{(0)}(x) = \begin{cases} e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad 0 < x < a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}x + a\alpha} & , \quad a < x < 2a \end{cases} \quad (2.32)$$

La extensión Bloch se comporta apropiadamente en los pozos (presenta máximos) y en las barreras (presenta mínimos) de  $V_0(x)$ . Se ha trazado la gráfica de la función de onda del estado fundamental (de  $\hat{H}_0$ ) aplicando a (2.32) el teorema de Bloch, como es mostrado en la Figura 2.7. Por tanto, la unión de todas las funciones de onda  $\psi_{0n}^{(0)}(x)$  de cada celda es el estado fundamental de energía cero de  $\hat{H}_0$  **Therefore, the union of all the  $\psi_{0n}^{(0)}(x)$  cell wave functions is the ground state of zero energy of  $\hat{H}_0$ .** This state, however, does belong to the spectrum of  $\hat{H}_1$  because it is physically nonsense just like  $\psi_0^{(1)}(x)$  with respect to  $\hat{H}_0$ .

En resumen, en el sistema mecano cuántico supersimétrico siempre hay estado fundamental no propagante (uno bosónico y uno fermiónico), una situación paradójica típica de potenciales periódicos supersimétricos.

Tabla 2.7: Gráficas de  $\psi_0^{(0)}(x)$ ,  $V_0(x)$  (izquierda) y  $\psi_0^{(1)}(x)$ ,  $V_1(x)$  (derecha) para  $a = 1$  y  $\alpha = 2$



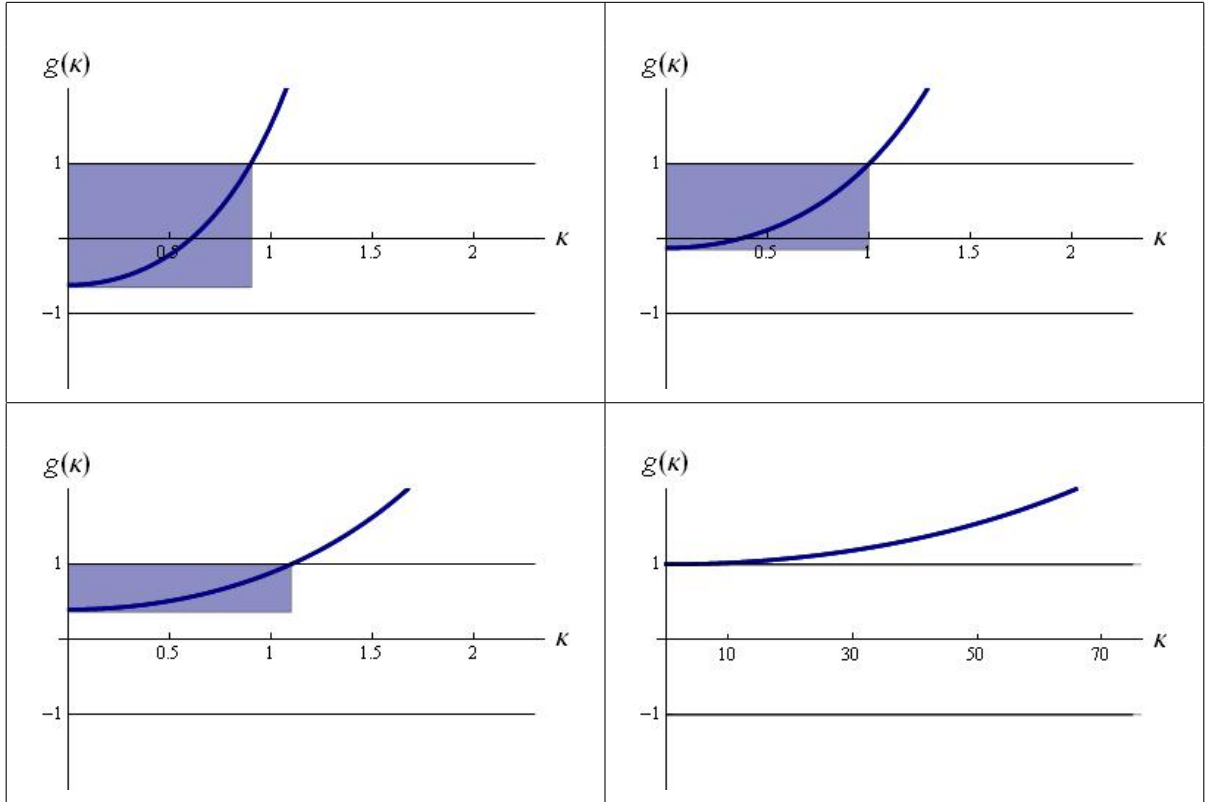
- Para valores del cuasimomento en el borde superior de la banda, esto es,  $q = \pm \frac{\pi}{2a} \Rightarrow \cos 2qa = -1$  la ecuación (2.30) reduce a la forma:

$$\frac{4\kappa^2}{\alpha^2} = \frac{\cosh 2\kappa a - 1}{\cosh 2\kappa a + 1}. \quad (2.33)$$

Ahora bien, (2.33) es una ecuación trascendente tal que las soluciones solo pueden identificarse por métodos gráficos como la intersección de la parábola  $f(\kappa) = \frac{4\kappa^2}{\alpha^2}$  y la curva trascendente  $h(\kappa) = \frac{\cosh 2\kappa a - 1}{\cosh 2\kappa a + 1}$ . Ambas curvas pasan por el origen,  $f(0) = 0 = h(0)$ , el cual es un punto crítico de  $f$  y  $h$  también,  $f'(0) = 0 = h'(0)$ . Además de  $\kappa = 0$ , la cual es una solución que no corresponde a un estado físico aceptable siendo trivial la función de onda, el número de intersecciones depende de la segunda derivada de estas funciones en  $\kappa = 0$ :  $f''(0) = \frac{8}{\alpha^2}$ ,  $h''(0) = 2a^2$ . Hay un ancho crítico  $a_c$ , dependiendo de la intensidad

$\alpha$ ,  $a_c = \frac{2}{\alpha}$  para el cual la curvatura de las dos curvas coincide. Si  $a > a_c$  hay una solución positiva  $\kappa_+ > 0$  y una solución negativa  $\kappa_- < 0$  de (2.33). En este caso toda la banda no propagante pertenece al espectro del Hamiltoniano supersimétrico, la intersección positiva a  $\hat{H}_1$  y la intersección negativa a  $\hat{H}_0$ . Cuando  $a < a_c$  no hay intersecciones entre  $g(\kappa)$  y la línea recta  $y = -1$  y el borde superior de la banda desaparece del espectro de  $\hat{H}_1$  y  $\hat{H}_0$ .

Tabla 2.8: Gráficas de  $g(\kappa) = \frac{1}{4\kappa^2} [(4\kappa^2 - \alpha^2) \cosh 2\kappa a + \alpha^2]$ . En la fila superior las curvas  $g(\kappa)$  son trazadas para  $a = 1$ ,  $\alpha = 1.8$  (izquierda) y  $a = 0.75$ ,  $\alpha = 2$  (derecha). En la fila inferior las curvas  $g(\kappa)$  son representadas para  $a = 0.5$ ,  $\alpha = 2.2$  (izquierda) y el caso cuasi-límite  $a = 0.01$ ,  $\alpha = 1$  (derecha).



- La búsqueda de soluciones de (2.30) dentro de la banda no propagante,  $-1 < \cos 2qa < 1$ , también requiere la identificación de un ancho crítico. La segunda derivada de la curva  $h(q, \kappa)$  en el lado derecho de esta ecuación es igual a la curvatura de  $f(\kappa)$  en el punto  $\kappa = 0$  si y solo si:

$$4 \sin^2 a_c q = \alpha^2 a_c^2 .$$



Dada una solución de esta ecuación trascendente, si  $a > a_c$  hay dos intersecciones, una positiva y otra negativa, de las curvas en los dos lados de (2.30), lo que nos dice que la correspondiente función de onda pertenece al espectro del par supersimétrico de Hamiltonianos. Si  $a < a_c$  no hay soluciones no nulas y el estado no propagante desaparece del espectro SUSY.

En la Figura 2.8 se ha representado la banda no propagante para  $\alpha = 2$ ,  $\alpha = 3$ ,  $\alpha = 4$  y  $a = 1$ . Nótese que los dos últimos casos están en el régimen  $a > a_c$  incluso el borde superior de la banda. En el primer caso  $a_c = 1$ , no obstante, el borde superior de la banda se encuentra precisamente en la frontera.

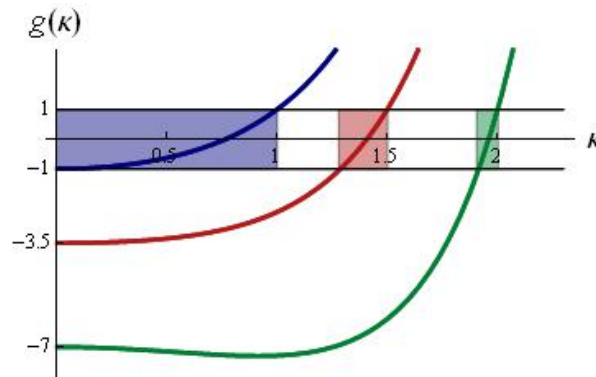


Figura 2.8: Gráficas de  $g(\kappa) = \frac{1}{4\kappa^2} [(4\kappa^2 - \alpha^2) \cosh 2\kappa a + \alpha^2]$  para  $a = 1$  y  $\alpha = 2$  (azul),  $\alpha = 3$  (rojo) y  $\alpha = 4$  (verde). Los estados tales que  $-1 \leq g(\kappa) \leq 1$  forman respectivamente las bandas azul, roja y verde.

### 2.8.1. Estados fundamentales: el problema de la ruptura espontánea de supersimetría

El análisis de la posible ruptura espontánea de simetría en este sistema requiere centrarse en las características de los estados fundamentales. Si hay estados fundamentales de energía cero tales que estos estados son singletes del álgebra SUSY la supersimetría es manifiesta. Los estados fundamentales singletes tienen necesariamente la forma  $\psi_0^{(0)}(x) = e^{W(x,\alpha,a)}$  o  $\psi_0^{(1)}(x) = e^{-W(x,\alpha,a)}$  respectivamente en los sectores bosónico y fermiónico. En la Tabla 2.9 estas funciones de onda son explícitamente escritas para los casos  $N = 1$ ,  $N = 2$ ,  $N = 3$  y  $N = 4$ . En el sistema con  $N = 1$  la función de onda  $\psi_0^{(0)}(x) = e^{W(x,\alpha,a)}$  corresponde a un estado normalizable, mientras que  $\psi^{(1)}(x) \notin L^2(\mathbb{R})$ . Así, hay un estado fundamental singlete bosónico aceptable y la supersimetría es manifiesta. Nótese que el valor de la función de onda en los pozos  $V_0$ , esto es,  $\psi_0^{(0)}(\pm a) = e^{-\frac{\alpha}{2}a}$ , es más grande que el valor en la barrera:  $\psi_0^{(0)}(0) = e^{-\alpha a}$ .

Es claro que la función de onda decrece exponencialmente a cero en  $\pm\infty$ :  $\psi_0^{(0)}(\pm\infty) = 0$ . La razón por la que seleccionamos  $\psi_0^{(0)}(x) = e^{W(x,\alpha,a)}$  es también clara. No es solo que el cambio  $W$  por  $-W$  hace la función de onda no normalizable sino que habría un máximo en la barrera y mínimos en los pozos contrariamente a las expectativas físicas. En el siguiente caso,  $N = 2$ , tenemos:  $\psi_0^{(1)}(0) = \psi_0^{(1)}(\pm 2a) = e^{-\alpha a}$ ,  $\psi_0^{(1)}(\pm a) = e^{-\frac{3}{2}\alpha a}$  y  $\psi_0^{(1)}(\pm\infty) = 0$ . La situación es idéntica al anterior problema  $N = 1$  pero el estado fundamental normalizable  $\psi_0^{(1)}(x)$  pertenece al sector fermiónico y  $\psi_0^{(0)}(x) \notin L^2(\mathbb{R})$ . Se verifica fácilmente que también hay un estado fundamental bosónico singlete  $\psi_0^{(0)}(x)$  for  $N = 3$ , mientras que para  $N = 4$  el estado fundamental es único pero fermiónico:  $\psi^{(1)}(x)$ . El patrón general es claro para  $N$  finito: La supersimetría es siempre manifiesta pero el índice de Witten “regularizado” es:

$$I_W^N = (-1)^{N+1} + 1 .$$

Este es por tanto dos para  $N$  impar y cero para  $N$  par. Recordamos que el sumando 1 proviene de la diferencia entre las densidades espectrales en el espectro continuo. Con el fin de investigar lo que sucede en el límite periódico  $N \rightarrow +\infty$  escribimos en una forma compacta el superpotencial para  $N$  finito en lo que va a ser la celda primitiva del potencial periódico:

$$W(x, \alpha, a) = \begin{cases} \frac{\alpha}{2} [x + 2a \sum_{n=1}^N (-1)^n n] = \frac{\alpha}{2} (x + \frac{a}{2} [(-1)^N (1 + 2N) - 1]) & , \quad 0 < x < a \\ -\frac{\alpha}{2} [x - 2a \sum_{n=2}^N (-1)^n n] = -\frac{\alpha}{2} (x - \frac{a}{2} [(-1)^N (1 + 2N) + 3]) & , \quad a < x < 2a \end{cases} \quad (2.34)$$

Para tomar el límite  $N \rightarrow \infty$  en (2.34) requerimos considerar la función  $\eta$  de Dirichlet definida como la serie alternada

$$\eta(s) = - \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{n^s} = -(1 - 2^{1-s})\zeta(s) \quad , \quad s \in \mathbb{C}$$

en el punto especial:  $s = -1$ . Aunque  $\eta(s)$  es estrictamente convergente solo para  $\text{Re } s > 0$  la relación anterior con la función zeta de Riemann  $\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}$  nos permite asignar vía continuación analítica el valor  $\eta(-1) = -\frac{1}{4}$  a partir de la famosa suma de todos los enteros positivos :  $\zeta(-1) = -\frac{1}{12}$ .

Por tanto, obtenemos:

$$W(x, \alpha, a) = \begin{cases} \frac{\alpha}{2} (x - \frac{1}{2}a) & , \quad 0 < x < a \\ -\frac{\alpha}{2} (x - \frac{3}{2}a) & , \quad a < x < 2a \end{cases}$$

Ni  $\psi_0^{(0)}(x) = e^{W(x,\alpha,a)}$  ni  $\psi_0^{(1)}(x) = e^{-W(x,\alpha,a)}$  son normalizables. Sin embargo, ambas funciones de onda son estados fundamentales aceptables. En potenciales periódicos las funciones de onda no son normalizables y por otra parte, el comportamiento de  $\psi_0^{(0)}$  y  $\psi_0^{(1)}$  describe apropiadamente la física del problema:

$$\psi_0^{(0)}(\pm 2na) = e^{-\frac{\alpha}{4}a} \quad , \quad \psi_0^{(1)}(\pm 2na) = e^{\frac{\alpha}{4}a}$$

Tabla 2.9: Superpotencial y estados fundamentales para  $N = 1$ ,  $N = 2$ ,  $N = 3$  y  $N = 4$ .

$W(x, \alpha, a)$	$\psi_0^{(0)}(x) = e^{W(x, \alpha, a)}$	$\psi_0^{(0)}(x) = e^{-W(x, \alpha, a)}$
$\frac{\alpha}{2} ( x  -  x - a  -  x + a )$	$\begin{cases} e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x < -a \\ e^{\frac{\alpha}{2}( x -2a)} & , \quad -a < x < a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x > a \end{cases}$	$\begin{cases} e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x < -a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}( x -2a)} & , \quad -a < x < a \\ e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x > a \end{cases}$
$\frac{\alpha}{2} \left( \begin{array}{l}  x  -  x - a  -  x + a  + \\ +  x - 2a  +  x + 2a  \end{array} \right)$	$\begin{cases} e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x < -2a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x+4a)} & , \quad -2a < x < -a \\ e^{\frac{\alpha}{2}( x +2a)} & , \quad -a < x < a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x-4a)} & , \quad a < x < 2a \\ e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x > 2a \end{cases}$	$\begin{cases} e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x < -2a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x+4a)} & , \quad -2a < x < -a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}( x +2a)} & , \quad -a < x < a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x-4a)} & , \quad a < x < 2a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x > 2a \end{cases}$
$\frac{\alpha}{2} \left( \begin{array}{l}  x  -  x - a  -  x + a  + \\ +  x - 2a  +  x + 2a  - \\ -  x - 3a  -  x + 3a  \end{array} \right)$	$\begin{cases} e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x < -3a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x+6a)} & , \quad -3a < x < -2a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x-2a)} & , \quad -2a < x < -a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}( x +4a)} & , \quad -a < x < a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x+2a)} & , \quad a < x < 2a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x-6a)} & , \quad 2a < x < 3a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x > 3a \end{cases}$	$\begin{cases} e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x < -3a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x+6a)} & , \quad -3a < x < -2a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x-2a)} & , \quad -2a < x < -a \\ e^{\frac{\alpha}{2}( x +4a)} & , \quad -a < x < a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x+2a)} & , \quad a < x < 2a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x-6a)} & , \quad 2a < x < 3a \\ e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x > 3a \end{cases}$
$\frac{\alpha}{2} \left( \begin{array}{l}  x  -  x - a  -  x + a  + \\ +  x - 2a  +  x + 2a  - \\ -  x - 3a  -  x + 3a  + \\ +  x - 4a  +  x + 4a  \end{array} \right)$	$\begin{cases} e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x < -4a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x+8a)} & , \quad -4a < x < -3a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x-2a)} & , \quad -3a < x < -2a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x+6a)} & , \quad -2a < x < -a \\ e^{\frac{\alpha}{2}( x +4a)} & , \quad -a < x < a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x-6a)} & , \quad a < x < 2a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x+2a)} & , \quad 2a < x < 3a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x-8a)} & , \quad 3a < x < 4a \\ e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x > 4a \end{cases}$	$\begin{cases} e^{\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x < -4a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x+8a)} & , \quad -4a < x < -3a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x-2a)} & , \quad -3a < x < -2a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x+6a)} & , \quad -2a < x < -a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}( x +4a)} & , \quad -a < x < a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x-6a)} & , \quad a < x < 2a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}(x+2a)} & , \quad 2a < x < 3a \\ e^{\frac{\alpha}{2}(x-8a)} & , \quad 3a < x < 4a \\ e^{-\frac{\alpha}{2}x} & , \quad x > 4a \end{cases}$

$$\psi_0^{(0)}(\pm(2n+1)a) = e^{\frac{\alpha}{4}a} \quad , \quad \psi_0^{(1)}(\pm(2n+1)a) = e^{-\frac{\alpha}{4}a}$$

En el límite  $N = \infty$  hay dos estados fundamentales, uno bosónico y uno fermiónico. La condición de Bloch  $\psi_q(x+2a) = e^{2iqa}\psi_q(x)$  es satisfecha por ambos

$$\psi_0^{(0)}(x) = \exp\left[\frac{\alpha}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n |x - na|\right] \quad \text{y} \quad \psi_0^{(1)}(x) = \exp\left[-\frac{\alpha}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n |x - na|\right]$$

debido a que  $\psi_0^{(0)}(2a) = \psi_0^{(0)}(0)$  y  $\psi_0^{(1)}(2a) = \psi_0^{(1)}(0)$ . Nótese que

$$\begin{aligned} \psi_0^{(0)}(2a) &= \exp\left[\frac{\alpha}{2}a \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n |2-n|\right] \quad , \quad \psi_0^{(0)}(0) = \exp\left[\frac{\alpha}{2}a \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n |-n|\right] \\ \psi_0^{(1)}(2a) &= \exp\left[-\frac{\alpha}{2}a \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n |2-n|\right] \quad , \quad \psi_0^{(1)}(0) = \exp\left[-\frac{\alpha}{2}a \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n |-n|\right] \end{aligned}$$

mientras que las dos series en los exponentes son idénticas:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n |2-n| = 2 \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^j j = 2\eta(-1) = -\frac{1}{2} \quad , \quad j = |2-n|$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n |-n| = 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n n = 2\eta(-1) = -\frac{1}{2} \quad .$$

La supersimetría es por tanto manifiesta pero la contribución al índice de Witten de los modos de energía cero es cero.



# Capítulo 3

## Dinámica del sistema de Lieb-Liniger-Yang de $N$ partículas bosónicas en una línea

### 3.1. Dinámica cuántica del sistema de Lieb-Liniger-Yang de $N$ partículas bosónicas sobre una línea

Consideremos un sistema de  $N$  bosones que se mueven en la recta real y su dinámica es determinada por el Hamiltoniano [2, 4, 54]

$$\hat{H}_N = - \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + 2c \sum_{1 \leq j < k \leq N} \delta(x_j - x_k),$$

donde  $x_j$  representa la coordenada de la  $j$ -ésima partícula.

Las interacciones entre las partículas se asumen así de rango ultracorto -interacciones de contacto- y se modelan en términos de la función delta de Dirac:  $2c\delta(x_j - x_k)$ . El parámetro real  $c$  caracteriza la intensidad de la interacción, el caso  $c = 0$  corresponde a partículas libres,  $c < 0$  indica atracción entre dos partículas cuando chocan mientras que  $c > 0$  obedece a choques en que existe repulsión. Las partículas pueden pasar unas a través de las otras excepto en el límite impenetrable  $c = \infty$ .

### 3.1.1. $N = 2$ bosones: el sistema de Lieb-Liniger-Yang de dos partículas

Abordamos en primer lugar el problema de dos partículas bosónicas sin espín que se mueven en la recta real y cuya dinámica está gobernada por el Hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + 2c\delta(x_1 - x_2) \quad , \quad c \in \mathbb{R} .$$

El espacio de configuración, que en este caso es el espacio de dos puntos en la recta real,  $(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ , está dividido en dos regiones de acuerdo con las desigualdades

$$R_{12} : x_1 < x_2 \quad , \quad R_{21} : x_2 < x_1$$

según que el primer punto esté a la izquierda o a la derecha del segundo. La frontera entre ambas regiones es la recta  $x_1 = x_2$ .

#### 3.1.1.1. Estados de colisión

Dado que la función  $\delta(x_1 - x_2)$  se anula en las regiones  $R_{12}$  y  $R_{21}$ , el problema de valores propios

$$\left[ -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + 2c\delta(x_1 - x_2) \right] \psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2) \quad , \quad (3.1)$$

es equivalente a la ecuación de Helmholtz para partículas libres

$$\left[ -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right] \psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2) \quad , \quad x_1 \neq x_2 .$$

en estas zonas. En la frontera  $x_1 = x_2$ , sin embargo, el potencial es infinito y han de empalmarse las soluciones en las dos regiones de acuerdo con este hecho. Es claro que la interacción de contacto modelada por el potencial delta de Dirac en (3.1) demanda la continuidad de la función de onda y la discontinuidad de su derivada en la frontera entre las regiones  $R_{12}$  y  $R_{21}$  en orden a que el problema espectral esté globalmente definido:

$$\psi|_{x_1-x_2 \rightarrow 0^+} = \psi|_{x_1-x_2 \rightarrow 0^-} \quad , \quad (3.2a)$$

$$\left( \frac{\partial \psi}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \right) \Big|_{x_1-x_2 \rightarrow 0^+} - \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \right) \Big|_{x_1-x_2 \rightarrow 0^-} = 2c \psi|_{x_1=x_2} \quad . \quad (3.2b)$$

Mediante la función escalón de Heaviside  $\theta(x)$  dada por (2.2) escribimos la función de onda general para el sistema de dos partículas en la forma:

$$\psi(x_1, x_2) = \theta(x_2 - x_1)\psi_{12}(x_1, x_2) + \theta(x_1 - x_2)\psi_{21}(x_1, x_2) \quad ,$$

donde  $\psi_{12}(x_1, x_2)$  y  $\psi_{21}(x_1, x_2)$  son respectivamente las funciones de onda en las regiones  $R_{12}$  y  $R_{21}$ .

La estadística bosónica requiere que la función de onda sea simétrica respecto del intercambio de las dos partículas:  $\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1)$ . Las funciones de onda en las regiones  $R_{12}$  y  $R_{21}$  han por tanto de ser construidas de acuerdo con el ansatz de Bethe para bosones:

$$\begin{aligned}\psi_{12}(x_1, x_2) &= \alpha_{12}e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + \alpha_{21}e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} , \\ \psi_{21}(x_1, x_2) &= \alpha_{12}e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} + \alpha_{21}e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} ,\end{aligned}$$

pues entonces  $\psi_{12}(x_2, x_1) = \psi_{21}(x_1, x_2)$  y  $\psi_{21}(x_2, x_1) = \psi_{12}(x_1, x_2)$  lo que garantiza la estadística bosónica. Nótese que las funciones de onda  $\psi_{12}(x_1, x_2)$  y  $\psi_{21}(x_1, x_2)$  son combinaciones lineales simetrizadas de ondas planas caracterizadas por los números de onda  $k_1$  y  $k_2$ . La naturaleza de estos estados es pues clara: en las regiones  $R_{12}$  y  $R_{21}$  las dos partículas se mueven libremente. El cruce de la frontera  $x_1 = x_2$  ocurre cuando las dos partículas entran en colisión; en el sistema de Yang colisiones entre partículas sólo acontecen cuando se entrecruzan en un punto. Los coeficientes de la combinación lineal  $\alpha_{12}$  y  $\alpha_{21}$  han de determinarse de modo que se satisfagan las condiciones de acoplamiento (3.2) en el punto de contacto.

Cuando la interacción depende sólo de la coordenada relativa  $x = x_2 - x_1$  es conveniente formular un problema de dos cuerpos en términos de esta coordenada y la coordenada  $X = \frac{1}{2}(x_1 + x_2)$  toda vez que el centro de masas se comporta como una partícula libre. Este es exactamente el caso en el sistema de Yang de dos bosones donde el Hamiltoniano se escribe en las nuevas coordenadas en la forma

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - 2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2c\delta(x) .$$

La función de onda del centro de masa es por tanto  $\psi_K(X) = e^{iKX}$  donde  $K = k_1 + k_2$  es el momento total mientras que la energía es simplemente  $E_{\text{CM}} = \frac{K^2}{2}$ . La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que regula la dinámica relativa entre las dos partículas deviene la EDO

$$-\frac{d^2\psi_{\text{Eint}}}{dx^2} + c\delta(x)\psi_{\text{Eint}}(x) = E_{\text{int}}\psi_{\text{Eint}}(x) ,$$

que ha de resolverse junto con las condiciones de acoplamiento en la frontera  $x = 0$

$$\psi_{\text{Eint}}|_{x \rightarrow 0^+} = \psi_{\text{Eint}}|_{x \rightarrow 0^-} , \quad (3.3a)$$

$$\left. \frac{d\psi_{\text{Eint}}}{dx} \right|_{x \rightarrow 0^+} - \left. \frac{d\psi_{\text{Eint}}}{dx} \right|_{x \rightarrow 0^-} = c \psi_{\text{Eint}}|_{x \rightarrow 0^-} . \quad (3.3b)$$

Las funciones  $\psi_{12}$ ,  $\psi_{21}$  y  $\psi$  dictadas por el ansatz de Bethe se escriben en las nuevas coordenadas en la forma:

$$\psi_{12}(x, X) = \left[ \alpha_{12}e^{i\frac{k}{2}x} + \alpha_{21}e^{-i\frac{k}{2}x} \right] e^{iKX} , \quad \psi_{21}(x, X) = \left[ \alpha_{12}e^{-i\frac{k}{2}x} + \alpha_{21}e^{i\frac{k}{2}x} \right] e^{iKX} ,$$



$$\psi(x, X) = \Psi_K(X)\psi_k(x) = e^{iKX} \left[ \alpha_{12} e^{i\frac{k}{2}|x|} + \alpha_{21} e^{-i\frac{k}{2}|x|} \right] , \quad k = k_2 - k_1 ,$$

de modo que la energía de interacción y la total son:  $E_{\text{int}} = \frac{k^2}{2}$  y  $E = E_{\text{CM}} + E_{\text{int}} = k_1^2 + k_2^2$ . Puesto que  $\psi_k(x = 0^+) = \psi_k(x = 0^-) = \alpha_{12} + \alpha_{21}$  y  $\psi'_k(x = 0^+) - \psi'_k(x = 0^-) = ik(\alpha_{12} - \alpha_{21})$  las condiciones de frontera (3.3) son satisfechas si y sólo si

$$\frac{\alpha_{21}}{\alpha_{12}} = \frac{ik - c}{ik + c} = \frac{i(k_2 - k_1) - c}{i(k_2 - k_1) + c} . \quad (3.4)$$

Es claro que el cociente de los coeficientes en (3.4) es un número complejo de módulo unidad de modo que

$$\frac{\alpha_{21}}{\alpha_{12}} = e^{i\theta(k_2 - k_1)} , \quad \theta(k) = \pi - 2\arctan \frac{k}{c} \in (0, 2\pi)$$

donde hemos limitado la función arctan a su determinación principal en el intervalo  $(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ . Es bien sabido que el problema de dos cuerpos con una energía potencial que depende de la coordenada relativa es equivalente al movimiento libre del centro de masas más el problema de una partícula con masa reducida  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  moviéndose en un potencial. En nuestro caso el potencial es una barrera ( $c > 0$ ) o un pozo ( $c < 0$ ) delta de Dirac y la masa reducida de la partícula equivalente es  $\mu = \frac{1}{4}$ . Es natural interpretar así la función de onda relativa como la correspondiente a un problema de scattering por un potencial delta. De la forma de la función en el semieje negativo

$$\psi_k(x) = \alpha_{12} \left[ e^{-i\frac{k}{2}x} + \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{12}} e^{i\frac{k}{2}x} \right] , \quad x < 0$$

se deduce, si asumimos  $k > 0$ , que

$$\frac{\alpha_{21}}{\alpha_{12}} = \sigma(k) + \rho(k) = e^{2i\delta_+(k)} ,$$

donde  $\sigma(k)$  y  $\rho(k)$  son respectivamente las amplitudes de transmisión y reflexión de scattering por un potencial delta mientras que  $\delta_+(k)$  es el defasaje en el canal par. Este análisis, resultante de considerar simultáneamente el scattering normal y zurdo -recuérdese que para un potencial par  $\rho^r = \rho^l$ - lleva a identificar  $\theta(k)$  con un defasaje y relacionarlo con la matriz de scattering  $S$  -en rigor es uno de sus dos autovalores-.

Es conveniente escribir los coeficientes  $\alpha_{12}$  y  $\alpha_{21}$  en la forma

$$\alpha_{12} = e^{\frac{i}{2}\theta(k_1 - k_2)} , \quad \alpha_{21} = e^{\frac{i}{2}\theta(k_2 - k_1)} .$$

Las funciones de onda de Bethe en las regiones  $R_{12}$  y  $R_{21}$  resultan:

$$\psi_{12}(x_1, x_2) = e^{\frac{i}{2}\theta(k_1 - k_2)} \left[ e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2) + i\theta(k_2 - k_1)} \right] \quad (3.5)$$

$$\psi_{21}(x_1, x_2) = e^{\frac{i}{2}\theta(k_1-k_2)} \left[ e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} + e^{i(k_1x_1+k_2x_2)+i\theta(k_2-k_1)} \right] . \quad (3.6)$$

La solución en la región  $R_{12}$ ,  $x_1 < x_2$ , es una combinación lineal de dos términos: (1)  $e^{i(k_1x_1+k_2x_2)}$  en que las dos partículas se propagan como ondas planas de momentos  $k_1$  y  $k_2$  y (2)  $e^{i(k_2x_1+k_1x_2)+i\theta(k_2-k_1)}$  donde ahora los momentos se han intercambiado de acuerdo con la estadística de Bose. Aparece una fase relativa como efecto del intercambio. En la región  $R_{21}$ ,  $x_1 > x_2$ , la solución es similar con los momentos intercambiados y son las condiciones de acoplamiento en la frontera entre ambas regiones las que fijan la fase de intercambio. La reducción del problema al centro de masas permite reinterpretar esta interacción de intercambio como el defasaje inducido por el potencial delta de Dirac  $\delta(x_1 - x_2)$  que opera cuando una partícula sobrepasa a la otra a través de la frontera entre  $R_{12}$  y  $R_{21}$  [55]. En este proceso el momento total  $K = k_1 + k_2$  y la energía  $E = k_1^2 + k_2^2$  son cantidades conservadas así que el scattering es elástico de tal forma que las partículas solo intercambian sus momentos. Si los momentos de partida en  $R_{12}$  son  $k_1$  y  $k_2$ , los momentos de partida en  $R_{21}$  son  $k'_1 = k_2$  y  $k'_2 = k_1$  [55]. Es habitual en la literatura sobre el tema escribir la fase de intercambio como una matriz de scattering

$$\alpha_{21}(k_2, k_1) = S(k_1, k_2)\alpha_{12}(k_1, k_2) \quad , \quad S(k_1, k_2) = \frac{i(k_2 - k_1) - c}{i(k_2 - k_1) + c} = e^{i\theta(k_2-k_1)} ,$$

aunque según va dicho es en realidad el defasaje en el canal par en el scattering por un potencial del problema reducido<sup>1</sup>.

### 3.1.1.2. Estados ligados

Claramente las soluciones descritas anteriormente provienen de las soluciones de scattering del problema reducido a la variable relativa. Cuando  $c < 0$  el problema relativo admite también un estado ligado y a continuación analizaremos las características de las soluciones del problema de dos cuerpos a que da lugar.

El momento relativo imaginario puro  $k = k_2 - k_1 = ic$  aniquila  $\alpha_{12}(k_1, k_2)$  y es por tanto un polo de  $S(k_1, k_2)$  en el plano complejo  $k$  sobre el eje imaginario.  $\alpha_{21} = -2c$  es sin embargo constante y la función de onda relativa deviene

$$\psi_{ic}(x) = -2c e^{\frac{c}{2}|x|}$$

que es el estado ligado del pozo delta si  $c < 0$  ó el antiligado de la barrera delta cuando  $c > 0$ . Sólo el primero es físicamente sensible (normalizable) y curiosamente da lugar a una infinidad

---

<sup>1</sup>Puede decirse que es el determinante de la matriz  $S$  pues para un potencial delta el defasaje en el canal impar es cero de modo que el otro autovalor es 1.

de estados en el problema de dos cuerpos.

La razón es que todos los momentos individuales de la forma

$$k_1 = P + i\frac{|c|}{2} \quad , \quad k_2 = P - i\frac{|c|}{2} \quad , \quad \forall P \in \mathbb{R} \quad (3.7)$$

dan lugar al polo de  $S(k_1, k_2)$  en  $k = -i|c|$ . Dado que el momento del centro de masa es  $K = k_1 + k_2 = 2P$  las funciones de onda correspondientes son:

$$\psi(x, X) = \psi_k(x)\psi_K(X) = -2|c|e^{-\frac{|c|}{2}|x|}e^{2iPX} \quad , \quad c < 0 . \quad (3.8)$$

Ello corresponde a soluciones en que las dos partículas forman un estado ligado, usualmente llamado dímero, mientras que su centro de masas se mueve libremente, es decir, son estados en que hay propagación colectiva de las dos partículas que no entran en colisión. La energía total de un estado de este tipo es

$$E = k_1^2 + k_2^2 = 2P^2 - \frac{|c|^2}{2}$$

y ha de entenderse como la suma de la energía del centro de masas,  $E_{\text{CM}} = 2P^2$  más la energía negativa del estado ligado formado por las dos partículas:  $E_{\text{int}} = -\frac{|c|^2}{2}$ .

En resumen, hay tres tipos de estados propios del Hamiltoniano en el sistema de Yang de dos partículas cuando  $c < 0$ :

Estado fundamental: El estado fundamental es el estado ligado de las dos partículas con movimiento nulo del centro de masas:  $P = 0$ . La energía es

$$E_0 = -\frac{|c|^2}{2} \quad ,$$

el autovalor más bajo del operador de Hamilton. La función de onda correspondiente es

$$\psi_0(x) = -2|c|e^{-\frac{|c|}{2}|x|} \quad , \quad c < 0$$

Estados excitados de tipo dímero: Descritos anteriormente, la única diferencia con el estado fundamental es el movimiento del centro de masas con un momento  $K = 2P \neq 0$  de modo que la energía es

$$E = E_0 + 2P^2 .$$

Estados excitados de tipo monómero: Descritos anteriormente también provienen de las soluciones de scattering del problema reducido. Su energía es siempre positiva <sup>2</sup>

$$E = \frac{K^2}{2} + \frac{k^2}{2} > 0 \quad , \quad k \in \mathbb{R}$$

---

<sup>2</sup>Excluimos aquí un posible estado de scattering justo en el umbral del espectro continuo que tendría energía cero.

Las funciones de onda de este tipo conllevan una amplitud de probabilidad no nula de encontrar las dos partículas infinitamente alejadas entre sí, veáanse las fórmulas (3.5) y (3.6). Ello garantiza la individualidad de cada partícula y justifica el nombre de monómero como denominación de cada ente. Las fases de intercambio reflejan las colisiones de los dos monómeros. Si  $c > 0$  sólo el tercer tipo sobrevive mientras que el estado fundamental proviene del umbral del espectro continuo en el problema relativo de dos cuerpos.

### 3.1.2. $N = 3$ bosones: el sistema de Lieb-Liniger-Yang de tres partículas

El operador Hamiltoniano de un sistema de Yang de tres partículas sin espín es

$$\hat{H} = -\Delta + 2c\delta(x_1 - x_2) + 2c\delta(x_1 - x_3) + 2c\delta(x_2 - x_3), \quad (3.9)$$

donde como antes  $c \in \mathbb{R}$  pero ahora  $\Delta = \sum_{k=1}^{N=3} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}$  es el Laplaciano en  $\mathbb{R}^3$  que es el nuevo espacio de configuración.

Hay en  $\mathbb{R}^3$  seis regiones  $R_Q$  definidas por las ordenaciones (desigualdades)

$$R_{123} : x_1 < x_2 < x_3 \quad , \quad R_{132} : x_1 < x_3 < x_2 \quad , \quad R_{213} : x_2 < x_1 < x_3 \quad (3.10)$$

$$R_{231} : x_2 < x_3 < x_1 \quad , \quad R_{312} : x_3 < x_1 < x_2 \quad , \quad R_{321} : x_3 < x_2 < x_1$$

que corresponden a las seis permutaciones de tres elementos:

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ Q_1 & Q_2 & Q_3 \end{pmatrix}.$$

#### 3.1.2.1. Las funciones de onda de Bethe de tres bosones: estados de colisión

Se ha de resolver el problema espectral definido por el Hamiltoniano (3.9)

$$[-\Delta + 2c\delta(x_1 - x_2) + 2c\delta(x_1 - x_3) + 2c\delta(x_2 - x_3)]\psi(x_1, x_2, x_3) = E\psi(x_1, x_2, x_3).$$

mediante el ansatz de Bethe en cada región  $R_Q$ :

$$\begin{aligned} \psi_{Q_1 Q_2 Q_3}(x_1, x_2, x_3) = & \alpha_{123} e^{i(k_1 x_{Q_1} + k_2 x_{Q_2} + k_3 x_{Q_3})} + \alpha_{213} e^{i(k_2 x_{Q_1} + k_1 x_{Q_2} + k_3 x_{Q_3})} + \\ & + \alpha_{132} e^{i(k_1 x_{Q_1} + k_3 x_{Q_2} + k_2 x_{Q_3})} + \alpha_{321} e^{i(k_3 x_{Q_1} + k_2 x_{Q_2} + k_1 x_{Q_3})} + \\ & + \alpha_{312} e^{i(k_3 x_{Q_1} + k_1 x_{Q_2} + k_2 x_{Q_3})} + \alpha_{231} e^{i(k_2 x_{Q_1} + k_3 x_{Q_2} + k_1 x_{Q_3})}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Las funciones de onda propias del Hamiltoniano han de ser por tanto de la forma

$$\begin{aligned}
\psi(x_1, x_2, x_3) = & \theta(x_2 - x_1)\theta(x_3 - x_2)\psi_{123}(x_1, x_2, x_3) + \theta(x_1 - x_2)\theta(x_3 - x_1)\psi_{213}(x_1, x_2, x_3) + \\
& + \theta(x_3 - x_1)\theta(x_2 - x_3)\psi_{132}(x_1, x_2, x_3) + \theta(x_2 - x_3)\theta(x_1 - x_2)\psi_{321}(x_1, x_2, x_3) + \\
& + \theta(x_1 - x_3)\theta(x_2 - x_1)\psi_{312}(x_1, x_2, x_3) + \theta(x_3 - x_2)\theta(x_1 - x_3)\psi_{231}(x_1, x_2, x_3) ,
\end{aligned} \tag{3.12}$$

mientras que los coeficientes  $\alpha_{P_1 P_2 P_3}(k_1, k_2, k_3)$  han de determinarse de modo que las condiciones de continuidad de la función (3.12) y de discontinuidad de su derivada en las fronteras entre regiones donde dos partículas entran en contacto se satisfagan.

Comencemos para afrontar este análisis por centrarnos en las regiones  $R_{123}$  y  $R_{213}$  tal que la frontera entre ellas es el plano  $x_1 = x_2$ . Estas dos regiones engloban conjuntamente configuraciones de las tres partículas en que la tercera se encuentra siempre a la derecha de las otras dos. El paso de una a la otra ocurre cuando las partículas en  $x_1$  y  $x_2$  intercambian sus posiciones. En esta situación el único término de interacción que contribuye de modo efectivo en el Hamiltoniano (3.9) es  $2c\delta(x_1 - x_2)$ . Es pues necesario estudiar primero el problema espectral reducido a  $R_{123} \cup R_{213}$  donde la partícula en  $x_3$  se encuentra siempre a la derecha de las otras dos que son las únicas susceptibles de colisionar. El Hamiltoniano efectivo es:

$$\left[ -\sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + 2c\delta(x_1 - x_2) \right] \psi(x_1, x_2, x_3) = E\psi(x_1, x_2, x_3) .$$

La solución vía ansatz de Bethe la conocemos pues el problema efectivo consiste en el sistema de Yang de dos partículas resuelto anteriormente y el movimiento independiente libre de la tercera partícula. Así pues las funciones propias de este problema simplificado son de la forma

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = \theta(x_2 - x_1)\psi_{123}(x_1, x_2, x_3) + \theta(x_1 - x_2)\psi_{213}(x_1, x_2, x_3) ,$$

donde las funciones de onda en  $R_{123}$  y  $R_{213}$  respectivamente vienen dadas por:

$$\psi_{123}(x_1, x_2, x_3) = \phi_{123}(x_1, x_2)e^{i(k_3 x_3)} = [\alpha_{123}e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + \alpha_{213}e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}] e^{ik_3 x_3} , \tag{3.13}$$

$$\psi_{213}(x_1, x_2, x_3) = \phi_{213}(x_1, x_2)e^{i(k_3 x_3)} = [\alpha_{123}e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1)} + \alpha_{213}e^{i(k_2 x_2 + k_1 x_1)}] e^{ik_3 x_3} . \tag{3.14}$$

Por  $\phi_{123}(x_1, x_2)$  y  $\phi_{213}(x_1, x_2)$  designamos las funciones propias del Hamiltoniano de dos partículas

$$\hat{H} = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + 2c\delta(x_1 - x_2) .$$

que satisfacen las condiciones de frontera:

$$\phi|_{x_1 - x_2 \rightarrow 0^+} = \phi|_{x_1 - x_2 \rightarrow 0^-} , \tag{3.15}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_2}\right) \phi|_{x_1-x_2 \rightarrow 0^+} - \left(\frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_2}\right) \phi|_{x_1-x_2 \rightarrow 0^-} = 2c \phi|_{x_1=x_2} . \quad (3.16)$$

Una argumentación idéntica sobre las funciones  $\phi_{123}(x_1, x_2)$  y  $\phi_{213}(x_1, x_2)$  dadas en (3.13) y (3.14) a la llevada a cabo en el problema de Yang de dos partículas conduce a determinar los coeficientes  $\alpha_{123}$  y  $\alpha_{213}$  de modo que las condiciones de frontera (3.15) y (3.16) se satisfagan. Omitimos el paso intermedio a coordenadas del centro de masas de las partículas en las posiciones  $x_1$  y  $x_2$  pues la repuesta es la misma. Los coeficientes deben satisfacer la ecuación de Bethe

$$\frac{\alpha_{213}}{\alpha_{123}} = \frac{i(k_2 - k_1) - c}{i(k_2 - k_1) + c} = e^{i\theta(k_2 - k_1)} \quad (3.17)$$

en aras a conseguir un acoplamiento en la frontera que incorpore la interacción de contacto. Procedemos ahora a identificar los otros pares de regiones  $R_Q$  y  $R_P$  que se diferencian únicamente en el intercambio de dos partículas. En primer lugar identificamos  $R_{312}$  y  $R_{321}$  como el otro par de regiones que comparte con el anterior la frontera en el plano  $x_1 = x_2$ . en este caso la tercera partícula está siempre colocada a la izquierda de las psicionadas sobre  $x_1$  y  $x_2$ . Esto nos da el patrón general: Los dos pares de regiones siguientes que comparten la frontera  $x_2 = x_3$  son  $(R_{123}, R_{132})$  y  $(R_{231}, R_{321})$ . Ahora es la partícula en la posición  $x_1$  la que está alternativamente a la izquierda o a la derecha de las otras dos. Finalmente, el par de regiones restante se forma a partir de la ausencia de intercambio de la partícula en  $x_2$ :  $(R_{132}, R_{312})$  y  $(R_{213}, R_{231})$ . La frontera común, que señala el intercambio de las dos partículas en  $x_1$  y  $x_3$ , es el plano  $x_1 = x_3$ . La teoría combinatoria fija el número de pares de permutaciones de tres elementos que difieren en la transposición de dos elementos consecutivos como  $3! \times 2$ . Es claro, sin embargo, que el razonamiento anterior determina un total de sólo 6 (la mitad) fórmulas de Bethe independientes, las necesarias para determinar los coeficientes independientes

$$\frac{\alpha_{213}}{\alpha_{123}} = \frac{\alpha_{321}}{\alpha_{312}} = \frac{i(k_2 - k_1) - c}{i(k_2 - k_1) + c} = e^{i\theta(k_2 - k_1)} = S(k_1, k_2) , \quad (3.18)$$

$$\frac{\alpha_{312}}{\alpha_{132}} = \frac{\alpha_{231}}{\alpha_{213}} = \frac{i(k_3 - k_1) - c}{i(k_3 - k_1) + c} = e^{i\theta(k_3 - k_1)} = S(k_1, k_3) , \quad (3.19)$$

$$\frac{\alpha_{321}}{\alpha_{231}} = \frac{\alpha_{132}}{\alpha_{123}} = \frac{i(k_3 - k_2) - c}{i(k_3 - k_2) + c} = e^{i\theta(k_3 - k_2)} = S(k_2, k_3) . \quad (3.20)$$

Habida cuenta de que

$$e^{i\theta(k_a - k_b)} = e^{i\pi - 2i \arctan \frac{k_a - k_b}{c}} = e^{-i\pi + 2i \arctan \frac{k_b - k_a}{c}} = e^{-i\theta(k_b - k_a)} , \quad \forall a, b = 1, 2, 3 , \quad a \neq b ,$$

es fácil resolver (3.18)-(3.19)-(3.20) en favor de los coeficientes:

$$\alpha_{123} = e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1 - k_2) + \theta(k_1 - k_3) + \theta(k_2 - k_3)]} , \quad \alpha_{213} = e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1 - k_3) + \theta(k_2 - k_1) + \theta(k_2 - k_3)]} \quad (3.21)$$

$$\alpha_{312} = e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_3-k_1)+\theta(k_3-k_2)]} \quad , \quad \alpha_{132} = e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_3-k_2)]} \quad (3.22)$$

$$\alpha_{231} = e^{\frac{i}{2}[\theta(k_2-k_1)+\theta(k_2-k_3)+\theta(k_3-k_1)]} \quad , \quad \alpha_{321} = e^{\frac{i}{2}[\theta(k_2-k_1)+\theta(k_3-k_1)+\theta(k_3-k_2)]} \quad (3.23)$$

relaciones que se pueden resumir en la fórmula

$$\alpha_{P_1 P_2 P_3} = \frac{[i(k_{P_2} - k_{P_1}) - c]}{[i(k_{P_2} - k_{P_1}) + c]} \cdot \frac{[i(k_{P_3} - k_{P_1}) - c]}{[i(k_{P_3} - k_{P_1}) + c]} \cdot \frac{[i(k_{P_3} - k_{P_2}) - c]}{[i(k_{P_3} - k_{P_2}) + c]}$$

donde  $(P_1, P_2, P_3)$  denota una de las seis permutaciones de los tres momentos.

Las autofunciones del sistema de Yang de tres bosones codificadas en las fórmulas (3.11)-(3.12)-(3.21)-(3.22)-(3.23) revelan dos propiedades muy importantes del sistema.

1. Integrabilidad: Las soluciones están caracterizadas por tres números cuánticos,  $k_1, k_2, k_3$  con ausencia total de degeneración. Ello implica que deben existir tres operadores que conmutan entre sí que se pueden elegir por ejemplo como

$$\hat{I}_1 = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 + \hat{p}_3 \quad , \quad \hat{I}_2 = \hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2 \quad , \quad \hat{I}_3 = \hat{p}_1^3 + \hat{p}_2^3 + \hat{p}_3^3 \quad .$$

Con dos partículas sólo los dos primeros, el momento y la energía totales, serían independientes y ello permite caracterizar las autofunciones en términos de los números cuánticos  $k_1$  y  $k_2$ . Para tres partículas el momento y la energía totales por sí solos no excluirían términos difractivos producidos por colisiones a tres cuerpos de la forma

$$\int dk'_1 \int dk'_2 \int dk'_3 S(k'_1, k'_2, k'_3) e^{i(k'_1 x_1 + k'_2 x_2 + k'_3 x_3)} \quad ,$$

$k'_1 < k'_2 < k'_3$ , con  $K$  y  $E$  fijos. Su ausencia indica que hay una tercera constante del movimiento y por tanto el sistema de Yang de tres bosones es también integrable.

2. Factorización: El segundo aspecto importante es que, de acuerdo con las fórmulas (3.18)-(3.19)-(3.20) el intercambio de dos partículas es independiente de la tercera. Las colisiones de tres partículas factorizan en productos de colisiones de dos cuerpos y el resultado no depende de la secuencia particular de los choques entre dos. Es claro que

$$\frac{\alpha_{213}}{\alpha_{123}} \cdot \frac{\alpha_{231}}{\alpha_{213}} \cdot \frac{\alpha_{321}}{\alpha_{231}} = e^{i[\theta(k_2-k_1)+\theta(k_3-k_1)+\theta(k_3-k_2)]} = \frac{\alpha_{132}}{\alpha_{123}} \cdot \frac{\alpha_{312}}{\alpha_{132}} \cdot \frac{\alpha_{321}}{\alpha_{312}}$$

y el mismo resultado  $\frac{\alpha_{321}}{\alpha_{123}} = S(k_1, k_2)S(k_1, k_3)S(k_2, k_3)$  se alcanza por las dos vías alternativas

$$\alpha_{123} \quad \longrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} \alpha_{213} \longrightarrow \alpha_{231} \\ \alpha_{132} \longrightarrow \alpha_{312} \end{array} \right\} \quad \longrightarrow \quad \alpha_{321} \quad .$$

Este hecho lleva a la relación

$$S(k_1, k_2)S(k_1, k_3)S(k_2, k_3) = S(k_2, k_3)S(k_1, k_3)S(k_1, k_2) ,$$

trivial en este sistema donde los elementos de matriz  $S$  conmutan, pero que dará lugar al álgebra de Yang-Baxter cuando las partículas adquieran grados internos de libertad, como spin o color, y los elementos de matriz  $S$ , que devienen tensores en este caso, no conmuten entre sí.

### 3.1.2.2. Estados ligados

Los números de onda  $k_1$ ,  $k_2$  y  $k_3$  son generalmente reales tanto en el sistema repulsivo  $c > 0$  como en el atractivo  $c < 0$ . La experiencia con el sistema de dos partículas sugiere que en el último caso los números de onda pueden admitir ciertos valores complejos con parte imaginaria no nula. Estos momentos complejos son polos en la matriz  $S$  a dos partículas y dan lugar a estados en los que ciertas colisiones binarias no ocurren [55].

Su descripción es más complicada en sistemas de Yang de  $N = 3$  partículas que la de los estados ligados de dos partículas analizados en la Sección anterior. Comenzaremos por aplicar el ansatz de Bethe para generalizar el estado fundamental a tres partículas.

Estado fundamental: La versión de la función de onda (3.8) para  $P = 0$  simétrica en las permutaciones de las tres partículas es:

$$\psi_0(x_1, x_2, x_3) = A e^{-\frac{|c|}{2}(|x_1-x_2|+|x_1-x_3|+|x_2-x_3|)} , \quad c < 0 \quad (3.24)$$

donde  $A$  es una constante de normalización. Es fácil comprobar que es una función propia del Hamiltoniano de Yang  $N = 3$  con energía  $E = -2|c|^2$  si uno tiene en cuenta que

$$\varepsilon(x_1 - x_2)\varepsilon(x_1 - x_3) + \varepsilon(x_2 - x_1)\varepsilon(x_2 - x_3) + \varepsilon(x_1 - x_3)\varepsilon(x_2 - x_3) = 1 ,$$

para cualquier ordenación de  $x_1$ ,  $x_2$  y  $x_3$ . Es pues un estado donde las tres partículas aparecen ligadas mediando una de ellas. Por ejemplo, en una configuración en que la partícula en  $x_1$  está a la izquierda de la localizada en  $x_2$ , que a su vez ocupa una posición a la izquierda de  $x_3$ , la partícula en el centro forma estados ligados con cada una en los extremos y así cíclicamente. Más precisamente, este estado proviene de la solución general para momentos imaginarios:  $k_1 = i|c|$ ,  $k_2 = 0$ , y  $k_3 = -i|c|$ . El momento total es cero  $K = k_1 + k_2 + k_3 = 0$  pero la energía es la correcta:  $E = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = -2|c|^2$  toda vez que los momentos relativos son  $k_1 - k_2 = k_2 - k_3 = i|c|$ ,  $k_1 - k_3 = 2i|c|$  y  $E = \frac{(k_1-k_2)^2+(k_1-k_3)^2+(k_2-k_3)^2}{3}$ . Más aún, estos valores del momento son polos de  $S(k_1, k_2)$  y  $S(k_2, k_3)$  que dan lugar a parejas de coeficientes ( $\alpha_{123} = 0$ ,  $\alpha_{213} = 2c$ ) y/o ( $\alpha_{213} = 0$ ,  $\alpha_{231} = 2c$ ) sobre los que construir los estados ligados



de las partículas colocadas respectivamente en  $x_1$  y  $x_3$  con la localizada en  $x_2$  en regiones en que esta última está en el centro. Las propiedades cíclicas del sistema producen idénticas estructuras cuando ó  $x_1$  ó  $x_3$  están en medio, partícula la central cuyo momento es  $k_2 = 0$  mientras la de la izquierda recibe  $k_1$  y la de la derecha  $k_3$ .

Estados excitados de tipo trímero: El centro de masas de las tres partículas en el estado fundamental se encuentra en reposo. Es inmediato generalizar este estado en que las tres partículas están ligadas y en reposo a una infinidad de ellos en que las tres se mueven colectivamente con ausencia total de colisiones. Simplemente uno realiza la transformación de Galileo a los nuevos momentos

$$k_1 = P + i|c| \quad , \quad k_2 = P \quad , \quad k_3 = P - i|c| \quad , \quad P \in \mathbb{R} \quad (3.25)$$

Las funciones de onda de estos estados en la que los tres bosones se mueven colectivamente formando un rosario de tres cuentas se inducen del estado fundamental (3.24), véase [55, 56, 57, 58]:

$$\psi_P(x_1, x_2, x_3) = e^{3iPX} e^{-\frac{|c|}{2}(|x_1-x_2|+|x_1-x_3|+|x_2-x_3|)} \quad , \quad c < 0 \quad (3.26)$$

donde  $X = \frac{x_1+x_2+x_3}{3}$  es la coordenada del centro de masas. El momento y la energía totales de estos estados que, en una terminología tomada de la física nuclear se denominan trímeros, son:

$$K_t = k_1 + k_2 + k_3 = 3P \quad , \quad E_t = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = 3P^2 - 2|c|^2 \quad . \quad (3.27)$$

Estados excitados de tipo monómero/dímero: La selección de momentos

$$k_1 = P + i\frac{|c|}{2} \quad , \quad k_2 = P - i\frac{|c|}{2} \quad , \quad k_3 = Q \quad , \quad P \neq Q \in \mathbb{R} \quad (3.28)$$

da lugar a un polo de  $S(k_1, k_2)$  y por tanto a un estado ligado únicamente implicando a dos partículas. Dependiendo de las regiones el estado ligado, el dímero, se forma entre dos partículas contiguas que no colisionan entre sí. La tercera partícula, el monómero, se mueve libremente y entra en colisión con el dímero. Las funciones de onda de estados de este tipo propias del Hamiltoniano de Yang de tres partículas con  $c < 0$  se infieren inmediatamente del ansatz de Bethe:

$$\begin{aligned} \psi_{PQ}(x_1, x_2, x_3) = & \exp[2iPX_{12}] \exp\left[-\frac{|c|}{2}|x_1 - x_2|\right] \exp[iQx_3] + \\ & + \exp[2iPX_{13}] \exp\left[-\frac{|c|}{2}|x_1 - x_3|\right] \exp[iQx_2] + \\ & + \exp[2iPX_{23}] \exp\left[-\frac{|c|}{2}|x_2 - x_3|\right] \exp[iQx_1] \end{aligned} \quad (3.29)$$

donde

$$X_{12} = \frac{x_1 + x_2}{2} \quad , \quad X_{13} = \frac{x_1 + x_3}{2} \quad , \quad X_{23} = \frac{x_2 + x_3}{2}$$

se refieren a las coordenadas de los centros de masas de los tres pares de partículas. Los momentos y energía totales de estos estados son:

$$K_{m/d} = k_1 + k_2 + k_3 = Q + 2P \quad , \quad E_{m/d} = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = Q^2 + 2P^2 - \frac{|c|^2}{2} . \quad (3.30)$$

Estados excitados de tipo monómero: Estos estados están caracterizados por tres momentos reales, no hay estados ligados, se dan todo tipo de colisiones o intercambios entre las partículas y tienen energía positiva siempre. Formados por tres monómeros, son los únicos que existen en el caso repulsivo  $c > 0$ .

### 3.1.3. $N$ bosones: el sistema de Yang de $N$ partículas

Como el paso de  $N = 2$  a  $N = 3$  conlleva el mayor aumento de complejidad es ahora cuasi automático tratar el problema de  $N$  bosones. El Hamiltoniano de Yang

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{j>i} \delta(x_j - x_i) \quad , \quad i, j = 1, 2, \dots, N$$

engloba así las interacciones mediante potenciales delta de Dirac que responden a los posibles  $\binom{N}{2} = \frac{N(N-1)}{2}$  contactos entre pares de partículas. El espacio de configuración está dividido en  $N!$  regiones  $R_Q : x_{Q_1} < x_{Q_2} < \dots < x_{Q_N}$  de acuerdo con los distintos ordenamientos de los  $N$  bosones sobre la recta real en ordenación creciente de izquierda a derecha.

$Q = (Q_1, Q_2, \dots, Q_N) \in S_N$  denota una de las permutaciones de  $(1, 2, \dots, N)$  mientras  $S_N$  es el grupo simétrico de orden  $N!$ . Dos regiones  $R_Q$  y  $R_{Q'}$  son contiguas con frontera común en el hiperplano de dimensión  $N - 1$   $x_{Q_i} = x_{Q_{i+1}}$  si  $x_{Q_i} = x_{Q'_{i+1}}$  y  $x_{Q_{i+1}} = x_{Q'_i}$ : ha habido un intercambio entre las partículas en  $x_{Q_i}$  y  $x_{Q_{i+1}}$  para pasar de  $R_Q$  a  $R_{Q'}$ . Tomaremos como punto de partida la región  $R_I$  con el ordenamiento natural  $x_1 < x_2 < \dots < x_N$  caracterizado por la permutación identidad  $I = (1, 2, \dots, N)$ .

#### 3.1.3.1. Las funciones de onda de Bethe de $N$ bosones: estados de colisión

Investigamos en primer lugar la existencia de estados caracterizados por  $N$  momentos que podemos tomar en la ordenación natural de derecha a izquierda:  $k_1 > k_2 > \dots > k_N$ . El ansatz de Bethe propone la siguiente función de onda en la región  $R_Q$  que es simétrica respecto a cualquier intercambio de los bosones:

$$\psi_Q(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P \alpha(P_1 P_2 \dots P_N) e^{i(k_{P_1} x_{Q_1} + k_{P_2} x_{Q_2} + \dots + k_{P_N} x_{Q_N})} .$$

El sumatorio es sobre todas las permutaciones  $P = (P_1, P_2, \dots, P_N) \in S_N$  de los momentos  $(k_1, k_2, \dots, k_N)$  y los coeficientes de la combinación lineal son específicos, a fijar mediante las condiciones de empalme en las fronteras, para cada permutación  $P$ . En el espacio de configuración completo la función de onda  $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$  se obtiene de las funciones de onda en cada una de las regiones con ayuda de las funciones escalón apropiadas

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_Q \theta(x_{Q_2} - x_{Q_1}) \theta(x_{Q_3} - x_{Q_2}) \cdots \theta(x_{Q_N} - x_{Q_{N-1}}) \psi_Q(x_1, x_2, \dots, x_N) .$$

El sumatorio ahora es sobre las permutaciones de las  $N$  posiciones  $x_i, i = 1, 2, \dots, N$ .

Consideremos ahora dos regiones  $R_Q$  y  $R_{Q'}$  tales que  $x_{Q_i} = x_{Q'_{i+1}} = x_j$  y  $x_{Q_{i+1}} = x_{Q'_i} = x_k$  para algún  $i = 1, \dots, N-1$ , es decir, dos regiones que se relacionan mediante el intercambio de dos partículas y comparten como frontera común el hiperplano  $x_j = x_k$  de dimensión  $N-1$ . En este hiperplano el único término de interacción no nulo en el Hamiltoniano  $\hat{H}_N$  es  $2c\delta(x_j - x_k)$ , sólo hay contacto posible entre las partículas localizadas en  $x_j$  y  $x_k$ . Es pues necesario estudiar el problema espectral efectivo [59]

$$\left[ -\sum_{l=1}^{i-1} \frac{\partial^2}{\partial x_l^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} - \sum_{l=i+2}^N \frac{\partial^2}{\partial x_l^2} + 2c\delta(x_j - x_k) \right] \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) .$$

En la región  $R_Q$ , donde  $x_j < x_k$ , la función de onda es de la forma

$$\begin{aligned} \psi_Q(x_1, x_2, \dots, x_N) &= \sum_P \alpha(P_1 P_2 \cdots P_i P_{i+1} \cdots P_N) \times \\ &\quad \times \exp[ik_{P_1} x_{Q_1} + ik_{P_2} x_{Q_2} + \cdots + ik_{P_i} x_j + ik_{P_{i+1}} x_k + \cdots + ik_{P_N} x_{Q_N}] , \end{aligned}$$

mientras que en  $R_{Q'}$ ,  $x_k < x_j$ , es similar

$$\begin{aligned} \psi_{Q'}(x_1, x_2, \dots, x_N) &= \sum_P \alpha(P_1 P_2 \cdots P_{i+1} P_i \cdots P_N) \times \\ &\quad \times \exp[ik_{P_1} x_{Q'_1} + ik_{P_2} x_{Q'_2} + \cdots + ik_{P_{i+1}} x_j + ik_{P_i} x_k + \cdots + ik_{P_N} x_{Q'_N}] . \end{aligned}$$

El intercambio o colisión de las dos partículas da lugar a una autofunción del Hamiltoniano de Yang si se satisfacen las condiciones de frontera

$$\psi|_{x_j - x_k \rightarrow 0^+} = \psi|_{x_j - x_k \rightarrow 0^-} , \quad (3.31a)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \psi|_{x_j - x_k \rightarrow 0^+} - \left( \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \psi|_{x_j - x_k \rightarrow 0^-} = 2c \psi|_{x_j = x_k} . \quad (3.31b)$$

La experiencia con los sistemas de Yang de dos y tres partículas permite identificar inmediatamente las relaciones entre los coeficientes que garantizan el cumplimiento de (3.31):

$$\frac{\alpha(P_1 \cdots P_{i+1} P_i \cdots P_N)}{\alpha(P_1 \cdots P_i P_{i+1} \cdots P_N)} = \frac{i(k_{P_{i+1}} - k_{P_i}) - c}{i(k_{P_{i+1}} - k_{P_i}) + c} , \quad (3.32)$$

de las cuales hay un número igual a  $N!(N-1)/2$  independientes. Este número resulta de la cuenta de todos los pares de permutaciones que difieren en la transposición de dos elementos consecutivos. El factor  $N!$  contabiliza el número total de permutaciones de las posiciones de las partículas, mientras que el factor  $N-1$  es el número de transposiciones entre elementos consecutivos en una permutación dada. Finalmente, el factor  $1/2$  se ha de incluir toda vez que las relaciones entre los coeficientes que provienen de una transposición  $i$  a  $i+1$  ó  $i+1$  a  $i$  son inversas.

Los elementos de la matriz de scattering se definen por tanto mediante la relaciones [55]

$$\alpha(P_1 \cdots P_{i+1} P_i \cdots P_N) = S[k_{P_i}, k_{P_{i+1}}] \alpha(P_1 \cdots P_i P_{i+1} \cdots P_N),$$

de modo que, en analogía con el caso  $N=3$ , de (3.32) se deduce

$$S[k_{P_i}, k_{P_{i+1}}] = \frac{i[k_{P_{i+1}} - k_{P_i}] - c}{i[k_{P_{i+1}} - k_{P_i}] + c} = e^{i\theta(k_{P_{i+1}} - k_{P_i})}$$

$$\theta(k_{P_{i+1}} - k_{P_i}) = \pi - 2\arctan \frac{k_{P_{i+1}} - k_{P_i}}{c} = -\theta(k_{P_i} - k_{P_{i+1}}).$$

Las fórmulas (3.32) permiten así mismo identificar todos los coeficientes. Si  $j < l$ ,

$$\alpha(P_1 P_2 \cdots P_N) = \exp \left[ -\frac{i}{2} \sum_{j=1}^N \sum_{l=1}^N \theta(k_{P_l} - k_{P_j}) \right] = \prod_{j < l} \left[ \frac{i(k_{P_l} - k_{P_j}) - c}{i(k_{P_l} - k_{P_j}) + c} \right].$$

Es claro que la solución mediante ansatz de Bethe del sistema de Yang de  $N$  bosones extiende las importantísimas propiedades de integrabilidad y factorización de 3 a  $N$  partículas. La factorización resulta de la existencia de dos vías equivalentes para el intercambio (interacción) de tres partículas:

$$\alpha_{P_1 P_2 \cdots P_N} \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \alpha_{P_1 \cdots P_{i+1} P_i P_{i+2} \cdots P_N} \longrightarrow \alpha_{P_1 \cdots P_{i+1} P_{i+2} P_i \cdots P_N} \\ \alpha_{P_1, \dots, P_i P_{i+2} P_{i+1} \cdots P_N} \longrightarrow \alpha_{P_1 \cdots P_{i+2} P_i P_{i+1} \cdots P_N} \end{array} \right\} \longrightarrow \alpha_{P_1 \cdots P_{i+2} P_{i+1} P_i \cdots P_N}$$

Así pues los elementos de matriz  $S$  satisfacen la identidad tautológica

$$S(k_{P_i}, k_{P_{i+1}}) S(k_{P_i}, k_{P_{i+2}}) S(k_{P_{i+1}}, k_{P_{i+2}}) = S(k_{P_{i+1}}, k_{P_{i+2}}) S(k_{P_i}, k_{P_{i+2}}) S(k_{P_i}, k_{P_{i+1}}),$$

el embrión del álgebra de Yang-Baxter que rige el comportamiento de sistemas de Yang de  $N$  partículas con grados de libertad internos.

En cuanto a la integrabilidad del sistema, la solución general queda fijada en función de los  $N$  números cuánticos  $k_1, k_2, \dots, k_N$  sin margen para procesos difractivos. Existen entonces  $N$  operadores de simetría independientes que se pueden elegir como

$$\hat{I}_n = \sum_{j=1}^N \hat{p}_j^n, \quad n = 1, 2, \dots, N.$$

### 3.1.3.2. Estados ligados

De la experiencia con  $N = 2$  y  $N = 3$  partículas sabemos que los Hamiltonianos de Yang poseen, además de los estados de colisión descritos, autofunciones que corresponden a estados ligados de dos partículas en el caso atractivo  $c < 0$ . Sus momentos adquieren una parte imaginaria tal que aparecen polos en los elementos de la matriz  $S$  que dan lugar a autofunciones al menos parcialmente normalizables<sup>3</sup>. Comenzamos por describir el caso más sencillo donde se forma una cadena de  $N$  partículas cada una ligada a la siguiente que es además el estado de menor energía propio del Hamiltoniano.

Estado fundamental: Los momentos

$$k_j = i \frac{|c|}{2} (N + 1 - 2j) \quad , \quad j = 1, 2, \dots, N$$

son  $N - 1$  polos de los elementos de matriz  $S$ , see [55, 56, 57]. Ello significa que hay  $N - 1$  estados ligados de dos partículas pero es fácil comprobar, por ejemplo, en la región  $R_I$  donde los polos aparecen en  $S(k_j, k_{j+1})$ ,  $j = 1, 2, \dots, N - 1$ , que cada partícula está ligada a la siguiente: la localizada en  $x_1$  a la contigua en  $x_2$ , esta a la siguiente en  $x_3$  y así sucesivamente hasta enlazar la acomodada en  $x_{N-1}$  con la última en  $x_N$ . El momento del centro de masas es cero y esta  $N$ -cadena se encuentra en reposo. La función de onda de acuerdo con el ansatz de Bethe que tiene en cuenta todas las permutaciones no equivalentes de esta estructura en  $R_I$  es [55, 56, 57]

$$\psi_0(x_1, x_2, \dots, x_N) = A \exp \left[ -\frac{|c|}{2} \sum_{1 \leq j < l \leq N} |x_j - x_l| \right] \quad , \quad c < 0 \quad (3.33)$$

donde  $A$  es una constante de normalización. Nótese que se han tenido en cuenta todas las permutaciones no equivalentes de las posiciones, las que conducen a encadenar partículas que en  $R_I$  difieren en dos o más posiciones, asignando siempre el conjunto de momentos  $(k_1, k_2, \dots, k_N)$  de izquierda a derecha. Por construcción es una autofunción simultánea del momento total y el Hamiltoniano de Yang atractivo con autovalores

$$K_0 = 0 \quad , \quad E_0 = -N(N^2 - 1) \frac{c^2}{12} \quad ,$$

La energía del estado fundamental (3.33) diverge por tanto negativamente como  $N^3$  en el límite termodinámico  $N \rightarrow +\infty$ , fenómeno usualmente denominado como “colapso por atracción” de bosones [55].

---

<sup>3</sup>Con parcialmente normalizable queremos designar una función de onda de  $N$  partículas cuyo modulo al cuadrado da una integración finita en al menos una de las coordenadas relativas entre dos partículas.

Estados excitados  $N$ -cadena: La invariancia respecto del grupo de Galileo del sistema de Yang permite obtener una infinidad de estados a partir del estado fundamental simplemente eligiendo los momentos en la forma [54, 55, 57]

$$k_j = P + i\frac{|c|}{2}(N + 1 - 2j) \quad , \quad j = 1, 2, \dots, N . \quad (3.34)$$

Los elementos de la matriz de scattering ó intercambio de dos partículas presentan los mismos polos de modo que estos estados sólo difieren en el movimiento del centro de masas de la cadena de  $N$ -partículas. Uno encuentra fácilmente la energía y el momento de los estados caracterizados por (3.34) [55, 57]:

$$E_P = \sum_{j=1}^N k_j^2 = NP^2 - N(N^2 - 1)\frac{c^2}{12} \quad , \quad K_P = \sum_{j=1}^N k_j = NP \quad ,$$

mientras que las funciones de onda de estos estados excitados

$$\psi_P(x_1, x_2, \dots, x_N) = \exp[iNPX] \exp\left[-\frac{|c|}{2} \sum_{1 \leq j < l \leq N} |x_j - x_l|\right] \quad , \quad c < 0$$

donde  $X = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_N}{N}$  es la coordenada del centro de masa del sistema de  $N$  partículas, obedecen a  $N$ -cadenas en movimiento colectivo libre. Obsérvese que en estados de este tipo no hay transiciones entre regiones y por tanto ausencia total de scattering o intercambio entre partículas.

Estados excitados formados por subcadenas

Sea  $(N_1, N_2, \dots, N_p)$  una partición entera de  $N$ :

$$N_a \in \mathbb{N}^* \quad , \quad a = 1, 2, \dots, p \quad , \quad \sum_{a=1}^p N_a = N .$$

Asociados a esta partición fijemos los momentos

$$k_{j_a} = P_a + i\frac{|c|}{2}[N_a + 1 - 2j_a] \quad , \quad j_a = 1, 2, \dots, N_a - 1, N_a \quad , \quad N_0 = 1 .$$

en cada uno de los  $p$  subconjuntos de  $N_a$  partículas. Esta elección determina un estado con  $p$  cadenas de  $N_1, N_2, \dots, N_p$  partículas cuya función de ondas ha de construirse de acuerdo con la estadística de Bose:

$$\psi_{P_a}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_Q \exp[iN_a P_a X_Q(x_{Q_1}, \dots, x_{Q_{N_a}})] \exp\left[-\frac{|c|}{2} \cdot \sum |x_{Q_{j_a}} - x_{Q_{l_a}}|\right]$$

$$X_Q(x_{Q_1}, \dots, x_{Q_{N_a}}) = \frac{x_{Q_1} + x_{Q_2} + \dots + x_{Q_{N_a}}}{N_a} \quad , \quad Q_1 \leq Q_{j_a} < Q_{l_a} \leq Q_{N_a} .$$

Aquí la suma es sobre las  $Q = \frac{N!}{N_a!(N-N_a)!}$  combinaciones de las  $N$  partículas tomadas en grupos de  $N_a$ . La función de onda que describe conjuntos de subcadenas de partículas asociadas a una partición entera dada de  $N$  es el producto de funciones de onda de este tipo:

$$\psi_{P_1 P_2 \dots P_p}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \prod_{a=1}^p \psi_{P_a}(x_1, x_2, \dots, x_N) .$$

El momento y la energía totales de este estado en que se puede intercambiar las  $p$  subcadenas es:

$$K_{P_1 P_2 \dots P_p} = \sum_{a=1}^p N_a P_a \quad , \quad E_{P_1 P_2 \dots P_p} = \sum_{a=1}^p N_a P_a^2 - \frac{c^2}{12} \sum_{a=1}^p N_a (N_a^2 - 1) .$$

Nótese que  $E_{00\dots 0} > E_0$  toda vez que  $\sum_{a=1}^p N_a (N_a^2 - 1) < N(N^2 - 1)$  de modo que el estado donde  $p$  subcadenas se encuentran en reposo tiene mayor energía que una  $N$ -cadena en reposo, siendo este último siempre el estado fundamental.

### 3.1.4. $N$ bosones en un anillo: el límite termodinámico

Comenzamos por restringir las posiciones de los  $N$  bosones a un intervalo de longitud finita  $L$ :  $x_j \in (0, L)$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$ . La región primitiva pasa a ser

$$R_I : 0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N < L .$$

Demandaremos condiciones de contorno periódicas sobre las funciones de onda de tal modo que la región

$$R_J : 0 < x_2 < \dots < x_N < x_1 < L$$

resulte contigua a  $R_I$ . Ello se conseguirá si los coeficientes de los estados de colisión construidos de acuerdo con el ansatz de Bethe

$$\alpha(P_1 P_2 P_3 \dots P_N) \exp[i(k_{P_2} x_2 + k_{P_3} x_3 + \dots + k_{P_N} x_N + k_{P_1} x_1)]$$

$$\alpha(P_2 P_3 \dots P_N P_1) \exp[i(k_{P_2} x_2 + k_{P_3} x_3 + \dots + k_{P_N} x_N + k_{P_1} x_1)]$$

satisfacen la relación de empalme

$$\alpha(P_1 P_2 P_3 \dots P_N) = \alpha(P_2 P_3 \dots P_N P_1) e^{ik_{P_1} L} . \quad (3.35)$$

Las fórmulas de Bethe nos dicen que

$$\begin{aligned}
 \alpha(P_1 P_2 P_3 \cdots P_N) &= e^{i\theta(k_{P_1} - k_{P_2})} \alpha(P_2 P_1 P_3 \cdots P_N) \\
 &= e^{i\theta(k_{P_1} - k_{P_2})} e^{i\theta(k_{P_1} - k_{P_3})} \alpha(P_2 P_3 P_1 \cdots P_N) \\
 &= \dots\dots\dots \\
 &= \exp \left[ i \sum_{j=2}^N \theta(k_{P_1} - k_{P_j}) \right] \alpha(P_2 P_3 \cdots P_N P_1)
 \end{aligned}$$

y la ecuación (3.35) se satisface si

$$e^{ikL} = e^{i \sum_{q \neq k} \theta(k-q)} = e^{i\pi(N-1) - 2i \sum_{q \neq k} \arctan \frac{k-q}{c}} \quad , \quad \forall k . \tag{3.36}$$

A partir de un conjunto de  $N$  números de onda  $k$ , todos distintos, que cumplen la condición (3.36) se puede construir una solución de la ecuación de Schrödinger que satisface condiciones de contorno periódicas.

La ecuación (3.36) por otra parte elimina todos los  $k$  que no satisfacen la ecuación trascendente

$$kL = 2\pi\nu_k - 2 \sum_{q \neq k} \arctan \frac{k-q}{c} \tag{3.37}$$

donde los  $\nu_k \in \mathbb{Z}$  son enteros si  $N$  es impar pero se convierten en semienteros,  $\nu_k \in \mathbb{Z}_{\frac{1}{2}}$ , si  $N$  es par.

### 3.1.5. El límite de bosones impenetrables

No es posible la resolución analítica de la ecuación trascendente (3.37) que implica muchas variables. Cabe sin embargo realizar un análisis cualitativo en el caso repulsivo  $c > 0$  definiendo la función de los  $N$  momentos siguiente

$$B(k_1, k_2, \dots, k_N) = \frac{L}{2} \sum_{j=1}^N k_j^2 - 2\pi \sum_{j=1}^N \nu_j k_j + \sum_{j>l=1}^N \Theta(k_j - k_l) \quad ,$$

donde

$$\Theta(k) = \int_0^k dq \, 2\arctan \frac{q}{c} = 2k\arctan \frac{k}{c} - c \ln \left[ 1 + \left( \frac{k}{c} \right)^2 \right] .$$

Los puntos críticos de la función  $B$ ,

$$\frac{\partial B}{\partial k_j}(k_1, k_2, \dots, k_N) = 0 \quad , \quad \forall j = 1, 2, \dots, N$$



son precisamente las soluciones de (3.37). Las características de la función  $B(k_1, k_2, \dots, k_N)$  de  $N$  variables pertinentes en nuestro problema se infieren del conocimiento de su matriz Hessiana:

$$hess(B)_{jl} \equiv \frac{\partial^2 B}{\partial k_j \partial k_l} = \begin{cases} \delta_{jl} \left[ L + \sum_{m \neq l} \frac{2c}{c^2 + (k_j - k_m)^2} \right] \\ -\frac{2c}{c^2 + (k_j - k_l)^2} \quad , \quad j \neq l \end{cases}$$

Puesto que para cualquier vector arbitrario real  $(u_1 u_2 \dots u_N)^T$  se verifica que

$$\sum_{j,l} u_j hess(B)_{jl} u_l = L \sum_j u_j^2 + \sum_{j>l} \frac{2c}{c^2 + (k_j - k_l)^2} (u_j - u_l)^2 \geq 0 \quad ,$$

la matriz hessiana  $hess(B)$  es definida positiva de modo que  $B$  es una función cóncava en el espacio de momentos de dimensión  $N$ . Más aún, para momentos muy altos esta función se comporta como  $B \simeq_{k_j \gg 0} \frac{L}{2} \sum_j k_j^2$ , todo lo cual implica que tiene un único mínimo. Dado un conjunto de enteros  $\{\nu_j\}$  la posición de este mínimo en  $\mathbb{R}^N$  depende de  $c$  pero es imposible de identificar analíticamente en general.

En el límite  $c \rightarrow +\infty$ , sin embargo, cuando los bosones resultan impenetrables y las fases de intercambio  $\theta(k_j - k_l)$  son todas iguales a  $\pi$ , el punto crítico es fácil de identificar:

$$\lim_{c \rightarrow +\infty} k_j^{\text{crit}} = \bar{k}_j = 2\pi\nu_j \quad , \quad j = 1, 2, \dots, N$$

Claramente en este régimen  $\alpha(P_1 P_2 \dots P_N) = \text{sgn} P$ ,  $\text{sgn} P$  es 1 si la permutación  $(P_1 P_2 \dots P_N)$  es par y  $-1$  si es impar, para cualquier permutación  $P$  y la función de onda en la región fundamental toma la forma de un determinante de Slater:

$$\psi_I(x_1, x_2, \dots, x_N) = \det \begin{pmatrix} e^{ik_1 x_1} & e^{ik_2 x_1} & \dots & e^{ik_N x_1} \\ e^{ik_1 x_2} & e^{ik_2 x_2} & \dots & e^{ik_N x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{ik_1 x_N} & e^{ik_2 x_N} & \dots & e^{ik_N x_N} \end{pmatrix} = \sum_P \text{sgn} P \prod_{1 \leq l \leq N} \exp[ik_{P_l} x_l] \quad . \quad (3.38)$$

Es claro de la expresión (3.38) que este tipo de funciones de onda es distinto de cero sólo si los momentos son distintos. En el régimen impenetrable  $c = +\infty$  ello implica una ordenación de los números cuánticos  $\nu_j$  y de los momentos, esto es

$$\frac{2\pi}{L} \nu_1 = k_1 < \frac{2\pi}{L} \nu_2 = k_2 < \dots < \frac{2\pi}{L} \nu_N = k_N \quad .$$

La energía de cualquiera de estos estados es  $E = \frac{4\pi^2}{L^2} \sum_{j=1}^N \nu_j^2$ . El estado fundamental es aquel en que los números cuánticos  $\{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N\}$  alcanzan los valores más pequeños posibles. Si

elegimos  $\nu_n$  tal que  $N = 2\nu_N + 1$  estos valores son:

$$\nu_1 = -\frac{N-1}{2} \quad , \quad \nu_2 = -\frac{N-1}{2} + 1 \quad , \quad -\frac{N-1}{2} + 2 \quad , \quad \dots \quad , \quad \nu_N = \frac{N-1}{2} \quad .$$

El estado fundamental es pues un mar de Fermi unidimensional, tiene energía mínima

$$E_0 = \frac{4\pi^2}{L^2} \sum_{j=1}^N \left( \frac{N-2j+1}{2} \right)^2 = \frac{\pi^2}{3L^2} N(N^2 - 1) \quad ,$$

mientras que la función de onda se puede escribir de forma factorizada como el producto del determinante de una matriz diagonal y un determinante de Vandermonde:

$$\begin{aligned} \Psi_{0I}(x_1, x_2, \dots, x_n) &= \\ &= \det \left\{ \left( \begin{array}{cccc} e^{-i\pi(N-1)x_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-i\pi(N-1)x_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-i\pi(N-1)x_N} \end{array} \right) \left( \begin{array}{cccc} 1 & e^{2i\pi x_1} & \dots & e^{2i\pi(N-1)x_1} \\ 1 & e^{2i\pi x_2} & \dots & e^{2i\pi(N-1)x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & e^{2i\pi x_N} & \dots & e^{2i\pi(N-1)x_N} \end{array} \right) \right\} \end{aligned}$$

El determinante de la matriz de Vandermonde a su vez

$$\det \left( \begin{array}{cccc} 1 & e^{2i\pi x_1} & \dots & e^{2i\pi(N-1)x_1} \\ 1 & e^{2i\pi x_2} & \dots & e^{2i\pi(N-1)x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & e^{2i\pi x_N} & \dots & e^{2i\pi(N-1)x_N} \end{array} \right) \propto \exp \left[ i\pi(N-1) \sum_{k=1}^N x_k \right] \prod_{j>l=1}^N \sin \left[ \pi \frac{|x_j - x_l|}{L} \right] \quad (3.39)$$

explicita la dependencia de la función de onda del estado fundamental de la coordenada del centro de masas y las coordenadas relativas entre cada par de partículas en una forma factorizada característica de los sistemas de muchos cuerpos integrables. La inclusión del modulo de las coordenadas relativas garantiza que la función de onda es simétrica respecto del intercambio de dos partículas y se describe así el estado fundamental de  $N$ -bosones impenetrables. El estado fundamental de  $N$  fermiones libres moviéndose en el intervalo  $[0, L]$  con condiciones de contorno periódicas sería (3.39) sin la restricción a su modulo de las coordenadas relativas.

### 3.1.6. El sistema de Yang de $N$ bosones con $l$ grados internos de libertad

En un sistema de  $N$  bosones con una estructura interna, spin, color, etcetera, que se traduce en  $1 < l \in \mathbb{N}$  estados cuánticos, cada estado  $a = 1, 2, \dots, l$  de cada partícula  $i = 1, 2, \dots, N$

marcado como  $\sigma_i(a)$ , el ansatz de Bethe proporciona el estado de colisión genérico en la región con el orden natural:

$$\Psi_I(\sigma_1, x_1; \sigma_2, x_2; \dots; \sigma_N, x_N) = \sum_{P \in S_N} \alpha_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N}(k_{P_1} k_{P_2} \dots k_{P_N}) \times \exp \left[ i \sum_{j=1}^N k_{P_j} x_j \right]$$

mientras que en cualquier otra región se obtiene a partir de esta en la forma<sup>4</sup>

$$\Psi_Q(\sigma_1, x_1; \sigma_2, x_2; \dots; \sigma_N, x_N) = \psi_I(\sigma_{Q_1}, x_{Q_1}; \sigma_{Q_2}, x_{Q_2}; \dots; \sigma_{Q_N}, x_{Q_N}) .$$

La identificación de las  $(N!)^2$  amplitudes  $\alpha_{[\sigma]}([P])$  ha de realizarse de modo que la continuidad de la función de onda y la discontinuidad de la derivada en el intercambio de dos partículas se verifiquen como en el caso de Lieb-Liniger (bosones sin estructura).

La novedad reside en el intercambio de los grados de libertad internos que convierte en matrices  $l \times l$  las matrices  $S$  escalares tratadas anteriormente. El criterio para que el nuevo sistema con estructura sea integrable es que estas matrices den lugar también a una matriz  $S$  entre  $N$  partículas que factoriza en términos de matrices  $S$  entre dos.

Para estudiar que ecuaciones garantizan esta factorización partimos de la ecuación que relaciona dos amplitudes en que se permutan los momentos entre dos partículas contiguas:

$$\alpha_{\sigma_1 \dots \sigma_i \sigma_{i+1} \dots \sigma_N}(k_{P_1} \dots k_{P_i} k_{P_{i+1}} \dots k_{P_N}) = S_i(k_{P_i}, k_{P_{i+1}}) \alpha_{\sigma_1 \dots \sigma_{i+1} \sigma_i \dots \sigma_N}(k_{P_1} \dots k_{P_{i+1}} k_{P_i} \dots k_{P_N})$$

donde  $(S_i)_b^a(k_i, k_{i+1})$  es una matriz  $l \times l$  que codifica, además del defasaje

$$\theta(k_i, k_{i+1}) = i\pi - 2 \arctan \frac{i(k_{i+1} - k_i) - c}{i(k_{i+1} - k_i) + c}$$

producido en el intercambio el bosón  $i$ -ésimo y el siguiente, la variación del estado de spin  $\sigma_i^b$  a  $\sigma_{i+1}^a$  en el mismo proceso.

La acción de la matriz en los estados internos de la partícula ha de fijarse de modo que se respete la factorización en intercambios de dos partículas que ocurre en el caso en que los bosones carecen de estructura interna. Para ello basta analizar un proceso entre tres partículas. La factorización ocurre si los procesos

$$\begin{aligned} \alpha_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3}(k_1, k_2, k_3) &= S_1(k_1, k_2) \alpha_{\sigma_2 \sigma_1 \sigma_3}(k_2, k_1, k_3) \\ &= S_1(k_1, k_2) S_2(k_1, k_3) \alpha_{\sigma_2 \sigma_3 \sigma_1}(k_2, k_3, k_1) \\ &= S_1(k_1, k_2) S_2(k_1, k_3) S_1(k_2, k_3) \alpha_{\sigma_3 \sigma_2 \sigma_1}(k_3, k_2, k_1) \end{aligned}$$

---

<sup>4</sup>Si en vez de bosones el sistema fuera compuesto por fermiones habrían de incluirse signos menos asociados a las permutaciones impares

y

$$\begin{aligned}\alpha_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3}(k_1, k_2, k_3) &= S_2(k_2, k_3)\alpha_{\sigma_1\sigma_3\sigma_2}(k_1, k_3, k_2) \\ &= S_2(k_2, k_3)S_1(k_1, k_3)\alpha_{\sigma_3\sigma_1\sigma_2}(k_3, k_1, k_2) \\ &= S_2(k_2, k_3)S_1(k_1, k_3)S_2(k_1, k_2)\alpha_{\sigma_3\sigma_2\sigma_1}(k_3, k_2, k_1)\end{aligned}$$

dan lugar al mismo resultado. Es decir si la ecuación entre matrices (el sistema de  $l^2$  ecuaciones)

$$S_1(k_1, k_2)S_2(k_1, k_3)S_1(k_2, k_3) = S_2(k_2, k_3)S_1(k_1, k_3)S_2(k_1, k_2) \quad (3.40)$$

se verifica. La ecuación altamente no trivial (3.40) es la ecuación de Yang-Baxter que garantiza la integrabilidad de los sistemas solubles en Mecánica Estadística, véase [60].

## 3.2. Dinámica cuántica supersimétrica del sistema de Lieb-Liniger-Yang de $N$ partículas bosónicas sobre una línea

La extensión supersimétrica de el problema cuántico de  $N$  bosones en una línea puede materializarse mediante la elección del superpotencial siguiente

$$W(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{j>k=1}^N \frac{c}{2}|x_k - x_j| \quad , \quad c > 0 \quad (3.41)$$

y la implementación mediante el álgebra de Clifford de  $\mathbb{R}^{2N}$  de la estructura general de sistema  $\mathcal{N} = 2$  supersimétrico mecano cuántico con  $N$  variables canónicas bosónicas. Cabe englobar este formalismo en la generalización supersimétrica de los sistemas integrables de tipo Calogero-Sutherland, véase [61], pero nuestro enfoque del problema va dirigido a la obtención de resultados analíticos paralelos a los alcanzados en la versión no supersimétrica de estos modelos.

### 3.2.1. $N = 2$ partículas con estructura supersimétrica e interacción generalizada de Lieb-Liniger-Yang

En el caso  $N = 2$  de dos partículas el superpotencial (3.41) es simplemente

$$W(x_1, x_2) = \frac{c}{2}|x_1 - x_2| \quad , \quad c > 0 \quad (3.42)$$

y por tanto sus derivadas incorporan las distribuciones:

$$\frac{\partial W}{\partial x_1} = \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) \quad , \quad \frac{\partial W}{\partial x_2} = -\frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2)$$

$$\frac{\partial^2 W}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2 W}{\partial x_2^2} = c\delta(x_1 - x_2) \quad , \quad \frac{\partial^2 W}{\partial x_1 \partial x_2} = \frac{\partial^2 W}{\partial x_2 \partial x_1} = -c\delta(x_1 - x_2) .$$

Las claves de la estructura supersimétrica, las supercargas, son las matrices  $4 \times 4$  de operadores diferenciales siguientes:

$$\begin{aligned} \hat{Q} &= i \sum_{j=1}^2 \hat{\psi}_j \hat{D}_j = i \left\{ \hat{\psi}_1 \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) \right] + \hat{\psi}_2 \left[ \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) \right] \right\} \\ &= \frac{i}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) & \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{Q}^\dagger &= i \sum_{j=1}^2 \hat{\psi}_j^\dagger \hat{D}_j^\dagger = i \left\{ \hat{\psi}_1^\dagger \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) \right] + \hat{\psi}_2^\dagger \left[ \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) \right] \right\} \\ &= \frac{i}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) & \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

En consecuencia los Hamiltonianos escalares resultan ser

$$\hat{H}_0 \equiv \hat{H} \Big|_{\mathcal{S}\mathcal{H}_0} = -\hat{D}_1 \hat{D}_1^\dagger - \hat{D}_2 \hat{D}_2^\dagger = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + 2c\delta(x_1 - x_2) + \frac{c^2}{2} ,$$

$$\hat{H}_2 \equiv \hat{H} \Big|_{\mathcal{S}\mathcal{H}_2} = -\hat{D}_1^\dagger \hat{D}_1 - \hat{D}_2^\dagger \hat{D}_2 = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - 2c\delta(x_1 - x_2) + \frac{c^2}{2} ,$$

mientras que el Hamiltoniano matricial es

$$\hat{H}_1 \equiv \hat{H} \Big|_{\mathcal{S}\mathcal{H}_1} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{c^2}{2} & 2c\delta(x_1 - x_2) \\ 2c\delta(x_1 - x_2) & -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{c^2}{2} \end{pmatrix} .$$

### 3.2.1.1. Estados de colisión en los sectores $\mathcal{SH}_0$ y $\mathcal{SH}_2$

Los Hamiltonianos escalares  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_2$  actuando en los sectores bosónicos son equivalentes al Hamiltoniano de Lieb-Liniger-Yang no supersimétrico, repulsivo en el primer caso, atractivo en el segundo, con la energía desplazada en  $\frac{c^2}{2}$  en ambos casos. Las funciones de onda propias correspondientes a estados de colisión donde las dos partículas intercambian sus posiciones son pues las dadas, en las dos regiones  $x_1 < x_2$  y  $x_2 < x_1$ , en las fórmulas (3.5), (3.6). Soluciones de este tipo existen en los dos sectores bosónicos y su energía es simplemente desplazada en  $\frac{c^2}{2}$ :

$$E^{(0)} = E^{(2)} = E + \frac{c^2}{2} = k_1^2 + k_2^2 + \frac{c^2}{2} .$$

Es conveniente señalar que en estas soluciones del sistema supersimétrico ocurre que

$$S(k_2, k_1) = \frac{i(k_2 - k_1) - c}{i(k_2 - k_1) + c} = e^{i\theta(k_2 - k_1)}$$

de modo que la forma del defasaje anticipa que en el caso de tres ó más partículas el scattering factorizará en procesos a dos partículas.

### 3.2.1.2. Estados ligados en $\mathcal{SH}_2$ : modo cero bosónico

Por las mismas razones en el sector  $\mathcal{SH}_2$  existen estados ligados. Precisamente los estados de tipo dímero -donde no hay intercambio de las dos partículas- dados en (3.8) correspondientes a los momentos complejos (3.7) son estados ligados de  $\hat{H}_2$  con energía

$$E^{(2)} = P^2 - \frac{c^2}{4} + P^2 - \frac{c^2}{4} + \frac{c^2}{2} = 2P^2 .$$

De este modo cuando el dímero se encuentra en reposo,  $P = 0$ , el estado correspondiente es un estado fundamental bosónico del sistema supersimétrico cuya energía es cero y no hay por tanto ruptura espontánea de supersimetría en el sistema. Se comprueba fácilmente que  $\hat{Q}\Psi_0^{(2)}(x_1, x_2) = 0$ , es decir,

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) & \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ e^{-\frac{c}{2}|x_1 - x_2|} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

toda vez que

$$\left(-\frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{c}{2}\right) e^{-\frac{c}{2}(x_1 - x_2)} = 0 = \left(-\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{c}{2}\right) e^{-\frac{c}{2}(x_2 - x_1)}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{c}{2}\right) e^{-\frac{c}{2}(x_1-x_2)} = 0 = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{c}{2}\right) e^{-\frac{c}{2}(x_2-x_1)}$$

Dado que también  $\hat{Q}^\dagger \Psi_0^{(2)}(x_1, x_2) = 0$ , en este caso trivialmente, el dímerno en reposo es un modo cero bosónico del sistema.

### 3.2.1.3. El espectro en el sector fermiónico $\mathcal{SH}_1$ : modo cero fermiónico

El problema espectral en el sector  $\mathcal{SH}_1$

$$\hat{H}\Psi^{(1)} = E^{(1)}\Psi^{(1)} \quad , \quad \Psi^{(1)}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_1^{(1)}(x_1, x_2) \\ \psi_2^{(1)}(x_1, x_2) \\ 0 \end{pmatrix} ,$$

se reduce a resolver el espectro del Hamiltoniano matricial  $\hat{H}_1$ :

$$\begin{pmatrix} -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{c^2}{2} & 2c\delta(x_1 - x_2) \\ 2c\delta(x_1 - x_2) & -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{c^2}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^{(1)}(x_1, x_2) \\ \psi_2^{(1)}(x_1, x_2) \end{pmatrix} = E^{(1)} \begin{pmatrix} \psi_1^{(1)}(x_1, x_2) \\ \psi_2^{(1)}(x_1, x_2) \end{pmatrix} .$$

Este sistema supersimétrico se encuentra entre los casos especiales en que existe además del bosónico un estado fundamental fermiónico, ambos singletes del álgebra de supersimetría. En efecto, los espinores de la forma

$$\Psi_0^{(1)}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_0(x_1, x_2) \\ -\psi_0(x_1, x_2) \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Sigma_1 \Psi_0^{(1)}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_0(x_1, x_2) \\ -\psi_0(x_1, x_2) \\ 0 \end{pmatrix} = -\Psi_0^{(1)}(x_1, x_2) \quad ,$$

propios con autovalor  $-1$  de la matriz  $\Sigma_1$ , son también propios de  $\hat{F}$  con autovalor  $1$  y de  $\hat{H}$  con autovalor  $0$ , si y sólo si se satisface la ecuación

$$\left(-\Delta + \frac{c^2}{2} - 2c\delta(x_1 - x_2)\right) \psi_0(x_1, x_2) = 0 \quad . \quad (3.43)$$

Anteriormente encontramos que la función de onda  $\psi_0(x_1, x_2) = -2ce^{-\frac{c}{2}|x_1-x_2|}$ , que describe un estado ligado de las dos partículas con el centro de masas en reposo, efectivamente es

solución de la ecuación (3.43). El espinor

$$\Psi_0^{(1)}(x_1, x_2) = e^{-\frac{c}{2}|x_1-x_2|} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad E^{(1)} = 0$$

es por tanto un estado fundamental fermiónico que junto con  $\Psi_0^{(2)}$  forman el conjunto de modos cero del sistema supersimétrico. La supersimetría de este sistema no se rompe pues espontáneamente, pero, módulo las sutilezas del espectro continuo, el índice de Witten es cero.

En general, en el sector con  $\hat{F} = 1$  se ha de resolver un problema de interacción de contacto de tipo Lieb-Liniger-Yang entre dos partículas con spin  $\frac{1}{2}$ . Afortunadamente la estructura del álgebra de supersimetría permite obtener funciones propias del Hamiltoniano supersimétrico en el sector  $\mathcal{SH}_1$  a partir de las autofunciones de energía estrictamente positiva en los sectores bosónicos ya conocidas mediante la acción de los operadores de supercarga  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$ .

### 3.2.1.4. Estados de colisión fermiónicos

Dadas las funciones de onda (3.5) y (3.6) que resuelven el problema de LLY no supersimétrico respectivamente en las regiones  $R_{12} : x_1 < x_2$  y  $R_{21} : x_2 < x_1$  cumpliendo las condiciones de empalme en el intercambio de las dos partículas los correspondientes estados fermiónicos son<sup>5</sup>:

$$\hat{Q}^\dagger \begin{pmatrix} \psi_{12}(x_1, x_2) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{1(12)}^{(1)}(x_1, x_2) \\ \psi_{2(12)}^{(1)}(x_1, x_2) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Q}^\dagger \begin{pmatrix} \psi_{21}(x_1, x_2) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{1(21)}^{(1)}(x_1, x_2) \\ \psi_{2(21)}^{(1)}(x_1, x_2) \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{Q} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \psi_{12}(x_1, x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{1(12)}^{(1)}(x_1, x_2) \\ \psi_{2(12)}^{(1)}(x_1, x_2) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Q} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \psi_{21}(x_1, x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{1(21)}^{(1)}(x_1, x_2) \\ \psi_{2(21)}^{(1)}(x_1, x_2) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Un cálculo rutinario nos proporciona el resultado siguiente para los autoestados de tipo monómero que provienen del sector  $\mathcal{SH}_2$ :

$$\psi_{1(12)}^{(1)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}\theta(k_1-k_2)} \left[ \left( k_2 - \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + \left( k_1 - \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} e^{i\theta(k_2-k_1)} \right]$$

<sup>5</sup>Es importante aclarar una casi segura confusión de denominación. Hablamos de fermiones en el sentido del sistema supersimétrico, no de la estadística.



$$\psi_{2(12)}^{(1)}(x_1, x_2) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}\theta(k_1-k_2)} \left[ \left( k_1 + \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + \left( k_2 + \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} e^{i\theta(k_2-k_1)} \right]$$

en la región  $R_{12}$  y

$$\psi_{1(21)}^{(1)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}\theta(k_1-k_2)} \left[ \left( k_1 + \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + \left( k_2 + \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} e^{i\theta(k_2-k_1)} \right]$$

$$\psi_{2(21)}^{(1)}(x_1, x_2) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}\theta(k_1-k_2)} \left[ \left( k_2 - \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + \left( k_1 - \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} e^{i\theta(k_2-k_1)} \right]$$

en la región  $R_{21}$ . Se observa así que los estados de spin también se intercambian cuando los dos partículas de spin  $\frac{1}{2}$  interactúan de modo que la acción de la matriz  $S$  sobre el grado de libertad interno se materializa mediante la matriz de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

En cuanto a los que provienen de  $\mathcal{SH}_0$  se calculan de forma similar:

$$\psi_{1(12)}^{(1)}(x_1, x_2) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}\theta(k_1-k_2)} \left[ \left( k_1 - \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + \left( k_2 - \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} e^{i\theta(k_2-k_1)} \right]$$

$$\psi_{2(12)}^{(1)}(x_1, x_2) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}\theta(k_1-k_2)} \left[ \left( k_2 + \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + \left( k_1 + \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} e^{i\theta(k_2-k_1)} \right]$$

en la región  $R_{12}$  y

$$\psi_{1(21)}^{(1)}(x_1, x_2) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}\theta(k_1-k_2)} \left[ \left( k_2 + \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} + \left( k_1 + \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} e^{i\theta(k_2-k_1)} \right]$$

$$\psi_{2(21)}^{(1)}(x_1, x_2) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}\theta(k_1-k_2)} \left[ \left( k_1 - \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_2x_1+k_1x_2)} + \left( k_2 - \frac{i}{2}c \right) e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} e^{i\theta(k_2-k_1)} \right]$$

en la región  $R_{21}$ .

### 3.2.2. $N = 3$ partículas con estructura supersimétrica e interacción generalizada de Lieb-Liniger-Yang

En el caso  $N = 3$  de tres partículas el superpotencial (3.41) es dado por:

$$W(x_1, x_2) = \frac{c}{2}|x_1 - x_2| + \frac{c}{2}|x_1 - x_3| + \frac{c}{2}|x_2 - x_3| \quad , \quad c > 0 \quad (3.44)$$

y por tanto sus derivadas incorporan las distribuciones:

$$\frac{\partial W}{\partial x_1} = \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_3) \quad , \quad \frac{\partial W}{\partial x_2} = -\frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) + \frac{c}{2}\varepsilon(x_2 - x_3)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial W}{\partial x_3} &= -\frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_3) - \frac{c}{2}\varepsilon(x_2 - x_3) \quad , \quad \frac{\partial^2 W}{\partial x_1^2} = c\delta(x_1 - x_2) + c\delta(x_1 - x_3) \\
\frac{\partial^2 W}{\partial x_2^2} &= c\delta(x_1 - x_2) + c\delta(x_2 - x_3) \quad , \quad \frac{\partial^2 W}{\partial x_3^2} = c\delta(x_1 - x_3) + c\delta(x_2 - x_3) . \\
\frac{\partial^2 W}{\partial x_1 \partial x_2} &= -c\delta(x_1 - x_2) = \frac{\partial^2 W}{\partial x_2 \partial x_1} \quad , \quad \frac{\partial^2 W}{\partial x_1 \partial x_3} = -c\delta(x_1 - x_3) = \frac{\partial^2 W}{\partial x_3 \partial x_1} . \\
\frac{\partial^2 W}{\partial x_2 \partial x_3} &= -c\delta(x_2 - x_3) = \frac{\partial^2 W}{\partial x_3 \partial x_2} .
\end{aligned}$$

Las claves de la estructura supersimétrica, las supercargas, son ahora los operadores diferenciales de tipo Clifford:

$$\begin{aligned}
\hat{Q} &= i \sum_{j=1}^3 \hat{\psi}_j \hat{D}_j = i \left\{ \hat{\psi}_1 \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_3) \right] + \right. \\
&\quad \left. + \hat{\psi}_2 \left[ \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) + \frac{c}{2}\varepsilon(x_2 - x_3) \right] + \hat{\psi}_3 \left[ \frac{\partial}{\partial x_3} - \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_3) - \frac{c}{2}\varepsilon(x_2 - x_3) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.45}$$

$$\begin{aligned}
\hat{Q}^\dagger &= i \sum_{j=1}^3 \hat{\psi}_j^\dagger \hat{D}_j^\dagger = i \left\{ \hat{\psi}_1^\dagger \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) - \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_3) \right] + \right. \\
&\quad \left. + \hat{\psi}_2^\dagger \left[ \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_2) - \frac{c}{2}\varepsilon(x_2 - x_3) \right] + \hat{\psi}_3^\dagger \left[ \frac{\partial}{\partial x_3} + \frac{c}{2}\varepsilon(x_1 - x_3) + \frac{c}{2}\varepsilon(x_2 - x_3) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.46}$$

En consecuencia los Hamiltonianos escalares resultan ser

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &\equiv \hat{H} \Big|_{\mathcal{S}\mathcal{H}_0} = -\hat{D}_1 \hat{D}_1^\dagger - \hat{D}_2 \hat{D}_2^\dagger - \hat{D}_3 \hat{D}_3^\dagger \\
&= -\Delta + 2c\delta(x_1 - x_2) + 2c\delta(x_1 - x_3) + 2c\delta(x_2 - x_3) + 2c^2 ,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_3 &\equiv \hat{H} \Big|_{\mathcal{S}\mathcal{H}_3} = -\hat{D}_1^\dagger \hat{D}_1 - \hat{D}_2^\dagger \hat{D}_2 - \hat{D}_3^\dagger \hat{D}_3 \\
&= -\Delta - 2c\delta(x_1 - x_2) - 2c\delta(x_1 - x_3) - 2c\delta(x_2 - x_3) + 2c^2 .
\end{aligned}$$

En el cálculo anterior hay un punto delicado a recordar: los productos cruzados de funciones signo de las posiciones relativas de cada par de partículas siempre suman uno cualesquiera sea la ordenación de las tres partículas sobre la recta, como se demostró en la sección 3.1.2

El Hamiltoniano matricial  $3 \times 3$   $\hat{H}_1$  que actúa en el subespacio tridimensional del espacio de Fock Fermiónico tal que  $\hat{F} = 1$  es por tanto:

$$\hat{H}_1 = \begin{pmatrix} -\Delta + 2c\delta(x_2 - x_3) + 2c^2 & 2c\delta(x_1 - x_2) & 2c\delta(x_1 - x_3) \\ 2c\delta(x_1 - x_2) & -\Delta + 2c\delta(x_1 - x_3) + 2c^2 & 2c\delta(x_2 - x_3) \\ 2c\delta(x_1 - x_3) & 2c\delta(x_2 - x_3) & -\Delta + 2c\delta(x_1 - x_2) + 2c^2 \end{pmatrix}$$

mientras que el Hamiltoniano matricial  $3 \times 3$   $\hat{H}_2$  que actúa en el subespacio tridimensional del espacio de Fock Fermiónico tal que  $\hat{F} = 2$  es:

$$\hat{H}_2 = \begin{pmatrix} -\Delta - 2c\delta(x_1 - x_2) + 2c^2 & 2c\delta(x_2 - x_3) & -2c\delta(x_1 - x_3) \\ 2c\delta(x_2 - x_3) & -\Delta - 2c\delta(x_1 - x_3) + 2c^2 & 2c\delta(x_1 - x_2) \\ -2c\delta(x_1 - x_3) & 2c\delta(x_1 - x_2) & -\Delta - 2c\delta(x_2 - x_3) + 2c^2 \end{pmatrix}$$

### 3.2.2.1. Estados de colisión en los sectores $\mathcal{SH}_0$ y $\mathcal{SH}_3$

En este caso los Hamiltonianos escalares  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_3$  actuando en los sectores escalares son equivalentes al Hamiltoniano de Lieb-Liniger-Yang no supersimétrico, repulsivo en el primer caso, atractivo en el segundo, con la energía desplazada en  $2c^2$  en ambos casos. En consecuencia las funciones de onda propias correspondientes a estados de colisión donde dos de las tres partículas intercambian sus posiciones son codificadas -en las regiones definidas por (3.10)- en las fórmulas (3.11)-(3.12) y (3.21)-(3.23).

Por ejemplo, las funciones de onda propias correspondientes a estados de colisión donde las partículas localizadas en  $x_1$  y  $x_2$  intercambian sus posiciones son dadas, en las dos regiones  $R_{123}$  y  $R_{213}$ , por:

$$\psi_{123}^{(\iota)}(x_1, x_2, x_3) = e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1 - k_2) + \theta(k_1 - k_3) + \theta(k_2 - k_3)]} [e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1) + i\theta(k_2 - k_1)}] e^{ik_3 x_3}, \quad (3.47)$$

$$\psi_{213}^{(\iota)}(x_1, x_2, x_3) = e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1 - k_2) + \theta(k_1 - k_3) + \theta(k_2 - k_3)]} [e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1)} + e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2) + i\theta(k_2 - k_1)}] e^{ik_3 x_3}. \quad (3.48)$$

donde  $\iota = 0, 3$ .

La solución en la región  $R_{123}$ ,  $x_1 < x_2 < x_3$ , corresponde al producto de una onda plana  $e^{ik_3 x_3}$  -describiendo el movimiento independiente de la partícula en  $x_3$ - y una combinación lineal de dos términos: (1)  $e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)}$  en que las partículas en  $x_1$  y  $x_2$  se propagan como ondas planas de momentos  $k_1$  y  $k_2$  y (2)  $e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1) + i\theta(k_2 - k_1)}$  donde ahora los momentos se han intercambiado de acuerdo con la estadística de Bose. Aparece una fase relativa como efecto del intercambio. En la región  $R_{213}$ ,  $x_2 < x_1 < x_3$ , la solución es similar con los momentos  $k_1$  y  $k_2$  intercambiados y son las condiciones de acoplamiento en la frontera entre ambas regiones las que fijan la fase de intercambio. En este caso la reducción del problema de colisión entre las

partículas en  $x_1$  y  $x_2$  al centro de masas permite reinterpretar la interacción de intercambio como el defasaje inducido por el potencial delta de Dirac  $\delta(x_1 - x_2)$  que opera cuando la partícula en  $x_1$  sobrepasa a la otra en  $x_2$  a través de la frontera entre  $R_{123}$  y  $R_{213}$  [55]. En este proceso el momento total y la energía son cantidades conservadas así que el scattering es elástico de tal forma que las partículas en  $x_1$  y  $x_2$  solo intercambian sus momentos. Si los momentos de partida en  $R_{123}$  son  $k_1, k_2$  y  $k_3$ , los momentos de partida en  $R_{213}$  son  $k'_1 = k_2, k'_2 = k_1$  y  $k'_3 = k_3$  [55]. La solución en las otras regiones  $R_Q$  y  $R_P$  donde son los otros dos pares de partículas los que dan lugar al intercambio es similar.

Soluciones de este tipo existen en los dos sectores escalares y su energía es simplemente desplazada en  $2c^2$ :

$$E^{(0)} = E^{(3)} = E + 2c^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 + 2c^2 .$$

Conviene señalar que en estas soluciones del sistema supersimétrico ocurre que

$$S(k_1, k_2) = \frac{i(k_2 - k_1) - c}{i(k_2 - k_1) + c} = e^{i\theta(k_2 - k_1)} ,$$

$$S(k_1, k_3) = \frac{i(k_3 - k_1) - c}{i(k_3 - k_1) + c} = e^{i\theta(k_3 - k_1)} ,$$

$$S(k_2, k_3) = \frac{i(k_3 - k_2) - c}{i(k_3 - k_2) + c} = e^{i\theta(k_3 - k_2)} ,$$

de modo que el scattering factoriza en procesos a dos partículas.

### 3.2.2.2. Estados ligados en $\mathcal{SH}_3$ : modo cero fermiónico

En el sector  $\mathcal{SH}_3$ , los estados ligados propios de  $\hat{H}_3$ , con  $\hat{F} = 3$ , son aquellos en que dos de ellas nunca se intercambian pero el par colisiona con la tercera, tipo monómero-dímero, y/o estados en que las tres partículas mantienen su ordenación, tipo trímero. Los estados monómero-dímero definidos por la selección de momentos (3.28) y dados por (3.51) son estados ligados de  $\hat{H}_3$  con energía:

$$E_{\text{m/d}}^{(3)} = P^2 - \frac{c^2}{4} + P^2 - \frac{c^2}{4} + Q^2 + 2c^2 = Q^2 + 2P^2 + \frac{3c^2}{2} \quad (3.49)$$

en tanto que los estados tipo trímero definidos por los momentos complejos (3.25) y dados por (3.26) también son estados ligados de  $\hat{H}_3$  con energía:

$$E_{\text{t}}^{(3)} = P^2 - c^2 + P^2 + P^2 - c^2 + 2c^2 = 3P^2 \quad (3.50)$$

Vemos pues en (3.49) que  $E_{\text{m/d}}^{(3)} > 0$  aún en el caso en que el monómero y el dímero permanezcan en reposo. De otro lado cuando el trímero se encuentra en reposo,  $P = 0$ , (3.50) revela que el

estado resultante tiene energía cero. El trímero en reposo es pues el estado fundamental con  $\hat{F} = 3$  del sistema supersimétrico. Dado que tiene energía cero es un singlete del álgebra de supersimetría y no hay ruptura espontánea de supersimetría en el sistema SUSY LLY  $N = 3$ .

El espinor propio correspondiente se encuentra fácilmente recordando que  $\psi_0(x_1, x_2, x_3) = e^{-\frac{|c|}{2}(|x_1-x_2|+|x_1-x_3|+|x_2-x_3|)}$  es el modo cero del Hamiltoniano no SUSY de LLY para tres partículas. El espinor asociado en  $\mathcal{SH}_3$  pertenece al núcleo de la supercarga  $\hat{Q}$  (3.45)

$$\hat{Q}\Psi_0^{(3)}(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} 0 & D_1 & D_2 & D_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -D_2 & -D_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_1 & 0 & -D_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_1 & D_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -D_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \psi_0(x_1, x_2, x_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

habida cuenta de que

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial}{\partial x_3} - \frac{c}{2} - \frac{c}{2} \right] e^{-\frac{c}{2}[|x_1-x_2|+(x_1-x_3)+(x_2-x_3)]} &= 0 = \left[ \frac{\partial}{\partial x_3} + \frac{c}{2} + \frac{c}{2} \right] e^{-\frac{c}{2}[|x_1-x_2|+(x_3-x_1)+(x_3-x_2)]} \\ \left[ -\frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{c}{2} - \frac{c}{2} \right] e^{-\frac{c}{2}[(x_1-x_2)+(x_1-x_3)+(x_2-x_3)]} &= 0 = \left[ -\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{c}{2} + \frac{c}{2} \right] e^{-\frac{c}{2}[(x_2-x_1)+(x_3-x_1)+(x_3-x_2)]} \\ \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{c}{2} + \frac{c}{2} \right] e^{-\frac{c}{2}[(x_1-x_2)+(x_1-x_3)+|x_2-x_3|]} &= 0 = \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{c}{2} - \frac{c}{2} \right] e^{-\frac{c}{2}[(x_2-x_1)+(x_3-x_1)+|x_2-x_3|]} \end{aligned}$$

De (3.46), por otro lado, se comprueba que también pertenece al núcleo de la supercarga  $\hat{Q}^\dagger$ :  $\hat{Q}^\dagger\Psi_0^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = 0$ , así que el trímero en reposo es el modo cero fermiónico del sistema.

### 3.2.2.3. El espectro en los sectores espinoriales $\mathcal{SH}_1$ y $\mathcal{SH}_2$

El problema espectral en el sector  $\mathcal{SH}_1$

$$\hat{H}\Psi^{(1)} = E^{(1)}\Psi^{(1)} \quad , \quad \Psi^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_1^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_2^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_3^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} ,$$

se reduce a resolver el espectro del Hamiltoniano matricial  $\hat{H}_1$ :

$$\hat{H}_1 \begin{pmatrix} \psi_1^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_2^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_3^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \end{pmatrix} = E^{(1)} \begin{pmatrix} \psi_1^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_2^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_3^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \end{pmatrix}$$

mientras que el problema espectral en el sector  $\mathcal{SH}_2$

$$\hat{H}\Psi^{(2)} = E^{(1)}\Psi^{(2)} \quad , \quad \Psi^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \psi_1^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_2^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_3^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ 0 \end{pmatrix} ,$$

consiste en identificar el espectro de valores y espinores propios del Hamiltoniano matricial  $\hat{H}_2$ :

$$\hat{H}_2 \begin{pmatrix} \psi_1^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_2^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_3^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \end{pmatrix} = E^{(2)} \begin{pmatrix} \psi_1^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_2^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_3^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \end{pmatrix} .$$

Ambos Hamiltonianos son de tipo LLY entre tres partículas con espín 1 que se mueven en una línea pero con interacciones de contacto que incluyen posiciones y estados de espín. Una resolución analítica directa no es posible (el álgebra de Yang-Baxter no es aplicable). La estructura del álgebra de supersimetría, sin embargo, permite obtener la mitad de las funciones propias del Hamiltoniano supersimétrico en los sectores  $\mathcal{SH}_1$  y  $\mathcal{SH}_2$  a partir de las autofunciones en los sectores escalares ya conocidas, puesto que los Hamiltonianos  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_3$  son de tipo LLY standard, mediante la acción de los operadores de supercarga  $\hat{Q}$  y  $\hat{Q}^\dagger$ .

### 3.2.2.4. Estado fundamental bosónico en $\mathcal{SH}_2$ y estados ligados de tipo monómero-dímero

Dada la importancia que tiene el análisis de la variedad de estados fundamentales en cualquier sistema supersimétrico en relación con el problema crucial de la ruptura espontánea de supersimetría abordamos ahora la existencia de un segundo estado fundamental, en este caso bosónico, el número fermiónico es  $\hat{F} = 2$ , a añadir al ya identificado con  $\hat{F} = 3$ . Dado el modo cero del Hamiltoniano no SUSY  $\psi_0(x_1, x_2, x_3)$  descrito anteriormente se comprueba que

$$\begin{pmatrix} -\Delta - 2c\delta(x_1 - x_2) + 2c^2 & 2c\delta(x_2 - x_3) & -2c\delta(x_1 - x_3) \\ 2c\delta(x_2 - x_3) & -\Delta - 2c\delta(x_1 - x_3) + 2c^2 & 2c\delta(x_1 - x_2) \\ -2c\delta(x_1 - x_3) & 2c\delta(x_1 - x_2) & -\Delta - 2c\delta(x_2 - x_3) + 2c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ -\psi_0 \\ \psi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

El espinor

$$\Psi_0^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = e^{-\frac{|c|}{2}(|x_1 - x_2| + |x_1 - x_3| + |x_2 - x_3|)} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

es pues un modo cero de  $\hat{H}_2$ , propio de  $\hat{F}$  con autovalor 2 y de la matriz

$$\Sigma = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

con autovalor  $-1$ .

La estructura de la variedad de estados fundamentales es pues idéntica en los modelos de LLY supersimétricos con  $N = 3$  y con  $N = 2$  partículas. En ambos casos hay un estado fundamental bosónico y otro fermiónico. La supersimetría del sistema no es espontáneamente rota. Ahora bien, módulo contribuciones del espectro continuo, el índice de Witten es cero. La única diferencia es que el estado fundamental bosónico pertenece a un sector escalar y el fermiónico a uno espinorial si  $N = 2$  mientras que en el sistema de tres partículas la situación esla contraria: el bosónico vive en un sector espinorial y el fermiónico en uno escalar.

Claramente en el sector  $\mathcal{SH}_2$  hay estados ligados de  $\hat{H}_2$  bosónicos que provienen de los trímeros y monómero-dímeros fermiónicos existentes en  $\mathcal{SH}_3$ :

$$\begin{aligned}\Psi_P^{(2)}(x_1, x_2, x_3) &= \hat{Q}\Psi_P^{(3)}(x_1, x_2, x_3) \\ \Psi_P^{(3)}(x_1, x_2, x_3) &= \psi_P(x_1, x_2, x_3) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T\end{aligned}$$

donde

$$\psi_P(x_1, x_2, x_3) = e^{iPX} e^{-\frac{c}{2}(|x_1-x_2|+|x_1-x_3|+|x_2-x_3|)}$$

y

$$\begin{aligned}\Psi_{QP}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) &= \hat{Q}\Psi_{QP}^{(3)}(x_1, x_2, x_3) \\ \Psi_{QP}^{(3)}(x_1, x_2, x_3) &= \psi_{QP}(x_1, x_2, x_3) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}\psi_{PQ}(x_1, x_2, x_3) &= \exp[2iPX_{12}]\exp\left[-\frac{|c|}{2}|x_1 - x_2|\right]\exp[iQx_3] + \\ &+ \exp[2iPX_{13}]\exp\left[-\frac{|c|}{2}|x_1 - x_3|\right]\exp[iQx_2] + \\ &+ \exp[2iPX_{23}]\exp\left[-\frac{|c|}{2}|x_2 - x_3|\right]\exp[iQx_1]\end{aligned}\quad (3.51)$$

### 3.2.2.5. Estados de colisión espinoriales

$\hat{H}_1$  es repulsivo y no admite por tanto ningún tipo de estado ligado. Es posible identificar sin embargo parte de los estados de colisión tanto de  $\hat{H}_1$  como de  $\hat{H}_2$ : aquellos que provienen respectivamente de los estados de colisión de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_3$  vía la acción de  $\hat{Q}^\dagger$  ó  $\hat{Q}$ . El cálculo es similar en todas las regiones del espacio de configuración definidas en (3.10) y en aras de la brevedad, nos restringimos al par de regiones  $R_{123}$  y  $R_{213}$ .

Comenzando con los autoestados de tipo monómero del Hamiltoniano matricial  $\hat{H}_1$  que provienen del sector  $\mathcal{SH}_0$  su obtención procede por la actuación de  $\hat{Q}^\dagger$  sobre las funciones de

onda (3.47) y (3.48) con  $\iota = 0$  respectivamente en las regiones  $R_{123} : x_1 < x_2 < x_3$  y  $R_{213} : x_2 < x_1 < x_3$  cumpliendo las pertinentes condiciones de empalme en el intercambio de dos de las tres partículas. Las correspondientes autofunciones fermiónicos en  $\mathcal{SH}_1$  son pues en las dos regiones:

$$\hat{Q}^\dagger \Psi_{123}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ D_1^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ D_2^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ D_3^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -D_2^\dagger & D_1^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -D_3^\dagger & 0 & D_1^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -D_3^\dagger & D_2^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_3^\dagger & -D_2^\dagger & D_1^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{123}^{(0)}(x_1, x_2, x_3) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{1(123)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_{2(123)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_{2(123)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{Q}^\dagger \Psi_{213}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ D_1^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ D_2^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ D_3^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -D_2^\dagger & D_1^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -D_3^\dagger & 0 & D_1^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -D_3^\dagger & D_2^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_3^\dagger & -D_2^\dagger & D_1^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{213}^{(0)}(x_1, x_2, x_3) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{1(213)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_{2(213)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_{2(213)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

Un cálculo rutinario proporciona el resultado siguiente para los autoestados de tipo monómero que provienen del sector  $\mathcal{SH}_0$ :

$$\psi_{1(123)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} [(k_1 - ic)e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + (k_1 - ic)e^{i(k_1x_2+k_2x_1)+i\theta(k_2-k_1)}] e^{ik_3x_3}$$

$$\psi_{2(123)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} [k_2e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + k_1e^{i(k_1x_2+k_2x_1)+i\theta(k_2-k_1)}] e^{ik_3x_3}$$

$$\psi_{3(123)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} (k_3 + ic) [e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + e^{i(k_1x_2+k_2x_1)+i\theta(k_2-k_1)}] e^{ik_3x_3}$$

en la región  $R_{123}$  y

$$\psi_{1(213)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} [k_1e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + k_2e^{i(k_1x_2+k_2x_1)+i\theta(k_2-k_1)}] e^{ik_3x_3}$$



$$\psi_{2(213)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} [(k_2 - ic)e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + (k_1 - ic)e^{i(k_1x_2+k_2x_1)+i\theta(k_2-k_1)}] e^{ik_3x_3}$$

$$\psi_{3(213)}^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} (k_3 + ic) [e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + e^{i(k_1x_2+k_2x_1)+i\theta(k_2-k_1)}] e^{ik_3x_3}$$

en la región  $R_{213}$ .

Las autofunciones de tipo monómero del Hamiltoniano matricial  $\hat{H}_2$  que provienen del sector  $\mathcal{SH}_3$  se calculan de forma similar, esto es:

$$\hat{Q}\Psi_{123}^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & D_1 & D_2 & D_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -D_2 & -D_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_1 & 0 & -D_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_1 & D_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -D_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \psi_{123}^{(3)}(x_1, x_2, x_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \psi_{1(123)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_{2(123)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_{2(123)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{Q}\Psi_{213}^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & D_1 & D_2 & D_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -D_2 & -D_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_1 & 0 & -D_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_1 & D_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -D_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \psi_{213}^{(3)}(x_1, x_2, x_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \psi_{1(213)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_{2(213)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ \psi_{2(213)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) \\ 0 \end{pmatrix},$$

donde

$$\psi_{1(123)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} [(k_1 + ic)e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + (k_1 + ic)e^{i(k_1x_2+k_2x_1)+i\theta(k_2-k_1)}] e^{ik_3x_3}$$

$$\psi_{2(123)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} [k_2 e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + k_1 e^{i(k_1x_2+k_2x_1)+i\theta(k_2-k_1)}] e^{ik_3x_3}$$

$$\psi_{3(123)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} (k_3 - ic) [e^{i(k_1x_1+k_2x_2)} + e^{i(k_1x_2+k_2x_1)+i\theta(k_2-k_1)}] e^{ik_3x_3}$$

en la región  $R_{123}$  y

$$\psi_{1(213)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} \left[ k_1 e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + k_2 e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1) + i\theta(k_2 - k_1)} \right] e^{ik_3 x_3}$$

$$\psi_{2(213)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} \left[ (k_2 + ic) e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + (k_1 + ic) e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1) + i\theta(k_2 - k_1)} \right] e^{ik_3 x_3}$$

$$\psi_{3(213)}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{\sqrt{m}} e^{\frac{i}{2}[\theta(k_1-k_2)+\theta(k_1-k_3)+\theta(k_2-k_3)]} (k_3 - ic) \left[ e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1) + i\theta(k_2 - k_1)} \right] e^{ik_3 x_3}$$

en la región  $R_{213}$ . Bajo la guía del ansatz de Bethe no es difícil pero sí laborioso proceder a calcular estas autofunciones en las demás regiones.



# Capítulo 4

## Dinámica del problema de Kepler-Coulomb

### 4.1. El problema de Kepler-Coulomb clásico en dos dimensiones

Consideremos el problema de Kepler-Coulomb en un plano descrito por la acción clásica:

$$S = \int dt L \left( \frac{dx_k}{dt}, x_k \right) = \int dt \left[ \frac{\mu}{2} \frac{dx_k}{dt} \frac{dx_k}{dt} + \frac{\alpha}{r} \right] \quad , \quad k = 1, 2 \quad \alpha > 0$$

donde  $\mu$  es la masa reducida de los dos cuerpos,  $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$  la posición de la partícula relativa al centro de fuerzas, y  $\alpha$  la intensidad de la interacción, con dimensiones  $[\alpha] = ML^3T^{-2}$ . El Hamiltoniano que gobierna la dinámica de este sistema es:

$$H = \frac{1}{2\mu} p_k p_k - \frac{\alpha}{r} \quad , \quad p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_k} .$$

El momento angular, un escalar en el plano, viene dado por:

$$L = x_1 p_2 - x_2 p_1 \quad , \quad [L] = ML^2T^{-1}$$

El Hamiltoniano  $H$  es invariante bajo traslaciones temporales y rotaciones en el plano, así que, la energía y el momento angular son cantidades conservadas, esto es, sus corchetes de Poisson con el Hamiltoniano son nulos:  $\{H, H\} = \{H, L\} = 0$ . Existe además otro invariante funcionalmente independiente de los dos anteriores: el vector de Runge-Lenz que en el plano tiene dos componentes

$$A_1 = \frac{1}{\mu\alpha} p_2 L - \frac{x_1}{r} \quad , \quad A_2 = -\frac{1}{\mu\alpha} p_1 L - \frac{x_2}{r} \quad , \quad [A_k] = 1$$

tales que  $\{H, A_k\} = 0$ ,  $k = 1, 2$ .

El problema de Kepler es así sobreintegrable, el vector de Runge-Lenz da lugar a una simetría oculta del problema de Kepler, su conservación explica la constancia de la órbita para los potenciales gravitacional y de Coulomb (la órbita no precesa) y la simetría asociada se denomina “simetría dinámica” ya que su carácter no es geométrico. Junto con el momento angular el vector de Runge-Lenz genera una simetría respecto del grupo  $\mathbb{SO}(3)$  tal que el Hamiltoniano es una función del operador de Casimir de este grupo.

## 4.2. El problema de Kepler-Coulomb cuántico en dos dimensiones

<sup>1</sup> En el proceso de cuantificación las variables canónicas conjugadas del espacio de fases se promueven a operadores sobre un espacio de Hilbert que satisfacen el álgebra de Heisenberg:  $[\hat{x}_k, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{kj}$ . Elegiremos la representación de coordenadas de este álgebra

$$p_k \rightarrow \hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \quad , \quad x_k \rightarrow \hat{x}_k = x_k \quad ,$$

en la descripción del problema de Kepler cuántico. El Hamiltoniano por tanto del problema de Kepler-Coulomb es el operador de Schrödinger:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{\alpha_Z}{r} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right] - \frac{\alpha_Z}{r} \quad , \quad \alpha_Z = \frac{Ze^2}{4\pi} = Z\alpha > 0 \quad .$$

Tratamos pues con el problema de determinar el espectro de energías y las correspondientes autofunciones de un átomo hidrogenoideo restringido a un plano. Es pertinente recordar las unidades atómicas de longitud y energía<sup>2</sup>:

1. El radio de Bohr:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{\hbar^2}{\mu\alpha} = 0.5292 \text{ \AA}$$

donde  $\mu$  es la masa reducida del electrón y el núcleo,  $\epsilon_0$  es la permitividad del vacío que tomamos  $\epsilon_0 = 1$  y  $e$  es la carga elemental del electrón.

---

<sup>1</sup>Aunque no es el propósito de esta Memoria tratar con aspectos experimentales, cabe advertir que el estudio del átomo de hidrógeno en el plano no es un asunto meramente académico. Desde el principio de los años 80 se conoce que átomos de hidrógeno con el espín polarizado pueden ser constreñido a un plano por campos magnéticos adecuados. Si además se somete el gas de Bose de átomos de hidrógeno que fluye en el plano a temperaturas suficientemente bajas surgen los fenómenos asociados de superfluidez y condensación de Bose-Einstein, véase [62].

<sup>2</sup>El parámetro  $\alpha_Z$  tal como está aquí definido es  $Z\hbar c$  veces la constante de estructura fina.

2. La constante de Rydberg:

$$1\text{Ry} = hcR_\infty = \frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2} = 13.605 \text{ eV} \quad , \quad R_\infty = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^3 c}$$

Como su versión clásica el sistema de Kepler-Coulomb es sobreintegrable. Además del operador energía existen otros dos operadores que conmutan con el Hamiltoniano, el momento angular

$$\hat{L} = -i\hbar \left( x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \quad , \quad [\hat{H}, \hat{L}] = 0$$

y el vector de Runge-Lenz, ordenado de modo que  $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^\dagger$

$$\hat{A}_1 = \frac{1}{2\mu\alpha_Z} \left( \hat{p}_2 \hat{L} + \hat{L} \hat{p}_2 \right) - \frac{\hat{x}_1}{r} \quad , \quad \hat{A}_2 = -\frac{1}{2\mu\alpha_Z} \left( \hat{p}_1 \hat{L} + \hat{L} \hat{p}_1 \right) - \frac{\hat{x}_2}{r} \quad , \quad [\hat{H}, \hat{A}_1] = [\hat{H}, \hat{A}_2] = 0 .$$

Más aún, las relaciones de conmutación

$$[\hat{L}, \hat{A}_1] = i\hbar \hat{A}_2 \quad , \quad [\hat{L}, \hat{A}_2] = -i\hbar \hat{A}_1 \quad , \quad [\hat{A}_1, \hat{A}_2] = -2i\hbar \hat{H} \hat{L}$$

sugieren que, sobre el espacio de funciones propias de  $\hat{H}$  de energía negativa (estados ligados), los operadores  $\hat{L}$  y  $\hat{A}$  cierran el álgebra de Lie que genera el grupo  $\mathbb{SO}(3)$ .

#### 4.2.1. Espectro discreto de $\hat{H}$

En orden a resolver el problema del espectro discreto  $\hat{H}$  es útil redefinir las componentes del vector de Runge-Lenz dividiéndolas por la raíz cuadrada del módulo de la energía del nivel a considerar puesto que entonces

$$\hat{M}_1 = \sqrt{\frac{\mu\alpha_Z^2}{-2E}} \hat{A}_1 \quad , \quad \hat{M}_2 = \sqrt{\frac{\mu\alpha_Z^2}{-2E}} \hat{A}_2 \quad , \quad \hat{M}_3 = \hat{L} \quad , \quad [\hat{M}_a, \hat{M}_b] = i\hbar \epsilon_{abc} \hat{M}_c .$$

de modo que el conjunto de los tres operadores aparece manifiestamente como el conjunto de generadores de Lie  $\mathbb{SO}(3)$ . Del operador de Casimir de este álgebra de rango 1

$$\hat{C}^2 = \hat{M}_1^2 + \hat{M}_2^2 + \hat{M}_3^2 = -\frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hat{H}} \left( \hat{A}_1^2 + \hat{A}_2^2 \right) + \hat{L}^2$$

y de la relación

$$\hat{A}_1^2 + \hat{A}_2^2 = \frac{2\hat{H}}{\mu\alpha_Z^2} \left( \hat{L}^2 + \frac{\hbar^2}{4} \right) + 1$$

se deduce que el operador Hamiltoniano es una función racional del operador de Casimir:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\mu\alpha_Z^2}{\hat{C}^2 + \frac{\hbar^2}{4}} \quad (4.1)$$

Esta es precisamente la caracterización de una simetría dinámica: los autovalores se pueden determinar de forma algebraica sin necesidad de recurrir a resolver ningún problema de tipo Sturm-Liouville. Se obtienen de los valores que el operador de Casimir adquiere sobre cada representación irreducible del álgebra de Lie de  $\mathbb{SO}(3)$ , que son bien conocidos:  $j(j+1)$ ,  $j \in \mathbb{N}$ . Además del número natural  $j$ , una base ortonormal en cada sub-espacio irreducible de dimensión  $2j+1$  se puede formar mediante los vectores propios del operador en el sub-álgebra de Cartan  $\hat{L}_3$  con autovalores:  $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ . La base ortonormal de kets propios comunes a  $\hat{C}^2$  y  $\hat{M}_3$   $\{|j; m\rangle\}$  con autovalores bien conocidos

$$\hat{C}^2 |j; m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j; m\rangle \quad , \quad \hat{M}_3 |j; m\rangle = \hbar m |j; m\rangle ,$$

resuelve automáticamente el problema espectral  $\hat{H}\psi_E = -|E|\psi_E$ :

$$E_j = -\frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \frac{1}{(2j+1)^2} \equiv -\frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad , \quad n = 2j+1 . \quad (4.2)$$

Cabe señalar que  $n$ , el número cuántico principal en el átomo de hidrógeno plano, es siempre un número natural impar toda vez que  $m$  y, por tanto  $j$ , es un entero.

#### 4.2.2. Funciones propias de estado ligado de $\hat{H}$

La identificación de las autofunciones usando la simetría dinámica es un proceso algo más complicado. Partiendo del estado con peso más alto  $|j; j\rangle$  en la representación de dimensión  $2j+1$  que es aniquilado por el operador “ascensor”  $\hat{M}_+ = \hat{M}_1 + i\hat{M}_2$

$$\hat{M}_+ |j, j\rangle = 0 ,$$

uno actúa de forma iterativa con el operador “descensor”  $\hat{M}_- = \hat{M}_1 - i\hat{M}_2$ . De las fórmulas  $\hat{M}_\pm |j; m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j; m \pm 1\rangle$  uno obtiene

$$|j, j-k\rangle = \frac{1}{\hbar^k \sqrt{(2j)(2j-1)\cdots(2j-k+1) \cdot k!}} \hat{M}_-^k |j, j\rangle .$$

hasta aniquilar el de peso más bajo:

$$\hat{M}_- |j, -j\rangle = 0 .$$

En orden a obtener expresiones analíticas, dada la simetría geométrica del problema, es conveniente introducir coordenadas polares planas

$$(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \Rightarrow \mathbb{R}^+ \times S^1 = [0, \infty) \times [0, 2\pi)$$

$$x_1 = r \cos \varphi \quad , \quad x_2 = r \sin \varphi \quad , \quad r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \quad , \quad \varphi = \arctan \frac{x_2}{x_1}$$

de forma que las funciones de onda propias del operador Hamiltoniano son funciones de  $r$  y  $\varphi$ :  $\psi_{jm}(r, \varphi) = \langle r, \varphi | j, m \rangle$ . El operador Hamiltoniano a su vez únicamente requiere escribir el Laplaciano en polares

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{\alpha_Z}{r} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{\alpha_Z}{r} \quad , \quad (4.3)$$

mientras que el momento angular resulta  $\hat{L} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$  y las componentes del vector de Runge-Lenz son algo más complicadas en este sistema de coordenadas:

$$\begin{aligned} \hat{A}_1 &= -\frac{\hbar^2}{2\mu\alpha_Z} \left[ \frac{2 \cos \varphi}{r} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + 2 \sin \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi} \right] - \cos \varphi \quad , \\ \hat{A}_2 &= -\frac{\hbar^2}{2\mu\alpha_Z} \left[ \frac{2 \sin \varphi}{r} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} - 2 \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi} \right] - \sin \varphi \quad . \end{aligned}$$

Sobre la representación irreducible  $\psi_{jm}(r, \varphi) = \langle r\varphi | jm \rangle$  los operadores escalera  $\hat{M}_\pm = \hat{M}_1 \pm i\hat{M}_2$  son

$$\begin{aligned} \hat{M}_+ &= \frac{\hbar^3}{2\mu\alpha_Z} (2j+1) e^{i\varphi} \left[ i \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi} - \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{2r} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\mu\alpha_Z}{\hbar^2} \right] \quad , \\ \hat{M}_- &= \frac{\hbar^3}{2\mu\alpha_Z} (2j+1) e^{-i\varphi} \left[ -i \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi} - \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{2r} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\mu\alpha_Z}{\hbar^2} \right] \quad . \end{aligned}$$

La acción sobre las funciones de onda propias de  $\hat{H}$

$$\hat{M}_\pm \psi_{jm}(r, \varphi) = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \psi_{jm\pm 1}(r, \varphi) \quad , \quad (4.4)$$

desvela la ecuación diferencial que garantiza la aniquilación del estado de peso más alto:

$$\hat{M}_+ \psi_{jj}(r, \varphi) = \frac{\hbar^3}{2\mu\alpha_Z} (2j+1) e^{i\varphi} \left[ i \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi} - \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{2r} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\mu\alpha_Z}{\hbar^2} \right] \psi_{jj}(r, \varphi) = 0 \quad . \quad (4.5)$$

El ansatz de separación de variables  $\psi_{jj}(r, \varphi) = \langle r; \varphi | j; j \rangle = f_j(r) e^{ij\varphi}$  reduce la ecuación en derivadas parciales de segundo orden (4.5) a una ecuación diferencial de primer orden para  $f_j(r)$  fácilmente soluble:

$$f_j'(r) = \left[ \frac{j}{r} - \frac{2\mu\alpha_Z}{\hbar^2(2j+1)} \right] f_j(r) \quad \Rightarrow \quad f_j(r) = r^j \exp \left[ -\frac{2\mu\alpha_Z r}{\hbar^2(2j+1)} \right] \quad ,$$

donde  $f_j(r)$  proporciona la función de onda de peso más alto propia de  $\hat{H}$  con autovalor  $E_j$ , que después de normalizada toma la forma:

$$\psi_{jj}(r, \varphi) = 2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\mu\alpha_Z u^j}{\hbar^2 \sqrt{(2j+1)^3 (2j)!}} e^{ij\varphi} e^{-\frac{u}{2}} \quad , \quad u = \frac{4\mu\alpha_Z r}{\hbar^2(2j+1)} \quad . \quad (4.6)$$



La función de onda siguiente, ortogonal a la anterior y degenerada en energía con ella, se obtiene mediante la acción del operador “descensor” sobre esta última

$$\psi_{jj-1}(r, \varphi) = \frac{1}{\hbar\sqrt{2j}} \hat{M}_- \psi_{jj}(r, \varphi) = N^{(1)} (\mu\alpha_Z)^j r^{j-1} P_1(r) e^{-\frac{u}{2}} e^{i(j-1)\varphi} .$$

La constante de normalización  $N^{(1)}$  y el polinomio  $P_1(r)$  resultan ser:

$$N^{(1)} = \frac{2^{2j+1}}{\hbar^{2j} \sqrt{2\pi} (2j+1)^{2j+1} (2j)^2 \Gamma(2j)} , \quad P_1(r) = \left[ j(2j-1) - \frac{4\mu\alpha_Z j r}{\hbar^2 (2j+1)} \right] .$$

Así pues, se verifica que la iteración de este procedimiento proporciona los otros estados en la representación irreducible

$$\hat{M}_-^{j-m} \psi_{jj}(r\varphi) \propto \psi_{jm}(r, \varphi) = N^{j-|m|} r^{|m|} P_{j-|m|}(r) e^{-\frac{u}{2}} e^{im\varphi}$$

con constantes de normalización  $N^{j-|m|}$  a determinar, con tal de que se verifiquen las relaciones de recurrencia entre los polinomios  $P_{j-|m|}(r)$ ,  $P_{j-|m|-1}(r)$  y las derivadas de este último siguientes:

$$P_{j-|m|}(r) = \left[ (2|m|+1)(|m|+1) - \frac{2(j+|m|+1)r}{(2j+1)\hbar^2} \right] P_{j-|m|-1}(r) + \frac{(2|m|+1)r}{2} P'_{j-|m|-1}(r) . \quad (4.7)$$

Esta relación de recurrencia (4.7) es satisfecha por las funciones hipergeométricas confluentes de Kummer:

$${}_1F_1[a, b, z] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{(b)_k} \frac{z^k}{k!} , \quad (a)_k = \frac{\Gamma(a+1)}{\Gamma(a-k+1)} , \quad (b)_k = \frac{\Gamma(b+1)}{\Gamma(b-k+1)} , \quad (4.8)$$

en nuestro caso para los valores  $a = |m| - j \in \mathbb{Z}$  y  $b = 2|m| + 1 \in \mathbb{Z}$  en que la serie trunca a los polinomios generalizados de Laguerre

$$L_{j-|m|}^{2|m|}(u) = \binom{j+|m|}{j-|m|} {}_1F_1[|m|-j, 2|m|+1, u] . \quad (4.9)$$

Las funciones de onda normalizadas propias de  $\hat{H}$  con energía negativa son por tanto :

$$\psi_{jm}(r, \varphi) = \frac{2\mu\alpha_Z}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2(j+|m|)!}{(2j+1)^3(j-|m|)! \pi}} \frac{u^{|m|}}{(2|m|)!} {}_1F_1[|m|-j, 2|m|+1, u] e^{im\varphi} e^{-\frac{u}{2}} . \quad (4.10)$$

El autovalor del momento angular,  $\hat{M}_3 \psi_{jm}(r, \varphi) = \hbar m \psi_{jm}(r, \varphi)$  rompe la degeneración, mientras que la dimensión del espacio de autofunciones degeneradas en energía es la de la

representación irreducible:  $\sum_{m=-j}^j 1 = 2j + 1 = n$ . Las autofunciones comunes a  $\hat{C}^2$  y  $\hat{M}_3$  forman una base completa en el módulo irreducible  $\{\psi_{jm}\}$  y cumplen las siguientes relaciones de ortonormalidad:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r dr \psi_{j_1 m_1}^*(r, \varphi) \psi_{j_2 m_2}(r, \varphi) = \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} .$$

En resumen, la simetría dinámica permite determinar los autovalores de energía de forma grupal. La ayuda de la simetría geométrica permite la búsqueda de autofunciones meramente mediante la resolución de una ecuación diferencial de primer orden. En unidades atómicas, los autovalores y autofunciones del átomo hidrogenoideo plano se escriben como:

$$E_j = -4Ry \frac{Z^2}{(2j + 1)^2} , \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi_{jm}(r, \varphi) = \frac{2Z}{a_0} \sqrt{\frac{2(j + |m|)!}{(2j + 1)^3 (j - |m|)! \pi}} \frac{1}{(2|m|)!} \left(\frac{4Zr}{na_0}\right)^{|m|} {}_1F_1 \left[ |m| - j, 2|m| + 1, \frac{4Zr}{na_0} \right] e^{im\varphi} e^{-\frac{2Zr}{na_0}}$$

Nótese que la simetría dinámica ó accidental mezcla la parte radial y la angular de las funciones de onda

$$\psi_{jm}(r, \varphi) = R_{jm}(r) Y_m(\varphi)$$

en una representación irreducible de  $\mathbb{SO}(3)$ .

### 4.2.3. Figuras y Tablas

Para cerrar el estudio de los átomos hidrogenoideos en el plano se ofrecen a continuación varias Figuras y Tablas que recogen los resultados esenciales.

- En la Figura 4.1 se muestran los niveles de energía para el átomo de hidrógeno en el plano. Es de resaltar que: 1. En el plano sólo dos números cuánticos caracterizan el espectro: el número cuántico principal  $n = 2j + 1$ , que es siempre impar, y el número cuántico azimutal o magnético  $m$ , que es un entero menor en módulo que  $j$ . 2. La degeneración del sub-espacio de energía  $E_j$  está filtrada por el número cuántico  $m$ :  $\sum_{m=-j}^j 1 = 2j + 1 = n$ . 3. La energía del estado fundamental es  $E_0 = -4 \text{ Ry}$  mientras que la diferencia entre las energías de los dos primeros niveles vale:  $\Delta E = E_1 - E_0 = 3.5 \text{ Ry}$ .
- En la Tabla 4.1 se muestran los autovalores y las autofunciones normalizadas del Hamiltoniano (4.1) para los niveles de energía  $n = 1, 3, 5$ .

- En las Tablas 4.2 y 4.3 se muestran: (a) Las gráficas de la parte radial de la función de onda  $a_0 R_{jm}(r)$  como función de  $\frac{r}{a_0}$  para las autofunciones de los tres primeros niveles de energía del átomo de hidrógeno. (b) Las gráficas de la densidad de carga  $\rho_{jm}(r) = a_0 |R_{jm}(r)|^2 r$  también para los tres primeros niveles como función de  $\frac{r}{a_0}$ . Se observa en ambas Tablas que las gráficas del primer nivel no presentan nodos, en el segundo nivel no tienen nodos las correspondientes a  $m = \pm 1$ , pero exhiben un nodo si  $m = 0$ . En el tercer nivel, no hay nodos si  $m = \pm 2$ , uno si  $m = \pm 1$  y dos cuando  $m = 0$ , etcetera. Esto permite deducir que el número de nodos de la parte radial de una autofunción en el nivel  $n = 2j + 1$  es:  $k = j - |m| = \frac{n-2|m|-1}{2}$ .
- En las Tablas 4.4 y 4.5 se representa: (a) Una gráfica tridimensional de la densidad de probabilidad  $a_0^2 |\psi_{jm}(x_1, x_2)|^2$  en función de  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_2}{a_0}\right)$  para los niveles  $n = 1, 3, 5$ . (b) Las curvas de nivel de la densidad de probabilidad para estos tres niveles de energía. Puesto que la dependencia angular es una fase la densidad de probabilidad es invariante respecto de rotaciones. Los nodos de la función radial dan lugar a círculos de densidad de probabilidad nula.
- El valor más probable del módulo de la posición del electrón en el estado fundamental del átomo de hidrógeno es el máximo de la densidad de carga radial  $\rho_{jm}(r) = a_0 |R_{jm}(r)|^2 r$  en dicho estado, es decir,

$$\left. \frac{d\rho_{00}(r)}{dr} \right|_{r_0} = 0 \Leftrightarrow r_0 = \frac{1}{4} \cdot \frac{a_0}{Z} .$$

Por otro lado, el valor esperado del módulo del operador de posición  $\hat{r}$  en el estado fundamental es:

$$\langle 0, 0 | \hat{r} | 0, 0 \rangle = 2\pi \int_0^\infty dr r^2 \rho_{00}(r) = \frac{1}{2} \cdot \frac{a_0}{Z} = 2r_0$$

es decir, el doble del valor más probable de la distancia al núcleo.

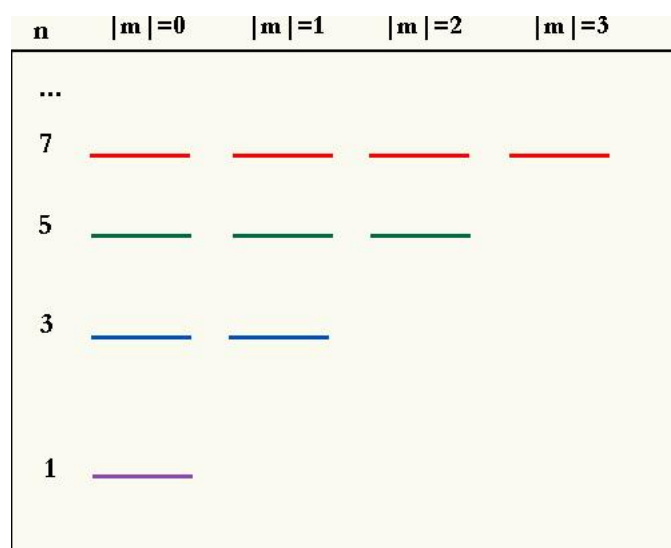


Figura 4.1: Niveles de energía del átomo de hidrógeno en el plano.

Tabla 4.1: Valores propios y funciones propias del Hamiltoniano (4.3) para  $n = 1, 3, 5$ 

Energía	Función propia
$E_1 = -4 Z^2 \text{Ry}$	$\psi_{10}(r, \varphi) = \frac{2Z}{a_0} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\frac{2Zr}{a_0}}$
$E_3 = -\frac{4}{9} Z^2 \text{Ry}$	$\psi_{31}(r, \varphi) = \frac{8Z}{9a_0\sqrt{3\pi}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{2Zr}{3a_0}} e^{i\varphi}$ $\psi_{30}(r, \varphi) = \frac{2Z}{9a_0} \sqrt{\frac{2}{3\pi}} \left(3 - \frac{4Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{2Zr}{3a_0}}$ $\psi_{3(-1)}(r, \varphi) = \frac{8Z}{9a_0\sqrt{3\pi}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{2Zr}{3a_0}} e^{-i\varphi}$
$E_5 = -\frac{4}{25} Z^2 \text{Ry}$	$\psi_{52}(r, \varphi) = \frac{16Z}{125 a_0 \sqrt{15\pi}} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-\frac{2Zr}{5a_0}} e^{2i\varphi}$ $\psi_{51}(r, \varphi) = \frac{8Z}{125 a_0 \sqrt{15\pi}} \frac{Zr}{a_0} \left(15 - \frac{4Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{2Zr}{5a_0}} e^{i\varphi}$ $\psi_{50}(r, \varphi) = \frac{2Z}{125 a_0} \sqrt{\frac{2}{5\pi}} \left(25 - \frac{40Zr}{a_0} + \frac{8Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-\frac{2Zr}{5a_0}}$ $\psi_{5(-1)}(r, \varphi) = \frac{8Z}{125 a_0 \sqrt{15\pi}} \frac{Zr}{a_0} \left(15 - \frac{4Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{2Zr}{5a_0}} e^{-i\varphi}$ $\psi_{5(-2)}(r, \varphi) = \frac{16Z}{125 a_0 \sqrt{15\pi}} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-\frac{2Zr}{5a_0}} e^{-2i\varphi}$

Tabla 4.2: Gráficas de la función de onda radial  $a_0 R_{jm}(r)$  vs  $\frac{r}{a_0}$  en  $\psi_{jm}(r, \varphi)$  para los tres primeros niveles.

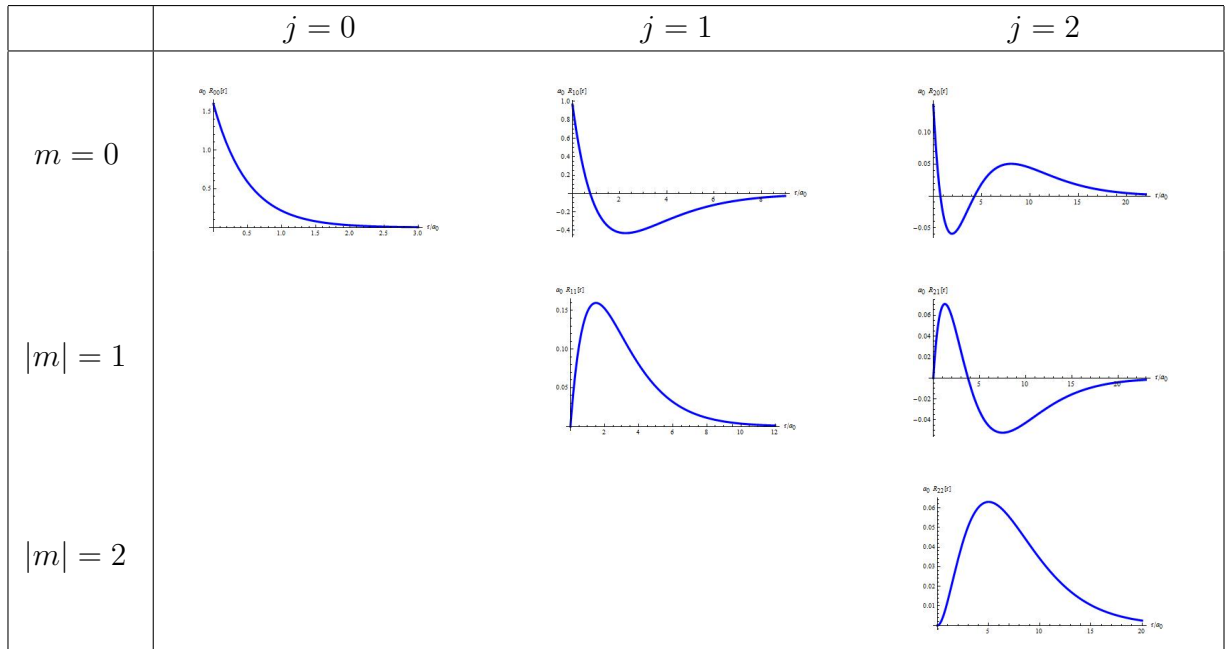


Tabla 4.3: Densidad de carga radial  $\rho_{jm}(r) = a_0 |R_{jm}(r)|^2 r$  vs  $\frac{r}{a_0}$  para  $j = 0, 1, 2$ .

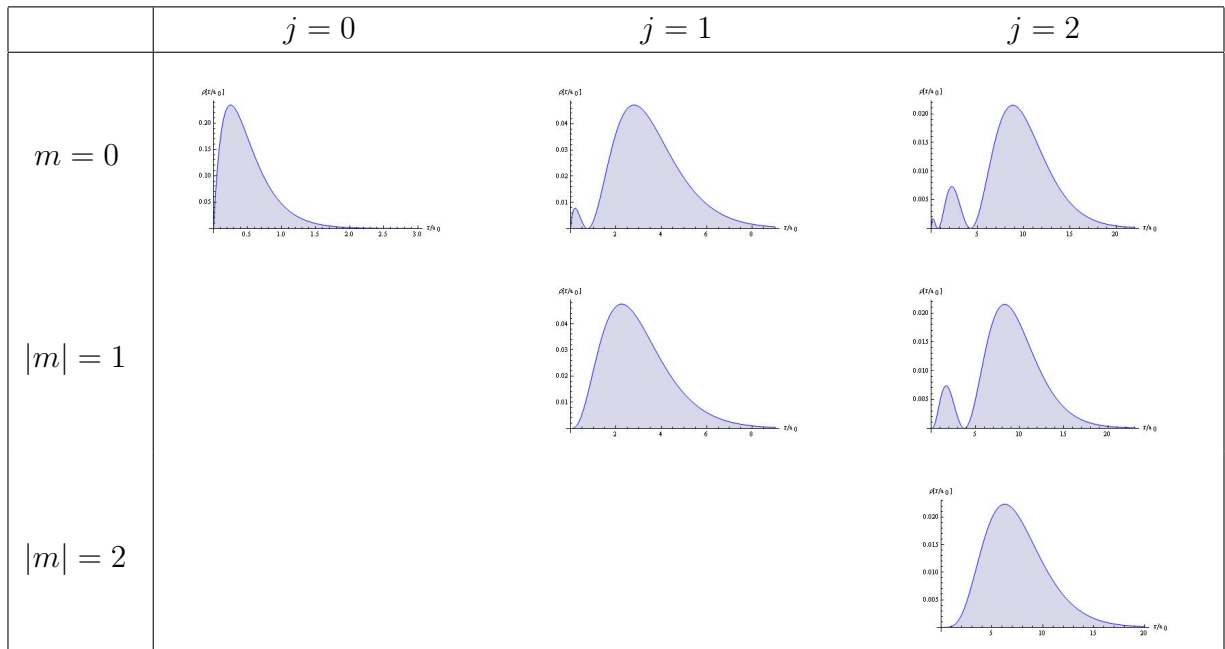


Tabla 4.4: Densidad de probabilidad  $a_0^2|\psi_{jm}(x_1, x_2)|^2$  vs  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_2}{a_0}\right)$ .

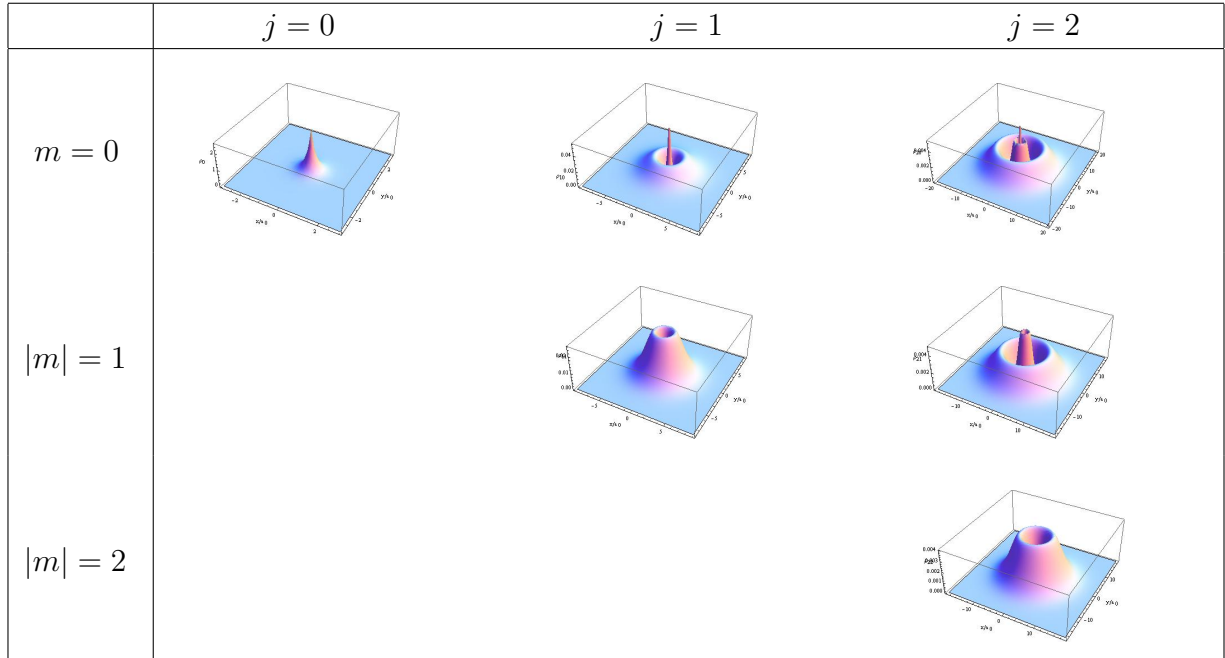
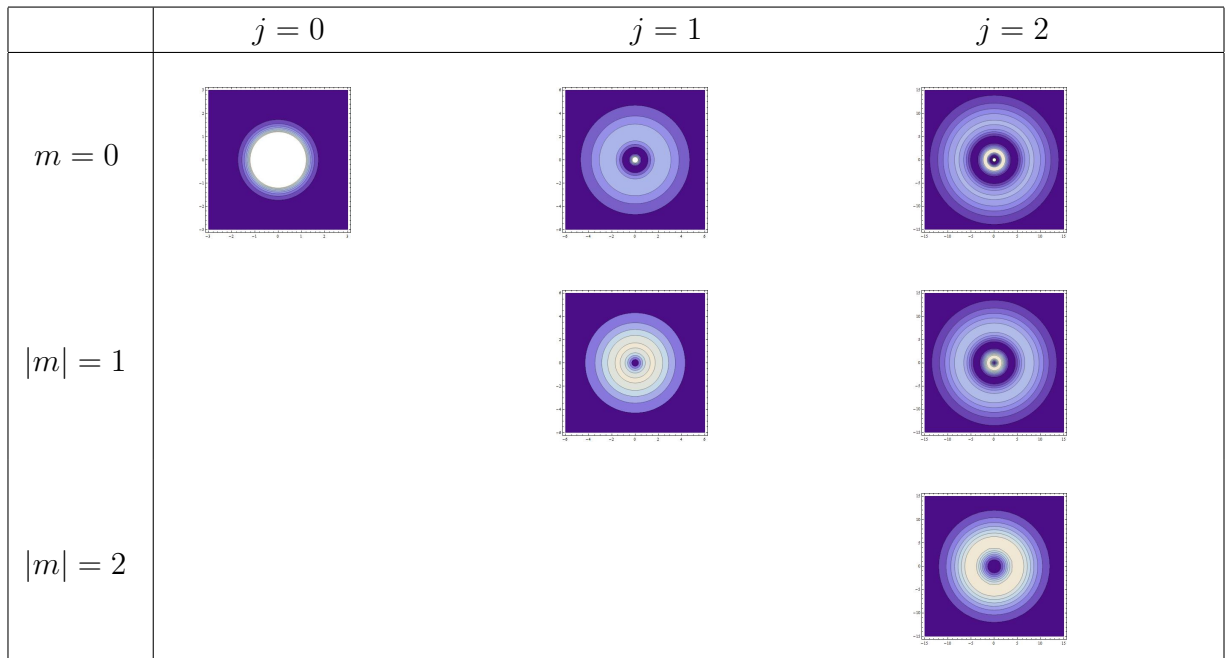


Tabla 4.5: Curvas de nivel para  $a_0^2|\psi_{jm}(x_1, x_2)|^2$  vs  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_2}{a_0}\right)$ .



### 4.3. El problema de Kepler-Coulomb clásico en tres dimensiones

La dinámica Lagrangiana del sistema de Kepler-Coulomb clásico en tres dimensiones está determinada por la acción:

$$S = \int dt L \left( \frac{dx_k}{dt}, x_k \right) = \int dt \left[ \frac{\mu}{2} \frac{dx_k}{dt} \frac{dx_k}{dt} + \frac{\alpha_Z}{r} \right] \quad , \quad k = 1, 2, 3$$

donde la distancia de la partícula cargada al centro de fuerzas es ahora  $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$  y nos ceñiremos al caso atractivo  $\alpha_Z > 0$ .

El paso standard al formalismo Hamiltoniano singulariza la función de Hamilton

$$H = \frac{1}{2\mu} p_k p_k - \frac{\alpha_Z}{r} \quad , \quad p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_k} \quad (4.11)$$

como generadora de la dinámica via la estructura de Poisson en el espacio de fases. El Hamiltoniano (4.11) es invariante bajo traslaciones temporales y rotaciones espaciales por lo cual la energía y las componentes del momento angular, generadores de estas simetrías, son cantidades conservadas:  $\{H, H\} = \{H, L_k\} = 0 \Rightarrow \dot{H} = \dot{L}_k = 0$ . Aparte del vector momento angular

$$L_k = \varepsilon_{kjl} x_j p_l \quad , \quad l, j, k = 1, 2, 3$$

es interesante considerar el cuadrado de su módulo:

$$\mathbf{L}^2 = L_k \cdot L_k = (x_1 p_2 - x_2 p_1)^2 + (x_2 p_3 - x_3 p_2)^2 + (x_3 p_1 - x_1 p_3)^2 \quad .$$

Es claro que  $\{H, \mathbf{L}^2\} = \{\mathbf{L}^2, L_k\} = 0$ , el Hamiltoniano, el momento angular total y una de sus componentes forman un sistema de tres invariantes en involución que, de acuerdo con el teorema de Arnold-Liouville, da lugar a la integrabilidad de este sistema Hamiltoniano. Recuérdese que los corchetes de Poisson entre las componentes del momento angular

$$\{L_k, L_j\} = \varepsilon_{kjl} L_l \quad , \quad \varepsilon_{123} = 1$$

representan el álgebra de Lie del grupo de rotaciones  $\mathbb{SO}(3)$  sobre el anillo de funciones en el espacio de fases.

Las consideraciones previas son aplicables a todo sistema Hamiltoniano natural con un potencial central. Específico al Hamiltoniano de Kepler-Coulomb es la existencia de otros tres invariantes funcionalmente independientes de los anteriores que son las componentes del vector de Runge-Lenz:

$$A_k = \frac{1}{\mu \alpha_Z} \varepsilon_{kjl} p_j L_l - \frac{x_k}{r} \quad , \quad [A_i] = 1 \quad , \quad \{H, A_k\} = 0 \quad .$$



El problema de Kepler-Coulomb es por tanto maximalmente sobreintegrable y de los corchetes de Poisson

$$\{L_k, A_j\} = \varepsilon_{kjl} A_l \quad , \quad \{A_k, A_j\} = \frac{2H}{\mu\alpha_Z^2} \varepsilon_{kjl} L_l \quad ,$$

se deduce que, sobre las órbitas de energía negativa, la simetría dinámica subsecuente responde al grupo de Lie  $\mathbb{SO}(4)$ .

#### 4.4. El problema de Kepler-Coulomb cuántico en el espacio Euclideo tridimensional

La cuantificación del sistema tratado en la subsección anterior obedece a un procedimiento standard en Mecánica Cuántica. En representación de coordenadas, el Hamiltoniano deviene el operador de Schrödinger:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{\alpha_Z}{r} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right] - \frac{\alpha_Z}{r} \quad .$$

Las componentes del momento angular y el momento angular total se convierten en los operadores diferenciales

$$\hat{L}_i = -i\hbar \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \quad ,$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left[ \left( x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^2 + \left( x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^2 + \left( x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^2 \right] \quad ,$$

que actúan en el espacio de Hilbert  $L^2(\mathbb{R}^3)$ . La promoción de corchetes de Poisson a conmutadores

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_k] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_i] = 0 \quad , \quad [\hat{L}_k, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{kjl} \hat{L}_k$$

demuestra que  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ , y una de las componentes del momento angular, e.g.  $\hat{L}_k$ , forman un sistema completo de observables compatibles asociados a cualquier potencial central. En el caso del potencial de Coulomb el operador vectorial de Runge-Lenz, simetrizado respecto de la versión clásica de modo que resulte un operador hermítico  $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^\dagger$ ,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}} &= \frac{1}{2\mu\alpha_Z} (\hat{\mathbf{p}} \wedge \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \wedge \hat{\mathbf{p}}) - \frac{\hat{\mathbf{x}}}{r} \quad , \quad \hat{A}_k = \frac{1}{2\mu\alpha_Z} \varepsilon_{kjl} (\hat{p}_j \hat{L}_l - \hat{L}_j \hat{p}_l) - \frac{\hat{x}_k}{r} \\ &= \frac{1}{\mu\alpha_Z} (\hat{\mathbf{p}} \wedge \hat{\mathbf{L}} - i\hbar \hat{\mathbf{p}}) - \frac{\hat{\mathbf{x}}}{r} \quad , \quad \hat{A}_k = \frac{1}{\mu\alpha_Z} \varepsilon_{kjl} (\hat{p}_j \hat{L}_l - i\hbar \hat{p}_k) - \frac{\hat{x}_k}{r} \end{aligned}$$

conmuta también con el Hamiltoniano:  $[\hat{H}, \hat{A}_k] = 0$ . Las relaciones de conmutación

$$[\hat{L}_k, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{kjl} \hat{L}_l \quad , \quad [\hat{L}_k, \hat{A}_j] = i\hbar \varepsilon_{kjl} \hat{A}_l \quad , \quad [\hat{A}_k, \hat{A}_j] = -2i\hbar \frac{\hat{H}}{\mu\alpha_Z^2} \varepsilon_{kjl} \hat{L}_l \quad (4.12)$$

indican que, sobre el subespacio del espacio de Hilbert de autofunciones de energía negativa de  $\hat{H}$ , el conjunto de las componentes del momento angular y del vector de Runge-Lenz representan el álgebra de Lie de un grupo compacto

#### 4.4.1. La simetría dinámica $\mathbb{SO}(4)$

El operador de Runge-Lenz re-escalado en la forma

$$\hat{M}_1 = \sqrt{\frac{\mu\alpha_Z^2}{-2E}} \hat{A}_1 \quad , \quad \hat{M}_2 = \sqrt{\frac{\mu\alpha_Z^2}{-2E}} \hat{A}_2 \quad , \quad \hat{M}_3 = \sqrt{\frac{\mu\alpha_Z^2}{-2E}} \hat{A}_3$$

sobre el subespacio de energía negativa, junto con el operador de momento angular, verifica las relaciones de conmutación:

$$[\hat{L}_k, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{kjl}\hat{L}_l \quad , \quad [\hat{L}_k, \hat{M}_j] = i\hbar\epsilon_{kjl}\hat{M}_l \quad , \quad [\hat{M}_k, \hat{M}_j] = i\hbar\epsilon_{kjl}\hat{L}_l \quad .$$

De aquí se deduce que la semisuma y la semidiferencia de las componentes de los vectores de momento angular y Runge-Lenz

$$\hat{J}_k^\pm = \frac{1}{2} \left( \hat{L}_k \pm \hat{M}_k \right)$$

representan cada una de ellas de forma desacoplada el álgebra de Lie de  $\mathbb{SO}(3)$  sobre el espacio de Hilbert

$$[\hat{J}_k^\pm, \hat{J}_j^\pm] = i\hbar\epsilon_{kjl}\hat{J}_l^\pm \quad , \quad [\hat{J}_k^\pm, \hat{J}_j^\mp] = 0 \quad , \quad \forall k, j \quad .$$

Tratamos por tanto con la suma directa de álgebras de Lie  $\text{Lie}\mathbb{SO}(3) \oplus \text{Lie}\mathbb{SO}(3)$  como álgebra de transformaciones infinitesimales generadas conjuntamente por los vectores de momento angular y de Runge-Lenz.

El isomorfismo entre las álgebras de Lie  $\text{Lie}\mathbb{SO}(3) \oplus \text{Lie}\mathbb{SO}(3)$  y  $\text{Lie}\mathbb{SO}(4)$  es manifiesto con la recombinación de generadores siguiente:

$$\begin{aligned} \hat{J}_{kj} &= \epsilon_{kjl} \left( \hat{J}_l^+ + \hat{J}_l^- \right) = \epsilon_{kjl}\hat{L}_l \quad , \quad \hat{J}_{k4} = \hat{J}_k^+ - \hat{J}_k^- = \hat{M}_k \\ \frac{i}{\hbar} [\hat{J}_{\alpha_Z\beta}, \hat{J}_{\gamma\delta}] &= -\delta_{\alpha_Z\delta}\hat{J}_{\gamma\beta} + \delta_{\alpha_Z\gamma}\hat{J}_{\delta\beta} + \delta_{\beta\gamma}\hat{J}_{\alpha_Z\delta} - \delta_{\beta\delta}\hat{J}_{\alpha_Z\gamma} \quad , \quad \alpha_Z, \beta, \gamma, \delta = 1, 2, 3, 4 \quad . \end{aligned}$$

En la versión  $\text{Lie}\mathbb{SO}(3) \oplus \text{Lie}\mathbb{SO}(3)$  uno elige los dos operadores de Casimir cuadráticos

$$\begin{aligned} \hat{C}_1^2 &= \hat{J}_k^+ \hat{J}_k^+ + \hat{J}_k^- \hat{J}_k^- = \frac{1}{2} \left( \hat{L}_k \hat{L}_k + \hat{M}_k \hat{M}_k \right) \\ \hat{C}_2^2 &= \hat{J}_k^+ \hat{J}_k^+ - \hat{J}_k^- \hat{J}_k^- = \hat{L}_k \hat{M}_k = 0 \end{aligned}$$

mientras que  $\hat{J}_3^+$  y  $\hat{J}_3^-$  se suelen tomar como generadores del subálgebra de Cartan. En la versión  $\text{Lie}\mathbb{SO}(4)$  los operadores de Casimir son los mismos con otro disfraz

$$\hat{C}_1^2 = \hat{J}_{12}^2 + \hat{J}_{13}^2 + \hat{J}_{23}^2 + \hat{J}_{14}^2 + \hat{J}_{24}^2 + \hat{J}_{34}^2 = \frac{1}{2} \left( \hat{L}_k \hat{L}_k + \hat{M}_k \hat{M}_k \right)$$

$$\hat{C}_2^2 = \hat{J}_{23}\hat{J}_{14} + \hat{J}_{31}\hat{J}_{24} + \hat{J}_{12}\hat{J}_{34} = \hat{L}_k\hat{M}_k = 0$$

pero es útil tomar como generadores del subálgebra de Cartan  $\hat{L}_3$  y  $\hat{M}_3$ .

Dado que

$$\hat{\mathbf{M}}^2 = -(\hat{\mathbf{L}}^2 + \hbar^2) + \frac{\mu\alpha_Z^2}{-2E}$$

se deduce inmediatamente la relación del operador Hamiltoniano con el primer Casimir del álgebra  $\text{LieSO}(4)$ :

$$\hat{H} = -\frac{\mu\alpha_Z^2}{2(2\hat{C}_1^2 + \hbar^2)} = -\frac{\mu\alpha_Z^2}{2(\hat{\mathbf{M}}^2 + \hat{\mathbf{L}}^2 + \hbar^2)},$$

fórmula que pone de manifiesto el carácter dinámico de la simetría  $\text{SO}(4)$  del problema de Kepler-Coulomb tridimensional<sup>3</sup>.

#### 4.4.2. Espectro discreto de $\hat{H}$

Así pues la simetría dinámica con respecto al grupo de Lie  $\text{SO}(4)$  de  $\hat{H}$  implica que las autofunciones de este operador se agrupan en representaciones irreducibles con energías dadas en función de los autovalores de los dos operadores de Casimir en cada representación irreducible. Dado lo habitual de tratar con las representaciones irreducibles de  $\text{SO}(3)$  elegimos trabajar en la versión  $\text{LieSO}(3) \oplus \text{LieSO}(3)$ . Ello significa que caracterizaremos los estados propios mediante los números cuánticos:  $j_+, j_-, m_+, m_-$ , los autovalores de  $(\hat{\mathbf{J}}^\pm)^2$ ,  $\hat{J}_3^\pm$ . Los kets  $|j_+, j_-; m_+, m_- \rangle$  propios comunes a estos operadores son también autoestados de  $\hat{C}_1^2$  y  $\hat{C}_2^2$ :

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{J}}^\pm)^2 |j_+, j_-; m_+, m_- \rangle &= \hbar^2 j_\pm(j_\pm + 1) |j_+, j_-; m_+, m_- \rangle \quad , \quad j_\pm \in \mathbb{N}_{\frac{1}{2}} \\ \hat{J}_3^\pm |j_+, j_-; m_+, m_- \rangle &= \hbar m_\pm |j_+, j_-; m_+, m_- \rangle \quad , \quad m_\pm : -j_\pm, -j_\pm + 1, \dots, j_\pm - 1, j_\pm \\ \hat{C}_1^2 |j_+, j_-; m_+, m_- \rangle &= \hbar^2 [j_+(j_+ + 1) + j_-(j_- + 1)] |j_+, j_-; m_+, m_- \rangle \\ \hat{C}_2^2 |j_+, j_-; m_+, m_- \rangle &= 0 \quad \Rightarrow \quad j_+ = j_- = j \end{aligned}$$

Nótese que en este caso: (a)  $j_+ = j_- = j$  pues  $\hat{C}_2^2 = 0$  debido a que los vectores de momento angular y Runge-Lenz son ortogonales:  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{M}} = 0$ . (b)  $j$  puede ser un entero o semientero no negativo.

El problema de identificar los valores propios

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E \quad , \quad E < 0$$

<sup>3</sup>La determinación algebraica del espectro del átomo de hidrógeno utilizando la simetría dinámica  $\text{SO}(4)$  se retrotrae a Pauli y viene tratada en muchos textos de Mecánica Cuántica. El desarrollo de este procedimiento en la Memoria se basa en los textos recientes de Tahktajan [33] y Weinberg [34].

queda por tanto resuelto inmediatamente, una vez fijado el autovalor de  $\hat{C}_1^2$ :

$$E_n = -\frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2(2j+1)^2} \quad , \quad (2j+1) = n \in \mathbb{Z}^+ \quad , \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (4.13)$$

La dimensión de la representación irreducible caracterizada por el número cuántico principal  $n = 2j + 1$  es identificable habida cuenta del teorema de adición de momentos angulares. El producto tensor de representaciones irreducibles de  $\mathbb{SO}(3)$  no es reducible:  $D_j^{(3)} \otimes D_j^{(3)} = D_0^{(3)} \oplus D_1^{(3)} \oplus \dots \oplus D_{2j-1}^{(3)} \oplus D_{2j}^{(3)}$ . La dimensión obtenida como la suma de las dimensiones de las representaciones irreducibles de  $\mathbb{SO}(3)$  en que descompone el producto tensor es por tanto:

$$\sum_{l=0}^{2j} (2l+1) = (2j+1)^2 = n^2 \quad .$$

Hay que poner énfasis en que todas ellas juntas forman la representación irreducible de  $\mathbb{SO}(4)$  de dimensión  $n^2$ :  $\bigoplus_{l=0}^{2j} D_l^{(3)} = D_n^{(4)}$ , formada por los tensores de orden  $2j$  simétricos y sin traza en  $\mathbb{R}^4$ .

### 4.4.3. Funciones propias de $\hat{H}$ de estado ligado

En orden a calcular las autofunciones conviene analizar detalladamente la base de kets que subtiende el espacio de cada representación irreducible: Los operadores “escalera” asociados a las raíces del álgebra de Lie  $\text{Lie}\mathbb{SO}(3) \oplus \text{Lie}\mathbb{SO}(3)$  mueven los pesos  $m_{\pm}$  que determinan una base en cada representación irreducible, y son:

$$\hat{J}_{\pm}^{\pm} = \hat{J}_1^{\pm} \pm i\hat{J}_2^{\pm} \quad , \quad \hat{J}_{\pm}^{\mp} = \hat{J}_1^{\mp} \pm i\hat{J}_2^{\mp}$$

tal que las relaciones de conmutación

$$[\hat{J}_+^{\pm}, \hat{J}_-^{\pm}] = 2\hbar\hat{J}_3^{\pm} \quad , \quad [\hat{J}_3^{\pm}, \hat{J}_{\pm}^{\pm}] = \pm\hbar\hat{J}_{\pm}^{\pm}$$

revelan como actúan sobre los pesos, los autovalores de  $\hat{J}_3^{\pm}$ . Sobre la base de estados propios comunes a  $\hat{\mathbf{J}}^{\pm} \cdot \hat{\mathbf{J}}^{\pm}$  y  $\hat{J}_3^{\pm}$ ,  $|j_+, j_-; m_+, m_- \rangle$ , uno tiene:

$$\hat{J}_{\pm}^{\pm} |j_+, j_-; m_+, m_- \rangle = \hbar\sqrt{j_+(j_+ + 1) - m_+(m_+ \pm 1)} |j_+, j_-; m_+ \pm 1, m_- \rangle$$

$$\hat{J}_{\pm}^{\mp} |j_+, j_-; m_+, m_- \rangle = \hbar\sqrt{j_-(j_- + 1) - m_-(m_- \pm 1)} |j_+, j_-; m_+, m_- \pm 1 \rangle \quad .$$

La estructura de suma directa de  $\text{Lie}\mathbb{SO}(3) \oplus \text{Lie}\mathbb{SO}(3)$  se traduce en la estructura de producto tensor de las representaciones irreducibles:  $|j_+, j_-; m_+, m_- \rangle = |j_+, m_+ \rangle \otimes |j_-, m_- \rangle$ . Según va dicho el producto tensor no es irreducible. Cada una de las representaciones irreducibles de

$\mathbb{SO}(3)$  en que descompone corresponde a un momento angular que varía entre los enteros o semienteros  $|j_+ - j_-|$  y  $j_+ + j_-$  que difieren en una unidad. En nuestro problema tenemos  $j_+ = j_- = j$  de modo que, sea  $j$  entero o semientero, los posibles momentos de las representaciones irreducibles son enteros que varían entre 0 y  $2j$ . Es pues conveniente elegir una base en cada representación irreducible formada por los kets propios comunes a los operadores  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{L}_3$  y  $\hat{\mathbf{J}}^\pm \cdot \hat{\mathbf{J}}^\pm$ :

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2 |l, m; j, j\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m; j, j\rangle \quad , \quad j \in \mathbb{N}_{\frac{1}{2}} \quad , \quad 0 \leq l \leq 2j \\ \hat{L}_3 |l, m; j, j\rangle &= \hbar m |l, m; j, j\rangle \quad , \quad m : -l, -l+1, \dots, l-1, l\end{aligned}$$

que se obtienen de la anterior como una combinación lineal caracterizada por los coeficientes de Clebsch-Gordan apropiados:  $C_{jj}(l, m; m_+, m_-) = \langle j, j; m_+, m_- | l, m; j, j\rangle$ ,

$$|l, m; j, j\rangle = \sum_{m_+, m_-} C_{jj}(l, m; m_+, m_-) |j, j; m_+, m_-\rangle \quad .$$

#### 4.4.4. Invariantes como operadores diferenciales en coordenadas polares esféricas

La simetría geométrica de rotación indica la conveniencia de elegir coordenadas polares esféricas como sistema más apropiado en representación de coordenadas:

$$(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \quad \Rightarrow \quad \mathbb{R}^+ \times S^1 \times I = [0, \infty) \times [0, 2\pi) \times [0, \pi]$$

$$\begin{aligned}x_1 &= r \sin \theta \cos \varphi \quad , \quad x_2 = r \sin \theta \sin \varphi \quad , \quad x_3 = r \cos \theta \\ r &= \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} \quad , \quad \varphi = \arctan \frac{x_2}{x_1} \quad , \quad \theta = \arccos \frac{x_3}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}} \quad .\end{aligned}$$

Así pues, las funciones de onda propias del operador Hamiltoniano se expresan como funciones de  $r$ ,  $\theta$  y  $\varphi$ :  $\psi_{j,j;m_+,m_-}(r, \theta, \varphi) = \langle r, \theta, \varphi | j, j; m_+, m_- \rangle$ , ó,  $\psi_{l,m;j,j}(r, \theta, \varphi) = \langle r, \theta, \varphi | l, m; j, j \rangle$ . El operador Hamiltoniano en coordenadas esféricas es el operador diferencial:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{\alpha_Z}{r} \quad . \quad (4.14)$$

mientras que los operadores vectoriales de momento angular y Runge-Lenz, son:

$$\begin{aligned}\hat{L}_3 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad , \quad \hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \\ \hat{A}_1 &= -\frac{\hbar^2}{2\mu\alpha_Z} \left[ \frac{2 \cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{2 \cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{2 \sin \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + 2 \cos \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \right.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2 \sin \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi} - 2 \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \Big] - \cos \varphi \sin \theta \\
\hat{A}_2 = & - \frac{\hbar^2}{2\mu\alpha_Z} \left[ \frac{2 \sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{2 \cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{2 \sin \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + 2 \sin \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} - \right. \\
& \left. - \frac{2 \cos \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi} - 2 \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \right] - \sin \varphi \sin \theta \\
\hat{A}_3 = & - \frac{\hbar^2}{2\mu\alpha_Z} \left[ \frac{2 \cot \theta}{r \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{2 \cos \theta \cot \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{2 \cos \theta}{r} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + 2 \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} + 2 \sin \theta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \right] - \cos \theta
\end{aligned}$$

Es importante también escribir los operadores escalera asociados a las raíces del álgebra como operadores diferenciales:

$$\begin{aligned}
\hat{J}_\pm^+ = & \frac{\hbar}{2} e^{\pm i\varphi} \left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} - (2j+1) \sin \theta - (2j+1) \frac{\hbar^2}{\mu\alpha_Z} \left[ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \mp \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi} - \cos \theta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \right] \right\} \\
\hat{J}_\pm^- = & \frac{\hbar}{2} e^{\pm i\varphi} \left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} + (2j+1) \sin \theta + (2j+1) \frac{\hbar^2}{\mu\alpha_Z} \left[ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \mp \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi} - \cos \theta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \right] \right\} .
\end{aligned}$$

Se obtienen a partir de estas fórmulas las combinaciones no hermíticas de las componentes del momento angular y dl vector de Runge-Lenz:  $\hat{L}_\pm = \hat{J}_\pm^+ + \hat{J}_\pm^-$  y  $\hat{M}_\pm = \hat{J}_\pm^+ - \hat{J}_\pm^-$ :

$$\begin{aligned}
\hat{L}_\pm = & \hat{L}_1 \pm i \hat{L}_2 = \hbar e^{\pm i\varphi} \left[ \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \\
\hat{M}_\pm = & \hat{M}_1 \pm i \hat{M}_2 = -\hbar e^{\pm i\varphi} (2j+1) \left\{ \sin \theta + \frac{\hbar^2}{\mu\alpha_Z} \left[ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \mp \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi} - \cos \theta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} \right] \right\} .
\end{aligned}$$

$\hat{L}_\pm$  son los operadores escalera que actúan en las representaciones irreducibles del grupo  $\mathbb{SO}(3)$  de rotaciones espaciales, caracterizadas por tanto por un momento angular orbital fijo, mientras que las combinaciones  $\hat{M}_\pm$  de las componentes del vector de Runge-Lenz conectan estados con diferente momento angular orbital, es decir, son operadores escalera en el ámbito del grupo de simetría dinámico  $\mathbb{SO}(4)$ .

#### 4.4.5. Los tres primeros niveles de energía

La simetría dinámica  $\mathbb{SO}(4)$  permite obtener de forma algebraica el espectro de autovalores del Hamiltoniano del átomo de hidrógeno. Dado que las autofunciones se calculan habitualmente usando la separabilidad de la ecuación de Schrödinger en coordenadas polares no se ha

abordado en la Literatura el análisis de las funciones de onda basándose en la simetría adicional aportada por el vector de Runge-Lenz. Resulta que el procedimiento es standard en el estudio de las representaciones irreducibles de grupos de Lie compactos. Se identifica primero el estado de más peso (la función de onda aniquilada por todos los operadores ascensor). Ello requiere resolver una ecuación en derivadas parciales separable en coordenadas polares. La acción iterada suficientes veces de los operadores escalera  $\hat{J}_{\pm}^{\pm}$  hasta llegar al estado de peso más bajo proporciona a continuación todas las funciones de onda con una energía negativa dada. Para ilustrar el procedimiento identificamos las funciones de onda propias en los tres primeros niveles.

- Sobre el primer nivel de energía ó estado fundamental el método se implementa fácilmente. En este caso,  $n = 1, j = 0 \Rightarrow m_+ = m_- = 0$ , y por tanto,  $l = m = 0$ . Hay un único estado en ambas bases que por tanto es el mismo:

$$|l, m; j, j\rangle = |0, 0; 0, 0\rangle \equiv |j, j; m_+, m_-\rangle = |0, 0; 0, 0\rangle$$

Este estado es aniquilado por todos los operadores  $\hat{J}_{\pm}^{\pm}$ , y consecuentemente se verifica también que:

$$\hat{L}_{\pm}|0, 0; 0, 0\rangle = 0 \quad , \quad \hat{M}_{\pm}|0, 0; 0, 0\rangle = 0$$

El “emparedado” con los bra’s propios del operador de posición en coordenadas polares convierte la anulación de los elementos de matriz de  $\hat{L}_{\pm}$  en las ecuaciones en derivadas parciales de primer orden siguientes:

$$\langle r, \theta, \varphi | \hat{L}_{\pm} | 0, 0; 0, 0 \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \left[ \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \psi_{0,0;0,0}(r, \theta, \varphi) = 0 \quad .$$

Claramente la solución ha de ser de la forma  $\psi_{0,0;0,0}(r, \theta, \varphi) = f_0(r)Y_{00}(\theta, \varphi)$  donde hemos seleccionado el armónico esférico  $Y_{00}(\theta, \varphi) = 1$  pues es el único aniquilado tanto por  $\hat{L}_+$  como por  $\hat{L}_-$ . Fijada la función de onda en este nivel a ser independiente de los ángulos polares la aniquilación de tanto  $\hat{M}_+$  como  $\hat{M}_-$  en este estado lleva a la misma ecuación diferencial

$$\langle r, \theta, \varphi | \hat{M}_{\pm} | 0, 0; 0, 0 \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \left[ \frac{d}{dr} + \frac{\mu\alpha_Z}{\hbar^2} \right] f_0(r) = 0$$

cuya solución proporciona la función de onda del estado fundamental:

$$\psi_{0,0;0,0}(r, \theta, \varphi) = f_0(r)Y_{00}(\theta, \varphi) = e^{-\frac{\mu\alpha_Z}{\hbar^2}r} \quad .$$

- En el siguiente nivel de energía los números cuánticos son:  $n = 2, j = \frac{1}{2}$  y/o  $l = 0, m = 0$ ;  $l = 1, m = -1, 0, 1$ . La base de estados propios comunes a  $\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_3, \hat{\mathbf{J}}^+ \cdot \hat{\mathbf{J}}^+$  y  $\hat{\mathbf{J}}^+ \cdot \hat{\mathbf{J}}^+$  se

expresa en la base de estados propios comunes a  $\hat{\mathbf{J}}^+ \cdot \hat{\mathbf{J}}^+$ ,  $\hat{\mathbf{J}}^- \cdot \hat{\mathbf{J}}^-$ ,  $\hat{J}_3^+$  y  $\hat{J}_3^-$  en la forma:

$$\begin{cases} |1, 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle] \\ |1, -1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ |0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle] \end{cases}$$

La interpretación como la composición de estados de dos partículas de espín 1/2 dando lugar a un singlete y un triplete respectivamente de momento angular cero y uno es clara. Más importante, la acción conocida de  $\hat{J}_\pm^+$  y  $\hat{J}_\pm^-$  sobre la base  $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; m_+ m_-\rangle$  permite deducir las aniquilaciones siguientes:

$$\begin{aligned} \hat{L}_\pm |1, \pm 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= 0, \quad \hat{M}_\pm |1, \pm 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = 0, \quad \hat{L}_\pm |0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = 0 \\ \hat{M}_\pm |1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= 0, \quad \hat{M}_\pm |1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = 0 \end{aligned}$$

así como las acciones efectivas dibujadas en la Figura 4.2. Se aprecia que  $\hat{L}_\pm$  son los operadores escalera de las representaciones irreducibles  $l = 0$  y  $l = 1$  del grupo de rotaciones, mientras que los operadores  $\hat{M}_\pm$  conectan estados con diferente momento angular orbital para completar la representación irreducible de  $\text{SO}(4)$  de dimensión cuatro. La

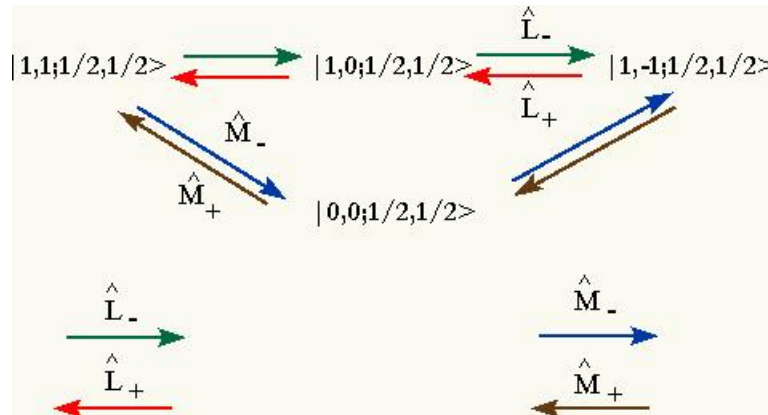


Figura 4.2: Acción de los operadores  $\hat{L}_\pm$  y  $\hat{M}_\pm$ .

anulación de  $\hat{L}_+$  sobre el estado de más peso da lugar a la ecuación en derivadas parciales siguiente:

$$\langle r, \theta, \varphi | \hat{L}_+ |1, 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \left[ \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \psi_{1,1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) = 0 \quad .$$



El ansatz de separación  $\psi_{1,1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) = f_1(r)Y_{11}(\theta, \varphi)$  tiene en cuenta que el aniquilado por  $\hat{L}_+$  es el armónico esférico  $Y_{11}(\theta, \varphi) = e^{i\varphi} \sin \theta$ . Con esta información la anulación de  $\hat{M}_+$  en este estado equivale a la ecuación diferencial de primer orden siguiente:

$$\langle r, \theta, \varphi | \hat{M}_+ | 1, 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \left[ \frac{d}{dr} - \frac{1}{r} + \frac{\mu\alpha_Z}{2\hbar^2} \right] \psi_{1,1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) = 0 \quad .$$

La solución es  $f_1(r) = r e^{-\frac{\mu\alpha_Z}{2\hbar^2}r}$  y por tanto la función de onda del estado con peso más alto en el segundo nivel resulta:

$$\psi_{1,1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) = r e^{i\varphi} \sin \theta e^{-\frac{\mu\alpha_Z}{2\hbar^2}r}$$

Las otras tres funciones de onda linealmente independientes se obtienen mediante la acción de los operadores descendentes  $\hat{L}_-$  y  $\hat{M}_-$ :

$$\begin{aligned} \psi_{1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \hat{L}_- \psi_{1,1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) \\ \psi_{1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{2\hbar^2} (\hat{L}_-)^2 \psi_{1,1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) \\ \psi_{0,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \hat{M}_- \psi_{1,1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) \quad . \end{aligned}$$

Sus expresiones analíticas se recogen en la Tabla 4.6.

- En el siguiente nivel de energía,  $n = 3 \equiv j = 1$  de modo que  $l = 0, 1, 2$ , el procedimiento se complica puesto que  $\hat{L}_\pm$  y  $\hat{M}_\pm$  no conmutan. Aunque la iteración de la acción de  $\hat{L}_-$  sobre el estado de más peso  $|2, 2; 1, 1\rangle \equiv |1, 1; 1, 1\rangle$  no presenta problemas barriendo la representación irreducible  $l = 2$  de  $\mathbb{SO}(3)$  hasta anular  $|2, -2; 1, 1\rangle$ , veáse la Figura 4.3, la iteración de  $\hat{M}_-$  no es tan simple. En efecto, la acción de  $\hat{M}_-$  sobre tanto  $|1, 1; 1, 1\rangle$  como  $|1, -1; 1, 1\rangle$  da una combinación lineal de  $|2, 0; 1, 1\rangle$  y  $|0, 0; 1, 1\rangle$ , es decir,  $\hat{M}_-^2$  aplica el estado de más peso en un subespacio bidimensional que incluye kets de dos representaciones irreducibles de  $\mathbb{SO}(3)$  distintas. Es por tanto natural utilizar los operadores “diagonales”  $\hat{J}_\pm^+$  y  $\hat{J}_\pm^-$  aplicados a los kets en los miembros de la derecha de las fórmulas siguientes que permiten expresar los estados propios de  $\mathbf{L}^2$  y  $\mathbf{L}_3$  usando los coeficientes de Clebsch-Gordan que correspondan. Esta estrategia permite obtener todos los kets de las representaciones irreducibles de  $\mathbb{SO}(3)$   $|2m; 1, 1\rangle$ ,  $|1m; 1, 1\rangle$  y  $|00; 1, 1\rangle$  (que

forman la irreducible de  $\mathbb{SO}(4)$  de dimensión 9) como se explicita en la Figura 4.3.

$$\left\{ \begin{array}{l} |2, 2; 1, 1\rangle = |1, 1; 1, 1\rangle \\ |2, 1; 1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1; 1, 0\rangle + |1, 1; 0, 1\rangle) \\ |2, 0; 1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|1, 1; 1, -1\rangle + 2|1, 1; 0, 0\rangle + |1, 1; -1, 1\rangle) \\ |2, -1; 1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1; 0, -1\rangle + |1, 1; -1, 0\rangle) \\ |2, -2; 1, 1\rangle = |1, 1; -1, -1\rangle \\ |1, 1; 1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1; 1, 0\rangle - |1, 1; 0, 1\rangle) \\ |1, 0; 1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1; 1, -1\rangle - |1, 1; -1, 1\rangle) \\ |1, -1; 1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1; 0, -1\rangle - |1, 1; -1, 0\rangle) \\ |0, 0; 1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|1, 1; 1, -1\rangle - |1, 1; 0, 0\rangle + |1, 1; -1, 1\rangle) \end{array} \right. \quad (4.15)$$

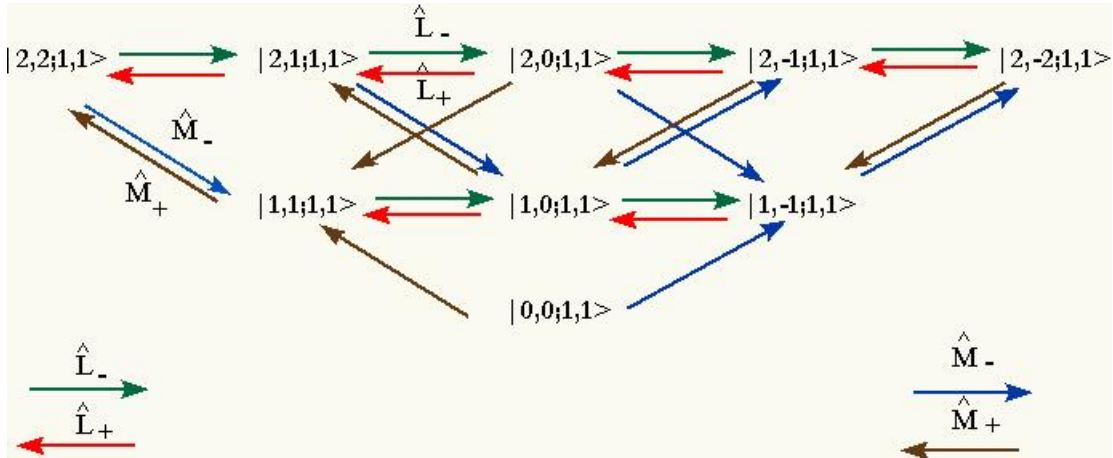


Figura 4.3: Acción de los operadores  $\hat{L}_{\pm}$  y  $\hat{M}_{\pm}$  sobre  $|l, m; j, j\rangle$  con  $j = 1$ .

La anulación del elemento de matriz de  $\hat{L}_{+} = \hat{J}_{+}^{+} + \hat{J}_{+}^{-}$  entre el bra propio del operador de posición y el ket de mayor peso  $|2, 2; 1, 1\rangle$  da lugar a la ecuación en derivadas parciales de primer orden siguiente:

$$\langle r, \theta, \varphi | (\hat{J}_{+}^{+} + \hat{J}_{+}^{-}) |2, 2; 1, 1\rangle = 0 \Rightarrow e^{i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) = 0 \quad .$$

La solución es evidente:  $\psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) = f_2(r)Y_{22}(\theta, \varphi) = f_2(r)e^{2i\varphi} (\sin \theta)^2$ , una función a determinar de  $r$  multiplicada por el armónico esférico de momento angular orbital  $l = 2$  y

número cuántico magnético  $m = 2$ . La determinación de  $f_2(r)$  se sigue entonces de la anulación del mismo elemento de matriz de  $\hat{M}_+ = \hat{J}_+^+ - \hat{J}_+^-$  que implica la ecuación diferencial ordinaria de primer orden:

$$\langle r, \theta, \varphi | (\hat{J}_+^+ - \hat{J}_+^-) | 2, 2; 1, 1 \rangle = 0 \Rightarrow \left( \frac{d}{dr} - \frac{2}{r} + \frac{\mu\alpha_Z}{3\hbar^2} \right) \psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) = 0 .$$

La función de onda radial es por tanto  $f_2(r) = r^2 e^{-\frac{\mu\alpha_Z}{3\hbar^2}r}$  y la total

$$\psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) = r^2 e^{-\frac{\mu\alpha_Z}{3\hbar^2}r} e^{2i\varphi} (\sin \theta)^2 .$$

Las demás funciones de onda que forman una base ortonormal en la representación irreducible de  $\text{SO}(4)$  de dimensión 9 se obtienen a partir de la de más peso mediante la acción reiterada de los operadores escalera. :

$$\begin{aligned} \psi_{2,1;1,1}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{2\hbar} (\hat{J}_-^- + \hat{J}_-^+) \psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) \\ \psi_{2,0;1,1}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{2\sqrt{6}\hbar^2} \left( (\hat{J}_-^-)^2 + 2\hat{J}_-^- \hat{J}_-^+ + (\hat{J}_-^+)^2 \right) \psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) \\ \psi_{2,-1;1,1}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{4\hbar^3} \left( \hat{J}_-^+ (\hat{J}_-^-)^2 + (\hat{J}_-^+)^2 \hat{J}_-^- \right) \psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) \\ \psi_{2,-2;1,1}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{4\hbar^4} (\hat{J}_-^+)^2 (\hat{J}_-^-)^2 \psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) \\ \psi_{1,1;1,1}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{2\hbar} (\hat{J}_-^- - \hat{J}_-^+) \psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) \\ \psi_{1,0;1,1}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{2\sqrt{2}\hbar^2} \left( (\hat{J}_-^-)^2 - (\hat{J}_-^+)^2 \right) \psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) \\ \psi_{1,-1;1,1}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{4\hbar^3} \left( \hat{J}_-^+ (\hat{J}_-^-)^2 - (\hat{J}_-^+)^2 \hat{J}_-^- \right) \psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) \\ \psi_{0,0;1,1}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{2\sqrt{3}\hbar^2} \left( (\hat{J}_-^-)^2 - \hat{J}_-^- \hat{J}_-^+ + (\hat{J}_-^+)^2 \right) \psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) \end{aligned}$$

En la deducción de estos resultados se ha de advertir que se ha usado el conocimiento de la acción de  $\hat{J}_\pm^\pm$  en la base de kets  $|j_+, j_-; m_+, m_-\rangle$  y las expresiones de los kets  $|lm : j_+ j_-\rangle$  en esta base dadas en (4.15). Cabe señalar que sobre los subespacios con  $l$  fijo basta actuar con potencias de  $\hat{L}_-$ . Cambiar  $l$  requiere que  $\hat{M}_-$  entre en el juego aunque de manera complicada. Por ejemplo, se puede reescribir la última identidad en la forma:  $\psi_{0,0;1,1}(r, \theta, \varphi) \propto (\hat{M}_-^2 + \hat{J}_-^+ \hat{J}_-^-) \psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi)$ . Hay pues que añadir el producto de los dos operadores descendentes para compensar que la acción iterada de  $\hat{M}_-$  lleve a una combinación lineal de  $\psi_{0,0;1,1}(r, \theta, \varphi)$  y  $\psi_{2,0;1,1}(r, \theta, \varphi)$ .

Se reproducen así los resultados, ya conocidos, acerca de las funciones de onda propias del problema cuántico de Kepler-Coulomb en tres dimensiones en el tercer nivel  $n = 3$ , que se recogen en la Tabla 4.6 junto con las funciones de onda en los niveles  $n = 1, 2$  anteriormente expuestas.

#### 4.4.6. El nivel genérico: Figuras y Tablas

La pauta a seguir en el nivel genérico  $n = 2j + 1$  y  $l = 0, 1, \dots, 2j = n - 1$  es clara. De un lado los coeficientes de Clebsch-Gordan determinan las combinaciones lineales de kets  $|j, j; m_+, m_-\rangle$  con momento angular orbital y número cuántico magnético definidos:

$$|l, m; j, j\rangle = \sum_{m_+, m_-} C_{jj}(l, m; m_+, m_-) |j, j; m_+, m_-\rangle \quad (4.16)$$

La anulación del elemento de matriz de  $\hat{L}_+$  entre un bra propio de  $\hat{x}$  y el ket de mayor peso  $|2j, 2j; j, j\rangle$  es equivalente a la ecuación en derivadas parciales de primer orden:

$$\hbar e^{i\varphi} \left[ \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \psi_{2j, 2j; j, j}(r, \theta, \varphi) = 0$$

La solución es pues  $\psi_{2j, 2j; j, j}(r, \theta, \varphi) = f_{2j}(r) Y_{2j, 2j}(\theta, \varphi)$  es el armónico esférico de más peso en la representación irreducible de  $\mathbb{SO}(4)$  de dimensión  $(2j + 1)^2$  multiplicada por una función de  $r$ . Un cálculo laborioso demuestra que la subsecuente anulación del elemento de matriz  $\langle r, \theta, \varphi | \hat{M}_+ | 2j, 2j; j, j \rangle$  equivale a la ecuación diferencial ordinaria:

$$\left[ \frac{d}{dr} - \frac{2j}{r} + \frac{\mu \alpha_Z}{(2j + 1) \hbar^2} \right] f_{2j}(r) = 0 \quad .$$

ecuación diferencial ordinaria que garantiza la anulación del elemento de matriz  $\langle r, \theta, \varphi | \hat{M}_+ | 2j, 2j; j, j \rangle$ . De todo ello resulta que la función de onda de más peso es de la forma

$$\psi_{2j, 2j; j, j}(r, \theta, \varphi) = r^{2j} e^{-\frac{\mu \alpha_Z}{(2j+1)\hbar^2} r} e^{i(2j)\varphi} (\sin \theta)^{2j} \quad .$$

Las demás funciones de onda en la representación irreducible de dimensión  $(2j + 1)^2$  se obtienen mediante la iteración de los operadores descendentes y el auxilio del conocimiento de los coeficientes de Clebsch-Gordan:

$$\psi_{l, m; j, j}(r, \theta, \varphi) = \sum_{m_+} \sum_{m_-} \tilde{C}_{jj}(l, m; m_+, m_-) \left( \hat{J}_+^- \right)^{(j-m_+)} \left( \hat{J}_-^- \right)^{(j-m_-)} \psi_{2j, 2j; j, j}(r, \theta, \varphi) \quad (4.17)$$

donde

$$\tilde{C}_{jj}(l, m; m_+, m_-) = \frac{C_{jj}(l, m; m_+, m_-)}{(2j)! \hbar^{(m_+ + m_-)}} \sqrt{\frac{(2j - m_+)! (2j - m_-)!}{m_+! m_-!}}$$

Finalmente, es conveniente expresar en términos del radio de Bohr y de la constante de Rydberg los valores propios 4.13 y las funciones de onda propias (4.17) del Hamiltoniano de Kepler-Coulomb cuántico en el espacio Euclideo tridimensional:

$$\begin{aligned}
 E_n &= -\text{Ry} \frac{Z^2}{(2j+1)^2}, \quad n = 2j+1 = 1, 2, 3, \dots, j \in \mathbb{N}_{\frac{1}{2}} \\
 \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\
 &= \frac{a_0}{Zr} \sqrt{\frac{(n-l-1)! Z^3}{n^2((n+l)!)^3 a_0^3}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{l+1} e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} P_l^m(\cos \theta) \quad .
 \end{aligned}$$

Se observa así que la parte radial de la función de onda es un polinomio de Laguerre generalizado, mientras que la función de onda angular, el armónico esférico que corresponda, se escribe en términos de los polinomios de Legendre en el coseno de la colatitud.

Un resumen del espectro obtenido, en comparación con el del átomo de hidrógeno en el plano, se ofrece en las Figuras y Tablas que siguen.

- En la Figura 4.4 se muestran los niveles de energía para el átomo de hidrógeno en el espacio. La comparación con el espectro del mismo Hamiltoniano en el plano, ver Figura 4.1, arroja las diferencias siguientes: 1. En el problema espacial tres números cuánticos caracterizan los estados propios: el número cuántico principal  $n = 2j + 1$ ,  $j \in \mathbb{N}_{\frac{1}{2}}$  que es un entero no nulo, el número cuántico orbital  $l = 0, 1, \dots, 2j = n - 1$  y el número cuántico azimutal  $m = -l, -l+1, \dots, l$ . En el plano, por contra, sólo hay dos números cuánticos: el número cuántico principal que es un número entero impar y el número cuántico azimutal que, como en el espacio, puede ser cualquier entero. 2. La degeneración de cada nivel de energía es en el espacio  $\sum_{l=0}^{2j} \sum_{m=-l}^l 1 = (2j+1)^2 = n^2$ , el cuadrado de la degeneración en el plano, habida cuenta de las dimensiones de las representaciones irreducibles de  $\mathbb{SO}(4)$  y  $\mathbb{SO}(3)$ .

En la Figura 4.5 se ofrece una comparación cuantitativa de ambos espectros. En dos dimensiones la energía del estado fundamental es  $E_0 = -4\text{Ry}$  mientras que en tres dimensiones es  $E_0 = -1\text{Ry}$ . Más aún, la diferencia de energías entre el estado fundamental y el primer nivel excitado es:  $\Delta E = 3.5 \text{ Ry}$  en el plano frente a  $\Delta E = 0.75 \text{ Ry}$  en el espacio.

- En la Tabla 4.6 se muestran los valores propios y funciones de onda propias del Hamiltoniano tridimensional (4.14) para los niveles de energía  $n = 1, 2, 3$ .
- En las Tablas 4.7 y 4.8 se representan: 1. La gráfica de la parte radial de la función de onda  $a_0^{\frac{3}{2}} R_{nl}(r)$  en términos de  $\frac{r}{a_0}$ . 2. La densidad de carga radial  $\rho_{nl}(r) = a_0 |r R_{nl}(r)|^2$

en función de  $\frac{r}{a_0}$ . El número de nodos es ahora  $k = n - l - 1$  mientras que en el caso bidimensional era  $k = \frac{n-2|m|-1}{2}$  con  $n$  impar. En ambos casos surge un patrón similar: (a) La función de onda radial de los estados  $|j, m\rangle = |0, 0\rangle, |1, \pm 1\rangle, |2, \pm 2\rangle$  en 2D y  $|n, l, m\rangle = |1, 0, 0\rangle, |2, 1, \pm 1\rangle, |3, 2, \pm 2\rangle$  en 3D no tiene nodos. (b) Los estados  $|j, m\rangle = |1, 0\rangle, |2, \pm 1\rangle$  en 2D y  $|n, l, m\rangle = |2, 0, 0\rangle, |3, 1, \pm 1\rangle$  en 3D dan lugar a una función de onda radial con un nodo. (c) la función de onda radial de los estados  $|j, m\rangle = |2, 0\rangle$  en 2D y  $|n, l, m\rangle = |3, 0, 0\rangle$  en 3D tiene dos ceros, y así, sucesivamente.

- Por último, en las Tablas 4.9 y 4.10 representamos el corte con el plano  $x_2 = 0$  de la densidad de probabilidad  $a_0^3 |\psi_{nlm}(x_1, x_2, x_3)|^2$  en función de  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_3}{a_0}\right)$  y las curvas de nivel correspondientes. En contraposición a los resultados obtenidos en el plano, ver Tablas 4.4 y 4.5, observamos que para  $l \neq 0$  la densidad de probabilidad en tres dimensiones no es rotacionalmente simétrica a diferencia de lo que sucede en el plano.
- El valor más probable de la distancia al núcleo  $r$  en el estado fundamental, el máximo de la densidad de carga radial  $\rho_{nl}(r) = a_0 |r R_{nl}(r)|^2$  en dicho estado, es:

$$\left. \frac{d\rho_{10}(r)}{dr} \right|_{r_0} = 0 \Leftrightarrow r_0 = \frac{a_0}{Z} \quad .$$

Por otro lado, el valor esperado del operador  $\hat{r}$  en el estado fundamental vale  $\frac{3}{2}$  veces  $r_0$ :

$$\langle 1, 0, 0 | \hat{r} | 1, 0, 0 \rangle = 4\pi \int_0^\infty dr r^3 \rho_{10}(r) = \frac{3}{2} \cdot \frac{a_0}{Z}$$

El radio más probable en tres dimensiones es por tanto cuatro veces mayor que el obtenido en el plano; sin embargo, el valor esperado de  $\hat{r}$  en el estado fundamental del átomo de hidrógeno en el espacio es sólo tres veces el valor esperado del mismo observable en el mismo estado obtenido en el caso bidimensional.

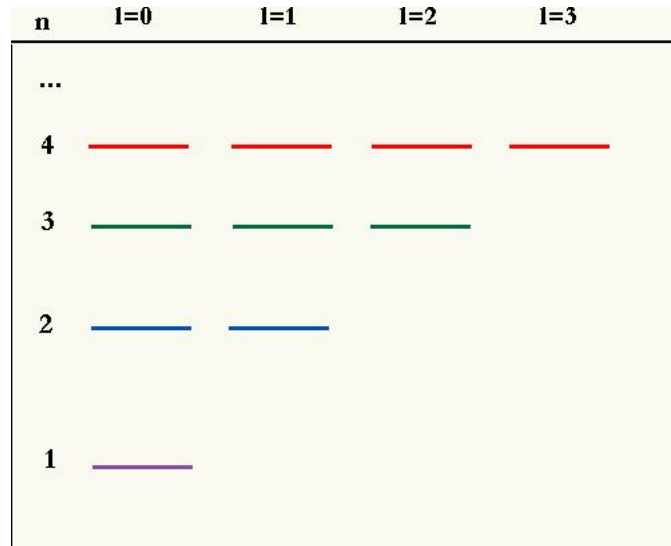


Figura 4.4: Niveles de energía del átomo de hidrógeno en 3D.

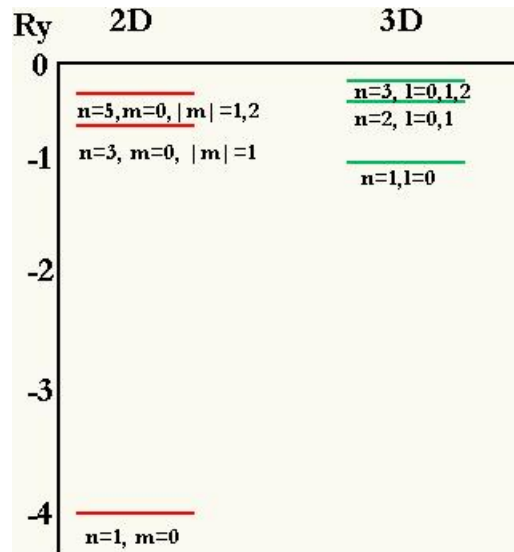


Figura 4.5: Comparación del espectro del átomo de hidrógeno en 2D y 3D.

Tabla 4.6: Valores propios y funciones propias del Hamiltoniano (4.14) para  $n = 1, 2, 3$ 

Energía	Función propia
$E_1 = -Z^2 \text{Ry}$	$\psi_{0,0;0,0}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{1}{\pi}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$
$E_2 = -\frac{1}{4} Z^2 \text{Ry}$	$\psi_{1,1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{64\pi}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \sin \theta e^{i\varphi}$ $\psi_{1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cos \theta$ $\psi_{1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{64\pi}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \sin \theta e^{-i\varphi}$ $\psi_{0,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$
$E_3 = -\frac{1}{9} Z^2 \text{Ry}$	$\psi_{2,2;1,1}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}$ $\psi_{2,1;1,1}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}$ $\psi_{2,0;1,1}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}} (3 \cos^2 \theta - 1)$ $\psi_{2,-1;1,1}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi}$ $\psi_{2,-2;1,1}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi}$ $\psi_{1,1;1,1}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left[6 \frac{Zr}{a_0} - \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \sin \theta e^{i\varphi}$ $\psi_{1,0;1,1}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{81} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[6 \frac{Zr}{a_0} - \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \cos \theta$ $\psi_{1,-1;1,1}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left[6 \frac{Zr}{a_0} - \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \sin \theta e^{-i\varphi}$ $\psi_{0,0;1,1}(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left[27 - 18 \frac{Zr}{a_0} + 2 \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$



Tabla 4.7: Gráficas de la parte radial de la función de onda  $a_0^{\frac{3}{2}} R_{nl}(r)$  vs  $\frac{r}{a_0}$  para los tres primeros niveles.

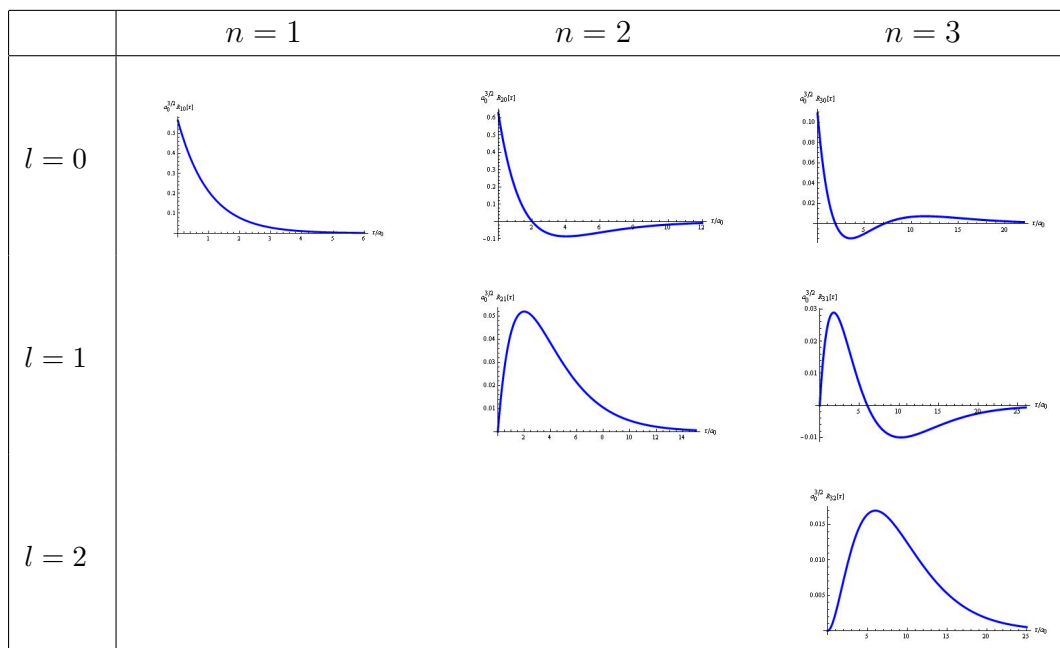


Tabla 4.8: Densidad de carga radial  $\rho_{nl}(r) = a_0 |r R_{nl}(r)|^2$  vs  $\frac{r}{a_0}$  para  $n = 1, 2, 3$ .

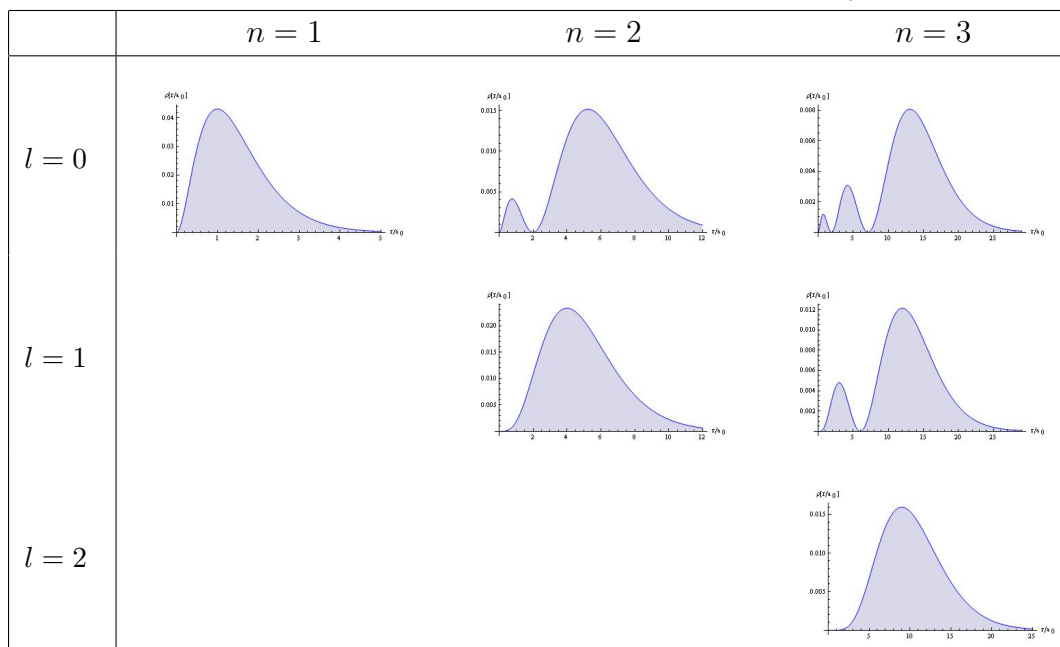


Tabla 4.9: Densidad de probabilidad  $a_0^3 |\psi_{nlm}(x_1, x_2 = 0, x_3)|^2$  vs  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_3}{a_0}\right)$  para los mismos niveles de energía.

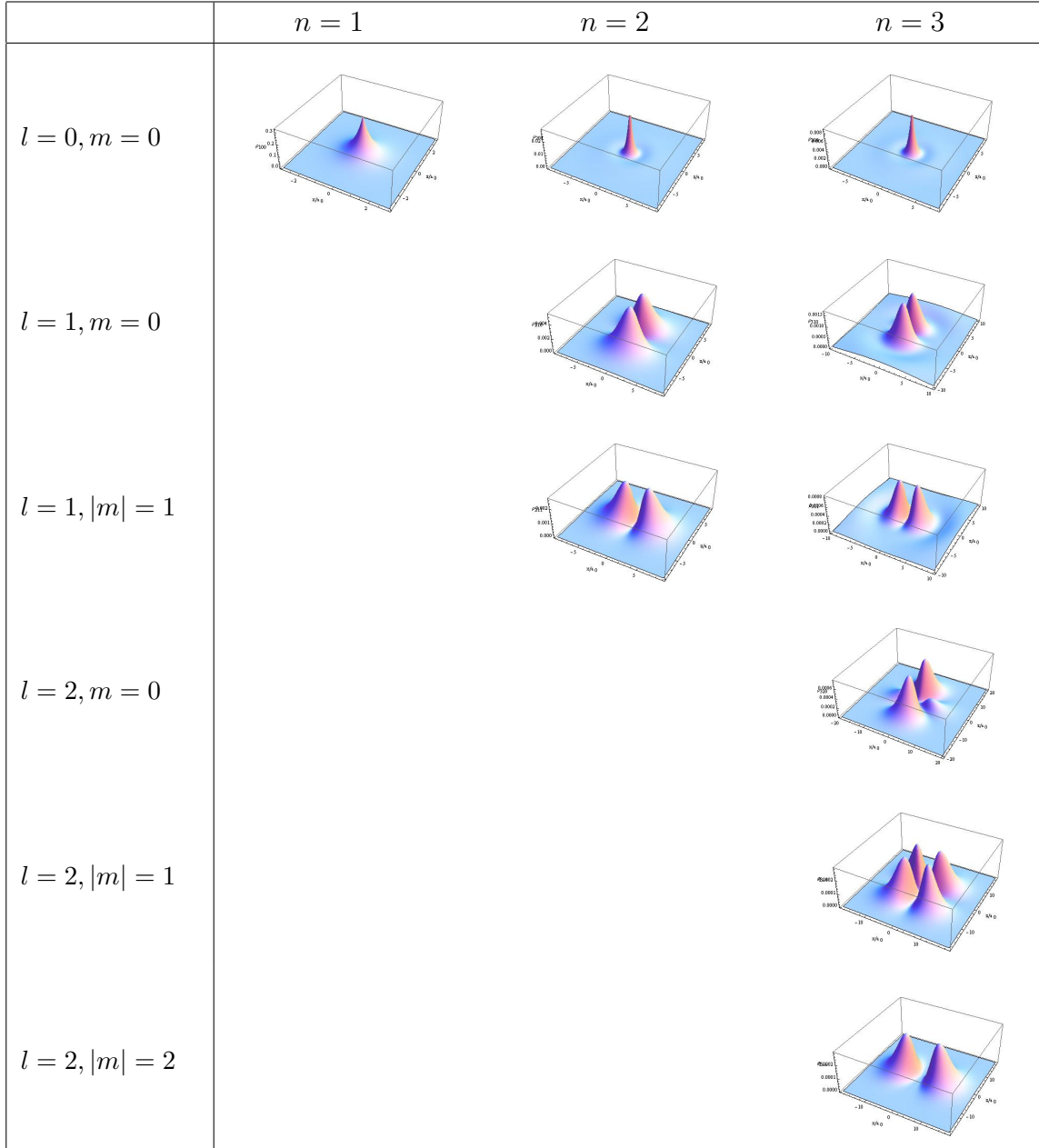
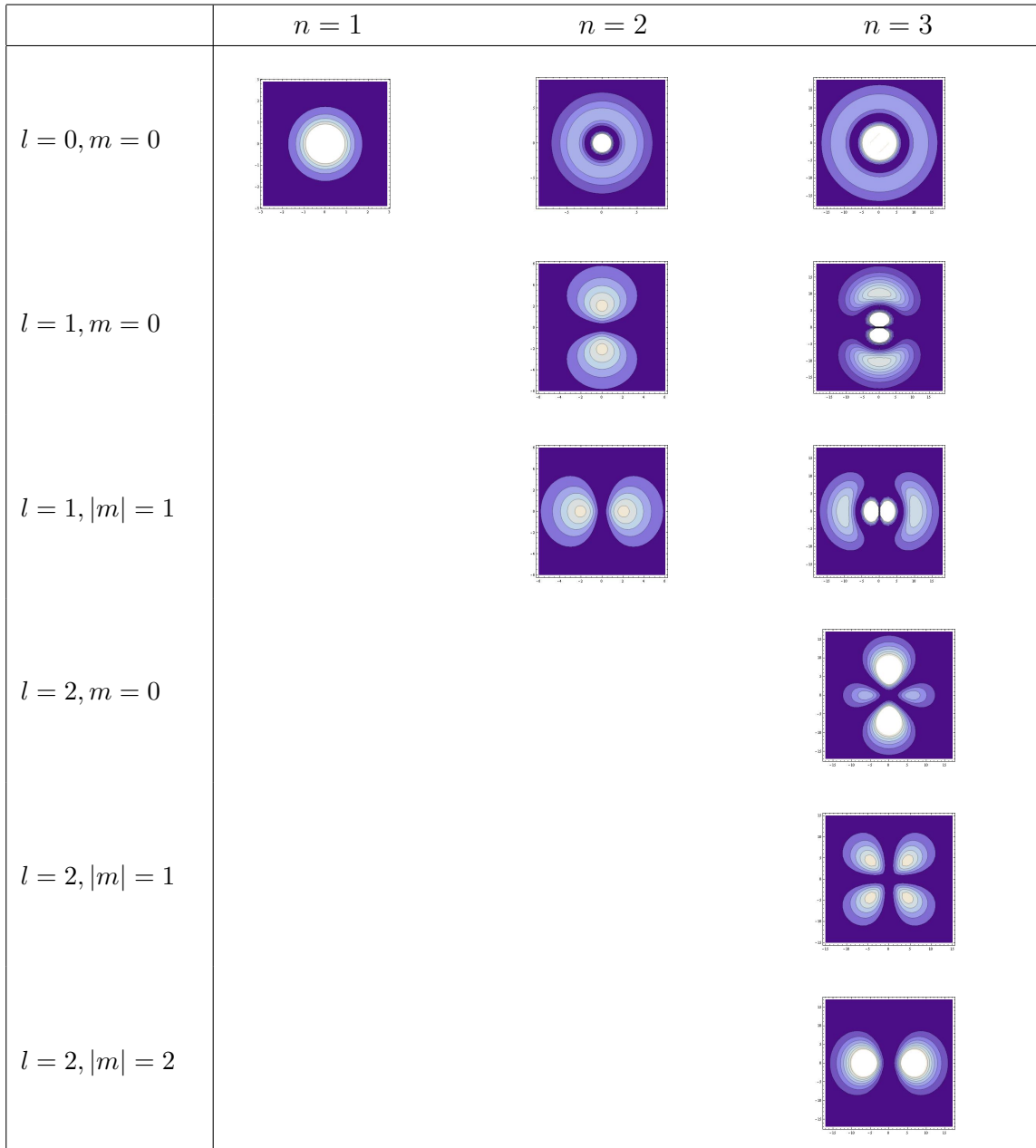


Tabla 4.10: Curvas de nivel para  $a_0^3 |\psi_{nlm}(x_1, x_2 = 0, x_3)|^2$  vs  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_3}{a_0}\right)$  e idénticos niveles.



## 4.5. El problema de Kepler-Coulomb supersimétrico en dos dimensiones

Para construir la versión supersimétrica del problema de Kepler-Coulomb consideremos el superpotencial propuesto por Ioffe et al. en [22] e independiente y posteriormente por Wipf et al. en [13]:

$$W(x_1, x_2) = -\frac{2\mu\alpha_Z}{\hbar}r = -\frac{2\mu\alpha_Z}{\hbar}\sqrt{x_1^2 + x_2^2},$$

$$\frac{\partial W}{\partial x_k} = -\frac{2\mu\alpha_Z}{\hbar}\frac{x_k}{r}, \quad \frac{\partial^2 W}{\partial x_k \partial x_l} = -\frac{2\mu\alpha_Z}{\hbar r} \left( \delta_{kl} - \frac{x_k x_l}{r^2} \right).$$

Las supercargas son entonces:

$$\hat{Q} = \sum_{j=1}^2 i \left( \hbar \hat{\psi}_j \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{2\mu\alpha_Z}{\hbar} \hat{g} \right), \quad \hat{Q}^\dagger = \sum_{j=1}^2 i \left( \hbar \hat{\psi}_j^\dagger \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{2\mu\alpha_Z}{\hbar} \hat{g}^\dagger \right), \quad [\hat{Q}] = M^{\frac{1}{2}} L T^{-1}$$

donde los operadores fermiónicos <sup>4</sup>

$$\hat{g} = \sum_{j=1}^2 \frac{x_j}{r} \hat{\psi}_j, \quad \hat{g}^\dagger = \sum_{j=1}^2 \frac{x_j}{r} \hat{\psi}_j^\dagger, \quad (\hat{g})^2 = (\hat{g}^\dagger)^2 = 0, \quad \{\hat{g}^\dagger, \hat{g}\} = \frac{1}{\mu} \hat{\mathbb{I}}_4$$

responden a la proyección de las coordenadas fermiónicas sobre las bosónicas. Explícitamente,

$$\hat{g} = \frac{1}{\sqrt{\mu}} \begin{pmatrix} 0 & \frac{x_1}{r} & \frac{x_2}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{x_2}{r} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{x_1}{r} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{g}^\dagger \hat{g} = \frac{1}{\mu} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{x_1^2}{r^2} & \frac{x_1 x_2}{r^2} & 0 \\ 0 & \frac{x_1 x_2}{r^2} & \frac{x_2^2}{r^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

El Hamiltoniano supersimétrico de Kepler-Coulomb [13]:

$$\hat{H} = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \right) \hat{\mathbb{I}}_4 - \frac{\alpha_Z}{r} \hat{X}$$

incluye por tanto la promoción del potencial Coulombiano a una matriz<sup>5</sup>:

$$\hat{X} = \hat{\mathbb{I}}_4 - 2\mu\hat{F} + 2\mu\hat{g}^\dagger\hat{g} = \frac{1}{\mu} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 + \frac{2x_1^2}{r^2} & -\frac{2x_1 x_2}{r^2} & 0 \\ 0 & -\frac{2x_1 x_2}{r^2} & -1 + \frac{2x_2^2}{r^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

<sup>4</sup> $\hat{\mathbb{I}}_4$  es la matriz identidad  $4 \times 4$ .

<sup>5</sup>Recuérdese la definición (1.11) del operador número de Fermi  $\hat{F}$ .

de modo que  $\hat{H}$  es el operador matricial  $4 \times 4$  de Schrödinger siguiente:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{H}_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{H}_0 + \frac{2\alpha_Z x_2^2}{r^3} & -\frac{2\alpha_Z x_1 x_2}{r^3} & 0 \\ 0 & -\frac{2\alpha_Z x_1 x_2}{r^3} & \hat{H}_0 + \frac{2\alpha_Z x_1^2}{r^3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{H}_2 \end{pmatrix}.$$

Los Hamiltonianos escalares  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_2$  son [13]:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} - \frac{\alpha_Z}{r}, \quad \hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} + \frac{\alpha_Z}{r}.$$

$\hat{H}_0$  es exactamente el Hamiltoniano de Kepler-Coulomb más la constante  $\frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2}$  necesaria para llevar a cero la energía del estado fundamental bosónico (modo cero). Por otro lado,  $\hat{H}_2$  es el Hamiltoniano de Kepler-Coulomb para una partícula de carga eléctrica opuesta, e.g. un positrón, y dado que el potencial de interacción es repulsivo en este caso sólo habrá estados de scattering en el sector con  $\hat{F} = 2$ .

El Hamiltoniano matricial  $\hat{H}_1$  de dimension  $2 \times 2$  -ya dado en [22] hacia 1984- que actúa sobre el subespacio bidimensional del espacio de Fock Fermiónico con  $\hat{F} = 1$ , es por su parte:

$$\hat{H}_1 = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} - \frac{\alpha_Z(x_1^2 - x_2^2)}{r^3} & -\frac{2\alpha_Z x_1 x_2}{r^3} \\ -\frac{2\alpha_Z x_1 x_2}{r^3} & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} + \frac{\alpha_Z(x_1^2 - x_2^2)}{r^3} \end{pmatrix}.$$

#### 4.5.1. El espectro discreto de $\hat{H}$ en el sector bosónico: $\hat{F} = 0$

Las funciones y valores propios de estado ligado de  $\hat{H}$  tal que  $\hat{F} = 0$  son los autovalores y autofunciones de  $\hat{H}_0$ . Las autofunciones bosónicas son exactamente las mismas que las funciones propias de estado ligado encontradas en el caso no SUSY, pero los valores propios difieren de los del caso no-SUSY en el sumando  $\frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2}$ . Esto es [24]:

$$\hat{H}_0 \psi_j^{(0)} = E_j^{(0)} \psi_j^{(0)} = \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \left[ 1 - \frac{1}{(2j+1)^2} \right] \psi_j^{(0)}, \quad j \in \mathbb{N}$$

La resolución de este problema espectral restringido es idéntica a la llevada a cabo en el caso no SUSY, ver Secciones 4.2.1 y 4.2.2. Como en el caso anteriormente resuelto  $\hat{H}_0$  se puede expresar en función del operador de Casimir de  $\mathbb{S}\mathbb{O}(3)$ , que es la suma del cuadrado del momento angular y el cuadrado de las componentes del vector de Runge-Lenz. A fuer de ser repetitivo resumimos el procedimiento de obtención de las funciones propias del operador  $\hat{H}_0$  usando la simetría dinámica del problema. Partimos de la base de kets propios  $|j; m\rangle$  comunes a  $\hat{C}^2$  y  $\hat{M}_3$ , que en representación de coordenadas devienen las funciones de onda:

$$\psi_{jm}^{(0)}(r, \varphi) = \langle r; \varphi | j; m \rangle.$$

Según va dicho en Secciones previas la aniquilación de la función de onda de mayor peso por el operador escalera  $\hat{M}_+$ ,  $\hat{M}_+ \psi_{jj}^{(0)}(r, \varphi) = 0$ , junto con el ansatz de separación de variables  $\psi_{jj}^{(0)}(r, \varphi) = f_j(r) e^{ij\varphi}$  que convierte el criterio de anulación en una ecuación diferencial ordinaria fácilmente resoluble, revela la solución:

$$f_j(r) = r^j \exp \left[ -\frac{2\mu\alpha_Z r}{\hbar^2(2j+1)} \right],$$

para la parte radial de la función de onda del estado de peso más alto de modo que la función de onda completa convenientemente normalizada es:

$$\psi_{jj}^{(0)}(r, \varphi) = 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\mu\alpha_Z u^j}{\hbar^2 \sqrt{(2j+1)^3 (2j)!}} e^{ij\varphi} e^{-\frac{u}{2}}, \quad u = \frac{4\mu\alpha_Z r}{\hbar^2(2j+1)}$$

la misma que la dada en (4.6).

Se ha explicado anteriormente también que las demás funciones de onda propias en un nivel de energía concreto forman una representación irreducible del grupo dinámico  $\mathbb{SO}(3)$  y por tanto pueden identificarse a partir de la de peso más alto mediante descensos causados por el operador escalera:

$$\psi_{jm}^{(0)} \propto \hat{M}_-^{j-m} \psi_{jj}^{(0)}, \quad m = j, m = j-1, \dots, m = -j+1, m = -j, \quad \hat{M}_-^{2j+1} \psi_{jj}^{(0)} = 0.$$

Suponiendo que en el escalón  $m$ -simo la función de onda resultante es de la forma  $\psi_{jm}^{(0)}(r, \phi) = N^{j-|m|} r^{|m|} P_{j-|m|}(r) e^{-\frac{u}{2}} e^{im\varphi}$ , donde  $N^{j-|m|}$  son constantes de normalización, las relaciones de recurrencia subsecuentes (4.7) definen los polinomios de Laguerre generalizados.

Como en el caso no-SUSY, encontramos que las funciones propias de estado ligado correspondientes al sector  $\hat{F} = 0$  son:

$$\psi_{jm}^{(0)}(r, \varphi) = \frac{2\mu\alpha_Z}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2(j+|m|)!}{(2j+1)^3 (j-|m|)! \pi}} \frac{u^{|m|}}{(2|m|)!} {}_1F_1[|m|-j, 2|m|+1, u] e^{im\varphi} e^{-\frac{u}{2}}, \quad (4.18)$$

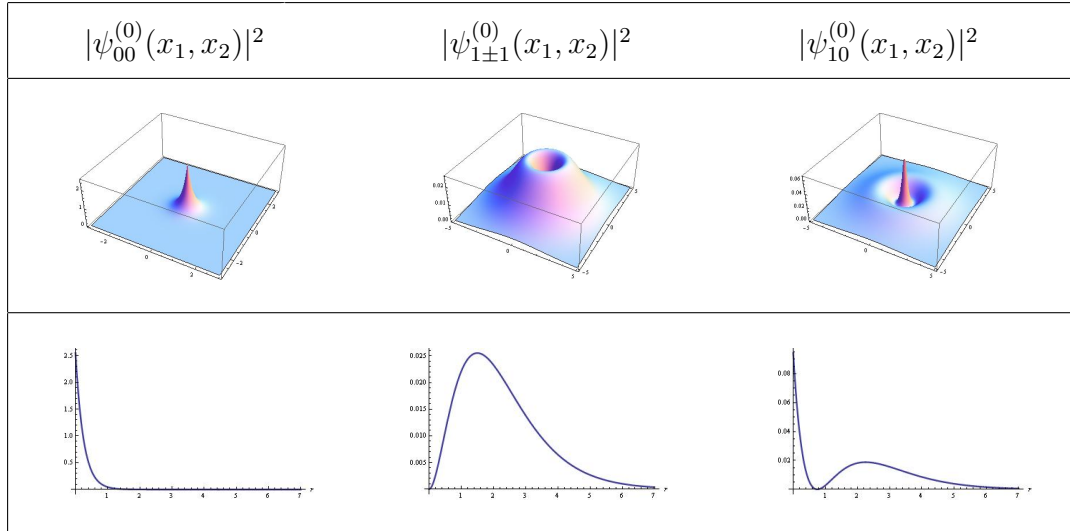
donde  ${}_1F_1$  son las funciones hipergeométricas confluentes de Kummer con argumentos tales que reducen a los polinomios de Laguerre mencionados: para  $a = |m| - j$  y  $b = 2|m| + 1$  la serie que define  ${}_1F_1[a, b, z]$  trunca y se obtienen los polinomios generalizados de Laguerre (4.9) [24].

En resumen, las funciones propias de estado ligado  $\hat{F} = 0$  del problema de Kepler-Coulomb supersimétrico en el plano están organizadas como representaciones irreducibles de  $\mathbb{SO}(3)$  (multipletes degenerados en energía) en  $L^2(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{S}^1)$  en lugar de  $L^2(\mathbb{S}^2)$  (armónicos esféricos). Además, se satisfacen las relaciones de ortonormalidad

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r dr \left( \psi_{j_1 m_1}^{(0)}(r, \varphi) \right)^* \psi_{j_2 m_2}^{(0)}(r, \varphi) = \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}, \quad j_1, j_2 = 0, 1, 2, 3, \dots$$

En la Tabla 4.11 se muestran las gráficas de las densidades de probabilidad y las secciones transversales correspondientes a las funciones de onda de los dos primeros niveles para  $a_0 = 1$ .

Tabla 4.11: Densidades de probabilidad y secciones transversales en el sector  $\hat{F} = 0$ .



#### 4.5.2. Funciones propias de $\hat{H}$ de estado ligado en el sector fermiónico $\hat{F} = 1$

Los estados propios (pares supersimétricos de los dados en el párrafo anterior) pertenecen a  $\mathcal{SH}_1$  con las mismas energías que los anteriores

$$E_j^{(1)} = \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \left[ 1 - \frac{1}{(2j+1)^2} \right] \in \left( 0, \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \right) \quad , \quad j > 0$$

son de la forma [24]:

$$\psi_{jm}^{(1)}(r, \varphi) = \frac{\hbar}{\sqrt{\mu}\alpha_Z} \hat{Q}^\dagger \psi_{jm}^{(0)}(r, \varphi) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{jm}^{(1)1}(r, \varphi) \\ \psi_{jm}^{(1)2}(r, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Como

$$\begin{aligned} (\psi_{j_1 m_1}^{(1)}(r, \varphi))^\dagger \psi_{j_2 m_2}^{(1)}(r, \varphi) &= (\psi_{j_1 m_1}^{(0)}(r, \varphi))^\dagger \frac{\hbar^2}{\mu \alpha_Z^2} \hat{Q} \hat{Q}^\dagger \psi_{j_2 m_2}^{(0)}(r, \varphi) \\ &= \frac{2\hbar^2}{\mu \alpha_Z^2} (\psi_{j_1 m_1}^{(0)}(r, \varphi))^\dagger \hat{H} \psi_{j_2 m_2}^{(0)}(r, \varphi) = \frac{2\hbar^2}{\mu \alpha_Z^2} E_{j_2}^{(0)} (\psi_{j_1 m_1}^{(0)}(r, \varphi))^\dagger \psi_{j_2 m_2}^{(0)}(r, \varphi) \end{aligned} \quad (4.19)$$

donde se ha tenido en cuenta que  $\hat{Q} \psi_{j m}^{(0)}(r, \varphi) = 0$  y  $\hat{H} \psi_{j m}^{(0)}(r, \varphi) = E_j^{(0)} \psi_{j m}^{(0)}(r, \varphi)$ , inntegración de (4.19) sobre todo  $\mathbb{R}^2$  da el resultado

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r dr (\psi_{j_1 m_1}^{(1)}(r, \varphi))^\dagger \psi_{j_2 m_2}^{(1)}(r, \varphi) &= \frac{2\hbar^2}{\mu \alpha_Z^2} E_{j_2}^{(0)} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r dr (\psi_{j_1 m_1}^{(0)}(r, \varphi))^\dagger \psi_{j_2 m_2}^{(0)}(r, \varphi) \\ &= \frac{2\hbar^2}{\mu \alpha_Z^2} E_{j_2}^{(1)} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \end{aligned}$$

debido a las relaciones de ortonormalidad. Los espinores propios de  $\hat{H}$  y propios de  $\hat{F}$  con autovalor 1 normalizados  $\psi_{j m}^{(1)}(r, \varphi) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\hbar E_j^{(1)}}} \psi_{j m}^{(1)}(r, \varphi)$  son bastante complicados pero pueden expresarse analíticamente:

$$\begin{aligned} \psi_{j m}^{(1)1}(r, \varphi) &= i \frac{2\mu \alpha_Z}{\hbar^2} \sqrt{\frac{8(j+|m|)!}{(2j+1)^3[(2j+1)^2-1](j-|m|)! \pi}} \frac{u^{|m|}}{(2|m|)!} e^{im\varphi} e^{-\frac{u}{2}} \times \\ &\times \left[ \cos\varphi \left\{ \frac{-j+|m|}{2|m|+1} {}_1F_1[-j+|m|+1, 2|m|+2, u] + j {}_1F_1[-j+|m|, 2|m|+1, u] \right\} \right. \\ &\left. + \frac{m}{u} e^{-i\varphi} {}_1F_1[-j+|m|, 2|m|+1, u] \right], \end{aligned}$$

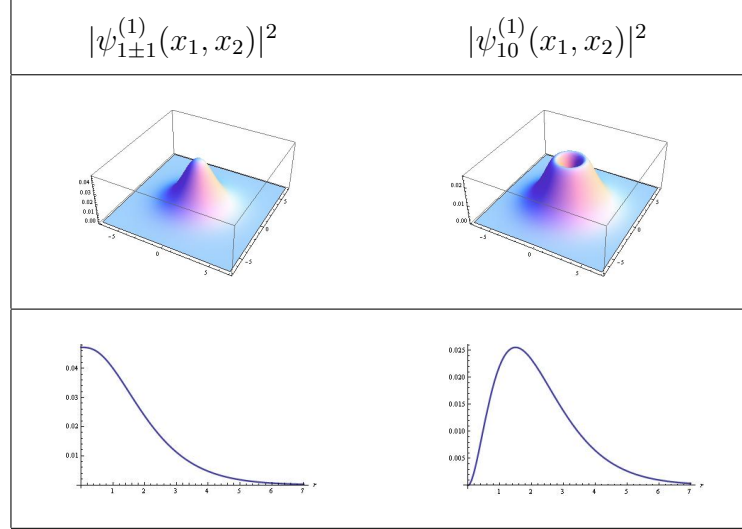
$$\begin{aligned} \psi_{j m}^{(1)2}(r, \varphi) &= i \frac{2\mu \alpha_Z}{\hbar^2} \sqrt{\frac{8(j+|m|)!}{(2j+1)^3[(2j+1)^2-1](j-|m|)! \pi}} \frac{u^{|m|}}{(2|m|)!} e^{im\varphi} e^{-\frac{u}{2}} \times \\ &\times \left[ \sin\varphi \left\{ \frac{-j+|m|}{2|m|+1} {}_1F_1[-j+|m|+1, 2|m|+2, u] + j {}_1F_1[-j+|m|, 2|m|+1, u] \right\} \right. \\ &\left. + i \frac{m}{u} e^{-i\varphi} {}_1F_1[-j+|m|, 2|m|+1, u] \right], \end{aligned}$$

que resuelven el problema espectral  $\hat{H} \psi_{j m}^{(1)}(r, \varphi) = E_j^{(1)} \psi_{j m}^{(1)}(r, \varphi) \equiv \hat{H}_1 \psi_{j m}^{(1)}(r, \varphi)$  y forman una base ortonormal en  $\mathcal{SH}_1$ .

Específicamente, estas funciones de onda de dos componentes son combinaciones lineales de dos polinomios de Laguerre generalizados contiguos. La razón es que  $\hat{Q}$  no conmuta con los generadores de la simetría  $\mathbb{SO}(3)$ :  $[\hat{M}_a, \hat{Q}^\dagger] \neq 0, \forall a = 1, 2, 3$ . Por tanto, la acción de  $\hat{Q}^\dagger$  no respeta las representaciones irreducibles de  $\mathbb{SO}(3)$ . No obstante, las funciones de onda espinoriales están caracterizadas por los números cuánticos  $j$  y  $m$ , aunque los multipletes degenerados no forman representaciones irreducibles de  $\mathbb{SO}(3)$ . En la Tabla 4.12 se muestran las densidades de probabilidad espinoriales [24].



Tabla 4.12: Densidades de probabilidad y secciones transversales en el sector  $\hat{F} = 1$ .  $|\psi_{1\pm 1}^{(1)}(x_1, x_2)|^2$  no presenta nodos, uno menos que  $|\psi_{1\pm 1}^{(0)}(x_1, x_2)|^2$ . Hay un nodo en  $|\psi_{10}^{(1)}(x_1, x_2)|^2$ , también uno menos que en  $|\psi_{10}^{(0)}(x_1, x_2)|^2$ .



### 4.5.3. Estados de scattering y descomposición espectral de Hodge supersimétrica

Sobre las funciones propias de energía positiva del Hamiltoniano de Kepler-Coulomb no SUSY las componentes normalizadas del vector de Runge-Lenz y el momento angular cierran el álgebra de Lie  $\mathbb{SO}(2, 1)$ , el grupo de Lorentz en el espacio de Minkowski  $\mathbb{R}^{1,2}$ :

$$\hat{M}_1 = -i\sqrt{\frac{\mu\alpha_Z^2}{2E}}\hat{A}_1 \quad , \quad \hat{M}_2 = -i\sqrt{\frac{\mu\alpha_Z^2}{2E}}\hat{A}_2 \quad , \quad \hat{M}_3 = \hat{L}$$

$$[\hat{M}_1, \hat{M}_2] = -i\hbar\hat{M}_3 \quad , \quad [\hat{M}_3, \hat{M}_1] = i\hbar\hat{M}_2 \quad , \quad [\hat{M}_2, \hat{M}_3] = i\hbar\hat{M}_1 \quad .$$

No es pues útil el uso de la simetría dinámica en la identificación de las autofunciones en el espectro continuo de  $\hat{H}_0$  en el subespacio  $\mathcal{SH}_0$ . En orden a dilucidar las soluciones de scattering

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} - \frac{\alpha_Z}{r}\right)\psi_{E^{(0)}}^{(0)}(x_1, x_2) = E^{(0)}\psi_{E^{(0)}}^{(0)}(x_1, x_2) \quad , \quad E^{(0)} > \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \quad ,$$

nos beneficiamos del hecho de que el problema espectral es separable en coordenadas polares. El ansatz  $\psi_{E^{(0)}}^{(0)}(r, \varphi) = f_{E^{(0)}}^{(0)}(r)e^{im\varphi}$  conduce a la ecuación diferencial ordinaria de tipo hipergeométrico

$$\frac{d^2 f_{E^{(0)}}^{(0)}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df_{E^{(0)}}^{(0)}}{dr} - \frac{m^2}{r^2} f_{E^{(0)}}^{(0)}(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( \frac{\alpha_Z}{r} + E^{(0)} - \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \right) f_{E^{(0)}}^{(0)}(r) = 0 \quad .$$

Definiendo la variable adimensional  $u = \frac{2\sqrt{2|\frac{2}{\hbar^2} - E^{(0)}}}{\hbar} r$  se encuentran las soluciones de scattering bosónicas

$$f_{E^{(0)}}^{(0)}(r) = N(E^{(0)})e^{-i\frac{u}{2}}u^{|m|}{}_1F_1 \left[ |m| - \frac{1}{2} - \frac{i}{\hbar\sqrt{2|\frac{2}{\hbar^2} - E^{(0)}}}, 1 + 2|m|, iu \right]$$

en términos de las funciones hipergeométricas confluentes de Kummer.

En forma similar, se identifican las funciones de onda de scattering en  $\mathcal{SH}_2$ , las funciones propias de  $\hat{H}_2$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} + \frac{\alpha_Z}{r} \right) \psi_{E^{(2)}}^{(2)}(x_1, x_2) = E^{(2)}\psi_{E^{(2)}}^{(2)}(x_1, x_2) \quad , \quad E^{(2)} > \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} .$$

Suponiendo  $\psi_{E^{(2)}}^{(2)}(r, \varphi) = f_{E^{(2)}}^{(2)}(r)e^{im\varphi}$  se encuentra

$$\frac{d^2 f_{E^{(2)}}^{(2)}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df_{E^{(2)}}^{(2)}}{dr} - \frac{m^2}{r^2} f_{E^{(2)}}^{(2)}(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( -\frac{\alpha_Z}{r} + E^{(2)} - \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \right) f_{E^{(2)}}^{(2)}(r) = 0 ,$$

$$f_{E^{(2)}}^{(2)}(r) = N(E^{(2)})e^{-i\frac{u}{2}}u^{|m|}{}_1F_1 \left[ |m| - \frac{1}{2} + \frac{i}{\hbar\sqrt{2|\frac{2}{\hbar^2} - E^{(2)}}}, 1 + 2|m|, iu \right] .$$

En cuanto al espectro discreto, al ser repulsivo el potencial no existen estados ligados en  $\mathcal{SH}_2$ . El álgebra supersimétrica nos permite ahora identificar todas las soluciones del problema espectral supersimétrico  $\hat{H}\psi_E = E\psi_E$  a partir de las funciones propias de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_2$  con valores propios no nulos. La observación clave es que hay dos clases de funciones propias de energía estrictamente positiva:  $\psi_E^{\rightarrow} = \hat{Q}^\dagger\psi_E \in \hat{Q}^\dagger\mathcal{SH}$  y  $\psi_E^{\leftarrow} = \hat{Q}\psi_E \in \hat{Q}\mathcal{SH}$  debido a que, si  $E > 0$  tenemos

$$\hat{H}\hat{Q}^\dagger\psi_E = \hat{Q}^\dagger\hat{H}\psi_E = E\hat{Q}^\dagger\psi_E \quad , \quad \hat{H}\hat{Q}\psi_E = \hat{Q}\hat{H}\psi_E = E\hat{Q}\psi_E .$$

La estructura del espectro es la siguiente [24]:

- Estados fundamentales: Hay un único estado fundamental  $\psi_{00}^{(0)}(x_1, x_2) \in \text{Ker}\hat{H}$  -que pertenece a  $\mathcal{SH}_0$  y por tanto es bosónico- de energía  $E_0^{(0)} = 0$ .
- Estados propios  $\hat{Q}^\dagger$ -exactos: Hay tres tipos de estados  $\hat{Q}^\dagger$ -exactos
  1. Espinores propios de estados ligados  $\hat{Q}^\dagger$ -exactos que pertenece al subespacio  $\hat{Q}^\dagger\mathcal{SH}$  y en particular viven en  $\mathcal{SH}_1$

$$\psi_{E_j^{(1)}}^{(1)}(x_1, x_2) = \hat{Q}^\dagger\psi_{jm}^{(0)}(x_1, x_2) \quad , \quad 0 < E_j^{(1)} < \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} .$$

2. Espinores propios de scattering  $\hat{Q}^\dagger$ -exactos que también pertenecen a  $\hat{Q}^\dagger\mathcal{SH}$  y viven en  $\mathcal{SH}_1$

$$E_-^{(1)} = E^{(0)} > \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \quad , \quad \psi_{E_-^{(1)}}^{(1)}(x_1, x_2) = \hat{Q}^\dagger \psi_{E^{(0)}}^{(0)}(x_1, x_2) .$$

3. Funciones de onda de scattering  $\hat{Q}^\dagger$ -exactas que pertenecen a  $\hat{Q}^\dagger\mathcal{SH}$  pero ahora viven en  $\mathcal{SH}_2$

$$E_+^{(2)} = E_+^{(1)} > \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \quad , \quad \psi_{E_+^{(2)}}^{(2)}(x_1, x_2) = \hat{Q}^\dagger \psi_{E_+^{(1)}}^{(1)}(x_1, x_2) .$$

- Estados propios  $\hat{Q}$ -exactos: Hay tres tipos de estados  $\hat{Q}$ -exactos

1. Estados ligados  $\hat{Q}$ -exactos que pertenecen a  $\hat{Q}\mathcal{SH}$  y viven en  $\mathcal{SH}_0$

$$0 < E_j^{(0)} = E_j^{(1)} < \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \quad , \quad j > 0 \quad , \quad \psi_{jm}^{(0)}(x_1, x_2) = \hat{Q} \psi_{E_j^{(1)}}^{(1)}(x_1, x_2) .$$

2. Funciones de onda de scattering  $\hat{Q}$ -exactas que pertenecen a  $\hat{Q}\mathcal{SH}$  y viven en  $\mathcal{SH}_0$

$$E^{(0)} = E_-^{(1)} > \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \quad , \quad \psi_{E^{(0)}}^{(0)}(x_1, x_2) = \hat{Q} \psi_{E_-^{(1)}}^{(1)}(x_1, x_2) .$$

3. Espinores propios de scattering  $\hat{Q}$ -exactos que pertenecen a  $\hat{Q}\mathcal{SH}$  y viven en  $\mathcal{SH}_1$

$$E_+^{(1)} = E^{(2)} > \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \quad , \quad \psi_{E_+^{(1)}}^{(1)}(x_1, x_2) = \hat{Q} \psi_{E^{(2)}}^{(2)}(x_1, x_2) .$$

Debido a que las funciones propias forman un conjunto completo en cada subespacio tenemos la descomposición tipo Hodge del espacio de estados supersimétrico

$$\mathcal{SH} = \hat{Q}\mathcal{SH} \oplus \hat{Q}^\dagger\mathcal{SH} \oplus \text{Ker}\hat{H} .$$

#### 4.5.4. Estructura Clifford de los invariantes en el problema supersimétrico de Kepler-Coulomb en el plano

El espectro del problema de Kepler-Coulomb supersimétrico plano se ha establecido resolviendo el problema espectral de los dos Hamiltonianos escalares y usando el álgebra supersimétrica para obtener las funciones propias del Hamiltoniano matricial. No obstante, conviene

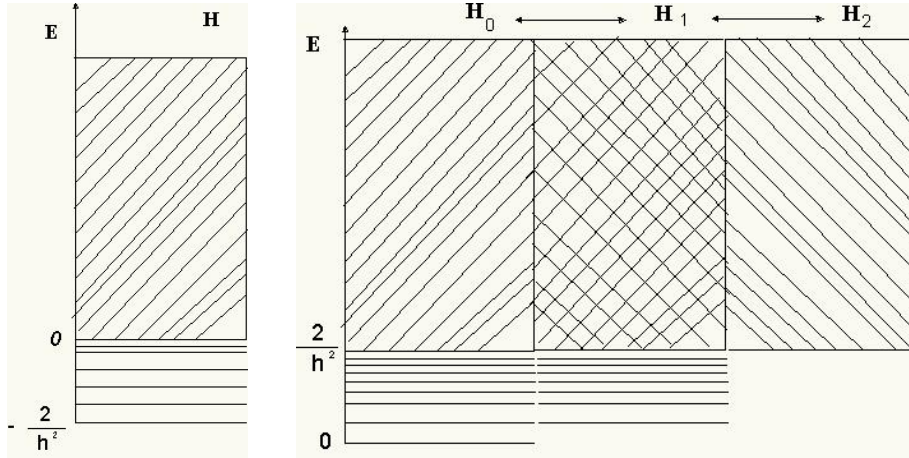


Figura 4.6: Espectro del Hamiltoniano de Kepler-Coulomb (izquierda) y espectro del Hamiltoniano de Kepler-Coulomb supersimétrico (derecha).

analizar el sistema en su conjunto, i.e., buscar directamente el espectro del operador Hamiltoniano supersimétrico matricial  $4 \times 4$ .

Con este objetivo en mente, se define el operador de “espín” en la forma [24]

$$\frac{1}{2}\hat{S} = -i\frac{\hbar}{2}(\hat{\psi}_1^\dagger\hat{\psi}_2 - \hat{\psi}_2^\dagger\hat{\psi}_1) = -i\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Claramente  $[\hat{S}, \hat{F}] = 0$ , tal que  $\frac{1}{2}\hat{S}$  y  $\hat{F}$  comparten estados propios. En esta dimensión esto podría entenderse como una versión del teorema de espín-estadística en mecánica cuántica, aunque más apropiadamente asociaremos el operador de espín en dimensiones más altas a los subespacios del espacio de Fock con  $\hat{F} \neq 0$  y  $\hat{F} \neq N$  en un problema mecano cuántico en  $\mathbb{R}^N$ . Los estados propios bosónicos de  $\hat{F}$  son estados propios de espín cero de  $\frac{1}{2}\hat{S}$ , mientras que los estados propios fermiónicos de  $\hat{F}$  son estados propios de espín un medio de  $\frac{1}{2}\hat{S}$ , esto es:

$$\frac{1}{2}\hat{S} \begin{pmatrix} \psi^{(0)} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hat{S} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \psi^{(2)} \end{pmatrix} = 0, \quad \frac{1}{2}\hat{S} \begin{pmatrix} 0 \\ \psi^{(1)} \\ \pm i\psi^{(1)} \\ 0 \end{pmatrix} = \mp \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ \psi^{(1)} \\ \pm i\psi^{(1)} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Nótese también que ni el momento angular orbital  $\hat{L}$  ni el momento angular de espín  $\hat{S}$  conmutan con  $\hat{H}$ . El momento angular “total” es el invariante cuántico asociado con las rotaciones

simultáneas de las coordenadas bosónicas  $x_k$  y fermiónicas  $\psi_k$ , esto es<sup>6</sup>:

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} = -i\hbar \left( x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) - i\hbar \left( \psi_1^\dagger \psi_2 - \psi_2^\dagger \psi_1 \right) .$$

Por tanto, además del hecho que  $[\hat{J}, \hat{F}] = 0$ , se puede hacer uso de  $[\hat{J}, \hat{g}] = [\hat{J}, \hat{X}] = 0$  para mostrar que:

$$[\hat{J}, \hat{Q}] = [\hat{J}, \hat{Q}^\dagger] = [\hat{J}, \hat{H}] = 0 ,$$

donde  $\hat{X} = \hat{\mathbb{I}}_4 - 2\hat{F} + 2\hat{g}^\dagger \hat{g}$ .

Tenemos dos operadores supersimétricos Clifford que conmutan entre sí:  $\hat{H}$  y  $\hat{J}$ . El sistema supersimétrico en su conjunto es integrable. Ahora el desafío es encontrar más operadores diferenciales Clifford que conmuten con el Hamiltoniano. En [13] los autores identificaron la versión supersimétrica del operador vectorial de Runge-Lenz -por tanto, el operador vectorial KLPW supersimétrico-:

$$\hat{W}_1 = \frac{1}{2} \left( \hat{p}_2 \hat{J} + \hat{J} \hat{p}_2 \right) - \frac{x_1}{r} \hat{X} \quad , \quad \hat{W}_2 = -\frac{1}{2} \left( \hat{p}_1 \hat{J} + \hat{J} \hat{p}_1 \right) - \frac{x_2}{r} \hat{X} .$$

Uno podría suponer el paso de  $\hat{L}$  a  $\hat{J}$ , y la necesidad del factor  $\hat{X}$ , tampoco es una sorpresa dado su papel en el Hamiltoniano supersimétrico  $\hat{H}$ . Un extenso cálculo asegura que las dos componentes de esta matriz  $4 \times 4$  de operadores vectoriales diferenciales conmutan con el Hamiltoniano y con el operador número de Fermi:

$$[\hat{W}_k, \hat{Q}] = [\hat{W}_k, \hat{Q}^\dagger] = [\hat{W}_k, \hat{H}] = [\hat{W}_k, \hat{F}] = 0 .$$

Adicionalmente se verifica

$$[\hat{J}, \hat{W}_1] = i\hbar \hat{W}_2 \quad , \quad [\hat{J}, \hat{W}_2] = -i\hbar \hat{W}_1 \quad , \quad [\hat{W}_1, \hat{W}_2] = -2i\hbar \left( \hat{H} - \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \right) \hat{J}$$

Por tanto, definiendo

$$\hat{C}_k = \frac{\hat{W}_k}{\sqrt{2 \left( \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} - \hat{H} \right)}} ,$$

el álgebra de Lie  $\mathbb{S}\mathbb{O}(3)$  es ahora cerrada -en el subespacio de estados de energía en el rango  $E \in (0, \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2})$ - por los operadores de Clifford  $\hat{C}_1, \hat{C}_2, \hat{C}_3 = \hat{J}$

$$[\hat{C}_a, \hat{C}_b] = -i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{C}_c \quad , \quad a, b, c = 1, 2, 3$$

<sup>6</sup>Recordar que  $[\hat{L}, x_k] = \hbar \varepsilon_{kj} x_j$  y  $[\hat{S}, \hat{\psi}_k] = \hbar \varepsilon_{kj} \hat{\psi}_j$ ,  $\varepsilon_{12} = -\varepsilon_{21} = 1$ ,  $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = 0$ .

y el operador de Casimir es el operador diferencial matricial  $4 \times 4$

$$\hat{\mathcal{C}}^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left[ \hat{\mathcal{C}}_1^2 + \hat{\mathcal{C}}_2^2 + \hat{\mathcal{C}}_3^2 \right].$$

Cabe advertir que el operador  $\hat{J}$ , y consecuentemente las dos componentes del vector de Runge-Lenz-Wipf  $\hat{C}_k$ , operan en todo el espacio de Hilbert  $\mathcal{SH} = L^2(\mathbb{R}^2) \otimes \mathcal{F}$ ;  $\hat{L}$  genera rotaciones en el espacio  $L^2(\mathbb{R}^2)$  mientras que  $\hat{S}$  rota en la componente espinorial de  $\mathcal{F}$ . En [13] los autores demuestran que esta situación ocurre para el problema de Kepler-Coulomb supersimétrico en cualquier espacio  $\mathbb{R}^d$  existiendo así una simetría dinámica con respecto al grupo  $\mathbb{SO}(d+1)$ . Como el isomorfismo  $\text{LieSO}(4) \simeq \text{LieSO}(3) \otimes \text{LieSO}(3)$  sólo es relevante en  $d = 3$  es conveniente considerar directamente las representaciones irreducibles de  $\mathbb{SO}(d+1)$ . Damos a continuación las fórmulas que utilizaremos.

1. La dimensión de la representación irreducible de  $\mathbb{SO}(d+1)$  formada por los tensores simétricos sin traza de orden  $l \in \mathbb{N}$  es:

$$\dim D_l^{(d+1)} = \binom{l+d}{l} - \binom{l+d-2}{l-2} . \quad (4.20)$$

2. El valor que toma el operador de Casimir cuadrático sobre cualquier elemento de una representación irreducible caracterizada por el orden de los tensores es:

$$\hat{\mathcal{C}}^2 = l(l+d-1) . \quad (4.21)$$

3. El Hamiltoniano supersimétrico reducido a los subespacios  $\hat{Q}\mathcal{H}$  y  $\hat{Q}^\dagger\mathcal{H}$  en términos del operador de Casimir se escribe como:

$$\hat{H} \Big|_{\hat{Q}\mathcal{H}} = \hat{Q}\hat{Q}^\dagger = \frac{2\mu\alpha_Z^2}{(d-1)^2\hbar^2} \left[ 1 - \frac{(d-1-2\hat{F})^2}{(d-1-2\hat{F})^2 + 4\hat{\mathcal{C}}^2} \right] \quad (4.22)$$

$$\hat{H} \Big|_{\hat{Q}^\dagger\mathcal{H}} = \hat{Q}^\dagger\hat{Q} = \frac{2\mu\alpha_Z^2}{(d-1)^2\hbar^2} \left[ 1 - \frac{(d+1-2\hat{F})^2}{d+1-2\hat{F})^2 + 4\hat{\mathcal{C}}^2} \right] . \quad (4.23)$$

La aplicación de estas fórmulas al caso  $d = 2$  es inmediata. Escribiendo  $l = j$  para coincidir con la notación anterior y considerando el caso  $\hat{F} = 0$  en

$$\hat{H} \Big|_{\hat{Q}\mathcal{H}} = \hat{Q}\hat{Q}^\dagger = \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \left[ 1 - \frac{(1-2\hat{F})^2}{(1-2\hat{F})^2 + 4\hat{\mathcal{C}}^2} \right] ,$$

el único en que esta expresión no es cero, se encuentra  $E_j^{(0)} = \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \left[ 1 - \frac{1}{(2j+1)^2} \right]$  mientras que tomando  $\hat{F} = 1$  en

$$\hat{H} \Big|_{\hat{Q}^\dagger \mathcal{H}} = \hat{Q}^\dagger \hat{Q} = \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \left[ 1 - \frac{(3 - 2\hat{F})^2}{(3 - 2\hat{F})^2 + 4\hat{C}^2} \right],$$

resulta  $E_j^{(1)} = \frac{2\mu\alpha_Z^2}{\hbar^2} \left[ 1 - \frac{1}{(2j+1)^2} \right]$ , esto es, las energías de los estados ligados en  $\mathcal{SH}_0$  y  $\mathcal{SH}_1$  están vinculadas por supersimetría como ya sabíamos.

## 4.6. El problema de Kepler-Coulomb supersimétrico en el espacio Euclideo tridimensional

El superpotencial para construir la versión supersimétrica del problema de Kepler-Coulomb en tres dimensiones se elige como:

$$W(x) = -\frac{\mu\alpha_Z}{\hbar} r = -\frac{\mu\alpha_Z}{\hbar} \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2},$$

es decir hay un factor  $\frac{1}{2}$  con respecto a la misma magnitud en el plano. Las derivadas parciales del superpotencial son<sup>7</sup>:

$$\begin{aligned} \partial_k W &= -\frac{\mu\alpha_Z}{\hbar} \frac{x_k}{r}, & \partial_1^2 W &= -\frac{\mu\alpha_Z}{\hbar} \frac{x_2^2 + x_3^2}{r^3}, & \partial_2^2 W &= -\frac{\mu\alpha_Z}{\hbar} \frac{x_1^2 + x_3^2}{r^3}, & \partial_3^2 W &= -\frac{\mu\alpha_Z}{\hbar} \frac{x_1^2 + x_2^2}{r^3} \\ \partial_1 \partial_2 W &= -\frac{\mu\alpha_Z}{\hbar} \frac{x_1 x_2}{r^3} = \partial_2 \partial_1 W, & \partial_1 \partial_3 W &= -\frac{\mu\alpha_Z}{\hbar} \frac{x_1 x_3}{r^3} = \partial_3 \partial_1 W, & \partial_2 \partial_3 W &= -\frac{\mu\alpha_Z}{\hbar} \frac{x_2 x_3}{r^3} = \partial_3 \partial_2 W \end{aligned}$$

Por tanto, las supercargas se escriben en la forma:

$$\hat{Q} = \sum_{j=1}^3 i \left( \hbar \hat{\psi}_j \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\mu\alpha_Z}{\hbar} \hat{h} \right), \quad \hat{Q}^\dagger = \sum_{j=1}^3 i \left( \hbar \hat{\psi}_j^\dagger \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\mu\alpha_Z}{\hbar} \hat{h}^\dagger \right), \quad [\hat{Q}] = M^{\frac{1}{2}} L T^{-1}$$

donde<sup>8</sup>

$$\hat{h} = \sum_{j=1}^3 \frac{x_j}{r} \hat{\psi}_j, \quad \hat{h}^\dagger = \sum_{j=1}^3 \frac{x_j}{r} \hat{\psi}_j^\dagger, \quad (\hat{h})^2 = (\hat{h}^\dagger)^2 = 0, \quad \{\hat{h}^\dagger, \hat{h}\} = \frac{1}{\mu} \hat{\mathbb{I}}_8$$

es la proyección de las variables fermiónicas sobre las coordenadas bosónicas en  $\mathbb{R}^3$ . Explícitamente

$$\hat{h} = \frac{1}{\sqrt{\mu} r} \begin{pmatrix} 0 & x_1 & x_2 & x_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -x_2 & -x_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x_1 & 0 & -x_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x_1 & x_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -x_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{h}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\mu} r} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -x_2 & x_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -x_3 & 0 & x_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -x_3 & x_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x_3 & -x_2 & x_1 & 0 \end{pmatrix}$$

<sup>7</sup> $\partial_k \equiv \frac{\partial}{\partial x_k}, k = 1, 2, 3$

<sup>8</sup> $\hat{\mathbb{I}}_8$  es la matriz identidad  $8 \times 8$ .

$$\hat{h}^\dagger \hat{h} = \frac{1}{\mu r^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_1^2 & x_1 x_2 & x_1 x_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_1 x_2 & x_2^2 & x_2 x_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_1 x_3 & x_2 x_3 & x_3^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x_1^2 + x_2^2 & x_2 x_3 & -x_1 x_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x_2 x_3 & x_1^2 + x_3^2 & x_1 x_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -x_1 x_3 & x_1 x_2 & x_2^2 + x_3^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \end{pmatrix}$$

El Hamiltoniano supersimétrico de Kepler-Coulomb en 3D es:

$$\hat{H} = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} \right) \hat{\mathbb{I}}_8 - \frac{\alpha_Z}{r} \hat{B},$$

donde la matriz  $8 \times 8$  potencial  $\hat{B}$  determina el campo de fuerzas<sup>9</sup>

$$\hat{B} = \hat{\mathbb{I}}_8 - \mu \hat{F} + \mu \hat{h}^\dagger \hat{h} = \frac{1}{r^2} \begin{pmatrix} x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_1^2 & x_1 x_2 & x_1 x_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_1 x_2 & x_2^2 & x_2 x_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_1 x_3 & x_2 x_3 & x_3^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -x_3^2 & x_2 x_3 & -x_1 x_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x_2 x_3 & -x_2^2 & x_1 x_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -x_1 x_3 & x_1 x_2 & -x_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 \end{pmatrix}$$

El Hamiltoniano supersimétrico  $\hat{H}$  es diagonal por cajas (1.14), con las cajas actuando en los subespacios propios de  $\hat{F}$ :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{H}_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{H}_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{H}_3 \end{pmatrix}$$

Hay por tanto dos Hamiltonianos escalares  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_3$  en las cajas que operan sobre los subespacios con  $\hat{F} = 0$  (ningún grado de libertad fermiónico ocupado) y  $\hat{F} = 3$  (los tres grados de libertad fermiónicos ocupados):

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} - \frac{\alpha_Z}{r}, \quad \hat{H}_3 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} + \frac{\alpha_Z}{r},$$

Hay además dos Hamiltonianos matriciales  $3 \times 3$ , que operan respectivamente sobre los subespacios tridimensionales del espacio de Fock fermiónico en que uno ó dos grados de libertad fermiónicos están ocupados.  $\hat{H}_1$  actúa en el subespacio tal que  $\hat{F} = 1$  y resulta ser:

$$\hat{H}_1 = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} - \frac{\alpha_Z x_1^2}{r^3} & -\frac{\alpha_Z x_1 x_2}{r^3} & -\frac{\alpha_Z x_1 x_3}{r^3} \\ -\frac{\alpha_Z x_1 x_2}{r^3} & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} - \frac{\alpha_Z x_2^2}{r^3} & -\frac{\alpha_Z x_2 x_3}{r^3} \\ -\frac{\alpha_Z x_1 x_3}{r^3} & -\frac{\alpha_Z x_2 x_3}{r^3} & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} - \frac{\alpha_Z x_3^2}{r^3} \end{pmatrix}.$$

<sup>9</sup>El operador número de Fermi  $\hat{F}$  se define en la ecuación (1.13). Es una matriz  $8 \times 8$  diagonal. El primer autovalor no degenerado es 0, el segundo autovalor tres veces degenerado es 1, el tercer autovalor 2 es también triplemente degenerado mientras que el último 3 no es degenerado.



$\hat{H}_2$  por su parte opera en el subespacio tal que  $\hat{F} = 2$  y es similar:

$$\hat{H}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} + \frac{\alpha_Z x_3^2}{r^3} & -\frac{\alpha_Z x_2 x_3}{r^3} & \frac{\alpha_Z x_1 x_3}{r^3} \\ -\frac{\alpha_Z x_2 x_3}{r^3} & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} + \frac{\alpha_Z x_2^2}{r^3} & -\frac{\alpha_Z x_1 x_2}{\hbar^2 r^3} \\ \frac{\alpha_Z x_1 x_3}{r^3} & -\frac{\alpha_Z x_1 x_2}{r^3} & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} + \frac{\alpha_Z x_1^2}{r^3} \end{pmatrix}.$$

Obsérvense sin embargo las diferencias en signos y las permutaciones de las coordenadas

#### 4.6.1. El espectro discreto de $\hat{H}$

Claramente el Hamiltoniano  $\hat{H}_3$  no admite estados propios ligados pues obedece a un potencial de Coulomb repulsivo. Menos obvio, pero altamente plausible, es que  $\hat{H}_2$  tampoco admite estados ligados. La parte diagonal del potencial, la dominante, es repulsiva. Las autofunciones del espectro discreto de  $\hat{H}$  deben ser pues estados ligados de  $\hat{H}_0$  ó  $\hat{H}_1$ . Las autofunciones normalizables de  $\hat{H}_0$ , las normalizables de  $\hat{H}$  en el subespacio  $\hat{F} = 0$ , quedan caracterizadas por los autovalores:

$$\hat{H}_0 \psi^{(0)} = E_j^{(0)} \psi_j^{(0)} = \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} \left[ 1 - \frac{1}{(2j+1)^2} \right] \psi_j^{(0)} \quad , \quad j \in \mathbb{N}_{\frac{1}{2}} \quad ,$$

es decir, son los autovalores del problema no SUSY desplazados en la cantidad  $\frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2}$  de modo que la energía del estado fundamental es cero de acuerdo con los requerimientos de supersimetría. Las funciones propias de estado ligado en el sector  $\hat{F} = 0$  del problema de Kepler-Coulomb supersimétrico son por otro lado las mismas que las funciones propias de estado ligado encontradas para el caso no SUSY (véase las Secciones 4.5.1. y 4.5.2) y no vamos a repetirlas aquí. Las funciones de onda, pares supersimétricas de las mencionadas en el párrafo anterior, que pertenecen a  $\mathcal{SH}_1$  tienen las mismas energías:

$$E_j^{(1)} = \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} \left[ 1 - \frac{1}{(2j+1)^2} \right] \in \left( 0, \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} \right) \quad , \quad 0 < j \in \mathbb{N}_{\frac{1}{2}}^*$$

y se obtienen de las anteriores por la acción de la supercarga, por ejemplo, en la base  $|lm; jj\rangle$ :

$$\psi_{l,m;j,j}^{(1)}(r, \theta, \varphi) = \frac{\hbar}{\sqrt{\mu\alpha_Z}} \hat{Q}^\dagger \psi_{l,m;j,j}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \psi_{l,m;j,j}^{(1)1}(r, \theta, \varphi) \\ \psi_{l,m;j,j}^{(1)2}(r, \theta, \varphi) \\ \psi_{l,m;j,j}^{(1)3}(r, \theta, \varphi) \end{pmatrix}.$$

De aquí se deduce que

$$\psi_{l_1, m_1; j_1, j_1}^{(1)}(r, \theta, \varphi)^\dagger \psi_{l_2, m_2; j_2, j_2}^{(1)}(r, \theta, \varphi) = \psi_{l_1, m_1; j_1, j_1}^{(0)}(r, \theta, \varphi)^\dagger \frac{\hbar^2}{\mu\alpha_Z^2} \hat{Q} \hat{Q}^\dagger \psi_{l_2, m_2; j_2, j_2}^{(0)}(r, \theta, \varphi)$$

$$= \frac{2\hbar^2}{\mu\alpha_Z^2} \psi_{l_1, m_1; j_1, j_1}^{(0)}(r, \theta, \varphi)^\dagger \hat{H} \psi_{l_2, m_2; j_2, j_2}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = \frac{2\hbar^2}{\mu\alpha_Z^2} E_{j_2}^{(0)} \psi_{l_1, m_1; j_1, j_1}^{(0)}(r, \theta, \varphi)^\dagger \psi_{l_2, m_2; j_2, j_2}^{(0)}(r, \theta, \varphi)$$

debido a que  $\hat{Q} \psi_{l, m; j, j}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = 0$  y  $\hat{H} \psi_{l, m; j, j}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = E_j^{(0)} \psi_{l, m; j, j}^{(0)}(r, \theta, \varphi)$ . La integración de (4.24) sobre todo  $\mathbb{R}^3$  da como resultado

$$\int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta (\psi_{l_1, m_1; j_1, j_2}^{(1)}(r, \theta, \varphi)^\dagger \psi_{l_2, m_2; j_2, j_2}^{(1)}(r, \theta, \varphi)) = \frac{2\hbar^2}{\mu\alpha_Z^2} E_{j_2}^{(1)} \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2} \delta_{j_1 j_2} ,$$

lo que demuestra que  $E_j^{(1)}$  debe ser positivo. Es conveniente recordar que el modo cero bosónico, el estado fundamental, pertenece al núcleo de las supercargas:  $\hat{Q}^\dagger \psi_0^{(0)}(\vec{x}) = 0$ . Esto no excluye modos cero fermiónicos que no son  $\hat{Q}^\dagger$  exactos. Veremos en el próximo Capítulo que esta posibilidad se materializa en el problema de dos centros de fuerza Coulombianos supersimétrico. Dado que las supercargas no conmutan con las componentes del vector de Runge-Lenz, generadores de la simetría  $\mathbb{SO}(4)$ ,

$$[\hat{M}_a, \hat{Q}^\dagger] \neq 0, \forall a = 1, 2, 3$$

la simetría dinámica que exhibe el sistema en el sector  $\hat{F} = 0$  no se mantiene en el subespacio  $\hat{F} \neq 0$  del espacio de Fock fermiónico. En particular, la acción de  $\hat{Q}^\dagger$  mezcla las representaciones irreducibles de  $\mathbb{SO}(4)$  en que se organizan las autofunciones de  $\hat{H}_0$  en las distintas componentes de  $\psi_j^{(1)}$ . No obstante, las funciones de onda en  $\mathcal{SH}_1$  propias de  $\hat{H}_1$  son caracterizadas por los números cuánticos  $l, m, j_+ = j$  y  $j_- = j$ , toda vez que se obtienen a partir de la representación irreducible de  $\mathbb{SO}(4)$  elegida en  $\mathcal{SH}_0$  vía la acción de  $\hat{Q}^\dagger$ . La situación es conceptualmente idéntica a la explicada en el problema de Coulomb supersimétrico en el plano.

#### 4.6.2. Estados de scattering

Sobre las funciones propias de energía positiva del Hamiltoniano de Kepler-Coulomb  $\hat{H}_0$  las componentes normalizadas del vector de Runge-Lenz y el momento angular cierran el álgebra de Lie  $\mathbb{SO}(3, 1)$

$$\hat{M}_1 = -i\sqrt{\frac{\mu\alpha_Z^2}{2E}} \hat{A}_1 \quad , \quad \hat{M}_2 = -i\sqrt{\frac{\mu\alpha_Z^2}{2E}} \hat{A}_2 \quad , \quad \hat{M}_3 = -i\sqrt{\frac{\mu\alpha_Z^2}{2E}} \hat{A}_3$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad , \quad [\hat{L}_i, \hat{M}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} \hat{M}_k \quad , \quad [\hat{M}_i, \hat{M}_j] = -\hbar\epsilon_{ijk} \hat{L}_k$$

No es pues muy útil el uso de la simetría dinámica para organizar las autofunciones de energía positiva. Las funciones de onda de scattering en  $\mathcal{SH}_0$ , funciones propias de  $\hat{H}_0$ , se encuentran habitualmente basándose en la invariancia bajo rotaciones de la ecuación de Schrödinger

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} - \frac{\alpha_Z}{r} \right) \psi_{E^{(0)}}^{(0)}(x_1, x_2, x_3) = E^{(0)} \psi_{E^{(0)}}^{(0)}(x_1, x_2, x_3) \quad , \quad E^{(0)} > \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2}$$

reducida a un sistema de ecuaciones diferenciales separadas mediante el ansatz de separación de variables  $\psi_{E^{(0)}}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = R_{E^{(0)}}^{(0)}(r)\Theta_{E^{(0)}}^{(0)}(\theta)e^{im\varphi}$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dR_{E^{(0)}}^{(0)}}{dr} \right) + \left\{ \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E^{(0)} - \left( \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} - \frac{\alpha_Z}{r} \right) \right] + \frac{\lambda}{r^2} \right\} R_{E^{(0)}}^{(0)} = 0 .$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta_{E^{(0)}}^{(0)}}{d\theta} \right) + \left( -\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right) \Theta_{E^{(0)}}^{(0)} = 0$$

donde  $\lambda$  es la constante de separación.

Similarmente las funciones de onda de scattering en  $\mathcal{SH}_3$ , funciones propias de  $\hat{H}_3$ , se obtienen mediante la resolución de la ecuación de Schrödinger

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} + \frac{\alpha_Z}{r} \right) \psi_{E^{(3)}}^{(3)}(x_1, x_2, x_3) = E^{(3)} \psi_{E^{(3)}}^{(3)}(x_1, x_2, x_3) \quad , \quad E^{(3)} > \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2}$$

vía separación de variables:  $\psi_{E^{(3)}}^{(3)}(r, \theta, \varphi) = R_{E^{(3)}}^{(3)}(r)\Theta_{E^{(3)}}^{(3)}(\theta)e^{im\varphi}$  se encuentran las ecuaciones separadas

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dR_{E^{(3)}}^{(3)}}{dr} \right) + \left\{ \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E^{(3)} - \left( \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} + \frac{\alpha_Z}{r} \right) \right] + \frac{\lambda}{r^2} \right\} R_{E^{(3)}}^{(3)} = 0 .$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta_{E^{(3)}}^{(3)}}{d\theta} \right) + \left( -\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right) \Theta_{E^{(3)}}^{(3)} = 0$$

donde  $\lambda$  es la constante de separación. Los defasajes en cada canal de momento angular dado que describen las soluciones de scattering del problema de Coulomb son bien conocidos y pueden consultarse en la Literatura. En cuanto a la estructura general del espectro supersimétrico es muy parecida a la del problema en el plano por lo que omitimos su descripción. Únicamente advertir que en dimensiones mayores que dos no se pueden determinar todas las autofunciones analíticamente mediante el uso del álgebra de supersimetría. Por ejemplo, en tres dimensiones, uno resuelve los problemas espectrales de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_3$ , los Hamiltonianos escalares. Actuando con  $\hat{Q}^\dagger$  sobre las autofunciones de  $\hat{H}_0$  encuentra sus pares supersimétricos en  $\mathcal{SH}_1$ . Mutatis mutandi la acción de  $\hat{Q}$  sobre las autofunciones de  $\hat{H}_3$  lleva a las autofunciones con la misma energía en  $\mathcal{SH}_2$ . Este proceso no se puede iterar pues las supercargas son nilpotentes. Es imposible determinar directamente las autofunciones de  $\hat{H}_1$  ó  $\hat{H}_2$  que no provengan de  $\mathcal{SH}_0$  ó  $\mathcal{SH}_3$  por medio de los generadores del álgebra de supersimetría no se pueden conocer. Se puede afirmar sin embargo que pertenecen al espectro continuo pues las interacciones en  $\hat{H}_2$  son repulsivas y los pares supersimétricos en  $\mathcal{SH}_1$  que se siguen de éstas vía la acción de  $\hat{Q}$  por tanto también.

### 4.6.3. Estructura Clifford de los invariantes del problema supersimétrico de Kepler-Coulomb en el espacio

Wipf y sus colaboradores, sin embargo, han propuesto una fórmula general para los autovalores de basándose en la generalización al marco supersimétrico del vector de Runge-Lenz-Wipf. En tres dimensiones los operadores fermiónicos permiten construir las tres componentes del operador de espín que genera el álgebra de Lie de  $\mathbb{SO}(3)$ :

$$\hat{S}_k = -i\hbar\varepsilon_{kjl}\hat{\psi}_j^\dagger\hat{\psi}_l \quad , \quad [\hat{S}_k, \hat{S}_j] = i\hbar\varepsilon_{kjl}\hat{S}_l \quad .$$

La componente del espín sobre el tercer eje, por ejemplo, es la matriz  $8 \times 8$

$$\hat{S}_3 = -i\hbar\left(\hat{\psi}_1^\dagger\hat{\psi}_2 - \hat{\psi}_2^\dagger\hat{\psi}_1\right) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

de modo que los espinores propios de  $\hat{S}_3$  respectivamente en  $\mathcal{SH}_1$  y  $\mathcal{SH}_2$  son de la forma:

$$\begin{aligned} \hat{S}_3 \Big|_{\mathcal{SH}_1} \begin{pmatrix} \psi^{(1)} \\ \pm i\psi^{(1)} \\ 0 \end{pmatrix} &= \mp \begin{pmatrix} \psi^{(1)} \\ \pm i\psi^{(1)} \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \hat{S}_3 \Big|_{\mathcal{SH}_1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \psi^{(1)} \end{pmatrix} = 0 \\ \hat{S}_3 \Big|_{\mathcal{SH}_1} \begin{pmatrix} 0 \\ \psi^{(2)} \\ \pm i\psi^{(2)} \end{pmatrix} &= \mp \begin{pmatrix} 0 \\ \psi^{(2)} \\ \pm i\psi^{(2)} \end{pmatrix} \quad , \quad \hat{S}_3 \Big|_{\mathcal{SH}_2} \begin{pmatrix} \psi^{(2)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad . \end{aligned}$$

El momento angular total, un operador vectorial tal que cada componente es una matriz  $8 \times 8$ , es el generador de  $\mathbb{SO}(3)$  que actúa en el sistema supersimétrico completo.

$$\hat{J}_k = \hat{L}_k + \hat{S}_k = -i\hbar\varepsilon_{kjl} \left( x_j \frac{\partial}{\partial x_l} + \hat{\psi}_j^\dagger \hat{\psi}_l \right)$$

Que las transformaciones generadas por  $\hat{J}_k$  son simetrías del sistema supersimétrico se infiere de las relaciones de conmutación siguientes:

$$[\hat{J}_k, \hat{F}] = [\hat{J}_k, \hat{Q}] = [\hat{J}_k, \hat{Q}^\dagger] = [\hat{J}_k, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{J}_k, \hat{h}] = [\hat{J}_k, \hat{B}] = 0 \quad .$$

Intuitivamente, el momento angular total rota simultáneamente las coordenadas bosónicas y las fermiónicas de modo que conmuta con el operador número fermiónico, las supercargas, la matriz potencial  $\hat{B}$  y el Hamiltoniano supersimétrico. Por otro lado, Wipf y colaboradores imaginaron, inspirados por esta construcción, como generalizar el vector de Runge-Lenz, que llamaremos apropiadamente Runge-Lenz-Wipf:

$$\hat{W}_k = \varepsilon_{kjl}(\hat{p}_j \hat{J}_l - \hat{J}_j \hat{p}_l) - \frac{2x_k}{r} \cdot \hat{B} \quad .$$

Es también un operador vectorial cuyas componentes son matrices  $8 \times 8$ . Esta definición da lugar al propio vector de Runge-Lenz en el sector  $\hat{F} = 0$ . Por otro lado, una constante arbitraria es fijada de modo que se satisfagan las relaciones de conmutación siguientes:

$$[\hat{W}_k, \hat{W}_j] = -4i\hbar \left( \hat{H} - \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} \right) \varepsilon_{kjl} \hat{J}_l \quad , \quad [\hat{W}_k, \hat{Q}] = [\hat{W}_k, \hat{H}] = [\hat{W}_k, \hat{F}] = 0, \quad .$$

Es también un invariante del sistema y los operadores re-escalados sobre el sub-espacio de energía negativa  $E \in \left(0, \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2}\right)$

$$\hat{C}_k = \frac{\hat{W}_k}{\sqrt{4 \left( \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} - \hat{H} \right)}}$$

cierran junto el momento angular total el álgebra de Lie  $\mathfrak{SO}(4)$ . Más aún, es posible escribir el Hamiltoniano supersimétrico restringido a cada sector de número fermiónico definido en términos de la restricción a dicho sector del operador de Casimir cuadrático. Nos encontramos ante una simetría dinámica de tipo Clifford que permite identificar los autovalores de estados ligados del Hamiltoniano supersimétrico de Kepler-Coulomb en todos los sectores en los que existen, como se hizo en el mismo problema en el plano. La aplicación de las fórmulas (4.20)-(4.21)-(4.22)-(4.23) al caso  $d = 3$  con la elección  $l = 2j \in \mathbb{N}$  arroja ahora los resultados siguientes:

$$\dim D_{2j}^{(4)} = (2j+1)^2 \quad , \quad \hat{C}^2 = 4j(j+1)$$

$$\hat{H} \Big|_{\hat{Q}\mathcal{H}} = \hat{Q}\hat{Q}^\dagger = \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} \left[ 1 - \frac{(1-\hat{F})^2}{(1-\hat{F})^2 + \hat{C}^2} \right] ,$$

que en el sector  $\hat{F} = 0$  da el resultado conocido:  $E_j^{(0)} = \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} \left[ 1 - \frac{1}{(2j+1)^2} \right]$ . Del mismo modo si  $\hat{F} = 1$  uno calcula que los autovalores de

$$\hat{H} \Big|_{\hat{Q}^\dagger\mathcal{H}} = \hat{Q}^\dagger\hat{Q} = \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} \left[ 1 - \frac{(2-\hat{F})^2}{2-\hat{F})^2 + \hat{C}^2} \right]$$

son:  $E_j^{(1)} = \frac{\mu\alpha_Z^2}{2\hbar^2} \left[ 1 - \frac{1}{(2j+1)^2} \right]$  como era de esperar.

La potencia de este procedimiento algebraico se revela en dimensiones más altas donde el álgebra de supersimetría es insuficiente para identificar todo el espectro a partir de la resolución del problema espectral en los sectores escalares. En el caso  $d = 4$  por ejemplo Wipf y sus colaboradores demuestran la existencia de estados ligados de  $\hat{H}$  en el sector  $\mathcal{SH}_2$  inaccesibles desde los estados ligados en  $\mathcal{SH}_0$ <sup>10</sup>.

---

<sup>10</sup>Existen también estados ligados  $\hat{Q}$ -exactos en  $\mathcal{SH}_1$ , los pares supersimétricos de aquellos con  $\hat{F} = 2$ .



# Capítulo 5

## Dinámica del problema de Euler-Coulomb

### 5.1. El problema de Euler-Coulomb clásico en dos dimensiones

Consideremos la acción clásica para un sistema formado por una partícula ligera, de masa  $\mu$ , moviéndose en el plano alrededor de dos cuerpos pesados o centros Coulombianos fijos:

$$S = \int dt \left[ \frac{1}{2} \mu \left( \frac{dx_1}{dt} \frac{dx_1}{dt} + \frac{dx_2}{dt} \frac{dx_2}{dt} \right) + \frac{\alpha_1}{r_1} + \frac{\alpha_2}{r_2} \right],$$

es decir, tratamos el problema de Euler en el plano.

Los centros están localizados en los puntos  $x_1 = -d, x_2 = 0$  y  $x_1 = d, x_2 = 0$ , sus intensidades son  $\alpha_1, \alpha_2$ ,  $[\alpha_1] = [\alpha_2] = ML^3T^{-2}$ , que tomamos sin pérdida de generalidad:  $\alpha_1 \geq \alpha_2$ . Sean

$$r_1 = \sqrt{(x_1 - d)^2 + x_2^2} \quad , \quad r_2 = \sqrt{(x_1 + d)^2 + x_2^2}$$

las distancias de la partícula ligera a los dos centros fijos, ver Figura 5.1.

Las componentes del momento lineal y el Hamiltoniano del sistema son:

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} = \frac{dx_1}{dt} \quad , \quad p_2 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_2} = \frac{dx_2}{dt}$$

$$H = \frac{1}{2\mu} (p_1^2 + p_2^2) - \frac{\alpha_1}{r_1} - \frac{\alpha_2}{r_2} .$$

Se trata de un sistema completamente integrable en el sentido de Arnold-Liouville ya que



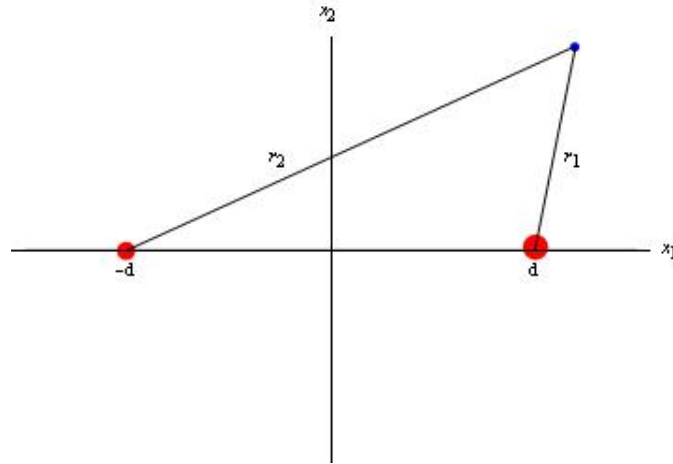


Figura 5.1: Partícula moviéndose en presencia de dos centros de fuerza fijos en el plano

existe un segundo invariante en involución con el Hamiltoniano  $\{H, I_2\} = 0$ , ver [36], dado por:

$$I_2 = \frac{1}{2} (l^2 - d^2 p_2^2) + \frac{\mu\alpha_1 d(d - x_1)}{r_1} + \frac{\mu\alpha_2 d(d + x_1)}{r_2},$$

donde  $l = x_1 p_2 - x_2 p_1$  es el momento angular orbital en el plano. Este invariante es cuadrático en los momentos al igual que el vector de Runge-Lenz en el problema de Kepler-Coulomb. Entendiendo  $d$  como un parámetro de deformación,  $I_2$  en el límite  $d \rightarrow 0$  reduce al momento angular orbital al cuadrado, pero en otro límite más sutil, uno de los centros se va a infinito y el otro se sitúa en el origen, una posibilidad muy precisa cuando  $d \rightarrow \infty$ ,  $I_2$  deviene una de las dos componentes del vector de Runge-Lenz. En ambos límites encontramos el problema de Kepler-Coulomb en el plano y esta doble deformación límite a un sistema sobreintegrable confiere al problema de Euler propiedades muy interesantes que pasamos a analizar en el marco cuántico.

## 5.2. El problema de Euler-Coulomb cuántico en el plano

El sistema considerado en la sección anterior es de carácter cuántico si, por ejemplo, los dos centros fijos son núcleos atómicos y la partícula liviana, un electrón, como ocurre en moléculas diatómicas sencillas. Fué W. Pauli quien en 1922 en su Tesis Doctoral estudió el Hamiltoniano tridimensional correspondiente al campo electrostático creado por dos cuerpos cargados fijos con la idea de describir en el marco de la vieja mecánica cuántica el ión de la molécula de hidrógeno  $H_2^+$  [5].

En el plano, el Hamiltoniano cuántico de Euler-Coulomb es el operador de Schrödinger:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{\alpha_1}{r_1} - \frac{\alpha_2}{r_2} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right] - \frac{\alpha_1}{r_1} - \frac{\alpha_2}{r_2}.$$

Aquí  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  son las intensidades de cada centro determinadas por los números atómicos  $Z_1$  y  $Z_2$ :

$$\alpha_1 = Z_1\alpha \quad , \quad \alpha_2 = Z_2\alpha \quad ,$$

donde  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi}$  es  $\hbar c$  veces la constante de estructura fina<sup>1</sup>, y elegimos, sin pérdida de generalidad, la jerarquía de cargas tal que

$$Z_1 \geq Z_2 \quad , \quad Z_1, Z_2 \in \mathbb{N}^* \quad ,$$

aunque eventualmente admitiremos que la carga de uno de los dos centros sea negativa. En particular, esta formulación se adecúa a la descripción de iones moleculares diatómicos con sólo un electrón tanto hetero,  $Z_2 \neq Z_1$ , como homonucleares,  $Z_2 = Z_1$ .

En el sistema de dos centros fijos existe un parámetro con dimensiones de longitud: la distancia entre los dos centros  $R = 2d$  o distancia internuclear en Física Molecular. Por ejemplo, en el caso del ión molecular del hidrógeno:  $R_{eq}(H_2^+) = 1.06 \text{ \AA}$ . Aparte de poder ser entendido como un parámetro de deformación, en combinación con la masa de la partícula ligera  $\mu$  y la intensidad de los centros  $\alpha$  determina la acción característica del sistema:  $\sqrt{\mu\alpha d}$ . Ello permite definir una versión de la constante de Planck sin dimensiones:  $\bar{h} = \frac{\hbar}{\sqrt{\mu\alpha d}}$ . Este parámetro distingue pues los regímenes supercuántico,  $\bar{h} \gg 1$ , cuántico,  $\bar{h} \simeq 1$ , y clásico,  $\bar{h} \ll 1$ , pero además, es el cociente entre la distancia intercentros de fuerza y el radio de Bohr:  $\bar{h}^2 = \frac{\hbar^2}{\mu\alpha d} = \frac{a_0}{d}$ . En el caso del ión molecular de hidrógeno es:  $\bar{h}^2 \simeq 1 \Leftrightarrow R = 2a_0$ , puesto que  $a_0 = 0.5294 \text{ \AA}$  y por tanto  $\sqrt{\mu\alpha d}$  es del orden de la constante de Planck en este caso como corresponde a la naturaleza cuántica de los fenómenos moleculares.

La cuantificación canónica del sistema clásico convierte el segundo invariante en un operador que conmuta con el Hamiltoniano:  $[\hat{H}, \hat{I}_2] = 0$ . En representación de coordenadas, el invariante clásico elegido por Perelomov [36] pasa a ser el operador diferencial:

$$\begin{aligned} \hat{I}_2 &= \frac{1}{2} \left( \hat{L}^2 - d^2 \hat{p}_2^2 \right) + \frac{\mu\alpha_1 d(d-x_1)}{r_1} + \frac{\mu\alpha_2 d(d+x_1)}{r_2} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \left[ (x_1^2 - d^2) \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + x_2^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - 2x_1 x_2 \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right] + \\ &+ \frac{\mu\alpha_1 d(d-x_1)}{r_1} + \frac{\mu\alpha_2 d(d+x_1)}{r_2} \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Tomamos unidades racionalizadas de Lorentz-Heaviside con  $\epsilon_0 = 1$

actuando en  $L^2(\mathbb{R}^2)$  y donde se ha tenido en cuenta la ordenación cuántica de los operadores de posición y momento. Como el vector de Runge-Lenz, este operador es cuadrático en los momentos, pero en el sistema de dos centros no hay más operadores que conmuten con el Hamiltoniano que sean funcionalmente independientes de  $\hat{H}$  e  $\hat{I}_2$ . El problema pues presenta un sistema completo de observables compatibles y constituye por tanto un sistema integrable: se podría esperar obtener un sistema completo de estados en el espacio de Hilbert  $L^2(\mathbb{R}^2)$  formado por los autoestados comunes de  $\hat{H}$  e  $\hat{I}_2$ . El problema de dos centros, sin embargo, no es “soluble” o al menos completamente soluble. La razón es que aunque  $\hat{I}_2$  conmuta con el Hamiltoniano no genera una simetría lineal asociada a un álgebra de Lie como el momento angular en problemas de fuerzas centrales.

### 5.2.1. Separabilidad de la ecuación de Schrödinger en coordenadas elípticas

El hecho de que el problema de dos cuerpos en el plano sea un sistema de Stäckel con un segundo invariante cuadrático en los momentos garantiza que la ecuación de Hamilton-Jacobi en la versión clásica y la de Schrödinger en el marco cuántico sean separables. Esta propiedad que permitirá convertir el problema espectral en la resolución de un sistema de dos ecuaciones diferenciales ordinarias dependientes de dos parámetros espectrales abre expectativas razonables de encontrar al menos parte del espectro. La ecuación de Schrödinger que describe la dinámica cuántica del problema de Euler-Coulomb en el plano es en particular separable en coordenadas elípticas. Este hecho proviene de la topología del espacio de configuración de la partícula que puede ocupar todos los puntos del plano menos los dos centros:  $\mathbf{C} = \mathbb{R}^2/\{(-d, 0), (d, 0)\}$ .  $\mathbf{C} = \mathbf{C}_+ \sqcup \mathbf{C}_-$  como variedad diferenciable consta de dos cartas: la primera es el conjunto abierto  $\mathbf{C}_+ = \mathbb{R}^+ \times \mathbb{N}$  en  $\mathbb{R}^2/\{(-d, 0)\} = \mathbb{R}^+ \times \mathbb{S}^1$  y la segunda  $\mathbf{C}_- = \mathbb{R}^+ \times \mathbb{S}$  en  $\mathbb{R}^2/\{(d, 0)\} = \mathbb{R}^+ \times \mathbb{S}^1$ .  $\mathbb{N}$  es el semicírculo norte abierto y  $\mathbb{S}$  el semicírculo sur abierto en  $\mathbb{S}^1$ . Ambas cartas deben pegarse adecuadamente en la zona de intersección  $\mathbf{C}_+ \cap \mathbf{C}_- = \mathbb{R} \times (-\varepsilon, \varepsilon)$ : una banda abierta en  $\mathbb{R}^2$  que incluye el eje de abscisas  $x_2 = 0$ . Perfectamente adaptadas a esta situación se definen las coordenadas elípticas como la semisuma y la semidiferencia de las distancias de la partícula a los dos centros:

$$u = \frac{1}{2}(r_1 + r_2) \in (d, +\infty) \quad , \quad v = \frac{1}{2}(r_2 - r_1) \in (-d, d)$$

que parametrizan la banda infinita  $\mathbb{E}^2 = (-d, d) \times \mathbb{R}^+$ . Las coordenadas Cartesianas se recobran mediante el cambio inverso

$$x_1 = \frac{1}{d}uv \in (-\infty, +\infty) \quad , \quad x_2 = \pm \frac{1}{d}\sqrt{(u^2 - d^2)(d^2 - v^2)} \in (-\infty, +\infty) \quad ,$$

que es una aplicación uno a dos de  $\mathbb{E}^2$  en  $\mathbb{R}^2$ , cada punto desdoblado en los semiplanos superior e inferior y por tanto en cada una de las dos cartas de  $\mathbf{C}$ . Es claro que en el borde de  $\mathbb{E}^2$ ,  $\partial\mathbb{E}^2 = \{(u = d, v), (u, v = \pm d)\}$ , que va al eje  $x_2 = 0$  ver Figura 5.2, la aplicación es sólo uno a uno en la zona de intersección de las dos cartas. Nótese también que en las posiciones de los centros  $(d, \pm d) \in \mathbb{E}^2$  el cambio inverso presenta puntos de ramificación de orden dos tanto en la dirección de  $u$  como la de  $v$ , por lo que han de ser excluidos.

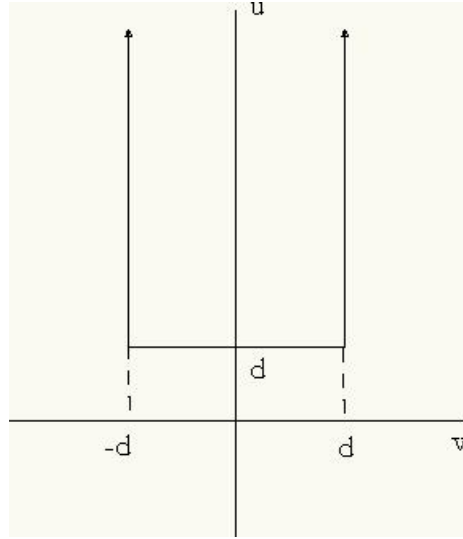


Figura 5.2: Versión de Euler de las coordenadas elípticas en la banda infinita  $\mathbb{E}^2$ .

Expresados en este sistema de coordenadas el Hamiltoniano y el segundo invariante se escriben:

$$\hat{H} = \frac{1}{u^2 - v^2} (\hat{h}_u + \hat{h}_v), \quad \hat{I}_2 = \frac{\mu}{u^2 - v^2} \left( (u^2 - d^2)\hat{h}_v - (d^2 - v^2)\hat{h}_u \right)$$

$$\hat{h}_u = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( (u^2 - d^2) \frac{\partial^2}{\partial u^2} + u \frac{\partial}{\partial u} \right) - (\alpha_1 + \alpha_2)u, \quad \hat{h}_v = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( (d^2 - v^2) \frac{\partial^2}{\partial v^2} - v \frac{\partial}{\partial v} \right) - (\alpha_1 - \alpha_2)v.$$

El ansatz de separabilidad  $\psi_E(u, v) = F_E(u)G_E(v)$  convierte el problema espectral

$$\hat{H}\psi_E(u, v) = E\psi_E(\xi, \eta) \quad (5.1)$$

en el sistema de dos ecuaciones diferenciales ordinarias

$$-\hbar^2 \left[ (u^2 - d^2) \frac{d^2 F(u)}{du^2} + u \frac{dF(u)}{du} \right] - [2\mu\alpha(Z_1 + Z_2)u + 2\mu Eu^2 + I] F(u) = 0 \quad (5.2)$$

$$\hbar^2 \left[ (d^2 - v^2) \frac{d^2 G(v)}{dv^2} - v \frac{dG(v)}{dv} \right] + [2\mu\alpha(Z_1 - Z_2)v - 2\mu Ev^2 - I] G(v) = 0 \quad (5.3)$$

que comparten el parámetro espectral  $E$  y la constante de separación  $I$ , esta última se reconoce fácilmente como el autovalor del operador de simetría:  $\hat{I} = -2\mu d^2 \hat{H} - 2\hat{I}_2$ .

### 5.2.2. Las ecuaciones de Razavy y Whittaker-Hill algebraicas como problema de Sturm-Liouville

Es interesante describir las ecuaciones de Razavy (5.2) y Whittaker-Hill (5.3) en su forma algebraica como un problema de Sturm-Liouville. En forma convencional la ecuación de Sturm-Liouville reza:

$$-\frac{1}{w(x)} \frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{dy}{dx} \right) + q(x) y(x) = \lambda y(x) \quad (5.4)$$

donde  $w(x)$  se denomina función peso. Un sistema de Sturm-Liouville en el intervalo  $x \in [a, b]$  consiste en una ecuación de Sturm-Liouville (5.4) tal que  $p(x), p'(x), q(x)$  y  $w(x)$  son funciones continuas en  $[a, b]$ ,  $p(x) > 0$  y  $w(x) > 0$ ,  $\forall x \in [a, b]$ , son además positivas, junto con las condiciones iniciales:

$$\alpha_1 y(a) + \alpha_2 y'(a) = 0 \quad , \quad \beta_1 y(b) + \beta_2 y'(b) = 0 \quad , \quad \alpha_1^2 + \alpha_2^2 > 0 \quad , \quad \beta_1^2 + \beta_2^2 > 0 \quad .$$

Un listado de propiedades útiles de un sistema de Sturm-Liouville regular es como sigue:

- Los autovalores  $\lambda$  de un sistema SL son reales.
- Si  $\lambda_n$  y  $\lambda_m$  son dos autovalores diferentes de un sistema SL, las autofunciones correspondientes  $y_n(x)$  e  $y_m(x)$  son ortogonales en  $L^2([a, b])$  donde la medida de integración está definida por el peso, i.e.:

$$\int_a^b \overline{y_n(x)} y_m(x) w(x) dx = 0$$

- Los autovalores de un sistema de Sturm-Liouville regular son no degenerados.

Que la ecuación de Razavy (5.2) da lugar a un sistema de Sturm-Liouville regular es manifiesto si se escribe en la forma (5.4):

$$-\frac{1}{w(u)} \frac{d}{du} \left( \sqrt{u^2 - d^2} \frac{dF}{du} \right) - (2\mu\alpha(Z_1 + Z_2)u + 2\mu E u^2) F(u) = I F(u) \quad , \quad (5.5)$$

donde el peso es  $w(u) = \frac{1}{h^2 \sqrt{u^2 - d^2}}$ . Las condiciones de regularidad  $p(u) > 0$  y  $w(u) > 0$  se satisfacen en la unión de semirrectas recorridas en sentidos opuestos  $(-\infty, -d] \sqcup [-d, -\infty)$  y  $(\infty, d] \sqcup [d, \infty)$ . Elegiremos la segunda opción pues precisamente es la unión de semirrectas donde la variable elíptica  $u$  está definida.

La ecuación de Whittaker-Hill (5.3) por su parte puede también escribirse en la forma SL (5.4):

$$-\frac{1}{w(v)} \frac{d}{dv} \left( \sqrt{d^2 - v^2} \frac{dG}{dv} \right) - (2\mu\alpha(Z_1 - Z_2)v + 2\mu E v^2) G(v) = -I G(v) \quad , \quad (5.6)$$

donde  $w(v) = \frac{1}{\hbar^2 \sqrt{d^2 - v^2}}$ , aunque ahora  $p(v) > 0$  y  $w(v) > 0$  sólo en  $[-d, d]$ , el intervalo apropiado para la variable elíptica  $v$ . Cabe advertir que el problema es regular en la unión de intervalos  $[-d, d] \sqcup [d, -d]$ , también recorridos en sentidos diferentes.

### 5.3. Funciones de onda estacionarias: soluciones combinadas de las ecuaciones de Razavy y Whittaker-Hill

Abordaremos sin embargo la resolución de estas ecuaciones en su forma trigonométrica. El cambio de variables

$$x = \frac{1}{2} \operatorname{arccosh} \frac{u}{d} \in (0, +\infty) \quad , \quad y = \frac{1}{2} \operatorname{arccos} \frac{v}{d} \in (0, \pi), \quad (5.7)$$

lleva la ecuación de Razavy algebraica (5.2) a la de Whittaker-Hill hiperbólica (5.8) y la Whittaker-Hill algebraica (5.3) a la ecuación trigonométrica de Razavy (5.9):

$$-\frac{d^2 F(x)}{dx^2} + (\zeta \cosh 2x - M)^2 F(x) = \lambda F(x) \quad , \quad (5.8)$$

$$\frac{d^2 G(y)}{dy^2} + (\beta \cos 2y - N)^2 G(y) = \nu G(y) \quad , \quad (5.9)$$

veáanse las Referencias [?] y [?]. Hay que advertir que estos cambios de coordenadas son dos a uno: la recta real se aplica en la unión de semirrectas  $(\infty, d) \sqcup (d, \infty)$  y la semicircunferencia en la unión de intervalos  $(d, -d) \sqcup (-d, d)$ , en los dos casos recorridas cada una de las partes en sentidos opuestos.

Los parámetros  $\zeta$ ,  $M$ ,  $\lambda$ ,  $\beta$ ,  $N$  y  $\nu$  están definidos en términos de la energía  $E$  y del valor propio  $I$  del operador de simetría en la forma siguiente

$$\zeta = \frac{2}{\hbar} \sqrt{-2\mu d^2 E} \quad , \quad M^2 = -\frac{2\mu\alpha^2 (Z_1 + Z_2)^2}{\hbar^2 E} \quad , \quad \lambda = M^2 + \frac{4I}{\hbar^2} \quad ,$$

$$\beta = -\frac{2}{\hbar} \sqrt{-2\mu d^2 E} \quad , \quad N^2 = -\frac{2\mu\alpha^2 (Z_2 - Z_1)^2}{\hbar^2 E} \quad , \quad \nu = N^2 + \frac{4I}{\hbar^2} \quad .$$

Ahora bien, para  $\zeta$ ,  $M$  y  $\lambda$  fijos tenemos una ecuación de Razavy determinada y  $\beta$ ,  $N$  y  $\nu$  fijos determinan del mismo modo una ecuación de Whittaker-Hill concreta. La observación clave es que, en consecuencia, debemos resolver un número infinito de ecuaciones de tipo Razavy y Razavy trigonométrica en orden a identificar los parámetros espectrales del Hamiltoniano de dos centros Coulombianos: la energía  $E$  y el segundo invariante  $I$ . Los autovalores son reales, el Hamiltoniano y el segundo operador invariante son hermíticos, en particular la energía será negativa para estados propios ligados y positiva para estados de scattering.

En la Referencia [63] se demuestra que las ecuaciones de Razavy y de Whittaker-Hill para  $M$  y  $N$  enteros positivos son “cuasi-exactamente” solubles, lo cual significa que es posible encontrar parte de las soluciones de forma analítica pero no todas. Más aún, estas soluciones, que además son normalizables, se pueden encontrar por métodos algebraicos. La estrategia a seguir es pues fijar los valores de  $M$  y  $\zeta$  en función de un número entero no negativo que admiten la resolución de la ecuación de Razavy (5.8) dando lugar a estados de este tipo pertenecientes a módulos irreducibles caracterizados por dicho entero. Estas soluciones determinan a su vez valores discretos de  $E$  negativos. La truncación de una solución en forma de serie de la ecuación de Razavy caracteriza mediante las raíces de un polinomio de orden  $n + 1$  los posibles valores de  $I$  que distinguen cada solución finita en cada módulo irreducible. Fijado el valor de  $E$  se resuelve a continuación la ecuación de Whittaker-Hill (5.9) para los mismos valores de  $E$  y los correspondientes de  $I$ . En general no será cuasi-exactamente soluble para esos valores de modo que daremos la solución a través de una expansión en serie determinada por una relación de recurrencia a tres términos. Dado que la variable  $v$  es una variable compacta no se presentarán problemas de normalizabilidad debidos a estos factores de la solución.

### 5.3.1. Soluciones “finitas” de la ecuación “radial”.

Por analogía con el problema de un solo centro nos referiremos a la ecuación de Razavy (5.8) como ecuación radial toda vez que  $x \in [0, +\infty)$ . Esta ecuación según va dicho es cuasi-exactamente soluble y admite  $n + 1$  soluciones “finitas”, productos de polinomios y exponenciales decrecientes, con tal de que  $\underline{M = n + 1}$  y  $n \in \mathbb{N}$  [63]. Esta elección de  $M$

$$M = n + 1 \quad \Rightarrow \quad E_n = -\frac{2\mu\alpha^2(Z_1 + Z_2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{(n + 1)^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

para la cual la ecuación de Razavy es cuasi-exactamente soluble fija el valor de la energía precisamente al de un nivel de un átomo hidrogenoideo en el plano con carga  $Z_1 + Z_2$ . Si es posible encontrar autofunciones normalizables correspondientes a este autovalor ello significaría que el Hamiltoniano de Coulomb y el de Euler-Coulomb son cuasi-espectrales, es decir, todos los autovalores del espectro discreto del átomo de hidrógeno son también autovalores del Hamiltoniano de dos centros Coulombianos con el debido ajuste de las cargas.

La búsqueda de las autofunciones sigue un procedimiento standard. Fijado  $M = n + 1$ , buscamos una solución de la ecuación de Razavy en la forma [63, 64] de una serie de potencias

$$F_n(z) = z^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{\zeta_n}{4}(z+\frac{1}{z})} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j P_j(\lambda)}{(2\zeta_n)^j j!} z^j \quad , \quad z = e^{2x} \quad , \quad \zeta_n = \frac{4\mu\alpha d(Z_1 + Z_2)}{\hbar^2(n + 1)} \quad , \quad (5.10)$$

en términos de polinomios en el parámetro  $\lambda$  que fija el valor de la constante de separación  $I = \frac{\hbar^2}{4}(\lambda - (n + 1)^2)$  correspondiente a la solución. La función  $F_n(z)$  (5.10) es solución de la

ecuación de Razavy (5.8) si y sólo si se satisface la relación de recurrencia a tres términos entre los polinomios  $P_j(\lambda)$  siguiente:

$$P_{j+1}(\lambda) = [\lambda - (4j(n-j) + 2n + 1 + \zeta_n^2)] P_j(\lambda) - (4j(n+1-j)\zeta_n^2) P_{j-1}(\lambda), \quad j \geq 0, \quad (5.11)$$

El módulo invariante de soluciones normalizables <sup>2</sup> se identifica entonces decretando la truncación de la serie en el orden  $n+1$  con el fin de casar no sólo el autovalor si no también la degeneración de un nivel de energía entre uno y dos centros de fuerzas. En efecto, si  $\lambda_{nm}$  es una de las  $n+1$  raíces del polinomio  $P_{n+1}(\lambda)$ , donde  $m = 1, 2, \dots, n+1$ , denota la raíz  $m$ -sima, entonces todos los polinomios de grado mayor que  $n+1$  se anulan automáticamente y la serie trunca (aplíquese la relación (5.11)):

$$P_{n+1}(\lambda_{nm}) = 0 \Rightarrow 0 = P_{n+2}(\lambda_{nm}) = P_{n+3}(\lambda_{nm}) = P_{n+4}(\lambda_{nm}) = \dots$$

Una vez que fijamos la ecuación de Razavy caracterizada por el entero no negativo  $n$ , el número cuántico  $m$  distingue entre soluciones ortogonales. Dado que  $n$  determina la energía y  $m$  los valores propios del operador de simetría  $\hat{I}$  en función de las  $n+1$  raíces  $\lambda_{nm}$  de  $P_{n+1}(\lambda)$ :

$$I_{nm} = \frac{\hbar^2}{4} [\lambda_{nm} - (n+1)^2], \quad m = 1, 2, \dots, n+1,$$

la expectativa es obtener a partir de estas soluciones un sistema de estados propios comunes a  $\hat{H}$  e  $\hat{I}$  que forman una base ortonormal en cada módulo invariante. De momento no se ha explicitado la parte angular de la función de onda pero la situación es clara: ha de resolverse la ecuación de Whittaker-Hill (5.9) para las constantes de integración  $E_n$  e  $I_{nm}$ . En general la solución expresada como una serie no truncará para estos valores, pero la solución  $G_{nm}(v)$  existe y siendo  $v$  una variable angular no presenta problemas de convergencia asintótica.

Mejor que estudiar las propiedades generales de los polinomios  $P_j(\lambda_{nm})$ , y por tanto de las soluciones finitas de la ecuación de Razavy, es ilustrativo describir la parte radial de las autofunciones del Hamiltoniano de dos centros fijos para los tres primeros niveles de energía que se basan en las soluciones mencionadas.

- La energía menor en la que se encuentra una ecuación de Razavy cuasi-exactamente soluble corresponde a  $n=0$ , es decir al estado fundamental del átomo de hidrógeno. Dada la anulación de  $P_{-1}(\lambda) = 0$  implícita en el ansatz (5.10), la relación de recurrencia (5.11) entre los dos polinomios de orden más bajo reduce a

$$P_1(\lambda) = [\lambda - 1 - \zeta_0^2] P_0(\lambda)$$

---

<sup>2</sup>La terminología se debe a la relación con los sub-espacios de representaciones irreducibles del álgebra de Lie  $\text{SL}(2, \mathbb{R})$  en función de cuyos generadores en la representación irreducible de dimensión  $n+1$  se puede escribir la ecuación de Razavy, véase [63].



donde tenemos:  $\zeta_0 = \frac{4(\mu\alpha d)}{\hbar^2}(Z_1 + Z_2)$ . Fijando  $P_0(\lambda) = 1$  el polinomio de primer grado  $P_1(\lambda)$  es  $P_1(\lambda) = \lambda - (1 + \zeta_0^2)$  cuya anulaci3n fija la ra3z  $\lambda_{01} = 1 + \zeta_0^2$  que caracteriza la 3nica soluci3n finita. Los autovalores del Hamiltoniano y el segundo invariante del problema de dos centros proporcionados por esta soluci3n de la ecuaci3n de Razavy con  $M = 1$  y  $\zeta_0$  son respectivamente:

$$E_0 = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}(Z_1 + Z_2)^2 \quad , \quad I_{01} = \frac{4(\mu\alpha d)}{\hbar^2}(Z_1 + Z_2)^2 \quad .$$

La parte radial de la funci3n de onda propia del Hamiltoniano se obtiene tambi3n en t3rminos de esta soluci3n de la ecuaci3n de Razavy:

$$F_{01}(x) = e^{-\frac{2\mu\alpha d(Z_1+Z_2)}{\hbar^2} \cosh 2x} \Leftrightarrow F_{01}(u) = e^{-\frac{2\mu\alpha(Z_1+Z_2)}{\hbar^2} u}$$

- El valor siguiente para el cual la ecuaci3n de Razavy es cuasi-exactamente soluble es  $n = 1$ . Todos los valores de  $n$  impares, sin embargo, son especiales. Aunque las ecuaciones de Razavy son cuasi-exactamente solubles y dan lugar a soluciones finitas del Hamiltoniano de dos cuerpos, no corresponden a niveles de energ3a del 3tomo de hidr3geno en el plano; recu3rdese, ver Cap3tulo 4, que  $j$ 's semi-enteros ( $n = 2j$ ) dan lugar a funciones de onda bivaluadas que no son f3sicamente admisibles. En relaci3n con este punto es bastante seguro aventurar una explicaci3n basada en la cuantificaci3n a la Bohr-Sommerfeld. En el problema de dos centros en el plano hay dos tipos de 3rbitas cerradas: ambos tipos encierran los dos centros y se diferencian en presentar cero 3 una auto-intersecci3n. El primer tipo de 3rbita, al que la regla de Bohr-Sommerfeld asigna  $n$  pares, da lugar a todos los estados ligados del 3tomo de hidr3geno plano cuando los dos centros colapsan a uno. La regla de Bohr-Sommerfeld, sin embargo, cuantifica las 3rbitas del segundo tipo mediante enteros positivos  $n$  impares. Estas 3rbitas son singulares en el l3mite de un solo centro, hecho que explica la bivaluedad de las funciones de onda. El origen topol3gico de este fen3meno es claro: no ocurre en tres dimensiones.

La determinaci3n de las soluciones finitas del problema de dos centros parte en este caso de

$$\zeta_1 = \frac{2(\mu\alpha d)}{\hbar^2}(Z_1 + Z_2) \quad , \quad P_{-1}(\lambda) = 0 \quad , \quad P_0(\lambda) = 1 .$$

La relaci3n de recurrencia hasta este orden da lugar a dos identidades entre los polinomios de 3rdenes m3s bajos que permiten su identificaci3n:

$$\begin{aligned} P_1(\lambda) &= \lambda - (3 + \zeta_1^2) \\ P_2(\lambda) &= [\lambda - (3 + \zeta_1^2)]P_1(\lambda) - 4\zeta_1^2 \\ &= \lambda^2 - 2(3 + \zeta_1^2)\lambda + 9 + 2\zeta_1^2 + \zeta_1^4 . \end{aligned}$$

La anulaci3n de  $P_2(\lambda)$  ocurre 3nicamente para las dos ra3ces

$$P_2(\lambda) = 0 \Leftrightarrow \lambda_{11} = 3 - 2\zeta_1 + \zeta_1^2 \quad , \quad \lambda_{12} = 3 + 2\zeta_1 + \zeta_1^2$$

La energ3a de este nivel se sigue de  $M = 2$ :

$$E_1 = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2} \cdot (Z_1 + Z_2)^2$$

mientras que los autovalores del segundo operador invariante se obtienen de las ra3ces  $\lambda_{1m}$ :

$$I_{11} = -\frac{\hbar^2}{4} + \frac{(\mu\alpha d)^2}{\hbar^2} (Z_1 + Z_2)^2 - \mu\alpha d (Z_1 + Z_2), \quad I_{12} = -\frac{\hbar^2}{4} + \frac{(\mu\alpha d)^2}{\hbar^2} (Z_1 + Z_2)^2 + \mu\alpha d (Z_1 + Z_2).$$

La parte radial de las funciones de onda asociadas a cada autovalor  $I_{1m}$  se escribe inmediatamente dado el conocimiento de  $P_1(\lambda_{1m})$ :

$$F_{11}(x) = e^{-\frac{\mu\alpha d}{\hbar^2} (Z_1 + Z_2) \cosh 2x} \sqrt{2(\cosh 2x + 1)} \Leftrightarrow F_{11}(u) = \frac{1}{d} e^{-\frac{\mu\alpha}{\hbar^2} (Z_1 + Z_2)u} \sqrt{2(u + d)}$$

$$F_{12}(x) = -e^{-\frac{\mu\alpha d}{\hbar^2} (Z_1 + Z_2) \cosh 2x} \sqrt{2(\cosh 2x - 1)} \Leftrightarrow F_{12}(u) = -\frac{1}{d} e^{-\frac{\mu\alpha}{\hbar^2} (Z_1 + Z_2)u} \sqrt{2(u - d)}.$$

La degeneraci3n en energ3a entre estas funciones se resuelve as3 mediante el autovalor del segundo operador que conmuta con el Hamiltoniano. Dado que la ecuaci3n de Razavy es equivalente a un problema de Sturm-Liouville con un peso apropiado se puede garantizar que  $F_{11}(u)$  y  $F_{12}(u)$  son ortogonales respecto de una medida de integraci3n relacionada con dicho peso. La primera de las autofunciones por otro lado no tiene nodos, mientras que la segunda tiene uno. Todo ello demuestra que  $F_{11}(u)$  y  $F_{12}(u)$  forman una base ortogonal en el m3dulo de funciones de dimensi3n dos que forman el primer nivel excitado del Hamiltoniano de dos centros Coulombianos fijos.

- El siguiente valor  $n = 2$  que da lugar a una ecuaci3n de Razavy cuasi-exactamente soluble corresponde al primer nivel de energ3a excitado del 3tomo de hidr3geno plano que se deduce de  $M = 3$ :

$$E_2 = -\frac{2\mu\alpha^2}{9\hbar^2} (Z_1 + Z_2)^2 .$$

En orden a calcular las autofunciones partimos como en los casos anteriores de

$$\zeta_2 = \frac{4\mu\alpha d}{3\hbar^2} (Z_1 + Z_2) \quad , \quad P_{-1}(\lambda) = 0 \quad , \quad P_0(\lambda) = 1$$

La relaci3n de recurrencia (5.11), junto con estos datos iniciales, permite identificar los polinomios hasta el orden 3 a partir de las identidades

$$P_1(\lambda) = \lambda - (5 + \zeta_2^2)$$

$$\begin{aligned}
P_2(\lambda) &= [\lambda - (9 + \zeta_2^2)] P_1(\lambda) - 8\zeta_2^2 \\
P_3(\lambda) &= [\lambda - (5 + \zeta_2^2)] P_2(\lambda) - 8\zeta_2^2 P_1(\lambda) \\
&= \lambda^2 - 2(7 + \zeta_2^2)\lambda + 45 - 2\zeta_2^2 + \zeta_2^4
\end{aligned}$$

Las tres raíces de la cúbica  $P_3(\lambda) = 0$  son

$$\lambda_{21} = \zeta_2^2 + 5 \quad , \quad \lambda_{22} = \zeta_2^2 + 7 - 2\sqrt{1 + 4\zeta_2^2} \quad , \quad \lambda_{23} = \zeta_2^2 + 7 + 2\sqrt{1 + 4\zeta_2^2} .$$

que proporcionan los autovalores del segundo invariante siguientes:

$$\begin{aligned}
I_{21} &= -\hbar^2 + \frac{4(\mu\alpha d)^2}{9\hbar^2} (Z_1 + Z_2)^2 \\
I_{22} &= -\frac{\hbar^2}{2} + \frac{4(\mu\alpha d)^2}{9\hbar^2} (Z_1 + Z_2)^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sqrt{1 + \frac{64(\mu\alpha d)^2}{9\hbar^4} (Z_1 + Z_2)^2} \\
I_{23} &= -\frac{\hbar^2}{2} + \frac{4(\mu\alpha d)^2}{9\hbar^2} (Z_1 + Z_2)^2 + \frac{\hbar^2}{2} \sqrt{1 + \frac{64(\mu\alpha d)^2}{9\hbar^4} (Z_1 + Z_2)^2} .
\end{aligned}$$

La parte radial de las funciones de ondas correspondientes a estos autovalores del segundo operador invariante se encuentra fácilmente:

$$\begin{aligned}
F_{21}(x) &= -2 e^{-\frac{2\mu\alpha d}{3\hbar^2} (Z_1 + Z_2) \cosh 2x} \sqrt{\cosh^2 2x - 1} \\
F_{22}(x) &= \frac{3\hbar^2}{4\mu\alpha d} \frac{1}{(Z_1 + Z_2)} e^{-\frac{2\mu\alpha d}{3\hbar^2} (Z_1 + Z_2) \cosh 2x} \left[ \frac{8\mu\alpha d (Z_1 + Z_2)}{3\hbar^2} \cosh 2x - 1 + \sqrt{1 + \frac{64(\mu\alpha d)^2 (Z_1 + Z_2)^2}{9\hbar^4}} \right] \\
F_{23}(x) &= \frac{3\hbar^2}{4\mu\alpha d} \frac{1}{(Z_1 + Z_2)} e^{-\frac{2\mu\alpha d}{3\hbar^2} (Z_1 + Z_2) \cosh 2x} \left[ \frac{8\mu\alpha d (Z_1 + Z_2)}{3\hbar^2} \cosh 2x - 1 - \sqrt{1 + \frac{64(\mu\alpha d)^2 (Z_1 + Z_2)^2}{9\hbar^4}} \right]
\end{aligned}$$

En la Tabla 5.1 se muestran estos resultados en función de los parámetros característicos del sistema.

Tabla 5.1: Soluciones finitas de la ecuación de Razavy (5.8) para  $n = 0, 1, 2$ 

Energía	Función propia y constante de separación
$E_0 = -4(Z_1 + Z_2)^2 \text{ Ry}$	$F_{01}(x) = e^{-2\frac{d}{a_0}(Z_1+Z_2) \cosh 2x}$ $I_{01} = 4\hbar^2 \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2$
$E_1 = -(Z_1 + Z_2)^2 \text{ Ry}$	$F_{11}(x) = e^{-\frac{d}{a_0}(Z_1+Z_2) \cosh 2x} \sqrt{2(\cosh 2x + 1)}$ $F_{12}(x) = -e^{-\frac{d}{a_0}(Z_1+Z_2) \cosh 2x} \sqrt{2(\cosh 2x - 1)}$ $I_{11} = -\frac{\hbar^2}{4} + \hbar^2 \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2 - \hbar^2 \frac{d}{a_0} (Z_1 + Z_2)$ $I_{12} = -\frac{\hbar^2}{4} + \hbar^2 \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2 + \hbar^2 \frac{d}{a_0} (Z_1 + Z_2)$
$E_2 = -\frac{4}{9}(Z_1 + Z_2)^2 \text{ Ry}$	$F_{21}(x) = -2e^{-\frac{2d}{3a_0}(Z_1+Z_2) \cosh 2x} \sqrt{\cosh^2 2x - 1}$ $F_{22}(x) = \frac{3a_0}{4d(Z_1+Z_2)} e^{-\frac{2d}{3a_0}(Z_1+Z_2) \cosh 2x}$ $\left[ \frac{8d(Z_1+Z_2)}{3a_0} \cosh 2x - 1 + \sqrt{1 + \frac{64}{9} \frac{d^2(Z_1+Z_2)^2}{a_0^2}} \right]$ $F_{23}(x) = \frac{3a_0}{4d(Z_1+Z_2)} e^{-\frac{2d}{3a_0}(Z_1+Z_2) \cosh 2x}$ $\left[ \frac{8d(Z_1+Z_2)}{3a_0} \cosh 2x - 1 - \sqrt{1 + \frac{64}{9} \frac{d^2(Z_1+Z_2)^2}{a_0^2}} \right]$ $I_{21} = -\hbar^2 + \hbar^2 \frac{4}{9} \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2$ $I_{22} = -\frac{\hbar^2}{2} + \hbar^2 \frac{4}{9} \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sqrt{1 + \frac{64}{9} \frac{d^2(Z_1+Z_2)^2}{a_0^2}}$ $I_{23} = -\frac{\hbar^2}{2} + \hbar^2 \frac{4}{9} \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2 + \frac{\hbar^2}{2} \sqrt{1 + \frac{64}{9} \frac{d^2(Z_1+Z_2)^2}{a_0^2}}$

### 5.3.2. Soluciones “finitas” de la ecuación “angular”

La ecuación de Whittaker-Hill (5.9) también es cuasi-exactamente soluble y relacionada con  $\text{LieSL}(2, \mathbb{R})$  cuando  $N = k + 1$  y  $k \in \mathbb{N}$  es un número natural. Dado que

$$N = k + 1 \quad \Rightarrow \quad E_k = -\frac{2\mu\alpha^2(Z_1 - Z_2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{(k + 1)^2},$$

si además  $k$  es par, ello ocurre para las energías de un átomo hidrogenoideo en el plano con carga  $Z_1 - Z_2$ .

La búsqueda de la parte angular de las autofunciones del Hamiltoniano de dos centros construidas a partir de soluciones finitas de la ecuación de Whittaker-Hill sigue el mismo patrón que desarrollamos en la investigación de soluciones finitas en la parte radial. Fijado  $N = k + 1$  ensayamos una solución de la ecuación de Whittaker-Hill en la forma de la serie de potencias

$$G_k(w) = w^{-\frac{k}{2}} e^{-\frac{\beta_k}{4}(w + \frac{1}{w})} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j Q_j(\nu_{kl})}{(2\beta_k)^j j!} w^j, \quad w = e^{2iy}, \quad \beta_k = -\frac{4\mu\alpha d(Z_1 - Z_2)}{\hbar^2(k + 1)}, \quad (5.12)$$

en términos de polinomios de orden  $j$   $Q_j(\nu)$  en el parámetro espectral  $\nu$  que fija el valor de la constante de separación  $I = \frac{\hbar^2}{4}(\nu - (k + 1)^2)$ .

La función  $G_k(w)$  (5.12) es solución de la ecuación de Whittaker-Hill (5.9) si los polinomios  $Q_j(\nu)$  satisfacen la relación de recurrencia a tres términos siguiente:

$$Q_{j+1}(\nu) = (\nu - [4j(k - j) + 2k + 1 + \beta_k^2]) Q_j(\nu) - [4j(k + 1 - j)\beta_k^2] Q_{j-1}(\nu), \quad j \geq 0. \quad (5.13)$$

Como en el caso de la ecuación radial soluciones finitas de la ecuación de Whittaker-Hill se consiguen cuando la serie trunca. Ello ocurre cuando se toma  $\nu_{kl}$ ,  $l = 1, 2, \dots, k + 1$ , como una de las  $k + 1$  raíces del polinomio  $Q_{k+1}(\nu)$  puesto que la relación de recurrencia (5.13) implica entonces que todos los polinomios de orden superior se anulan:

$$0 = Q_{k+2}(\nu_{kl}) = Q_{k+3}(\nu_{kl}) = Q_{k+4}(\nu_{kl}) = \dots$$

Las  $k + 1$  raíces  $\nu_{kl}$  determinan los autovalores del segundo operador invariante:

$$I_{kl} = \frac{\hbar^2}{4} [\nu_{kl} - (k + 1)^2], \quad l = 1, 2, \dots, k + 1$$

que elimina la degeneración entre las funciones del módulo invariante de energía  $E_k$ . Existen soluciones en forma de series de la ecuación radial para las constantes de integración  $E_k$  e  $I_{kl}$  pero es seguro que presentan divergencias en el rango de  $u$  muy grande. En resumen, funciones

de onda cuya parte radial es finita aunque la angular sea una serie dan lugar a estados cuánticos razonables pero no así en el caso contrario pues son estados no normalizables.

Para uso posterior describiremos las soluciones finitas de la ecuación de Whittaker-Hill para los tres primeros niveles de energía  $k = 0, 1, 2$ .

- Si  $k = 0$ ,  $N = 1$ , y contemplamos la ecuación de Whittaker-Hill cuasi-exactamente soluble que corresponde a la representación trivial de  $\text{LieSL}(2, \mathbb{R})$ . La energía corresponde al estado fundamental  $E_0 = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}(Z_1 - Z_2)^2$  y, como en el caso de la ecuación de Razavy, partimos de

$$\beta_0 = -\frac{4\mu\alpha d(Z_1 - Z_2)}{\hbar^2} \quad , \quad Q_{-1}(\nu) = 0 \quad , \quad Q_0(\nu) = 1 \quad .$$

La relación de recurrencia (5.13) permite identificar  $Q_1$

$$Q_1(\nu) = \nu - (1 + \beta_0^2)$$

y su anulación revela el autovalor del operador de simetría:

$$Q_1(\nu_{01}) = 0 \implies \nu_{01} = 1 + \beta_0^2 \implies I_{01} = \frac{\hbar^2}{4}\beta_0^2 \quad ,$$

así como la parte angular de la función de onda:  $G_{01}(y) = e^{-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}(Z_1 - Z_2)\cos 2y}$ .

- El siguiente valor  $N = 2$  en que la ecuación de WH es cuasi-exactamente soluble no corresponde a un nivel de energía del átomo de hidrógeno en el plano:  $E_1 = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2}(Z_1 - Z_2)^2$ , puesto que el número cuántico principal sería par, imposible en el plano pues daría lugar a funciones de onda bivaluadas. No obstante, partiendo de

$$\beta_1 = -\frac{2\mu\alpha d(Z_1 - Z_2)}{\hbar^2} \quad , \quad Q_{-1}(\nu) = 0 \quad , \quad Q_0(\nu) = 1$$

se resuelve la relación de recurrencia (5.13) hasta el orden dos:

$$\begin{aligned} Q_1(\nu) &= \nu - (3 + \beta_1^2) \\ Q_2(\nu) &= [\nu - (3 + \beta_1^2)]Q_1(\nu) - 4\beta_1^2 \\ &= \nu^2 - 2(3 + \beta_1^2)\nu + 9 + 2\beta_1^2 + \beta_1^4 \quad . \end{aligned}$$

Las raíces de  $Q_2$  son por tanto

$$Q_2(\nu_{1l}) = 0 \implies \nu_{11} = 3 - 2\beta_1 + \beta_1^2 \quad , \quad \nu_{12} = 3 + 2\beta_1 + \beta_1^2$$

de tal modo que la energía, los autovalores del segundo operador invariante y las funciones de onda son:

$$\begin{aligned}
 E_1 &= -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2}(Z_1 - Z_2)^2 \\
 I_{11} &= -\frac{\hbar^2}{4} + \mu\alpha d(Z_1 - Z_2) + \left(\frac{\mu\alpha d}{\hbar}\right)^2 (Z_1 - Z_2)^2 \\
 I_{12} &= -\frac{\hbar^2}{4} - \mu\alpha d(Z_1 - Z_2) + \left(\frac{\mu\alpha d}{\hbar}\right)^2 (Z_1 - Z_2)^2 \\
 G_{11}(y) &= 2e^{-\frac{\mu\alpha d}{\hbar^2}\cos 2y}\cos y, \quad G_{12}(y) = -2ie^{-\frac{\mu\alpha d}{\hbar^2}\cos 2y}\sin y
 \end{aligned}$$

- El siguiente caso en que la ecuación de WH es cuasi-exactamente soluble es  $k = 2$ ,  $N = 3$ . Partimos de:

$$\beta_2 = -\frac{4\mu\alpha d(Z_1 - Z_2)}{3\hbar^2}, \quad Q_{-1}(\nu) = 0, \quad Q_0(\nu) = 1.$$

La relación de recurrencia (5.13) proporciona los siguientes polinomios hasta el orden tres:

$$\begin{aligned}
 Q_1(\nu) &= \nu - (5 + \beta_2^2) \\
 Q_2(\nu) &= [\nu - (9 + \beta_2^2)] Q_1(\nu) - 8\beta_2^2 \\
 Q_3(\nu) &= [\nu - (5 + \beta_2^2)] Q_2(\nu) - 8\beta_2^2 Q_1(\nu) \\
 &= [\nu - (5 + \beta_2^2)] \{ [\nu - (5 + \beta_2^2)] [\nu - (9 + \beta_2^2)] - 16\beta_2^2 \}.
 \end{aligned}$$

Las tres raíces de  $Q_3$  son

$$Q_3(\nu_{2l}) = 0 \implies \nu_{21} = \beta_2^2 + 5, \quad \nu_{22} = \beta_2^2 + 7 - 2\sqrt{1 + 4\beta_2^2}, \quad \nu_{23} = \beta_2^2 + 7 + 2\sqrt{1 + 4\beta_2^2}.$$

La energía y los autovalores del segundo invariante son:

$$\begin{aligned}
 E_2 &= -\frac{2\mu\alpha^2}{9\hbar^2}(Z_1 - Z_2)^2 \\
 I_{21} &= -\hbar^2 + \frac{4(\mu\alpha d)^2}{9\hbar^2}(Z_1 - Z_2)^2 \\
 I_{22} &= -\frac{\hbar^2}{2} + \frac{4(\mu\alpha d)^2}{9\hbar^2}(Z_1 - Z_2)^2 - \frac{\hbar^2}{2}\sqrt{1 + \frac{64(\mu\alpha d)^2}{9\hbar^4}(Z_1 - Z_2)^2} \\
 I_{23} &= -\frac{\hbar^2}{2} + \frac{4(\mu\alpha d)^2}{9\hbar^2}(Z_1 - Z_2)^2 + \frac{\hbar^2}{2}\sqrt{1 + \frac{64(\mu\alpha d)^2}{9\hbar^4}(Z_1 - Z_2)^2}.
 \end{aligned}$$

La parte angular de las funciones de ondas correspondientes a estos autovalores del segundo operador invariante se encuentra fácilmente:

$$\begin{aligned} G_{21}(y) &= -2i e^{\frac{2\mu\alpha d}{3\hbar^2}(Z_1-Z_2)\cos 2y} \sin 2y \\ G_{22}(y) &= \frac{3\hbar^2}{4\mu\alpha d} \frac{1}{(Z_1 - Z_2)} e^{\frac{2\mu\alpha d}{3\hbar^2}(Z_1-Z_2)\cos 2y} \left[ \frac{8\mu\alpha d(Z_1 - Z_2)}{3\hbar^2} \cos 2y - 1 + \sqrt{1 + \frac{64(\mu\alpha d)^2(Z_1 - Z_2)^2}{9\hbar^4}} \right] \\ G_{23}(y) &= \frac{3\hbar^2}{4\mu\alpha d} \frac{1}{(Z_1 - Z_2)} e^{\frac{2\mu\alpha d}{3\hbar^2}(Z_1-Z_2)\cos 2y} \left[ \frac{8\mu\alpha d(Z_1 - Z_2)}{3\hbar^2} \cos 2y - 1 - \sqrt{1 + \frac{64(\mu\alpha d)^2(Z_1 - Z_2)^2}{9\hbar^4}} \right] \end{aligned}$$

En la Tabla 5.2 se muestran estos resultados en función de los parámetros característicos del sistema.

## 5.4. Funciones de onda hidrogenoideas

Aunque no completamente soluble el Hamiltoniano de dos centros de fuerza Coulombianos fijos en un plano admite entre sus autovalores todos los niveles de energía de un átomo hidrogenoideo plano con cargas bien  $Z_1 + Z_2$  ó  $Z_1 - Z_2$ , siendo  $Z_1 > Z_2$  los números atómicos de los dos núcleos. En rigor el número cuántico principal del átomo de hidrógeno en un plano es siempre impar. El Hamiltoniano de dos centros exhibe también autovalores con número cuántico principal par. Si denotamos por funciones de onda hidrogenoideas a las autofunciones correspondientes a los autovalores antedichos, nuestro análisis muestra que hay esencialmente dos tipos cuando  $Z_1 \neq Z_2$ .

1. El primer tipo se construye a partir de las soluciones *finitas* de la ecuación de Razavy (5.8). Son propias del operador Hamiltoniano y del segundo operador invariante

$$\hat{H} \Psi_{nm}(x_1, x_2) = E_n \Psi_{nm}(x_1, x_2) \quad , \quad \hat{I} \Psi_{nm}(x_1, x_2) = I_{nm} \Psi_{nm}(x_1, x_2)$$

con autovalores

$$E_n = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} \cdot \frac{(Z_1 + Z_2)^2}{(n+1)^2} \quad , \quad I_{nm} = \frac{\hbar^2}{4} [\lambda_{nm} - (n+1)^2],$$

$n \in \mathbb{N}$  y  $m = 1, 2, \dots, n+1$ . La separabilidad del problema en variables elípticas permite construir las en forma factorizada:

$$\Psi_{nm}(x_1, x_2) = F_{nm}(x)G(y; E_n, I_{nm}) \quad . \quad (5.14)$$

En (5.14)  $F_{nm}(x)$  denota cualquiera de las soluciones finitas de la ecuación de Razavy discutidas anteriormente. Por  $G(y; E_n, I_{nm})$  designamos la solución de la ecuación de



Whittaker-Hill (5.9) definida por los siguientes parámetros:

$$\beta_n = -\frac{4\mu\alpha d(Z_1 + Z_2)}{\hbar^2(n+1)} \quad , \quad N_n = \frac{(Z_1 - Z_2)}{(Z_1 + Z_2)}(n+1) . \quad (5.15)$$

De modo genérico  $N_n$  como aparece en (5.15) no es un entero y por tanto la ecuación de WH que resulta de fijar la energía a  $E_n$  y el segundo invariante a  $I_{nm}$  no es cuasi-exactamente soluble mientras que su gemela Razavy lo es. Ello no significa que no exista solución para la función  $G$ , lo único que ocurre es que la serie (5.12) no trunca para el valor

$$\nu_{nm} = N_n^2 + \frac{4}{\hbar^2} I_{nm}$$

que no es una raíz de ninguno de los polinomios en dicha fórmula. La solución sin embargo es única y  $G(y; E_n, I_{nm})$  queda definida como una serie convergente por la relación de recurrencia (5.13).

Más explícitamente, la ecuación de Whittaker-Hill en su forma algebraica para los valores que dan lugar a soluciones finitas de la ecuación de Razavy es:

$$\frac{d^2 G}{dv^2} - \frac{v}{d^2 - v^2} \frac{dG}{dv} + \frac{A_{nm} + Bv + C_n v^2}{d^2 - v^2} G(v) = 0$$

$$A_{nm} = -\frac{I_{nm}}{\hbar^2} \quad , \quad B = \frac{2}{a_0}(Z_1 - Z_2) \quad , \quad C_n = \frac{4}{a_0^2} \left( \frac{Z_1 + Z_2}{n+1} \right)^2 .$$

Los coeficientes de una solución en serie de potencias  $G(v) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ ,  $z = \frac{v}{d}$ , de esta ecuación satisfacen la relación de recurrencia a cuatro términos, véase [68],

$$c_k = -\frac{1}{k(k-1)} \left[ (A_{nm} - (k-2)^2) c_{k-2} + dBc_{k-3} + d^2 C_n c_{k-4} \right] . \quad (5.16)$$

Esta serie converge en el intervalo abierto  $z \in (-1, 1)$  y se pueden elegir dos soluciones básicas a partir de las combinaciones de los dos primeros coeficientes ( $c_{0+} = 1, c_{1+} = 0$ ) y ( $c_{0-} = 0, c_{1-} = 1$ ). Así pues

$$G_+(v) = 1 + \sum_{k=2}^{\infty} c_k^+ z^k \quad , \quad G_+(0) = 1 \quad , \quad G'_+(0) = 0$$

$$G_-(v) = z + \sum_{k=2}^{\infty} c_k^- z^k \quad , \quad G_-(0) = 0 \quad , \quad G'_-(0) = 1$$

dan lugar a cualquier solución de la ecuación de Whittaker-Hill en el abierto  $(-d, d)$ . Extender la solución a los puntos del borde  $v = \pm d$

$$G_+(d) = 1 + \sum_{k=2}^{\infty} c_k^+ \quad , \quad G_+(-d) = 1 + \sum_{k=2}^{\infty} (-1)^k c_k^+$$

$$G_-(d) = 1 + \sum_{k=2}^{\infty} c_k^- , \quad G_-(-d) = -1 + \sum_{k=2}^{\infty} (-1)^k c_k^- ,$$

es un problema delicado que impone restricciones sobre las sumas de las series anteriores y ha de adaptar las condiciones de contorno del problema.

2. En el otro tipo de funciones de onda hidrogenoideas se intercambian los papeles de las ecuaciones de Razavy y Whittaker-Hill y de las funciones  $F$  y  $G$ . Las funciones de onda se construyen a partir de las soluciones *finitas* de la ecuación de Whittaker-Hill como productos con soluciones en serie de la ecuación de Razavy. Si las funciones propias comunes a  $\hat{H}$  e  $\hat{I}$

$$\hat{H} \Psi_{kl}(x_1, x_2) = E_k \Psi_{kl}(x_1, x_2) \quad , \quad \hat{I} \Psi_{kl}(x_1, x_2) = I_{kl} \Psi_{kl}(x_1, x_2)$$

con autovalores

$$E_k = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} \cdot \frac{(Z_1 - Z_2)^2}{(k+1)^2} , \quad I_{kl} = \frac{\hbar^2}{4} [\nu_{kl} - (k+1)^2] ,$$

$k \in \mathbb{N}$  y  $k = 1, 2, \dots, k+1$  tendremos una factorización de la forma:

$$\Psi_{kl}(x_1, x_2) = F(x; E_k, I_{kl}) G_{kl}(y) . \quad (5.17)$$

Como ahora la solución finita es en la variable compacta se espera que  $F(x; E_k, I_{kl})$ , que genéricamente no es una solución finita, sea no normalizable y por tanto sin interés físico. De hecho la ecuación de Razavy en el régimen de  $u \gg 1$  se convierte en

$$u^2 \frac{d^2 F}{du^2} + u \frac{dF}{du} - |a_k| u^2 F = 0 \Big|_{u \rightarrow +\infty} , \quad a_k = \frac{2\mu}{\hbar^2} E_k .$$

La solución es una combinación lineal de funciones de Bessel del primer y del segundo tipo

$$F(u) \simeq_{u \rightarrow +\infty} c_1 J_0(i\sqrt{|a_k|}u) + c_2 Y_0(i\sqrt{|a_k|}u)$$

que tienden a infinito en el límite  $u = +\infty$ .

La comparación entre las soluciones truncadas de las ecuaciones de Razavy y Whittaker-Hill es sencilla: se pasa de la suma de las cargas de los dos centros ( $Z_1 + Z_2$ ) y funciones hiperbólicas en la variable no acotada  $2x$  a la diferencia de las cargas de los dos centros ( $Z_1 - Z_2$ ) y funciones trigonométricas de la variable radial  $2y$  sin ningún cambio estructural más.

Entendida la distancia intercentros  $d$  como un parámetro de deformación es conveniente resumir los resultados precedentes sobre el espectro del Hamiltoniano de Euler-Coulomb en el plano como sigue:

1. Los niveles de energía de átomos hidrogenoideos de carga  $Z_1 + Z_2$  en el plano son autovalores del Hamiltoniano de dos centros. Es decir, no dependen de la distancia  $d$  de modo que el paso de uno a dos centros situados a distancia arbitraria resulta una deformación cuasi-iso-espectral.
2. Si  $d > 0$  surge una torre infinita discreta de niveles con número cuántico principal par intercalados entre los que obedecen a  $n$  impar que desaparecen en el límite  $d = 0$  de un solo centro.
3. Las funciones de onda estacionarias que corresponden a estos niveles de energía son polinomios por una exponencial decreciente en la variable radial  $u$  multiplicados por una serie convergente en la variable angular  $v$ . Al contrario que los autovalores, las autofunciones dependen de  $d$  y ha de esperarse que se conviertan en las funciones de onda estacionarias de un átomo plano hidrogenoideo cuando los dos centros colapsan en uno.
4. Los autovalores del segundo operador invariante dependen de  $d$  y tienden a los autovalores del momento angular al cuadrado cuando  $d = 0$  y hay simetría respecto de rotaciones en el plano.
5. Cuando uno de los centros escapa a infinito y el otro se sitúa en el origen el segundo operador invariante se convierte en una componente del vector de Runge-Lenz. Esta afirmación se verificará más adelante con cierta dificultad yendo al sistema de coordenadas parabólicas en que degeneran las elípticas en este proceso. En ello radica la razón de porqué el espectro heredado del problema de un centro en el sistema de dos centros recuerda la simetría dinámica  $\mathbb{SO}(3)$  que explica la degeneración adicional.

### 5.4.1. Funciones de onda de Demkov en el plano

Siguiendo los trabajos de la escuela de Demkov en tres dimensiones [65, 67] pasamos a investigar en el plano funciones de onda de la forma

$$\Psi_{nmkl}(x_1, x_2) = F_{nm}(x)G_{kl}(y) \quad .$$

La condición necesaria para que tanto la ecuación de Razavy como la de Whittaker-Hill sean cuasi-exactamente solubles viene caracterizada por la ecuación diofántica

$$N_n = (k + 1) \implies (Z_1 - Z_2)(n + 1) = (Z_1 + Z_2)(k + 1) \quad .$$

Tabla 5.2: Soluciones de la ecuación de Whittaker-Hill (5.9) para  $k = 0, 1, 2$ 

Energía	Función propia y constante de separación
$E_0 = -4(Z_1 - Z_2)^2 \text{ Ry}$	$G_{01}(y) = e^{2\frac{d}{a_0}(Z_1 - Z_2) \cos 2y}$ $I_{01} = 4\hbar^2 \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2$
$E_1 = -(Z_1 - Z_2)^2 \text{ Ry}$	$G_{11}(y) = e^{\frac{d}{a_0}(Z_1 - Z_2) \cos 2y} \sqrt{2(\cos 2y + 1)}$ $G_{12}(y) = -e^{\frac{d}{a_0}(Z_1 - Z_2) \cos 2y} \sqrt{2(\cos 2y - 1)}$ $I_{11} = -\frac{\hbar^2}{4} + \hbar^2 \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2 + \hbar^2 \frac{d}{a_0} (Z_1 - Z_2)$ $I_{12} = -\frac{\hbar^2}{4} + \hbar^2 \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2 - \hbar^2 \frac{d}{a_0} (Z_1 - Z_2)$
$E_2 = -\frac{4}{9}(Z_1 - Z_2)^2 \text{ Ry}$	$G_{21}(y) = -2e^{\frac{2d}{3a_0}(Z_1 - Z_2) \cos 2y} \sqrt{1 - \cos^2 2y}$ $G_{22}(y) = \frac{3a_0}{4d(Z_1 - Z_2)} e^{\frac{2d}{3a_0}(Z_1 - Z_2) \cos 2y} \left[ \frac{8d(Z_1 - Z_2)}{3a_0} \cos 2y + 1 - \sqrt{1 + \frac{64}{9} \frac{d^2(Z_1 - Z_2)^2}{a_0^2}} \right]$ $G_{23}(y) = \frac{3a_0}{4d(Z_1 - Z_2)} e^{\frac{2d}{3a_0}(Z_1 - Z_2) \cos 2y} \left[ \frac{8d(Z_1 - Z_2)}{3a_0} \cos 2y + 1 + \sqrt{1 + \frac{64}{9} \frac{d^2(Z_1 - Z_2)^2}{a_0^2}} \right]$ $I_{21} = -\hbar^2 + \hbar^2 \frac{4}{9} \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2$ $I_{22} = -\frac{\hbar^2}{2} + \hbar^2 \frac{4}{9} \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sqrt{1 + \frac{64}{9} \frac{d^2(Z_1 - Z_2)^2}{a_0^2}}$ $I_{23} = -\frac{\hbar^2}{2} + \hbar^2 \frac{4}{9} \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2 + \frac{\hbar^2}{2} \sqrt{1 + \frac{64}{9} \frac{d^2(Z_1 - Z_2)^2}{a_0^2}}$

Esta condición iguala los niveles de los dos átomos hidrogenoideos respectivamente con cargas  $Z_1 + Z_2$  y  $Z_1 - Z_2$

$$E_n = -\frac{2\mu\alpha^2 (Z_1 + Z_2)^2}{\hbar^2 (n+1)^2} = -\frac{2\mu\alpha^2 (Z_1 - Z_2)^2}{\hbar^2 (k+1)^2} = E_k, \quad (5.18)$$

pero la existencia de funciones de onda de la forma (5.4.1), el producto de dos soluciones *finitas*, una de la ecuación de Razavy, otra de la de WH requiere además que coincidan los segundos invariantes:  $I_{nm}(d) = I_{kl}(d)$ . Ello significa que funciones de onda de este tipo existen cuando tanto las cargas como la distancia intercentros están calibradas de forma única. El proceso de búsqueda consiste en dos pasos: (1) Se demanda la igualdad de las energías  $E_n = E_k$ , condición (5.44) que determina los posibles valores de los enteros no negativos  $n$  y  $k$  dados  $Z_1$  y  $Z_2$ . (2) Obtenidos  $n$  y  $k$  debemos imponer que coincida también el autovalor del segundo invariante:

$$I_{nm}(d) = I_{kl}(d). \quad (5.19)$$

condición que fija automáticamente los valores de  $m$ ,  $l$  y  $d$ . Encontraremos, pues, algunas soluciones *finitas* propias del Hamiltoniano y del segundo invariante para ciertos valores de  $Z_1$ ,  $Z_2$  y  $d$  dados. Analizaremos a continuación algunos casos a energías bajas:

- Si  $Z_1 = 3$ ,  $Z_2 = 1$  la ecuación diofántica resultante es resuelta por la identidad entre números naturales

$$n = 2k + 1 \quad \Rightarrow \quad \{(n, k)\} = \{(1, 0); (3, 1); (5, 2); (7, 3) \dots\}$$

Las energías que permiten la truncación en la serie radial o en la angular en orden creciente se recogen en la Tabla siguiente

$$\begin{array}{ll} E_{n=0} = -\frac{32\mu\alpha^2}{\hbar^2} & E_{k=0} = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2} \\ E_{n=1} = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2} & E_{k=1} = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} \\ E_{n=2} = -\frac{32\mu\alpha^2}{9\hbar^2} & E_{k=2} = -\frac{8\mu\alpha^2}{9\hbar^2} \\ E_{n=3} = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} & E_{k=3} = -\frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2} \\ E_{n=4} = -\frac{32\mu\alpha^2}{25\hbar^2} & \vdots \\ E_{n=5} = -\frac{8\mu\alpha^2}{9\hbar^2} & \vdots \end{array}$$

Todas las truncaciones en la variable angular pueden dar lugar a priori a funciones de onda de Demkov doblemente finitas. En cada nivel sólo aquellas que también presentan idéntico segundo invariante son soluciones de este tipo. Por ejemplo, comenzando por la primera,  $n = 1$  y  $k = 0$ , la condición  $I_{1m}(d) = I_{0l}(d)$  es consecuentemente resuelta por

$m = 2, l = 1$  y  $d = \frac{1}{16}a_0$ . La energía, el segundo invariante y la función de onda para esta distancia se calculan a continuación y resultan ser:

$$\begin{cases} E_1 = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2} \equiv -16 \text{ Ry} , I = \hbar^2 \frac{1}{16} \\ \Psi_{1201}(x_1, x_2) = -\frac{1}{a_0} e^{-\frac{4r_1}{a_0}} \sqrt{\frac{r_1+r_2}{a_0} - \frac{1}{8}} \end{cases}$$

Encontramos pues que para una distancia de un dieciseisavo del radio de Bohr una de las dos soluciones finitas del módulo invariante de dimensión 2 de la ecuación de Razavy multiplicada por la solución finita de la ecuación de WH de dimensión 1 da lugar a una función de onda llamada por Demkov “elemental”. Nótese que la energía del estado fundamental en este caso es  $E_0 = -\frac{32\mu\alpha^2}{\hbar^2}$ . En la Figura (5.3) se representa la densidad de probabilidad  $a_0^2|\Psi_{1201}(x_1, x_2)|^2$  vs  $(x_1/a_0, x_2/a_0)$  y sus curvas de nivel.

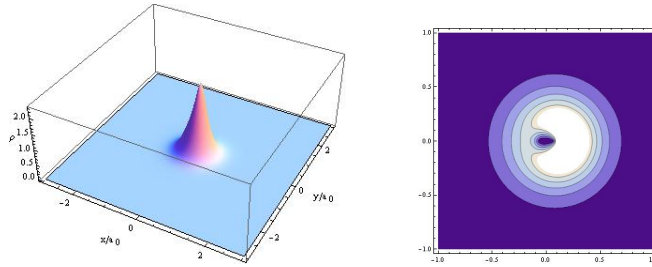


Figura 5.3: Densidad de probabilidad y curvas de nivel para:  $Z_1 = 3, Z_2 = 1, \frac{d}{a_0} = \frac{1}{16}$

- Consideremos ahora  $Z_1 = 5, Z_2 = 1$ . La ecuación diofántica y sus posibles soluciones son

$$2n = 3k + 1 \Rightarrow \{(n, k)\} = \{(2, 1); (5, 3); (8, 5); \dots\} .$$

Las energías que permiten la truncación en la serie radial o en la angular en orden creciente se recogen en la Tabla siguiente

$E_{n=0} = -\frac{72\mu\alpha^2}{\hbar^2}$	$E_{k=0} = -\frac{32\mu\alpha^2}{\hbar^2}$
$E_{n=1} = -\frac{18\mu\alpha^2}{\hbar^2}$	$E_{k=1} = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2}$
$E_{n=2} = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2}$	$E_{k=2} = -\frac{32\mu\alpha^2}{9\hbar^2}$
$E_{n=3} = -\frac{9\mu\alpha^2}{2\hbar^2}$	$E_{k=3} = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}$
$E_{n=4} = -\frac{72\mu\alpha^2}{25\hbar^2}$	⋮
$E_{n=5} = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}$	⋮

Los niveles de energía con  $k$  impar que dan lugar a truncación de la serie en la variable angular pueden pues admitir soluciones de Demkov, y dar lugar así a estados ligados,

si se verifican identidades en algunos de los segundos invariantes. Centrémonos en la primera combinación,  $n = 2, k = 1$ , los segundos invariantes son iguales si y sólo si  $m = 1, l = 2, d = \frac{3}{16}a_0$ . La energía, el segundo invariante, y la función de onda son:

$$\begin{cases} E_3 = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2} \equiv -16 \text{ Ry} , I = -\hbar^2 \frac{7}{16} \\ \Psi_{2112}(x_1, x_2) = \frac{2}{a_0} e^{-\frac{4r_1}{a_0}} \sqrt{\frac{r_2-r_1}{a_0} - \frac{3}{8}} \sqrt{\frac{(r_1+r_2)^2}{4a_0^2} - \frac{9}{256}} \end{cases}$$

mientras que la energía del estado fundamental es en este caso:  $E_0 = -\frac{72\mu\alpha^2}{\hbar^2}$ . En la Figura (5.4) representamos la densidad de probabilidad para este estado.

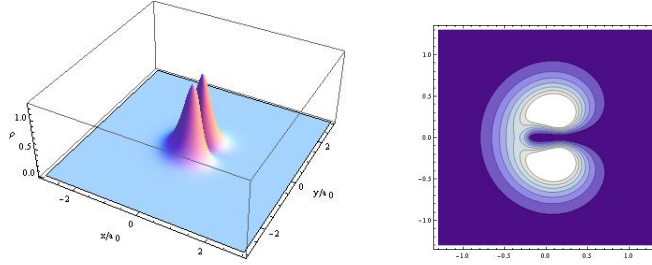


Figura 5.4: Densidad de probabilidad y curvas de nivel para:  $Z_1 = 5, Z_2 = 1, \frac{d}{a_0} = \frac{3}{16}$

- Es interesante considerar también la situación en que un centro es atractivo y otro repulsivo. Por ejemplo, apartándonos de la convención anterior pero manteniendo  $Z_1 > |Z_2|$  tomamos:  $Z_1 = 3, Z_2 = -1$ . La ecuación diofántica y sus soluciones son:

$$n = \frac{k-1}{2} \implies \{(n, k)\} = \{(0, 1); (1, 3); (2, 5); (3, 7); \dots\}.$$

Las energías para las que se obtienen soluciones finitas o bien en Razavy o bien en WH son:

$$\begin{array}{ll} E_{n=0} = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2} & E_{k=0} = -\frac{32\mu\alpha^2}{\hbar^2} \\ E_{n=1} = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} & E_{k=1} = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2} \\ E_{n=2} = -\frac{8\mu\alpha^2}{9\hbar^2} & E_{k=2} = -\frac{32\mu\alpha^2}{9\hbar^2} \\ E_{n=3} = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2} & E_{k=3} = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} \\ \vdots & E_{k=4} = -\frac{32\mu\alpha^2}{25\hbar^2} \\ \vdots & E_{k=5} = -\frac{8\mu\alpha^2}{9\hbar^2} \end{array}$$

La identidad entre los segundos invariantes en el primer caso,  $(n, k) = (0, 1)$ ,  $I_{01}(d) = I_{1,1}(d)$  fuerza  $l = 1$  y  $d = \frac{1}{16}a_0$ . La energía en este caso es la del estado fundamental

mientras que la función de onda es:

$$\begin{cases} E_0 = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2} \equiv -16 \text{ Ry} , I = \hbar^2 \frac{1}{16} \\ \Psi_{0111}(x_1, x_2) = \frac{1}{a_0} e^{-4\frac{r_1}{a_0}} \sqrt{\frac{r_2-r_1}{a_0} + \frac{1}{8}} \end{cases}$$

- Otra distribución de cargas de este tipo es:  $Z_1 = 5$  ,  $Z_2 = -1$ . La ecuación diofántica y sus soluciones son:

$$n = \frac{2k - 1}{3} \implies \{(n, k)\} = \{(1, 2); (3, 5); (5, 8); (7, 11); \dots\}$$

Los niveles que dan lugar a soluciones finitas en  $F$  o en  $G$  se escriben a continuación:

$$\begin{array}{ll} E_{n=0} = -\frac{32\mu\alpha^2}{\hbar^2} & E_{k=0} = -\frac{72\mu\alpha^2}{\hbar^2} \\ E_{n=1} = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2} & E_{k=1} = -\frac{18\mu\alpha^2}{\hbar^2} \\ E_{n=2} = -\frac{32\mu\alpha^2}{9\hbar^2} & E_{k=2} = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2} \\ E_{n=3} = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} & E_{k=3} = -\frac{9\mu\alpha^2}{2\hbar^2} \\ \vdots & E_{k=4} = -\frac{72\mu\alpha^2}{25\hbar^2} \\ \vdots & E_{k=5} = -\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} \end{array}$$

En el caso más sencillo,  $(n, k) = (1, 2)$ ,  $I_{1m}(d) = I_{2l}(d)$  si  $m = 1$ ,  $l = 1$  y  $d = \frac{3}{16}$ . En consecuencia la energía, el segundo invariante, y la función de onda elemental son:

$$\begin{cases} E_1 = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2} \equiv -16 \text{ Ry} , I = -\frac{7}{16}\hbar^2 \\ \Psi_{1121}(x_1, x_2) = -\frac{2}{a_0} e^{-4\frac{r_1}{a_0}} \sqrt{\frac{r_1+r_2}{a_0} + \frac{3}{8}} \sqrt{\frac{9}{256} - \frac{(r_2-r_1)^2}{4a_0^2}} \end{cases}$$

Las densidades de probabilidad correspondientes a estas dos últimas funciones de onda de Demkov se representan en las Figuras: (5.5) y (5.6).

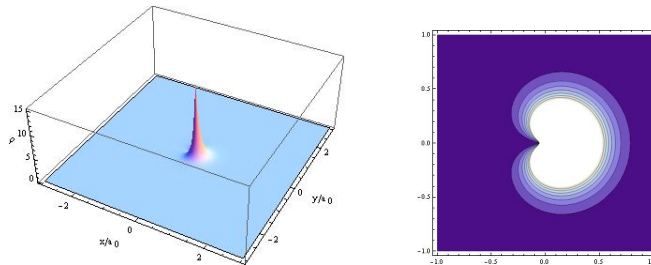


Figura 5.5: Densidad de probabilidad y curvas de nivel para  $Z_1 = 3, Z_2 = -1, \frac{d}{a_0} = \frac{1}{16}$



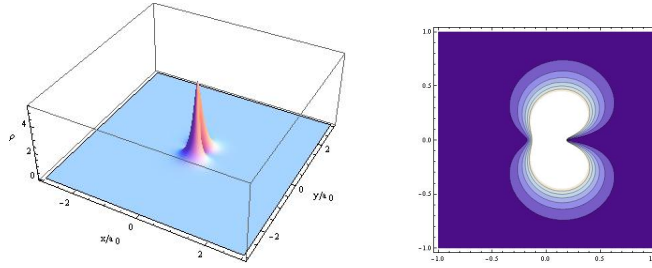


Figura 5.6: Densidad de probabilidad y curvas de nivel para  $Z_1 = 5, Z_2 = -1, \frac{d}{a_0} = \frac{3}{16}$

### 5.4.2. El caso de dos centros iguales: la ecuación de Mathieu

Si los dos centros atraen con la misma intensidad,  $Z_1 = Z_2$  en Física Molecular se trataría de una molécula diatómica homonuclear, la ecuación de Whittaker-Hill reduce a la ecuación de Mathieu cuyos parámetros serán fijados en función de los autovalores  $E_n$  e  $I_{nm}$  que dan lugar a una solución finita de la ecuación de Razavy. Al contrario que la ecuación de Whittaker-Hill la de Mathieu no es cuasi-exactamente soluble para ninguna elección de parámetros, no obstante lo cual sus soluciones se conocen en virtud de toda una clase de funciones especiales: las funciones de Mathieu. Para dos centros iguales por tanto las funciones de onda hidrogenoideas de carga  $Z_1 + Z_2 = 2Z$  se pueden expresar de forma analítica como el producto de una solución finita de la ecuación de Razavy  $F(x)$  por una combinación lineal de funciones de Mathieu que escribiremos en la forma  $G_{nm}(y)$  en orden a recordar que corresponden a la ecuación de Mathieu determinada por  $E_n$  e  $I_{nm}$ .

En el sistema de coordenadas elípticas en versión trigonométrica las ecuaciones (5.8) y (5.9) se escriben en este caso como:

$$-\frac{d^2 F(x)}{dx^2} + (\zeta \cosh 2x - M)^2 F(x) = \lambda F(x), \quad (5.20)$$

$$-\frac{d^2 G(y)}{dy^2} + (\gamma \cos 4y + \sigma) G(y) = 0, \quad (5.21)$$

La primera ecuación (5.20) es simplemente la ecuación (5.8) cuando  $Z_1 = Z_2 = Z$ . La segunda (5.21) es una ecuación de Mathieu. Los parámetros  $\zeta, M, \lambda, \gamma$  y  $\sigma$  en función de las constantes de integración  $E$  e  $I$  son

$$\zeta = \frac{2}{\hbar} \sqrt{-2\mu d^2 E}, \quad M^2 = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2 E} Z^2, \quad \lambda = M^2 + \frac{4I}{\hbar^2},$$

$$\gamma = \frac{4\mu d^2 E}{\hbar^2}, \quad \sigma = \frac{4}{\hbar^2} (I + \mu d^2 E).$$

Tomando  $M$  de modo que (5.20) sea cuasi-exactamente soluble se acaba en los niveles del átomo de hidrógeno en el plano (admitiendo también que el número cuántico principal sea par), es decir,

$$M = n + 1 \quad \Rightarrow \quad E_n = -\frac{8\mu\alpha^2}{\hbar^2} \frac{Z^2}{(n+1)^2} \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.22)$$

Las soluciones de tipo finito (5.10) de la ecuación de Razavy (5.20) tal que  $\zeta_n = \frac{8\mu\alpha d}{\hbar^2(n+1)}Z$  se obtienen mediante la truncación de la serie definida por las relaciones de recurrencia a tres términos (5.11) y, por tanto, caracterizadas por las  $n+1$  raíces  $\lambda_{nm}$  de  $P_{n+1}(L)$ , véase la Tabla 5.1 para:  $(Z_1 + Z_2) = 2Z_1$ . La elección de una ecuación de Razavy cuasi-exactamente soluble determina una serie de niveles de energía  $E_n$  discreta de tipo hidrogenoidea. La restricción a soluciones finitas fija el segundo invariante en función de las raíces:  $I_{nm} = \frac{\hbar^2}{4}[\lambda_{nm} - (n+1)^2]$ ,  $m = 1, 2, \dots, n-1$ . Los parámetros de la ecuación de Mathieu asociados a estos valores de las constantes de integración son:

$$\gamma_n = \frac{4\mu d^2 E_n}{\hbar^2} \quad , \quad \sigma_{nm} = \frac{4}{\hbar^2}(I_{nm} + \mu d^2 E_n) \quad .$$

En su forma algebraica la ecuación de Mathieu para estos valores toma la forma

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ (d^2 - v^2) \frac{d^2 G_{nm}}{dv^2} - v \frac{dG_{nm}}{dv} \right] - \left( E_n + \frac{I}{2\mu} \right) G_{nm}(v) = 0 \quad . \quad (5.23)$$

Es claro que la simetría de la ecuación (5.23) es bajo una transformación discreta:  $v \leftrightarrow -v$ . Escrita en la forma trigonométrica (5.21) también admite una simetría  $\mathbb{Z}_2$  generada por la reflexión:  $y \leftrightarrow -y$ . En esta forma se genera además una simetría discreta e infinita:  $y \leftrightarrow y + \frac{\pi}{2}n$ ,  $n \in \mathbb{Z}$  de la ecuación de Mathieu. De acuerdo con el teorema de Floquet el espectro de esta ecuación es un espectro de bandas. El fijar  $E_n$  e  $I_{nm}$ , y por tanto  $\gamma$  y  $\sigma$ , selecciona por tanto un número de ondas finito en una banda. En términos de las funciones especiales seno y coseno de Mathieu  $S[a, q, z]$  y  $C[a, q, z]$  expresamos estas funciones de onda de tipo Bloch correspondientes a índices de Floquet determinados por  $\gamma_n$  y  $\sigma_{nm}$  como la combinación lineal siguiente:

$$G_{nm}(y) = C[a_{nm}(d), q_n(d), 2y] + iS[a_{nm}(d), q_n(d), 2y] \quad . \quad (5.24)$$

Los parámetros  $q_n$  y  $a_{nm}$  que codifican la notación standard de las funciones de Mathieu se expresan en función de aquellos de nuestro problema en la forma:

$$q_n = \frac{\gamma_n}{8} = -\frac{4(\mu\alpha d)^2}{\hbar^4} \frac{Z^2}{(n+1)^2} \quad , \quad a_{nm} = -\frac{\sigma_{nm}}{4} = \frac{1}{4} \left( (n+1)^2 - \lambda_{nm} \right) + \frac{8(\mu\alpha d)^2}{\hbar^4} \frac{Z^2}{(n+1)^2} \quad ,$$

El criterio para la elección de combinación lineal en (5.24) es el buen comportamiento el límite  $d \rightarrow 0$ , problema de Kepler-Coulomb con un centro de carga  $2Z$ . En efecto, como en ese

régimen las funciones de Mathieu tienden a las trigonométricas de ángulo múltiple se obtiene dependencia angular de la función de onda en la forma:  $e^{ij\varphi}$  donde  $|j| \leq n - 1$  y es entero si  $n$  es par y semi-entero si  $n$  es impar.

En la Tabla 5.3 se muestran estos resultados para los primeros niveles de energía  $n = 0, 1, 2$ . Para la elección de cargas  $Z_1 = Z_2 = 1$ , se muestran en la Tabla 5.4 las gráficas de la función de onda radial  $a_0 F_{nm}(u)$  frente a  $\frac{u}{a_0}$  para los tres primeros niveles de energía y distintos valores del parámetro  $\frac{d}{a_0}$ :

- 1.  $\frac{d}{a_0} = 0.001$  tal que  $\bar{\hbar}^2 \gg 1$  y  $\hbar^2 \gg \mu\alpha d$  un régimen supercuántico. Los dos centros de fuerza se solapan en un centro de carga  $2Z$ . Se trata, pues, del límite del problema de Euler-Coulomb al de Kepler-Coulomb en el plano.
- 2.  $\frac{d}{a_0} = 1$  describe el régimen cuántico. En el ión molecular de Hidrógeno ocurre que  $\hbar^2 \simeq \mu\alpha d$ .
- 3.  $\frac{d}{a_0} = 4$  equivale a  $\hbar^2 \ll \mu\alpha d$  y caemos en un régimen semi-clásico, con las funciones de onda mucho más localizadas en torno a los centros.
- 4. En general, en el límite  $d \rightarrow 0$  se recuperan los resultados de Kepler-Coulomb.

Comparando con las gráficas obtenidas para la parte radial en el problema de Kepler-Coulomb en el plano, ver la Tabla 4.2, observamos que en el límite  $d \rightarrow 0$ :

- $F_{01}(u) \Rightarrow R_{00}(r)$ , el estado fundamental  $n = 1$  y  $m = 0$  de Kepler-Coulomb.
- $F_{11}(u)$  y  $F_{12}(u)$  no tienen límite a ninguna solución del problema de Kepler-Coulomb. El límite correspondería a un valor de  $j = \frac{1}{2}$  y  $n = 2j + 1 = 2$  pero en el plano el número cuántico principal es siempre impar por lo que estas soluciones no representan ningún estado físico. Las partes angulares irían a  $e^{\pm \frac{i}{2}\varphi}$  que son funciones bivaluadas de  $\varphi$  no admisibles físicamente.
- $F_{21}(u)$  y  $F_{22}(u)$  tienen como límite la misma función radial  $R_{1\pm 1}(r)$  que corresponde al estado  $n = 1$  y  $m = \pm 1$  del problema de Kepler.
- Por último,  $F_{23}(u) \Rightarrow R_{10}(r)$ .

En las siguientes Tablas 5.5, 5.6, 5.7 y 5.8 representamos la densidad de probabilidad  $a_0^2 |\psi_{nm}(x_1, x_2)|$  como funciones de  $\frac{x_1}{a_0}$  y  $\frac{x_2}{a_0}$  para los diferentes valores de  $\frac{d}{a_0}$  antes mencionados. Se representan al tiempo las curvas de nivel correspondientes y se muestra el resultado que se obtiene al tomar el límite  $\frac{d}{a_0} \rightarrow 0$ . Las gráficas de la Tabla ?? han de compararse con las mostradas en 4.5. De nuevo comprobamos que el estado fundamental del problema de dos centros caracterizado

Tabla 5.3: Valores propios y funciones propias para  $n = 0, 1, 2$ 

Energía	Función propia — Constante de separación — Parámetros de Mathieu
$E_0 = -16 Z^2 \text{ Ry}$	$\psi_{01}(x, y) = e^{-4 \frac{d}{a_0} Z \cosh 2x} (C[a_{01}, q_0, 2y] + iS[a_{01}, q_0, 2y])$ $I_{01} = 16 \hbar^2 \frac{d^2}{a_0^2} Z^2 \quad , \quad q_0 = -4 \frac{d^2}{a_0^2} Z^2 \quad , \quad a_{01} = -8 \frac{d^2}{a_0^2} Z^2$
$E_1 = -4 Z^2 \text{ Ry}$	$\psi_{11}(x, y) = e^{-2 \frac{d}{a_0} Z \cosh 2x} \sqrt{2(\cosh 2x + 1)} (C[a_{11}, q_1, 2y] + iS[a_{11}, q_1, 2y])$ $I_{11} = -\frac{\hbar^2}{4} - 2\hbar^2 \frac{d}{a_0} Z + 4\hbar^2 \frac{d^2}{a_0^2} Z^2 \quad , \quad q_1 = -\frac{d^2}{a_0^2} Z^2 \quad , \quad a_{11} = \frac{1}{4} + 2 \frac{d}{a_0} Z + 2 \frac{d^2}{a_0^2} Z^2$ $\psi_{12}(x, y) = e^{-2 \frac{d}{a_0} Z \cosh 2x} \sqrt{2(\cosh 2x - 1)} (C[a_{12}, q_1, 2y] + iS[a_{12}, q_1, 2y])$ $I_{12} = -\frac{\hbar^2}{4} + 2\hbar^2 \frac{d}{a_0} Z + 4\hbar^2 \frac{d^2}{a_0^2} Z^2 \quad , \quad a_{12} = \frac{1}{4} - 2 \frac{d}{a_0} Z + 2 \frac{d^2}{a_0^2} Z^2$
$E_2 = -\frac{16}{9} Z^2 \text{ Ry}$	$\psi_{21}(x, y) = -2e^{-\frac{4d}{3a_0} Z \cosh 2x} \sqrt{\cosh^2 2x - 1} (C[a_{21}, q_2, 2y] + iS[a_{21}, q_2, 2y])$ $I_{21} = -\hbar^2 + \hbar^2 \frac{16d^2}{9a_0^2} Z^2 \quad , \quad q_2 = -\frac{4d^2}{9a_0^2} Z^2 \quad , \quad a_{21} = 1 - \frac{8d^2}{9a_0^2} Z^2$ $\psi_{22}(x, y) = e^{-\frac{4d}{3a_0} Z \cosh 2x} \left[ 2 \cosh 2x - \frac{3a_0}{8dZ} + \frac{3a_0}{8dZ} \sqrt{1 + \frac{256d^2}{9a_0^2} Z^2} \right] \times$ $\quad \times (C[a_{22}, q_2, 2y] + iS[a_{22}, q_2, 2y])$ $I_{22} = -\frac{\hbar^2}{2} + \hbar^2 \frac{16d^2}{9a_0^2} Z^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sqrt{1 + \frac{256d^2}{9a_0^2} Z^2} \quad , \quad a_{22} = \frac{1}{2} - \frac{8d^2}{9a_0^2} Z^2 + \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{256d^2}{9a_0^2} Z^2}$ $\psi_{23}(x, y) = e^{-\frac{4d}{3a_0} Z \cosh 2x} \left[ 2 \cosh 2x - \frac{3a_0}{8dZ} - \frac{3a_0}{8dZ} \sqrt{1 + \frac{256d^2}{9a_0^2} Z^2} \right] \times$ $\quad \times (C[a_{23}, q_2, 2y] + iS[a_{23}, q_2, 2y])$ $I_{23} = -\frac{\hbar^2}{2} + \hbar^2 \frac{16d^2}{9a_0^2} Z^2 + \frac{\hbar^2}{2} \sqrt{1 + \frac{256d^2}{9a_0^2} Z^2} \quad , \quad a_{23} = \frac{1}{2} - \frac{8d^2}{9a_0^2} Z^2 - \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{256d^2}{9a_0^2} Z^2}$

por  $n = 0$  y  $m = 1$  en el límite nos lleva al estado fundamental del problema de un centro con carga  $2Z = 2$  caracterizado por  $j = 0 \Rightarrow n = 1$  y  $m = 0$ . Los estados de dos centros con  $n = 1$  y  $m = 1, 2$  según va dicho no tienen límite a un estado del problema de un centro y, por último, los estados con  $n = 2$  y  $m = 1, 2$  dan lugar a  $j = 1 \Rightarrow n = 3$  y  $m = \pm 1$ , mientras que el estado  $n = 2$  y  $m = 3$  del problema de dos centros tiene como límite  $j = 1 \Rightarrow n = 3$  y  $m = 0$ .

### 5.4.3. Colapso de los dos centros en uno

Es interesante estudiar detalladamente los dos límites en que el problema de dos centros se reduce al problema de Kepler-Coulomb. La primera posibilidad ocurre cuando  $d = 0$ , es decir, cuando los dos centros colapsan en uno. Las coordenadas elípticas se convierten en coordenadas polares y, trivialmente, dado que el sistema adquiere simetría bajo rotaciones, el segundo operador invariante pasa a ser el momento angular al cuadrado:  $\lim_{d \rightarrow 0} \hat{I} = \frac{1}{2} \hat{L}^2$ . Más aún, la relación de recurrencia (5.16) se simplifica mucho:

$$c_k = -\frac{1}{k(k-1)} (A_{nm} - (k-2)^2) c_{k-2} \quad . \quad (5.25)$$

De un lado en el régimen en que los dos centros están muy cerca la partícula no distingue entre las cargas de los dos centros. De otro lado la relación de recurrencia deviene a dos términos y es consecuentemente sencilla de resolver. Los comentarios anteriores se refieren a la parte angular. La parte radial es menos complicada todavía de analizar puesto que  $u$  se convierte en  $r$ , y sólo ha de estudiarse fijando el nivel de energía.

Un análisis completo de este proceso en los tres primeros niveles parte de los límites

$$\lim_{d \rightarrow 0} u = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = r \quad , \quad \lim_{d \rightarrow 0} v = 0 \quad , \quad \arccos \lim_{d \rightarrow 0} \frac{v}{d} = \arccos \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} = \arctan \frac{x_2}{x_1} = \varphi$$

y es como sigue:

- Comenzamos con el estado fundamental: si  $2Z = Z_1 + Z_2$  la función de onda del estado fundamental cuando  $d$  es suficientemente pequeña es:

$$\Psi_{01}(u, v) = \frac{1}{a_0} \left( C \left[ -8 \frac{d^2}{a_0^2} Z^2, -4 \frac{d^2}{a_0^2} Z^2, \arccos \frac{v}{d} \right] + iS \left[ -8 \frac{d^2}{a_0^2} Z^2, -4 \frac{d^2}{a_0^2} Z^2, \arccos \frac{v}{d} \right] \right) e^{-\frac{4}{a_0} Z u}$$

y se deduce por tanto que

$$\lim_{d \rightarrow 0} \Psi_{01}(u, v) = \frac{1}{a_0} (C[0, 0, \varphi] + iS[0, 0, \varphi]) e^{-\frac{4}{a_0} Z r} = \frac{1}{a_0 \sqrt{2}} e^{-\frac{4}{a_0} Z r}$$

que es la función de onda del estado fundamental  $\Psi_{00}(r, \varphi)$  de un átomo de hidrógeno en el plano de carga  $2Z$ . La relación de recurrencia (5.25) da esta solución con la elección:  $c_{0+} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ,  $C_{1+} = 0$ .

Tabla 5.4: Gráficas de  $a_0 F_{nm}(u)$  vs  $\frac{u}{a_0}$  para: Azul  $\frac{d}{a_0} = 0.001$ , Rojo  $\frac{d}{a_0} = 1$ , Verde  $\frac{d}{a_0} = 4$  (verde) y Magenta  $d \rightarrow 0$ .

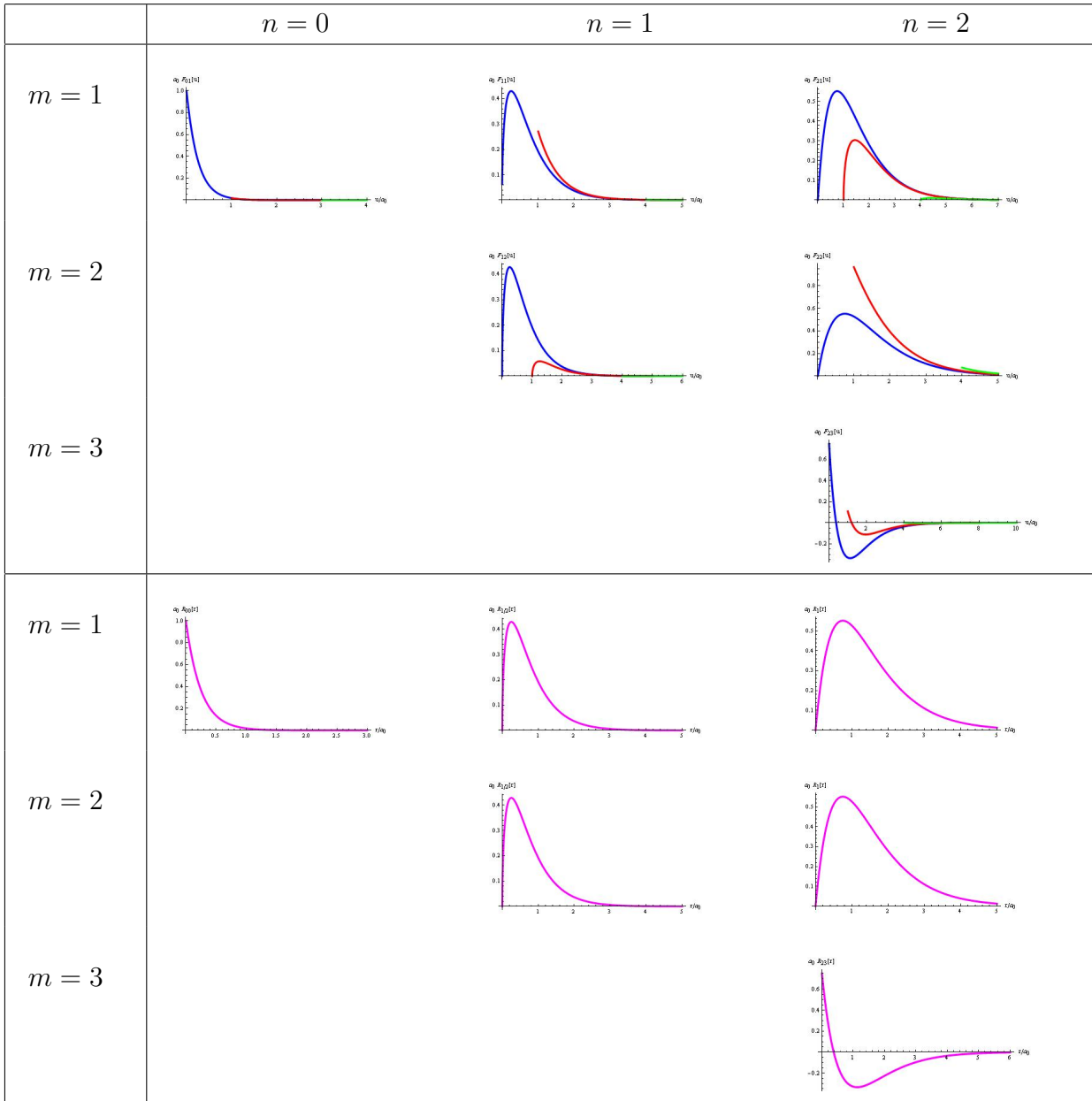


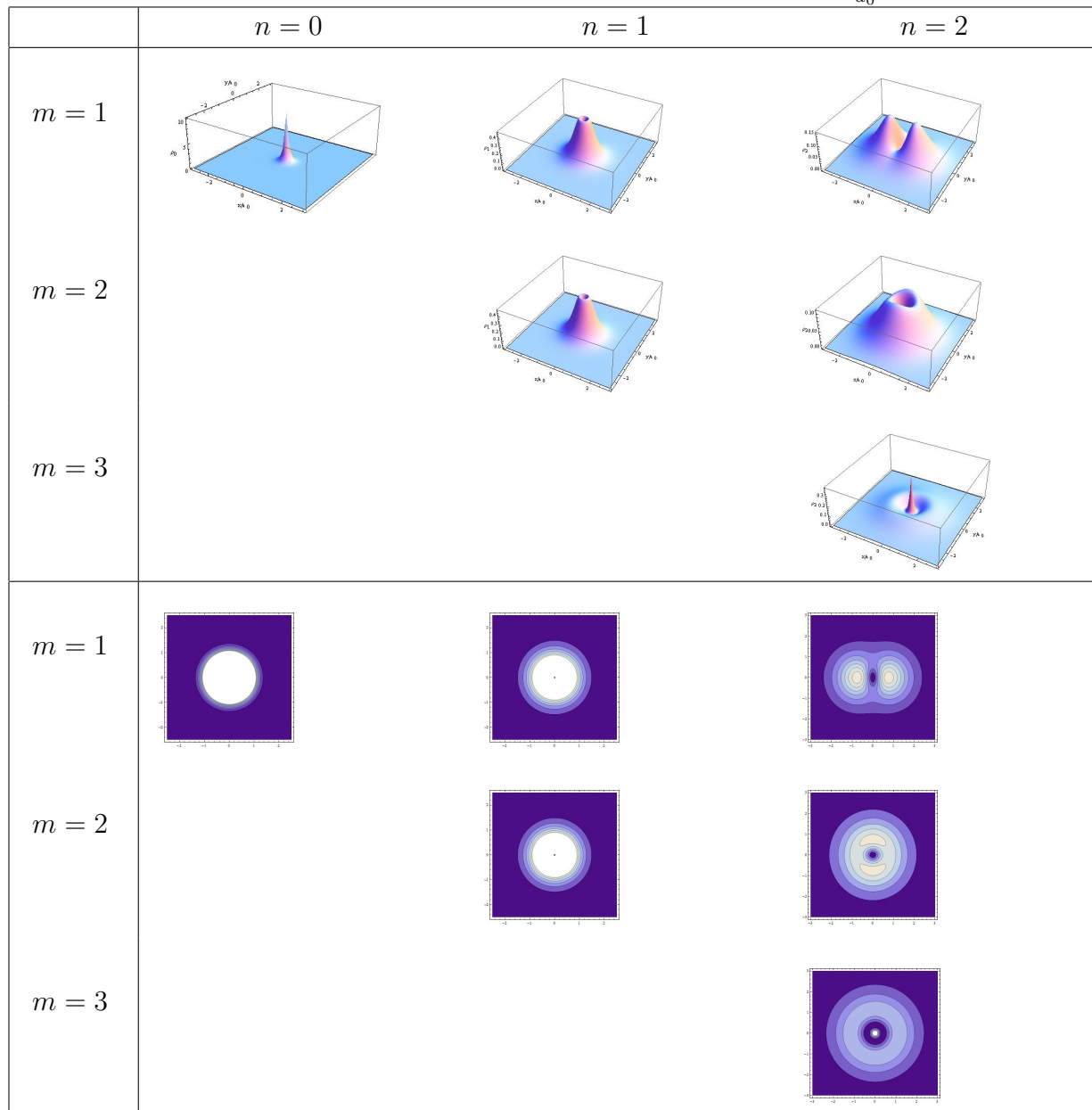
Tabla 5.5: Densidad de probabilidad y curvas de nivel para  $\frac{d}{a_0} = 0.001$ .

Tabla 5.6: Densidad de probabilidad y curvas de nivel para  $\frac{d}{a_0} = 1$ .

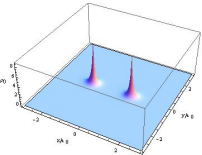
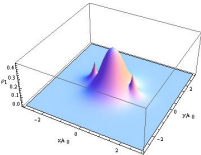
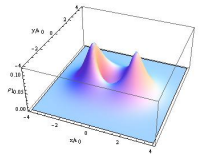
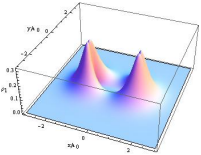
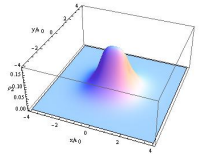
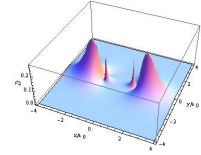
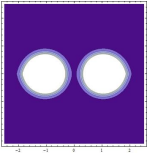
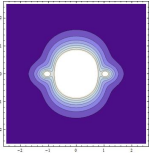
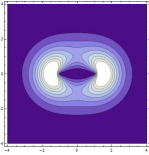
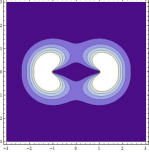
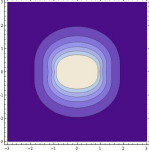
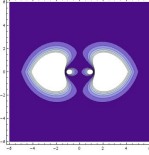
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$
$m = 1$			
$m = 2$			
$m = 3$			
$m = 1$			
$m = 2$			
$m = 3$			



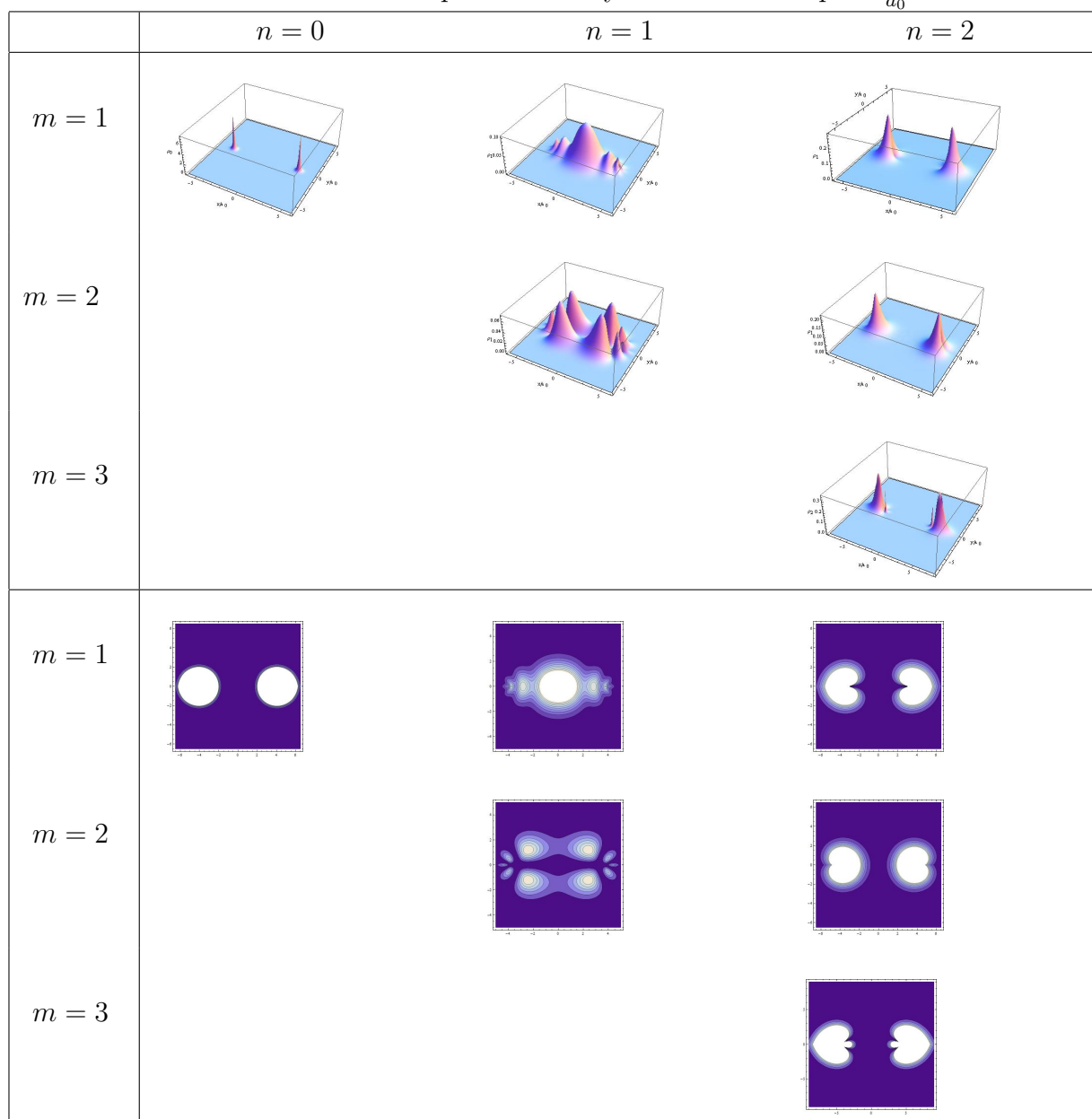
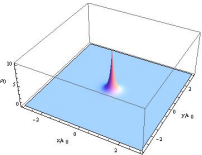
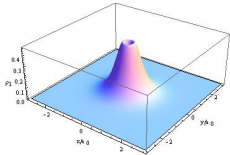
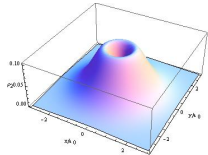
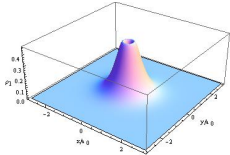
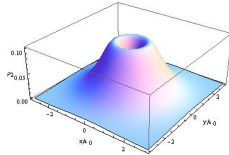
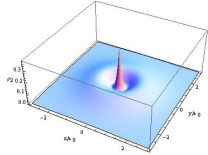
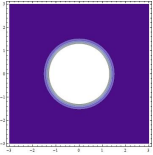
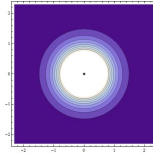
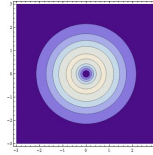
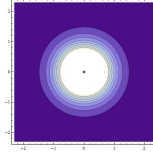
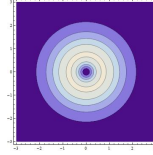
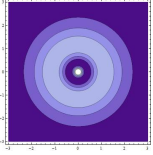
Tabla 5.7: Densidad de probabilidad y curvas de nivel para  $\frac{d}{a_0} = 4$ .

Tabla 5.8: Densidad de probabilidad y curvas de nivel para  $\frac{d}{a_0} \rightarrow 0$ .

	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$
$m = 1$			
$m = 2$			
$m = 3$			
$m = 1$			
$m = 2$			
$m = 3$			

- Cuando  $d$  es pequeño las dos funciones del doblete en el siguiente nivel de energía son de la forma

$$\begin{aligned}\Psi_{11}(u, v) &= \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} G_{11}(v) e^{-\frac{2}{a_0} Z u} \sqrt{2(u+d)} \\ G_{11}(v) &= C\left[\frac{1}{4} + 2\frac{d}{a_0} Z + 2\frac{d^2}{a_0^2} Z^2, -\frac{d^2}{a_0^2} Z^2, \arccos \frac{v}{d}\right] + iS\left[\frac{1}{4} + 2\frac{d}{a_0} Z + 2\frac{d^2}{a_0^2} Z^2, -\frac{d^2}{a_0^2} Z^2, \arccos \frac{v}{d}\right] \\ \Psi_{12}(u, v) &= \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} G_{12}(v) e^{-\frac{2}{a_0} Z u} \sqrt{2(u-d)} \\ G_{12}(v) &= C\left[\frac{1}{4} - 2\frac{d}{a_0} Z + 2\frac{d^2}{a_0^2} Z^2, -\frac{d^2}{a_0^2} Z^2, \arccos \frac{v}{d}\right] + iS\left[\frac{1}{4} - 2\frac{d}{a_0} Z + 2\frac{d^2}{a_0^2} Z^2, -\frac{d^2}{a_0^2} Z^2, \arccos \frac{v}{d}\right]\end{aligned}$$

Dado que  $C[a, 0, \varphi] = \cos\sqrt{a}\varphi$  y  $S[a, 0, \varphi] = \sin\sqrt{a}\varphi$  encontramos para  $d = 0$ :

$$\begin{aligned}\lim_{d \rightarrow 0} \Psi_{11}(u, v) &= \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} \left( C\left[\frac{1}{4}, 0, \varphi\right] + iS\left[\frac{1}{4}, 0, \varphi\right] \right) e^{-\frac{2}{a_0} Z r} \sqrt{2r} = \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{1}{2}\varphi} e^{-\frac{2}{a_0} Z r} \sqrt{2r} \\ \lim_{d \rightarrow 0} \Psi_{12}(u, v) &= \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} \left( C\left[\frac{1}{4}, 0, \varphi\right] + iS\left[\frac{1}{4}, 0, \varphi\right] \right) e^{-\frac{2}{a_0} Z r} \sqrt{2r} = \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} e^{-i\frac{1}{2}\varphi} e^{-\frac{2}{a_0} Z r} \sqrt{2r}\end{aligned}$$

donde se ha usado en la segunda función de onda:  $\frac{1}{4} = (-\frac{1}{2})^2$ . Resulta pues un nivel que no sobrevive en el límite pues las funciones de onda son bivaluadas y tienen un punto de ramificación en el origen.

Partiendo directamente de la ecuación de WH la relación de recurrencia a resolver es

$$c_k^{1m} = -\frac{1}{k(k-1)} \left( \frac{1}{4} - (k-2)^2 \right) c_{k-2}^{1m},$$

donde los superíndices recuerdan que obedecen a las series de potencias  $G_{1m} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k^{1m} z^k$ . Las dos soluciones básicas, que corresponden respectivamente a las condiciones iniciales  $c_{0+}^{1m} = 1, c_{1+}^{1m} = 0$  y  $c_{0-}^{1m} = 0, c_{1-}^{1m} = 1$ , son:

$$\begin{aligned}c_{2+}^{1m} = -\frac{1}{8}, \quad c_{4+}^{1m} = -\frac{5}{128}, \quad c_{6+}^{1+} = -\frac{21}{1024}, \dots, \quad G_{1m}^+(v) = \sum_{k=0}^{\infty} c_{2k+}^{1m} v^{2k} d^{-2k} \\ c_{3-}^{1m} = \frac{1}{8}, \quad c_{5-}^{1m} = \frac{7}{128}, \quad c_{7-}^{1m} = \frac{33}{1024}, \dots, \quad G_{1m}^-(v) = \sum_{k=0}^{\infty} c_{(2k+1)-}^{1m} v^{2k+1} d^{-(2k+1)}.\end{aligned}$$

Comparación con las expansiones en serie

$$\begin{aligned}C[1/4, 0, \arccos z] \pm iS[1/4, 0, \arccos z] = \\ = \frac{1 \pm i}{\sqrt{2}} + \frac{\left(\frac{1}{2} \mp \frac{i}{2}\right) z}{\sqrt{2}} - \frac{\left(\frac{1}{8} \pm \frac{i}{8}\right) z^2}{\sqrt{2}} + \frac{\left(\frac{1}{16} \mp \frac{i}{16}\right) z^3}{\sqrt{2}} - \frac{\left(\frac{5}{128} \pm \frac{5i}{128}\right) z^4}{\sqrt{2}} \\ + \frac{\left(\frac{7}{256} \mp \frac{7i}{256}\right) z^5}{\sqrt{2}} - \frac{\left(\frac{21}{1024} \mp \frac{21i}{1024}\right) z^6}{\sqrt{2}} + O(z^7),\end{aligned}$$

demuestra que las combinaciones lineales adecuadas son

$$G_{11}(v) = e^{-i\frac{\pi}{4}}G_{11}^+(v) + e^{i\frac{\pi}{4}}G_{11}^-(v) \quad , \quad G_{12}(v) = e^{i\frac{\pi}{4}}G_{12}^+(v) + e^{-i\frac{\pi}{4}}G_{12}^-(v) \quad .$$

- Si los dos centros están suficientemente próximos las tres funciones de onda del triplete en el segundo nivel excitado son:

$$\begin{aligned} \Psi_{21}(u, v) &= \frac{2}{a_0^2}G_{21}(v)e^{-\frac{4}{3a_0}Zu}\sqrt{u^2 - d^2} \\ G_{21}(v) &= C\left[1 - \frac{8d^2}{9a_0^2}Z^2, -\frac{4d^2}{9a_0^2}Z^2, \arccos\frac{v}{d}\right] + iS\left[1 - \frac{8d^2}{9a_0^2}Z^2, -\frac{4d^2}{9a_0^2}Z^2, \arccos\frac{v}{d}\right] \\ \Psi_{22}(u, v) &= \frac{1}{a_0^2}G_{22}(v)e^{-\frac{4}{3a_0}Zu}\left\{2u - \frac{3a_0}{8Z}\left(1 - \sqrt{1 + \frac{28d^2}{9a_0^2}Z^2}\right)\right\} \\ G_{22}(v) &= C\left[\frac{1}{2}\left(1 + \sqrt{1 + \frac{28d^2}{9a_0^2}Z^2}\right) - \frac{8d^2}{9a_0^2}Z^2, -\frac{4d^2}{9a_0^2}Z^2, \arccos\frac{v}{d}\right] + \\ &+ iS\left[\frac{1}{2}\left(1 + \sqrt{1 + \frac{28d^2}{9a_0^2}Z^2}\right) - \frac{8d^2}{9a_0^2}Z^2, -\frac{4d^2}{9a_0^2}Z^2, \arccos\frac{v}{d}\right] \\ \Psi_{23}(u, v) &= \frac{1}{a_0^2}G_{22}(v)e^{-\frac{4}{3a_0}Zu}\left\{2u - \frac{3a_0}{8Z}\left(1 + \sqrt{1 + \frac{28d^2}{9a_0^2}Z^2}\right)\right\} \\ G_{23}(v) &= C\left[\frac{1}{2}\left(1 - \sqrt{1 + \frac{28d^2}{9a_0^2}Z^2}\right) - \frac{8d^2}{9a_0^2}Z^2, -\frac{4d^2}{9a_0^2}Z^2, \arccos\frac{v}{d}\right] + \\ &+ iS\left[\frac{1}{2}\left(1 - \sqrt{1 + \frac{28d^2}{9a_0^2}Z^2}\right) - \frac{8d^2}{9a_0^2}Z^2, -\frac{4d^2}{9a_0^2}Z^2, \arccos\frac{v}{d}\right] \end{aligned}$$

El colapso en un centro por tanto

$$\begin{aligned} \lim_{d \rightarrow 0} \Psi_{21}(u, v) &= \frac{2}{a_0^2}re^{-\frac{4}{3a_0}Zr}(C[1, 0, \varphi] + iS[1, 0, \varphi]) = \frac{2}{a_0^2}re^{-\frac{4}{3a_0}Zr}e^{i\varphi} \\ \lim_{d \rightarrow 0} \Psi_{22}(u, v) &= \frac{2}{a_0^2}re^{-\frac{4}{3a_0}Zr}(C[1, 0, \varphi] + iS[1, 0, \varphi]) = \frac{2}{a_0^2}re^{-\frac{4}{3a_0}Zr}e^{-i\varphi} \\ \lim_{d \rightarrow 0} \Psi_{23}(u, v) &= \frac{2}{a_0^2}\left(r - \frac{3}{16Z}a_0\right)e^{-\frac{4}{3a_0}Zr}(C[0, 0, \varphi] + iS[0, 0, \varphi]) = \frac{\sqrt{2}}{a_0^2}\left(r - \frac{3}{16Z}a_0\right)e^{-\frac{4}{3a_0}Zr} \end{aligned}$$

conduce a las funciones de onda del triplete, en el sentido de la simetría dinámica  $\mathbb{SO}(3)$ , del átomo de hidrógeno en el plano. Otra vez se ha tomado el signo negativo de la raíz cuadrada en la segunda función de onda.

La relación de recurrencia (5.25) para los coeficientes  $c_k^{23}$  reduce a :

$$c_k^{23} = \frac{(k-2)^2}{k(k-1)}c_{k-2}^{23} \quad .$$

Comparación con  $C[0, 0, \varphi] + iS[0, 0, \varphi] = \frac{1}{\sqrt{2}}$  demuestra que la solución pertinente de esta última relación de recurrencia es:  $c_0^{23} = 1, c_k^{23} = 0, \forall k \geq 1$ .

En los otros dos casos los coeficientes  $c_k^{2m}$ ,  $m = 1, 2$  satisfacen la misma recurrencia:

$$c_k^{2m} = \frac{1}{k(k-1)} (k^2 - 4k + 3) c_{k-2}^{2m} \quad .$$

Las soluciones básicas son pues

$$\begin{aligned} c_{0+}^{2m} = 1, \quad c_{1+}^{2m} = 0, \quad c_{2+}^{2m} = -\frac{1}{2}, \quad c_{4+}^{2m} = -\frac{1}{8}, \quad c_{6+}^{2m} = -\frac{1}{16}, \quad c_{8+}^{2m} = -\frac{5}{128} \dots \\ c_{0-}^{2m} = 0, \quad c_{1-}^{2m} = 1, \quad c_{k-}^{2m} = 0, \quad \forall k \geq 2, \dots \\ G_{2m}^+(v) = \sum_{k=0}^{\infty} c_{(2k)+}^{2m} v^{2k} d^{-2k} \quad , \quad G_{2m}^-(v) = \frac{v}{d} \quad . \end{aligned}$$

La comparación con los desarrollos en serie

$$C[1, 0, \arccos z \pm iS[1, 0, \arccos z]] = \pm i + z \mp \frac{iz^2}{2} \mp \frac{iz^4}{8} \mp \frac{iz^6}{16} \mp \frac{5iz^8}{128} \mp \frac{7iz^{10}}{256} + O(z^{11})$$

determina las combinaciones

$$G_{21}(v) = iG_{21}^+(v) + G_{21}^-(v) \quad , \quad G_{22}(v) = -iG_{22}^+(v) + G_{22}^-(v)$$

como aquellas que van respectivamente a  $\exp[i\varphi]$  y  $\exp[-i\varphi]$  en el límite  $d = 0$ .

#### 5.4.4. Fuga de uno de los dos centros al infinito

El Hamiltoniano de dos centros Coulombianos en coordenadas elípticas trigonométricas

$$x_1 = d \cosh \xi \cos \eta, \quad x_2 = d \sinh \xi \sin \eta \quad \xi \in [0, +\infty), \quad \eta \in [-\pi, \pi]$$

es

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{(Z_1 + Z_2)\alpha \cosh \xi}{d(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} - \frac{(Z_1 - Z_2)\alpha \cos \eta}{d(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \\ \Delta &= \frac{1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left( \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right) \end{aligned}$$

Una doble operación, una traslación del origen en el eje  $x_1$  primero,  $x = x_1 - d$ ,  $y = x_2$ , y después enviar  $d$  a infinito lleva del sistema de coordenadas elípticas a las parabólicas:

$$\begin{aligned} \lim_{d \rightarrow +\infty} \sqrt{d} \sinh d\xi = \xi_1, \quad \lim_{d \rightarrow +\infty} \sin \eta = \xi_2 \quad ; \quad \xi_1 \in (-\infty, \infty), \quad \xi_2 \in [0, +\infty) \\ \Rightarrow x = \lim_{d \rightarrow \infty} (d \cosh \xi \cos \eta - d) = \frac{1}{2}(\xi_1^2 - \xi_2^2) \quad , \quad y = \lim_{d \rightarrow \infty} d \sinh \xi \sin \eta = \xi_1 \xi_2. \end{aligned}$$

En este proceso las distancias a los centros sufren distinto destino

$$\lim_{d \rightarrow +\infty} r_1 = +\sqrt{x^2 + y^2} = \frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{2} \quad , \quad \lim_{d \rightarrow +\infty} r_2 = \lim_{d \rightarrow +\infty} (2d) = +\infty$$

de modo que

$$\lim_{d \rightarrow +\infty} \frac{1}{d^2(\sinh^2 \xi + \sin^2 \eta)} = \frac{1}{\xi^2 + \xi_2^2} \lim_{d \rightarrow +\infty} \frac{1}{d} \quad .$$

El cambio inducido sobre las derivadas parciales compensa esta divergencia

$$\begin{aligned} \lim_{d \rightarrow +\infty} \frac{\partial}{\partial \xi} &= \frac{\partial}{\partial \xi_1} \lim_{d \rightarrow +\infty} \sqrt{\xi_1 + d} \quad , \quad \lim_{d \rightarrow +\infty} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} = \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} \lim_{d \rightarrow +\infty} d \\ \lim_{d \rightarrow +\infty} \frac{\partial}{\partial \eta} &= \frac{\partial}{\partial \xi_2} \lim_{d \rightarrow +\infty} \sqrt{d - \xi_2} \quad , \quad \lim_{d \rightarrow +\infty} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} = \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} \lim_{d \rightarrow +\infty} d \end{aligned}$$

Todo ello permite determinar el Hamiltoniano cuando uno de los centros se escapa al infinito y el otro se sitúa en el origen:

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{2\alpha Z_1}{\xi_1^2 + \xi_2^2} \quad , \quad \Delta = \frac{1}{\xi_1^2 + \xi_2^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} \right)$$

precisamente el Hamiltoniano del problema de Kepler/Coulomb para un centro de carga  $\alpha Z_1$ , expresado en coordenadas parabólicas. El segundo operador invariante del problema de dos centros en coordenadas elípticas trigonométricas se escribe como:

$$\begin{aligned} \hat{I}_2 &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left( \sinh^2 \xi \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - \sin^2 \eta \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right) \\ &+ \frac{\mu \alpha d}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left( (Z_1 + Z_2) \sin^2 \eta \cosh \xi - (Z_1 - Z_2) \sinh^2 \xi \cos \eta \right) \quad , \end{aligned}$$

expresión que nos permite tomar el límite de este operador cuando un centro se escapa a infinito y el otro migra al origen usando la información anterior:

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \frac{\hat{I}_2}{\mu \alpha d} = -\frac{\hbar^2}{2\mu \alpha} \cdot \frac{1}{\xi_1^2 + \xi_2^2} \cdot \left( \xi_1^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} - \xi_2^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} \right) + \frac{\xi_2^2 - \xi_1^2}{\xi_1^2 + \xi_2^2} Z_1 + Z_2 = \hat{A}_1 + Z_2$$

donde  $\hat{A}_1$  es la componente del vector de Runge-Lenz en coordenadas parabólicas sobre el eje  $x_1$  donde están colocados los centros.

Hemos pues de concluir que el problema de dos centros de fuerza Newtonianos es un sistema integrable muy especial que tiende a un sistema sobreintegrable, el problema de un solo centro, en dos límites distintos asociados con la degeneración de las coordenadas elípticas a polares en el primer proces y a parabólicas en el segundo. De la separabilidad del problema de Coulomb en polares hereda toda una serie discreta de autovalores mientras que el invariante

del problema de dos centros degenera en el operador de momento angular al cuadrado. La separabilidad del problema de un centro por otro lado en parabólicas está relacionada con que el segundo invariante deviene una componente del vector de Runge-Lenz cuando un centro se escapa a infinito. Esto explica la degeneración de las autofunciones hidrogenoideas que obedece a la simetría dinámica  $\mathbb{SO}(3)$ . En este segundo límite hay una sutileza a tener en cuenta. Lo que se relaciona con el vector de Runge-Lenz es  $\hat{I}_2$  no la constante de separación en elípticas:  $\hat{I} = -2\mu d^2 \hat{H} - 2\hat{I}_2$  que estrictamente deviene infinita a causa del término proporcional a la energía. Ello significa que la constante de separación en parabólicas ha de ser renormalizada mediante la traslación al origen del otro centro. Otro sistema integrable que tiene características similares, que podríamos denominar problema de Landau para un par electrón-positrón, ha sido tratado en la Referencia [71]. También exhibe dos límites donde este sistema es sobreintegrable, si bien en este caso en uno de los límites se encuentra un oscilador armónico plano isótropo, en el otro el problema de Coulomb entre partícula-anti-partícula.

## 5.5. El problema de Euler-Coulomb clásico y cuántico en tres dimensiones

La acción clásica para el problema de dos centros de fuerza fijos en tres dimensiones es

$$S = \int dt \left[ \frac{1}{2} \mu \left( \frac{dx_1}{dt} \frac{dx_1}{dt} + \frac{dx_2}{dt} \frac{dx_2}{dt} + \frac{dx_3}{dt} \frac{dx_3}{dt} \right) - \frac{\alpha_1}{r_1} - \frac{\alpha_2}{r_2} \right],$$

donde  $\alpha_1, \alpha_2$  son las intensidades de los centros,  $r_1, r_2$  son las distancias de cada centro a la partícula de masa  $\mu$ ,

$$r_1 = \sqrt{(x_1 - d)^2 + x_2^2 + x_3^2} \quad , \quad r_2 = \sqrt{(x_1 + d)^2 + x_2^2 + x_3^2}$$

El Hamiltoniano que gobierna la dinámica de la partícula es:

$$H = \frac{1}{2\mu} (p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) - \frac{\alpha_1}{r_1} - \frac{\alpha_2}{r_2}.$$

Se trata de un sistema integrable ya que existen dos invariantes en involución con el Hamiltoniano que son:

$$I_2 = \frac{1}{2} [L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 - d^2 (p_2^2 + p_3^2)] + \left[ \frac{\mu\alpha_1 d(d - x_1)}{r_1} + \frac{\mu\alpha_2 d(d + x_1)}{r_2} \right]$$

y la componente del momento angular correspondiente al eje en el que se encuentran los centros de fuerza  $L_1$ .  $\{H, L_1\} = \{H, I_2\} = \{I_2, L_1\} = 0$ .

Consideremos ahora el sistema cuántico formado por dos centros Coulombianos cuyo Hamiltoniano es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right] - \frac{\alpha_1}{r_1} - \frac{\alpha_2}{r_2}$$

En este caso  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  son:  $\alpha_1 = Z_1\alpha$ ,  $\alpha_2 = Z_2\alpha$ ,  $Z_1 \geq Z_2 \in \mathbb{N}^*$  y  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi}$ . El parámetro adimensional que relaciona la distancia internuclear  $R = 2d$  y el radio de Bohr es de nuevo:  $\bar{\hbar}^2 = \frac{\hbar^2}{\mu\alpha d} = \frac{a_0}{d}$ .

La integrabilidad de este problema cuántico está garantizada ya que

$$[\hat{H}, \hat{I}_2] = [\hat{H}, \hat{L}_1] = [\hat{I}_2, \hat{L}_1] = 0$$

siendo el operador asociado al segundo invariante:

$$\hat{I}_2 = \frac{1}{2} \left[ \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 - d^2 (\hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2) \right] + \mu d \alpha \left[ \frac{Z_1(d - x_1)}{r_1} + \frac{Z_2(d + x_1)}{r_2} \right]$$

donde  $\hat{L}_i = -i\hbar\epsilon_{ijk}x_j\frac{\partial}{\partial x_k}$ ,  $i = 1, 2, 3$  son las componentes del momento angular orbital.



### 5.5.1. Separabilidad de la ecuación de Schrödinger en coordenadas elípticas prolatas

La ecuación de Schrödinger para el problema de Euler tridimensional es separable en coordenadas elípticas prolatas que se obtienen por rotación de las coordenadas elípticas en el plano alrededor del eje en el que se encuentran los centros de fuerza. En la versión de “Euler” las coordenadas elípticas prolatas son:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{d} uv \\ x_2 &= \frac{1}{d} \sqrt{u^2 - d^2} \sqrt{d^2 - v^2} \cos \varphi \\ x_3 &= \frac{1}{d} \sqrt{u^2 - d^2} \sqrt{d^2 - v^2} \sin \varphi \end{aligned} \quad (5.26)$$

donde  $u \geq d$ ,  $-d \leq v \leq d$  y  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , y el cambio inverso,

$$u = \frac{r_1 + r_2}{2} \quad , \quad v = \frac{r_2 - r_1}{2} \quad , \quad \varphi = \arctan \frac{x_3}{x_2}$$

En estas coordenadas el Laplaciano y el potencial vienen dados por:

$$\Delta = \frac{u^2 - d^2}{u^2 - v^2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{2u}{u^2 - v^2} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{d^2 - v^2}{u^2 - v^2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} - \frac{2v}{u^2 - v^2} \frac{\partial}{\partial v} + \frac{d^2}{(u^2 - d^2)(d^2 - v^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$V(u, v) = -\frac{\alpha}{u^2 - v^2} [(Z_1 + Z_2)u + (Z_1 - Z_2)v]$$

El operador Hamiltoniano es, por tanto,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{-\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{u^2 - v^2} \left( \frac{\partial}{\partial u} \left( (u^2 - d^2) \frac{\partial}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left( (d^2 - v^2) \frac{\partial}{\partial v} \right) \right) + \frac{d^2}{(u^2 - d^2)(d^2 - v^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \\ &\quad - \frac{\alpha}{u^2 - v^2} ((Z_1 + Z_2)u + (Z_1 - Z_2)v) \end{aligned}$$

Suponiendo que  $\Psi(u, v, \varphi) = \Phi(u, v) f(\varphi)$  el problema espectral

$$\hat{H} \Psi(u, v, \varphi) = E \Psi(u, v, \varphi) \quad , \quad E < 0$$

se convierte en

$$\frac{d^2 f}{d\varphi^2} = -\frac{2\mu}{\hbar^2} I f(\varphi) = -m^2 f(\varphi) \quad (5.27)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial}{\partial u} \left( (u^2 - d^2) \frac{\partial}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left( (d^2 - v^2) \frac{\partial}{\partial v} \right) \Phi(u, v) +$$

$$+(u^2 - v^2) \left( V(u, v) - E + \frac{I d^2}{2\mu(u^2 - d^2)(d^2 - v^2)} \right) \Phi(u, v) = 0 \quad (5.28)$$

donde  $I$  es la constante de separación.

Las soluciones con sentido físico, i.e. funciones de onda univaluadas, de la ecuación (5.27) son de la forma:

$$f(\varphi) = C_1 e^{im\varphi} + C_2 e^{-im\varphi} \quad , \quad \frac{2\mu}{\hbar^2} I = m^2 \quad , \quad m \in \mathbb{Z} \quad (5.29)$$

Por tanto, la ecuación (5.28) reduce a la ecuación en derivadas parciales

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\partial}{\partial u} \left( (u^2 - d^2) \frac{\partial}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left( (d^2 - v^2) \frac{\partial}{\partial v} \right) \right] \Phi(u, v) + \\ &+(u^2 - v^2) \left( V(u, v) - E + \frac{\hbar^2 m^2 d^2}{2\mu(u^2 - d^2)(d^2 - v^2)} \right) \Phi(u, v) = 0 \end{aligned} \quad (5.30)$$

El ansatz  $\Phi(u, v) = F(u) G(v)$  convierte el problema espectral (5.30) en separable

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d}{du} \left[ (u^2 - d^2) \frac{dF(u)}{du} \right] + \left[ -\alpha(Z_1 + Z_2)u - Eu^2 + \frac{m^2 \hbar^2 d^2}{2\mu(u^2 - d^2)} - \frac{K}{2\mu} \right] F(u) = 0 \quad (5.31)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d}{dv} \left[ (d^2 - v^2) \frac{dG(v)}{dv} \right] + \left[ -\alpha(Z_1 - Z_2)v + Ev^2 + \frac{m^2 \hbar^2 d^2}{2\mu(d^2 - v^2)} + \frac{K}{2\mu} \right] G(v) = 0 \quad (5.32)$$

donde  $K$  es la nueva constante de separación. Como es usual, llamaremos a (5.31) la ecuación “radial” y a (5.32) la ecuación “angular”.

La constante  $K$  de separación puede interpretarse como el autovalor del operador  $\hat{K} = -2\mu d^2 \hat{H} - 2\hat{I}_2$  siendo

$$\hat{H} = \frac{1}{u^2 - v^2} [\hat{h}_u + \hat{h}_v] \quad , \quad \hat{I}_2 = \frac{\mu}{u^2 - v^2} [(u^2 - d^2)\hat{h}_v - (d^2 - v^2)\hat{h}_u]$$

donde

$$\begin{aligned} \hat{h}_u &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial}{\partial u} \left[ (u^2 - d^2) \frac{\partial}{\partial u} \right] - \alpha(Z_1 + Z_2)u + \frac{\hbar^2 m^2 d^2}{2\mu(u^2 - d^2)} \\ \hat{h}_v &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial}{\partial v} \left[ (d^2 - v^2) \frac{\partial}{\partial v} \right] - \alpha(Z_1 - Z_2)v + \frac{\hbar^2 m^2 d^2}{2\mu(d^2 - v^2)} \end{aligned}$$

### 5.5.2. Funciones de onda estacionarias: soluciones de las ecuaciones esferoidales generalizadas “radial” y “angular”

Las ecuaciones radial (5.31) y angular (5.32) puede escribirse de forma más sintética, ver [?], en términos de las variables y parámetros adimensionales siguientes:

$$\xi = \frac{u}{d} \quad , \quad 1 \leq \xi < \infty \quad , \quad \eta = \frac{v}{d} \quad , \quad -1 \leq \eta \leq 1$$

$$\Lambda = \frac{2\mu\alpha d(Z_1 + Z_2)}{\hbar^2} \equiv \frac{2d}{a_0}(Z_1 + Z_2) \quad , \quad \Theta = \frac{2\mu\alpha d(Z_1 - Z_2)}{\hbar^2} \equiv \frac{2d}{a_0}(Z_1 - Z_2),$$

$$e = \frac{2\mu E d^2}{\hbar^2} \quad , \quad \lambda = \frac{K}{\hbar^2} + e ;$$

$$(\xi^2 - 1) \frac{d^2 F(\xi)}{d\xi^2} + 2\xi \frac{dF(\xi)}{d\xi} + \left[ e(\xi^2 - 1) + \Lambda\xi + \lambda - \frac{m^2}{(\xi^2 - 1)} \right] F(\xi) = 0 . \quad (5.33)$$

$$(1 - \eta^2) \frac{d^2 G(\eta)}{d\eta^2} - 2\eta \frac{dG(\eta)}{d\eta} + \left[ e(1 - \eta^2) + \Theta\eta - \lambda - \frac{m^2}{(1 - \eta^2)} \right] G(\eta) = 0 . \quad (5.34)$$

Ambas ecuaciones son casos particulares de la ecuación diferencial esferoidal generalizada. Resolverlas simultáneamente es un problema muy complicado ya que están acopladas en los parámetros  $e$  y  $\lambda$ , que dependen de la energía y del autovalor del segundo invariante del sistema.

Siguiendo el planteamiento de Demkov en [65], vamos a suponer que la energía para este sistema coincide con la del problema equivalente de Coulomb (un centro) con una carga igual a la suma de las cargas de los dos centros,  $\alpha(Z_1 + Z_2)$ , es decir,

$$E_{n_1} = -\frac{\mu\alpha^2(Z_1 + Z_2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{2n_1^2} \equiv -\frac{(Z_1 + Z_2)^2}{n_1^2} \text{ Ry} \quad , \quad n_1 = 0, 1, 2, \dots \quad (5.35)$$

para la ecuación radial, y para la ecuación angular, consideramos una energía que depende de la diferencia de las cargas de los dos centros,  $\alpha(Z_1 - Z_2)$ , es decir,

$$E_{n_2} = -\frac{\mu\alpha^2(Z_1 - Z_2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{2n_2^2} \equiv -\frac{(Z_1 - Z_2)^2}{n_2^2} \text{ Ry} \quad , \quad n_2 = 0, 1, 2, \dots \quad (5.36)$$

Estas ecuaciones admiten soluciones “finitas”. Sustituyamos  $F(\xi)$  y  $G(\eta)$  en (5.33) y (5.34) por:

$$F(\xi) = (\xi^2 - 1)^{\frac{m}{2}} e^{-\frac{\Lambda}{2n_1}\xi} u(\xi)$$

$$G(\eta) = (1 - \eta^2)^{\frac{m}{2}} e^{-\frac{\Theta}{2n_2}\eta} u(\eta)$$

las ecuaciones diferenciales ordinarias que resultan para  $u(\xi)$  y  $u(\eta)$  son

$$(\xi^2 - 1) u''(\xi) + \left( -\frac{\Lambda}{n_1}(\xi^2 - 1) + (2m + 1)\xi \right) u'(\xi) + \left( \frac{\Lambda(n_1 - m - 1)}{n_1}(\xi + 1) - q \right) u(\xi) = 0 \quad (5.37)$$

$$(\eta^2 - 1) u''(\eta) + \left( \frac{\Theta}{n_2}(\eta^2 - 1) + (2m + 1)\eta \right) u'(\eta) + \left( -\frac{\Theta(n_2 - m - 1)}{n_2}(\eta + 1) - \bar{q} \right) u(\eta) = 0 \quad (5.38)$$

donde los parámetros  $q$  y  $\bar{q}$  se definen de la forma,

$$q = \Lambda \frac{n_1 - m - 1}{n_1} - \lambda - m(m + 1) \quad , \quad \bar{q} = -\Theta \frac{n_2 - m - 1}{n_2} - \lambda - m(m + 1)$$

Aplicamos el método de Frobenius a estas ecuaciones y consideramos una serie de potencias, en torno a un punto singular regular, de la forma:

$$u(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k P_k(q)}{2^k k! (m+1)_k} (\xi + 1)^k \quad (5.39)$$

$$u(\eta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k P_k(\bar{q})}{2^k k! (m+1)_k} (\eta + 1)^k \quad (5.40)$$

donde  $(m+1)_k$  es el símbolo de Pochhammer:  $(m+1)_k = \frac{\Gamma(m+1+k)}{\Gamma(m+1)} = (m+1)(m+2) \dots (m+k)$ . Los polinomios  $P_k(q)$  y  $P_k(\bar{q})$  de grado  $k$  en los parámetros  $q$  y  $\bar{q}$  son mónicos. Tomando  $P_0(q) = 1$ ,  $P_0(\bar{q}) = 1$  y sustituyendo (5.39) en la ecuación (5.37) así como (5.40) en la ecuación (5.38) se obtienen las relaciones de recurrencia a tres términos:

$$P_{k+1}(q) = \left[ q - k \left\{ 2(2m + 1) + \frac{2\Lambda}{n_1} + k - 1 \right\} \right] P_k(q) - k \left( \frac{-2\Lambda}{n_1} \right) (n_1 - m - k) (m + k) P_{k-1}(q) \quad (5.41)$$

$$P_{k+1}(\bar{q}) = \left[ \bar{q} - k \left\{ 2(2m + 1) - \frac{2\Theta}{n_2} + k - 1 \right\} \right] P_k(\bar{q}) - k \left( \frac{2\Theta}{n_2} \right) (n_2 - m - k) (m + k) P_{k-1}(\bar{q}) \quad (5.42)$$

donde  $k \geq 1$ ,  $P_1(q) = q$  y  $P_1(\bar{q}) = \bar{q}$ .

En ambas recurrencias se deduce fácilmente que para  $k = n_1 - m$  o bien  $k = n_2 - m$  llegamos a una expresión a dos términos:

$$P_{n_1-m+1}(q) = \left[ q - (n_1 - m) \left\{ 2(2m + 1) + \frac{2\Lambda}{n_1} + n_1 - m - 1 \right\} \right] P_{n_1-m}(q)$$

$$P_{n_2-m+1}(\bar{q}) = \left[ \bar{q} - (n_1 - m) \left\{ 2(2m + 1) - \frac{2\Theta}{n_2} + n_2 - m - 1 \right\} \right] P_{n_2-m}(\bar{q})$$

de tal forma que si elegimos  $q$  y  $\bar{q}$  como una de las raíces de los polinomios  $P_{n_1-m}(q)$  y  $P_{n_2-m}(\bar{q})$  respectivamente, es decir,  $q_j, j = m, m+1, \dots, n_1-1$  y  $\bar{q}'_{j'}, j' = m, m+1, \dots, n_2-1$ , resulta que:

$$\begin{aligned} 0 &= P_{n_1-m}(q) = P_{n_1-m+1}(q) = P_{n_1-m+2}(q) = \dots \\ 0 &= P_{n_2-m}(\bar{q}) = P_{n_2-m+1}(\bar{q}) = \dots = P_{n_2-m+3}(\bar{q}) = \dots \end{aligned}$$

y, por tanto, ambas series truncan a un polinomio de grado  $n_1 - m - 1$  y  $n_2 - m - 1$ , respectivamente.

En los dos casos que estamos estudiando, las ecuaciones radial y angular, resulta:

- Si en la ecuación radial elegimos soluciones cuya energía es

$$E_{n_1} = -\frac{(Z_1 + Z_2)^2}{n_1^2} \text{ Ry}, \quad n_1 = 1, 2, 3, \dots$$

para cada valor de  $m$ ,  $m > 0$ , existen  $(n_1 - m)$  soluciones “finitas” que caracterizaremos con un entero  $l$ , tal que  $l = m, m+1, \dots, n_1-1$ . Estas soluciones son degeneradas en la energía pero les corresponde un autovalor del segundo invariante de la forma:

$$K_{n_1lm} = \hbar^2 \left( -q_{n_1lm} + \Lambda \frac{n_1 - m - 1}{n_1} + \frac{\Lambda^2}{4n_1^2} - m(m+1) \right)$$

donde  $q_{n_1lm}$  es una de las  $(n_1 - m)$  raíces del polinomio  $P_{n_1-m}(q)$ . La función de onda “finita” para la parte radial es, por tanto,

$$F_{n_1lm}(\xi) = (\xi^2 - 1)^{\frac{m}{2}} e^{-\frac{\Lambda}{2n_1}\xi} \sum_{k=0}^{n_1-m-1} \frac{(-1)^k P_k(q_{n_1lm})}{2^k k! (m+1)_k} (\xi + 1)^k$$

- Por otro lado, para la ecuación angular buscamos soluciones con una energía:

$$E_{n_2} = -\frac{(Z_1 - Z_2)^2}{n_2^2} \text{ Ry}, \quad n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

de manera que para cada valor de  $m$ ,  $m > 0$ , existen  $(n_2 - m)$  soluciones “finitas” que podemos caracterizar de nuevo por un entero  $l$ ,  $l = m, m+1, \dots, n_2-1$ . Estas soluciones están degeneradas en la energía pero ahora el autovalor del operador de simetría es:

$$K_{n_2lm} = \hbar^2 \left( -\bar{q}_{n_2lm} - \Theta \frac{n_2 - m - 1}{n_2} + \frac{\Theta^2}{4n_2^2} - m(m+1) \right)$$

$\bar{q}_{n_2lm}$  es una de las  $(n_2 - m)$  raíces del polinomio  $P_{n_2-m}(\bar{q})$ . La función de onda “finita” para la parte angular es:

$$G_{n_2lm}(\eta) = (1 - \eta^2)^{\frac{m}{2}} e^{\frac{\Theta}{2n_2}\eta} \sum_{k=0}^{n_2-m-1} \frac{(-1)^k P_k(\bar{q}_{n_2lm})}{2^k k! (m+1)_k} (\eta + 1)^k$$

Como se puede observar en el problema tridimensional, a diferencia de lo que sucede en el plano, las dos ecuaciones radial y angular son idénticas. Resolviendo una de ellas se pueden obtener las soluciones de la otra simplemente intercambiando las variables  $\xi$ ,  $\eta$ , y  $\Lambda$  por  $-\Theta$ , es decir,  $(Z_1 + Z_2)$  por  $(Z_2 - Z_1)$ .

### 5.5.3. Soluciones “finitas” de las ecuaciones radial y angular para los niveles más bajos de energía

Procederemos a continuación a identificar las soluciones polinómicas que determinan las funciones de onda de Demkov para los niveles de energía más bajos.

- Soluciones de la ecuación radial para  $n_1 = 1, 2, 3$ : Autovalor de la energía, autovalor del segundo invariante y funciones de onda “finitas”.
- Para  $n_1 = 1$  la energía es  $E_1 = -(Z_1 + Z_2)^2 \text{ Ry}$ . La raíz del polinomio  $P_1(q)$  es trivial:

$$q_{100} = 0 \Rightarrow K_{100} = \hbar^2 \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2$$

y tenemos un único estado con  $m = 0$  y  $l = 0$  cuya función de onda es:

$$F_{100}(\xi) = e^{-\frac{d}{a_0}(Z_1+Z_2)\xi}$$

- En el siguiente nivel  $n_1 = 2$ ,  $E_2 = -\frac{(Z_1+Z_2)^2}{4} \text{ Ry}$ , vamos a obtener tres soluciones finitas: dos para  $m = 0$  y una para  $m = 1$ , que caracterizaremos por  $l = 0, 1$  y  $l = 1$  respectivamente. En el primer caso si  $m = 0$  debemos calcular las raíces del polinomio  $P_2(q)$ , es decir,

$$q_{200} = \frac{1}{2} \left( 2 + \Lambda - \sqrt{4 + \Lambda^2} \right), \quad q_{210} = \frac{1}{2} \left( 2 + \Lambda + \sqrt{4 + \Lambda^2} \right)$$

Y, por tanto, el autovalor del segundo invariante será:

$$\begin{cases} K_{200} = \hbar^2 \left[ -1 + \frac{d^2}{4a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2 + \sqrt{1 + \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2} \right] \\ K_{210} = \hbar^2 \left[ -1 + \frac{d^2}{4a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2 - \sqrt{1 + \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2} \right] \end{cases}$$

Finalmente, las funciones de onda radiales “finitas” son:

$$F_{200}(\xi) = \left( -\frac{q_{200}}{2} \right) \left( \xi + \frac{-2 - \sqrt{4 + \Lambda^2}}{\Lambda} \right) e^{-\frac{d}{2a_0}(Z_1+Z_2)\xi}$$

$$F_{210}(\xi) = \left(-\frac{q_{210}}{2}\right) \left(\xi + \frac{-2 + \sqrt{4 + \Lambda^2}}{\Lambda}\right) e^{-\frac{d}{2a_0}(Z_1+Z_2)\xi}$$

Si buscamos la solución con  $m = 1$  de  $P_1(q) = 0$  se obtiene

$$K_{211} = \hbar^2 \left[-2 + \frac{d^2}{4a_0^2}(Z_1 + Z_2)^2\right]$$

que corresponde a:

$$F_{211}(\xi) = \sqrt{\xi^2 - 1} e^{-\frac{d}{2a_0}(Z_1+Z_2)\xi}$$

• Con  $n_1 = 3$ ,  $E_3 = -\frac{(Z_1+Z_2)^2}{9} \text{Ry}$ , se obtienen tres posibles soluciones para  $m = 0$  con  $l = 0, 1, 2$ , dos soluciones para  $m = 1$ ,  $l = 1, 2$  y, por último, una solución con  $m = 2$  y  $l = 2$ . Para  $m = 0$  calculamos las tres raíces del polinomio  $P_3(q)$ :

$$\begin{aligned} q_{300} &= \frac{2}{9} \left[ 12 + 3\Lambda - \sqrt{21 + \Lambda^2} \left\{ \sqrt{3} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) + 3 \sin\left(\frac{\theta}{3}\right) \right\} \right] \\ q_{310} &= \frac{2}{9} \left[ 12 + 3\Lambda + \sqrt{21 + \Lambda^2} \left\{ -\sqrt{3} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) + 3 \sin\left(\frac{\theta}{3}\right) \right\} \right] \\ q_{320} &= \frac{1}{9} \left[ 24 + 6\Lambda + 4\sqrt{3}\sqrt{21 + \Lambda^2} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) \right] \\ \theta &= \arctan \left[ \frac{\sqrt{3}\sqrt{6561 + 1863\Lambda^2 + 36\Lambda^4 + \Lambda^6}}{90 - 9\Lambda^2} \right] \end{aligned}$$

y los autovalores del segundo invariante vienen dados por

$$\begin{aligned} K_{300} &= \hbar^2 \left[ -\frac{8}{3} + \frac{d^2}{9a_0^2}(Z_1 + Z_2)^2 + \frac{2}{9} \sqrt{21 + \frac{4d^2}{a_0^2}(Z_1 + Z_2)^2} \left[ \sqrt{3} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) + 3 \sin\left(\frac{\theta}{3}\right) \right] \right] \\ K_{310} &= \hbar^2 \left[ -\frac{8}{3} + \frac{d^2}{9a_0^2}(Z_1 + Z_2)^2 + \frac{2}{9} \sqrt{21 + \frac{4d^2}{a_0^2}(Z_1 + Z_2)^2} \left[ \sqrt{3} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) - 3 \sin\left(\frac{\theta}{3}\right) \right] \right] \\ K_{320} &= \hbar^2 \left[ -\frac{8}{3} + \frac{d^2}{9a_0^2}(Z_1 + Z_2)^2 - \frac{4}{9} \sqrt{21 + \frac{4d^2}{a_0^2}(Z_1 + Z_2)^2} \left[ \sqrt{3} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) \right] \right] \end{aligned}$$

Las funciones de onda correspondientes se obtienen a partir de

$$F_{3lm}(\xi) = e^{-\frac{d}{3a_0}(Z_1+Z_2)\xi} u_{3lm}(\xi)$$

donde el polinomio  $u_{3lm}(\xi)$  es de la forma

$$u_{3lm}(\xi) = \frac{(3q_{3lm} - 2\Lambda)(q_{3lm} - 2)}{48} \left[ \xi^2 + \frac{(6q_{3lm}^2 - 4q_{3lm}(\Lambda + 9) + 8\Lambda)}{(3q_{3lm} - 2\Lambda)(q_{3lm} - 2)} \xi + \frac{(3q_{3lm} - 2\Lambda - 24)}{(3q_{3lm} - 2\Lambda)} \right]$$

para cada una de las tres raíces.

Para el caso  $m = 1$  tenemos las dos raíces de  $P_2(q)$ ,

$$q_{311} = \frac{1}{3} \left[ 6 + \Lambda - \sqrt{36 + \Lambda^2} \right], \quad q_{321} = \frac{1}{3} \left[ 6 + \Lambda + \sqrt{36 + \Lambda^2} \right]$$

tal que

$$K_{311} = \hbar^2 \left[ -4 + \frac{d^2}{9a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2 + \frac{1}{3} \sqrt{36 + \frac{4d^2}{a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2} \right]$$

$$K_{321} = \hbar^2 \left[ -4 + \frac{d^2}{9a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2 - \frac{1}{3} \sqrt{36 + \frac{4d^2}{a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2} \right]$$

y

$$F_{311}(\xi) = \sqrt{\xi^2 - 1} \left( \frac{-q_{311}}{4} \right) \left[ \xi + \frac{-6 - \sqrt{36 + \Lambda^2}}{\Lambda} \right] e^{-\frac{d}{3a_0} (Z_1 + Z_2) \xi}$$

$$F_{321}(\xi) = \sqrt{\xi^2 - 1} \left( \frac{-q_{321}}{4} \right) \left[ \xi + \frac{-6 + \sqrt{36 + \Lambda^2}}{\Lambda} \right] e^{-\frac{d}{3a_0} (Z_1 + Z_2) \xi}$$

Y para terminar con  $m = 2$  tenemos una única solución  $l = 2$ :

$$K_{322} = \hbar^2 \left[ -6 + \frac{d^2}{9a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2 \right]$$

y

$$F_{322}(\xi) = (\xi^2 - 1) e^{-\frac{d}{3a_0} (Z_1 + Z_2) \xi}$$

- Determinemos ahora las soluciones de la ecuación angular para  $n_2 = 1, 2, 3$ : Autovalor de la energía, autovalor del segundo invariante y funciones de onda “finitas”.
- Empecemos con  $n_2 = 1$ ,  $E_1 = -(Z_1 - Z_2)^2 \text{ Ry}$ . De la raíz de  $P_1(\bar{q})$  se obtiene el autovalor del segundo invariante

$$\bar{q}_{100} = 0 \Rightarrow K_{100} = \hbar^2 \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2$$

para

$$G_{100}(\eta) = e^{\frac{d}{a_0} (Z_1 - Z_2) \eta}$$

- Con  $n_2 = 2$ ,  $E_2 = -\frac{(Z_1 - Z_2)^2}{4} \text{ Ry}$  se obtienen tres soluciones finitas: dos para  $m = 0$  y una para  $m = 1$ . Para  $m = 0$  resulta

$$\bar{q}_{200} = \frac{1}{2} \left( 2 - \Theta - \sqrt{4 + \Theta^2} \right), \quad \bar{q}_{210} = \frac{1}{2} \left( 2 - \Theta + \sqrt{4 + \Theta^2} \right)$$



Autovalor del segundo invariante y funciones de onda “finitas”:

$$\begin{cases} K_{200} = \hbar^2 \left[ -1 + \frac{d^2}{4a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2 + \sqrt{1 + \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2} \right] \\ K_{210} = \hbar^2 \left[ -1 + \frac{d^2}{4a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2 - \sqrt{1 + \frac{d^2}{a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2} \right] \end{cases}$$

$$G_{200}(\eta) = \left( -\frac{\bar{q}_{200}}{2} \right) \left( \eta + \frac{2 + \sqrt{4 + \Theta^2}}{\Theta} \right) e^{\frac{d}{2a_0} (Z_1 - Z_2) \eta}$$

$$G_{210}(\eta) = \left( -\frac{\bar{q}_{210}}{2} \right) \left( \eta + \frac{2 - \sqrt{4 + \Theta^2}}{\Theta} \right) e^{\frac{d}{2a_0} (Z_1 - Z_2) \eta}$$

En el caso  $m = 1$  resulta:

$$\begin{cases} G_{211}(\eta) = \sqrt{1 - \eta^2} e^{\frac{d}{2a_0} (Z_1 - Z_2) \eta} \\ K_{211} = \hbar^2 \left[ -2 + \frac{d^2}{4a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2 \right] \end{cases}$$

• Por último, el caso  $n_2 = 3$  con  $E_3 = -\frac{(Z_1 - Z_2)^2}{9}$ , Ry tiene tres soluciones para  $m = 0$ ,  $l = 0, 1, 2$ , dos soluciones con  $m = 1$ ,  $l = 1, 2$  y una solución con  $m = 2$  y  $l = 2$ . Para  $m = 0$ :

$$\bar{q}_{300} = \frac{2}{9} \left[ 12 - 3\Theta - \sqrt{21 + \Theta^2} \left\{ \sqrt{3} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) + 3 \sin\left(\frac{\theta}{3}\right) \right\} \right]$$

$$\bar{q}_{310} = \frac{2}{9} \left[ 12 - 3\Theta + \sqrt{21 + \Theta^2} \left\{ -\sqrt{3} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) + 3 \sin\left(\frac{\theta}{3}\right) \right\} \right]$$

$$\bar{q}_{320} = \frac{1}{9} \left[ 24 - 6\Theta + 4\sqrt{3}\sqrt{21 + \Theta^2} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) \right]$$

$$\theta = \arctan \left[ \frac{\sqrt{3}\sqrt{6561 + 1863\Theta^2 + 36\Theta^4 + \Theta^6}}{90 - 9\Theta^2} \right]$$

Los autovalores del segundo invariante y las funciones de onda son:

$$K_{300} = \hbar^2 \left[ -\frac{8}{3} + \frac{d^2}{9a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2 + \frac{2}{9} \sqrt{21 + \frac{4d^2}{a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2} \left[ \sqrt{3} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) + 3 \sin\left(\frac{\theta}{3}\right) \right] \right]$$

$$K_{310} = \hbar^2 \left[ -\frac{8}{3} + \frac{d^2}{9a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2 + \frac{2}{9} \sqrt{21 + \frac{4d^2}{a_0^2} (Z_1 - Z_2)^2} \left[ \sqrt{3} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) - 3 \sin\left(\frac{\theta}{3}\right) \right] \right]$$

$$K_{320} = \hbar^2 \left[ -\frac{8}{3} + \frac{d^2}{9a_0^2}(Z_1 - Z_2)^2 - \frac{4}{9} \sqrt{21 + \frac{4d^2}{a_0^2}(Z_1 - Z_2)^2} \left[ \sqrt{3} \cos \left( \frac{\theta}{3} \right) \right] \right]$$

$$G_{3lm}(\eta) = e^{\frac{d}{3a_0}(Z_1 - Z_2)\eta} u_{3lm}(\eta)$$

$$u_{3lm}(\eta) = \frac{(3\bar{q}_{3lm} + 2\Theta)(\bar{q}_{3lm} - 2)}{48} \left[ \eta^2 + \frac{(6\bar{q}_{3lm}^2 + 4q_{3lm}(\Theta - 9) - 8\Theta)}{(3\bar{q}_{3lm} + 2\Theta)(\bar{q}_{3lm} - 2)} \eta + \frac{(3\bar{q}_{3lm} + 2\Theta - 24)}{(3\bar{q}_{3lm} + 2\Theta)} \right]$$

Con  $m = 1$ :

$$\bar{q}_{311} = \frac{1}{3} \left[ 6 - \Theta - \sqrt{36 + \Theta^2} \right] \Rightarrow K_{311} = \hbar^2 \left[ -4 + \frac{d^2}{9a_0^2}(Z_1 - Z_2)^2 + \frac{1}{3} \sqrt{36 + \frac{4d^2}{a_0^2}(Z_1 - Z_2)^2} \right]$$

$$\bar{q}_{321} = \frac{1}{3} \left[ 6 - \Theta + \sqrt{36 + \Theta^2} \right] \Rightarrow K_{321} = \hbar^2 \left[ -4 + \frac{d^2}{9a_0^2}(Z_1 - Z_2)^2 - \frac{1}{3} \sqrt{36 + \frac{4d^2}{a_0^2}(Z_1 - Z_2)^2} \right]$$

$$G_{311}(\eta) = \sqrt{1 - \eta^2} \left( \frac{-\bar{q}_{311}}{4} \right) \left[ \xi + \frac{6 + \sqrt{36 + \Theta^2}}{\Theta} \right] e^{\frac{d}{3a_0}(Z_1 - Z_2)\eta}$$

$$G_{321}(\eta) = \sqrt{1 - \eta^2} \left( \frac{-\bar{q}_{321}}{4} \right) \left[ \eta + \frac{6 - \sqrt{36 + \Theta^2}}{\Theta} \right] e^{\frac{d}{3a_0}(Z_1 - Z_2)\eta}$$

y para  $m = 2$  resulta:

$$K_{322} = \hbar^2 \left[ -6 + \frac{d^2}{9a_0^2}(Z_1 - Z_2)^2 \right]$$

$$G_{322}(\eta) = (1 - \eta^2) e^{\frac{d}{3a_0}(Z_1 - Z_2)\eta}$$

#### 5.5.4. Funciones de onda hidrogenoideas

De lo que hemos visto se deduce que el Hamiltoniano de dos centros Coulombianos fijos admite entre sus autovalores todos los niveles de energía de un átomo hidrogenoideo con carga  $(Z_1 + Z_2)$ . A partir de las soluciones *finitas* de la ecuación esferoidal generalizada “radial” que son propias de:

$$\hat{H}\Psi_{nlm}(x_1, x_2, x_3) = E_n \Psi_{nlm}(x_1, x_2, x_3)$$

$$\hat{I}\Psi_{nlm}(x_1, x_2, x_3) = K_{nlm} \Psi_{nlm}(x_1, x_2, x_3)$$

$$\hat{L}_1 \Psi_{nlm}(x_1, x_2, x_3) = \hbar m \Psi_{nlm}(x_1, x_2, x_3)$$

con autovalores

$$E_n = -\frac{\mu\alpha^2(Z_1 + Z_2)}{\hbar^2} \frac{1}{2n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$K_{nlm} = \hbar^2 \left( -q_{nlm} + \frac{2d}{a_0} (Z_1 + Z_2) \frac{n - m - 1}{n} + \frac{d^2}{a_0^2 n^2} (Z_1 + Z_2)^2 - m(m + 1) \right)$$

$$l = m, m + 1, \dots, n - 1, m \in \mathbb{Z}$$

Las funciones de onda se pueden expresar de forma factorizada en coordenadas elípticas prolatas

$$\Psi_{nlm}(\xi, \eta, \varphi) = F_{nlm}(\xi) G_{nlm}(\eta; E_n, K_{nlm}) f_m(\varphi) \quad (5.43)$$

en (5.43)  $F_{nlm}(\xi)$  es una de las soluciones finitas de la ecuación radial correspondiente al nivel de energía  $n$ , y  $G_{nlm}(\eta; E_n, K_{nlm})$  es una solución de la ecuación esferoidal generalizada (5.34) cuando los parámetros vienen determinados por:

$$e_n = \frac{2\mu E_n d^2}{\hbar^2}, \quad \lambda_{nlm} = \frac{K_{nlm}}{\hbar^2} + e_n;$$

Para estos valores de  $e_n$  y  $\lambda_{nlm}$  la ecuación (5.34) en general no admite soluciones finitas, excepto para los casos analizados por Demkov, [65].

La estructura espectral correspondiente a esta situación puede verse en la figura 5.7.

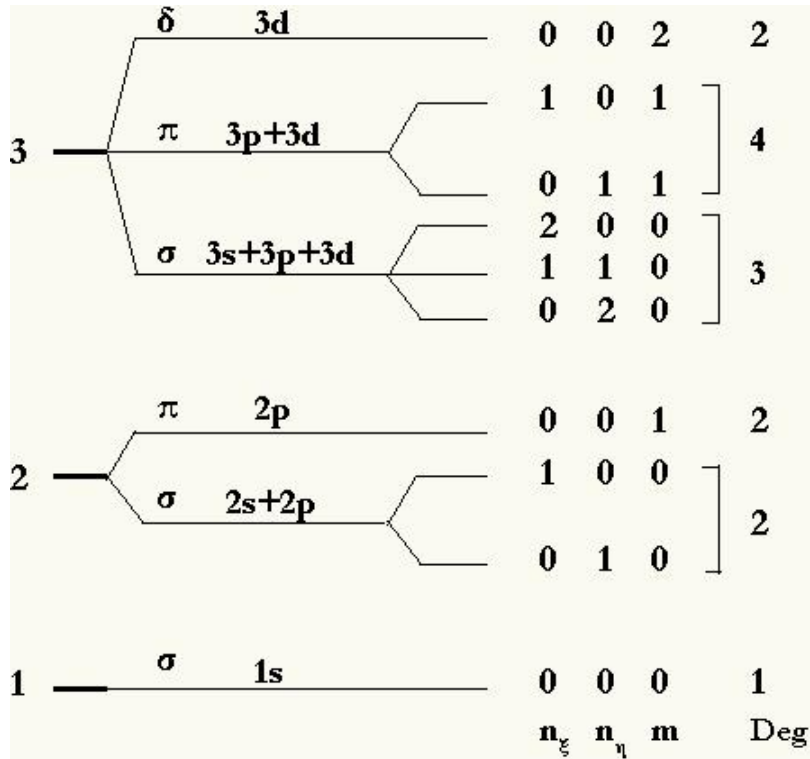


Figura 5.7: Estructura espectral para un átomo hidrogenoideo en 3D.  $n = 1, 2, 3$  es el número cuántico principal, la degeneración para cada  $n$  viene caracterizada por los valores positivos de  $m$  (el número cuántico magnético)  $m = 0, 1, 2, \dots$  que equivalen a considerar orbitales del tipo  $\sigma, \pi, \delta, \dots$ . Esta degeneración la marca el autovalor del segundo invariante  $K_{nlm}$  que depende del número cuántico  $l = m, m + 1, \dots, n - 1$  y, por tanto, es igual a  $n + 2 \cdot (n - 1) + 2 \cdot (n - 2) + \dots + 2 \cdot 1 = n^2$ . Los ceros de las funciones de onda esferoidales radial y angular son  $n_\xi = n - l - 1$  y  $n_\eta = l - |m|$  respectivamente, [66], tal que  $n_\xi + n_\eta = n - |m| - 1$ .

### 5.5.4.1. Funciones de onda de Demkov en el espacio

Se pueden obtener siguiendo los trabajos de Demkov algunas soluciones muy especiales en las que tanto la función de onda de la parte radial como de la angular se eligen finitas. Para ello debemos buscar soluciones truncadas de las ecuaciones esferoidales generalizadas con los parámetros determinados por:

$$E_{n_1} = -\frac{(Z_1 + Z_2)^2}{n_1^2} = -\frac{(Z_1 - Z_2)^2}{n_2^2} = E_{n_2}$$

esta ecuación diofántica nos determina  $n_1$  y  $n_2$  para  $Z_1$  y  $Z_2$  dados. Una vez que hemos fijado el primer invariante, esto para cada valor de  $m$ , debemos imponer también que coincida el autovalor del segundo invariante, es decir,

$$\begin{aligned} K_{n_1 l_1 m} &= \hbar^2 \left( -q_{n_1 l_1 m} + \Lambda \frac{n_1 - m - 1}{n_1} + \frac{\Lambda^2}{4n_1^2} - m(m+1) \right) = \\ \hbar^2 \left( -\bar{q}_{n_2 l_2 m} - \Theta \frac{n_2 - m - 1}{n_2} + \frac{\Theta^2}{4n_2^2} - m(m+1) \right) &= K_{n_2 l_2 m} \end{aligned}$$

Estas ecuaciones permiten determinar el valor del número cuántico  $l_1$  y  $l_2$  así como la distancia internuclear  $R = 2d$ .

Las funciones de onda para estos estados tan especiales son:

$$\Psi_{n_1 l_1 m | n_2 l_2 m}(\xi, \eta, \varphi) = F_{n_1 l_1 m}(\xi) G_{n_2 l_2 m}(\eta) f_m(\varphi) \quad (5.44)$$

donde tanto  $F_{n_1 l_1 m}(\xi)$  como  $G_{n_2 l_2 m}(\eta)$  son soluciones finitas de las ecuaciones radial y angular. Se pueden reproducir todos los casos que aparecen en el trabajo de Demkov, [65].

### 5.5.4.2. Ecuaciones radial y angular en el caso de dos centros de igual intensidad

En el caso  $Z_1 = Z_2 = Z$  los parámetros  $\Lambda$  y  $\Theta$  son:

$$\Lambda = \frac{4\mu\alpha dZ}{\hbar^2} \equiv \frac{4d}{a_0} Z \quad , \quad \Theta = 0$$

y, por tanto, las ecuaciones radial (5.33) y angular (5.34) se convierten en:

$$(\xi^2 - 1) \frac{d^2 F(\xi)}{d\xi^2} + 2\xi \frac{dF(\xi)}{d\xi} + \left[ e(\xi^2 - 1) + \Lambda\xi + \lambda - \frac{m^2}{(\xi^2 - 1)} \right] F(\xi) = 0 . \quad (5.45)$$

$$(1 - \eta^2) \frac{d^2 G(\eta)}{d\eta^2} - 2\eta \frac{dG(\eta)}{d\eta} + \left[ e(1 - \eta^2) - \lambda - \frac{m^2}{(1 - \eta^2)} \right] G(\eta) = 0 . \quad (5.46)$$

La ecuación radial (5.45) es nuevamente una ecuación esferoidal generalizada del tipo que ya hemos estudiado. Podemos, pues, encontrar soluciones “finitas” para las energías:

$$E_n = -\frac{2\mu\alpha^2 Z^2}{\hbar^2 n^2} \equiv -4Z^2 \frac{1}{n^2} \text{ Ry} \quad , \quad n = 1, 2, \dots \quad (5.47)$$

siendo los autovalores del segundo invariante de la forma

$$K_{nlm} = \hbar^2 \left( -q_{nlm} + \Lambda \frac{n-m-1}{n} + \frac{\Lambda^2}{4n^2} - m(m+1) \right) \quad (5.48)$$

donde  $q_{nlm}$  es una de las  $(n-m)$  raíces del polinomio  $P_{n-m}(q)$ . Las soluciones de la ecuación radial son las funciones  $F_{nlm}(\xi)$  calculadas anteriormente pero ahora sustituyendo  $Z_1 = Z_2 = Z$ .

Por otro lado, la ecuación angular (5.46) para dos centros de igual intensidad reduce a una ecuación de tipo esferoidal. Fijando los parámetros  $e$  y  $\lambda$  en dicha ecuación por los autovalores de la energía y segundo invariante determinados por la ecuación radial:

$$e_n = \frac{2\mu E_n d^2}{\hbar^2} \quad , \quad \lambda_{nlm} = \frac{K_{nlm}}{\hbar^2} + e_n ;$$

para cada  $n, l$  y  $m$  la solución más general de la ecuación esferoidal es:

$$G_{nlm}(\eta) = C_1 \text{PS}(l, m, \gamma_n, \eta) + C_2 \text{QS}(l, m, \gamma_n, \eta) \quad ,$$

$$\gamma_n^2 = e_n \Rightarrow \gamma_n = i \frac{\Lambda}{2n} \equiv i \frac{2d Z}{a_0 n}$$

donde  $\text{PS}(l, m, \gamma_n, \eta)$  y  $\text{QS}(l, m, \gamma_n, \eta)$  son las funciones esferoidales de primera y segunda especie. En el límite  $d \rightarrow 0$  solo para  $C_2 = 0$  la función  $G_{nlm}(\eta)$  reduce a la función asociada de Legendre que aparece en el problema espectral de un centro Coulombiano en tres dimensiones.

Por tanto, las funciones de onda hidrogenoideas para el problema de dos centros de fuerza iguales en el espacio son de la forma:

$$\Psi_{nlm}(\xi, \eta, \varphi) = F_{nlm}(\xi) \text{PS}(l, m, \gamma_n, \eta) f_m(\varphi) \quad (5.49)$$

Se puede comprobar que el número de ceros de la función radial  $F_{nlm}(\xi)$  es  $n_\xi = n - l - 1$  y el de la función angular  $\text{PS}(l, m, \gamma_n, \eta)$ :  $n_\eta = l - |m|$ , tal y como se había especificado en (5.7) para una función de onda hidrogenoidea general, es decir,  $Z_1 \neq Z_2$ .

En las Tablas 5.9 y 5.10 se muestran estos resultados para los primeros niveles de energía  $n = 1, 2, 3$ . En las siguientes Tablas representamos el corte con el plano  $x_2 = 0$  de la densidad de probabilidad y las curvas de nivel correspondientes, para los primeros niveles de energía y tomando los valores de  $\frac{d}{a_0} = 1$ ,  $\frac{d}{a_0} = 4$  y el caso límite  $\frac{d}{a_0} \rightarrow 0$ . En el límite recuperamos los resultados del problema de un centro Coulombiano con carga  $2Z = 2$  como se puede comprobar comparando con las gráficas de las Tablas 4.9 y 4.10, vemos que en este límite el eje de simetría es  $X_1$  en vez del que elegimos para obtener las funciones de onda del problema de Coulomb que era  $X_3$ .

Tabla 5.9: Valores propios y funciones propias para  $n = 1, 2$ 

Energía	Función propia — Segundo invariante
$E_1 = -4 Z^2 \text{Ry}$	$\Psi_{100}(\xi, \eta, \varphi) = e^{-\frac{2d}{a_0} Z \xi} \text{PS}(0, 0, i \frac{2d}{a_0} Z, \eta)$ $K_{100} = \hbar^2 \frac{4Z^2 d^2}{a_0^2}$
$E_2 = -Z^2 \text{Ry}$	$\psi_{200}(\xi, \eta, \varphi) = e^{-\frac{d}{a_0} Z \xi} (1 + a_{200} + a_{200} \xi) \text{PS}(0, 0, i \frac{d}{a_0} Z, \eta)$ $K_{200} = \hbar^2 \left[ -1 + \frac{d^2}{a_0^2} Z^2 + \sqrt{1 + \frac{4d^2}{a_0^2} Z^2} \right], \quad a_{200} = \frac{1}{4} \left[ -2 - \frac{4d}{a_0} Z + \sqrt{4 + \frac{16d^2}{a_0^2} Z^2} \right]$ $\psi_{210}(\xi, \eta, \varphi) = e^{-\frac{d}{a_0} Z \xi} (1 + a_{210} + a_{210} \xi) \text{PS}(1, 0, i \frac{d}{a_0} Z, \eta)$ $K_{210} = \hbar^2 \left[ -1 + \frac{d^2}{a_0^2} Z^2 - \sqrt{1 + \frac{4d^2}{a_0^2} Z^2} \right], \quad a_{210} = \frac{1}{4} \left[ -2 - \frac{4d}{a_0} Z - \sqrt{4 + \frac{16d^2}{a_0^2} Z^2} \right]$ $\Psi_{21\pm 1}(\xi, \eta, \varphi) = (\xi^2 - 1)^{1/2} e^{-\frac{d}{a_0} Z \xi} \text{PS}(1, 1, i \frac{d}{a_0} Z, \eta) e^{\pm i \varphi}$ $K_{211} = \hbar^2 \left[ -2 + \frac{d^2}{a_0^2} Z^2 \right]$

Tabla 5.10: Valores propios y funciones propias para  $n = 1, 2, 3$ 

Energía	Función propia — Segundo invariante
$E_3 = -\frac{4}{9} Z^2 \text{Ry}$	$\Psi_{300}(\xi, \eta, \varphi) = u_{300}(\xi) e^{-\frac{2d}{3a_0} Z \xi} \text{PS}(0, 0, i\frac{2d}{3a_0} Z, \eta)$
	$K_{300} = \hbar^2 \left[ -\frac{8}{3} + \frac{4d^2}{9a_0^2} Z^2 + \frac{2}{9} \sqrt{21 + \frac{16d^2}{a_0^2} Z^2} (\sqrt{3} \cos(\frac{\theta}{3}) + 3 \sin(\frac{\theta}{3})) \right]$
	$\Psi_{310}(\xi, \eta, \varphi) = u_{310}(\xi) e^{-\frac{2d}{3a_0} Z \xi} \text{PS}(1, 0, i\frac{2d}{3a_0} Z, \eta)$
	$K_{310} = \hbar^2 \left[ -\frac{8}{3} + \frac{4d^2}{9a_0^2} Z^2 + \frac{2}{9} \sqrt{21 + \frac{16d^2}{a_0^2} Z^2} (\sqrt{3} \cos(\frac{\theta}{3}) - 3 \sin(\frac{\theta}{3})) \right]$
	$\Psi_{320}(\xi, \eta, \varphi) = u_{320}(\xi) e^{-\frac{2d}{3a_0} Z \xi} \text{PS}(2, 0, i\frac{2d}{3a_0} Z, \eta)$
	$K_{320} = \hbar^2 \left[ -\frac{8}{3} + \frac{4d^2}{9a_0^2} Z^2 - \frac{4}{9} \sqrt{21 + \frac{16d^2}{a_0^2} Z^2} \sqrt{3} \cos(\frac{\theta}{3}) \right]$
	$\Psi_{31\pm 1}(\xi, \eta, \varphi) = (\xi^2 - 1)^{\frac{1}{2}} (1 + a_{311} + a_{311}\xi) e^{-\frac{2d}{3a_0} Z \xi} \text{PS}(1, 1, i\frac{2d}{3a_0} Z, \eta) e^{\pm i\varphi}$
	$K_{311} = \hbar^2 \left[ -4 + \frac{4d^2}{9a_0^2} Z^2 + \frac{1}{3} \sqrt{36 + \frac{16d^2}{a_0^2} Z^2} \right], a_{311} = \frac{-1}{12} \left[ 6 + \frac{4d}{a_0} Z - \sqrt{36 + \frac{16d^2}{a_0^2} Z^2} \right]$
	$\Psi_{32\pm 1}(\xi, \eta, \varphi) = (\xi^2 - 1)^{\frac{1}{2}} (1 + a_{321} + a_{321}\xi) e^{-\frac{2d}{3a_0} Z \xi} \text{PS}(2, 1, i\frac{2d}{3a_0} Z, \eta) e^{\pm i\varphi}$
	$K_{321} = \hbar^2 \left[ -4 + \frac{4d^2}{9a_0^2} Z^2 - \frac{1}{3} \sqrt{36 + \frac{16d^2}{a_0^2} Z^2} \right], a_{321} = \frac{-1}{12} \left[ 6 + \frac{4d}{a_0} Z + \sqrt{36 + \frac{16d^2}{a_0^2} Z^2} \right]$
	$\Psi_{32\pm 2}(\xi, \eta, \varphi) = (\xi^2 - 1) e^{-\frac{2d}{3a_0} Z \xi} \text{PS}(2, 2, i\frac{2d}{3a_0} Z, \eta) e^{\pm i2\varphi}$
	$K_{322} = \hbar^2 \left[ -6 + \frac{4d^2}{9a_0^2} Z^2 \right]$



En la Tabla 5.10 los polinomios de segundo grado  $u_{300}(\xi)$ ,  $u_{310}(\xi)$  y  $u_{320}(\xi)$  vienen dados por:

$$u_{300}(\xi) = a + b\xi + c\xi^2$$

$$a = \frac{1}{324} \left[ -3 - 3\Lambda + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} + 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right] \left[ 24 + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} + 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right]$$

$$b = \frac{1}{162} \left[ -3 - 3\Lambda + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} + 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right] \left[ 6 + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} + 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right] - 1$$

$$c = \frac{1}{324} \left[ -3 - 3\Lambda + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} + 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right] \left[ -12 + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} + 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right]$$

$$u_{310}(\xi) = a + b\xi + c\xi^2$$

$$a = \frac{1}{324} \left[ -3 - 3\Lambda + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} - 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right] \left[ 24 + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} - 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right]$$

$$b = \frac{1}{162} \left[ -3 - 3\Lambda + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} - 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right] \left[ 6 + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} - 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right] - 1$$

$$c = \frac{1}{324} \left[ -3 - 3\Lambda + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} - 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right] \left[ -12 + \sqrt{21 + \Lambda^2}(\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} - 3 \sin \frac{\theta}{3}) \right]$$

$$u_{320}(\xi) = a + b\xi + c\xi^2$$

$$a = \frac{1}{162} \left[ 3 + 3\Lambda + \sqrt{21 + \Lambda^2}2\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} \right] \left[ -12 + \sqrt{21 + \Lambda^2}2\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} \right]$$

$$b = \frac{1}{81} \left[ 3 + 3\Lambda + \sqrt{21 + \Lambda^2}2\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} \right] \left[ -3 + \sqrt{21 + \Lambda^2}2\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} \right] - 1$$

$$c = \frac{1}{162} \left[ 3 + 3\Lambda + \sqrt{21 + \Lambda^2}2\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} \right] \left[ 6 + \sqrt{21 + \Lambda^2}2\sqrt{3} \cos \frac{\theta}{3} \right]$$

donde

$$\theta = \arctan \left[ \frac{\sqrt{3}\sqrt{6561 + 1863\Lambda^2 + 36\Lambda^4 + \Lambda^6}}{90 - 9\Lambda^2} \right]$$

con  $\Lambda = \frac{4d}{a_0}Z$ .

Tabla 5.11: Densidad de probabilidad  $a_0^3 |\psi_{nlm}(x_1, x_2 = 0, x_3)|^2$  vs  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_3}{a_0}\right)$  para  $n = 1, 2, 3$  con  $\frac{d}{a_0} = 1$ .

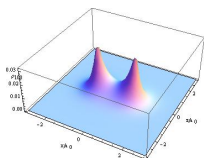
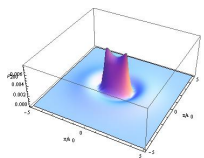
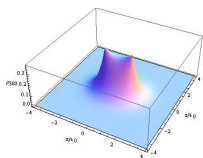
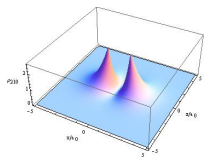
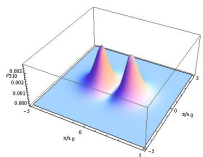
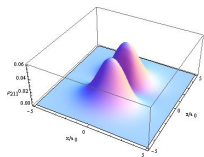
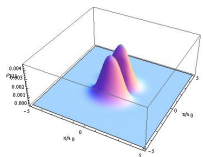
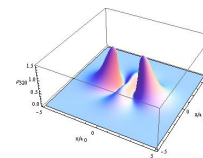
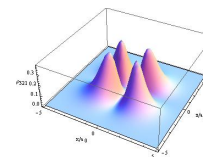
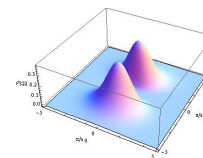
	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$l = 0, m = 0$			
$l = 1, m = 0$			
$l = 1,  m  = 1$			
$l = 2, m = 0$			
$l = 2,  m  = 1$			
$l = 2,  m  = 2$			

Tabla 5.12: Curvas de nivel para  $a_0^3 |\psi_{nlm}(x_1, x_2 = 0, x_3)|^2$  vs  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_3}{a_0}\right)$  e idénticos niveles con  $\frac{d}{a_0} = 1$ .

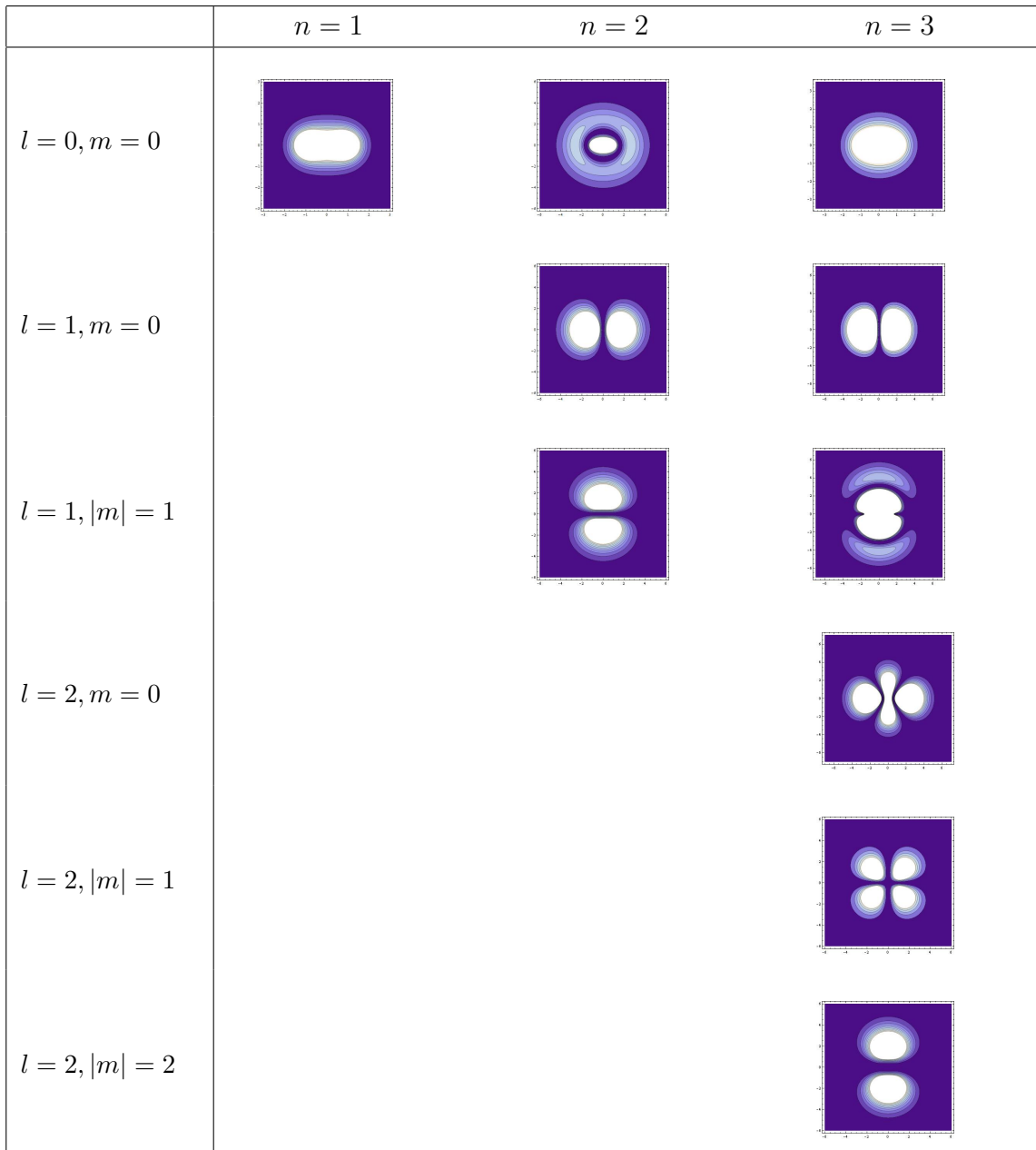


Tabla 5.13: Densidad de probabilidad  $a_0^3 |\psi_{nlm}(x_1, x_2 = 0, x_3)|^2$  vs  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_3}{a_0}\right)$  para  $n = 1, 2, 3$  con  $\frac{d}{a_0} = 4$ .

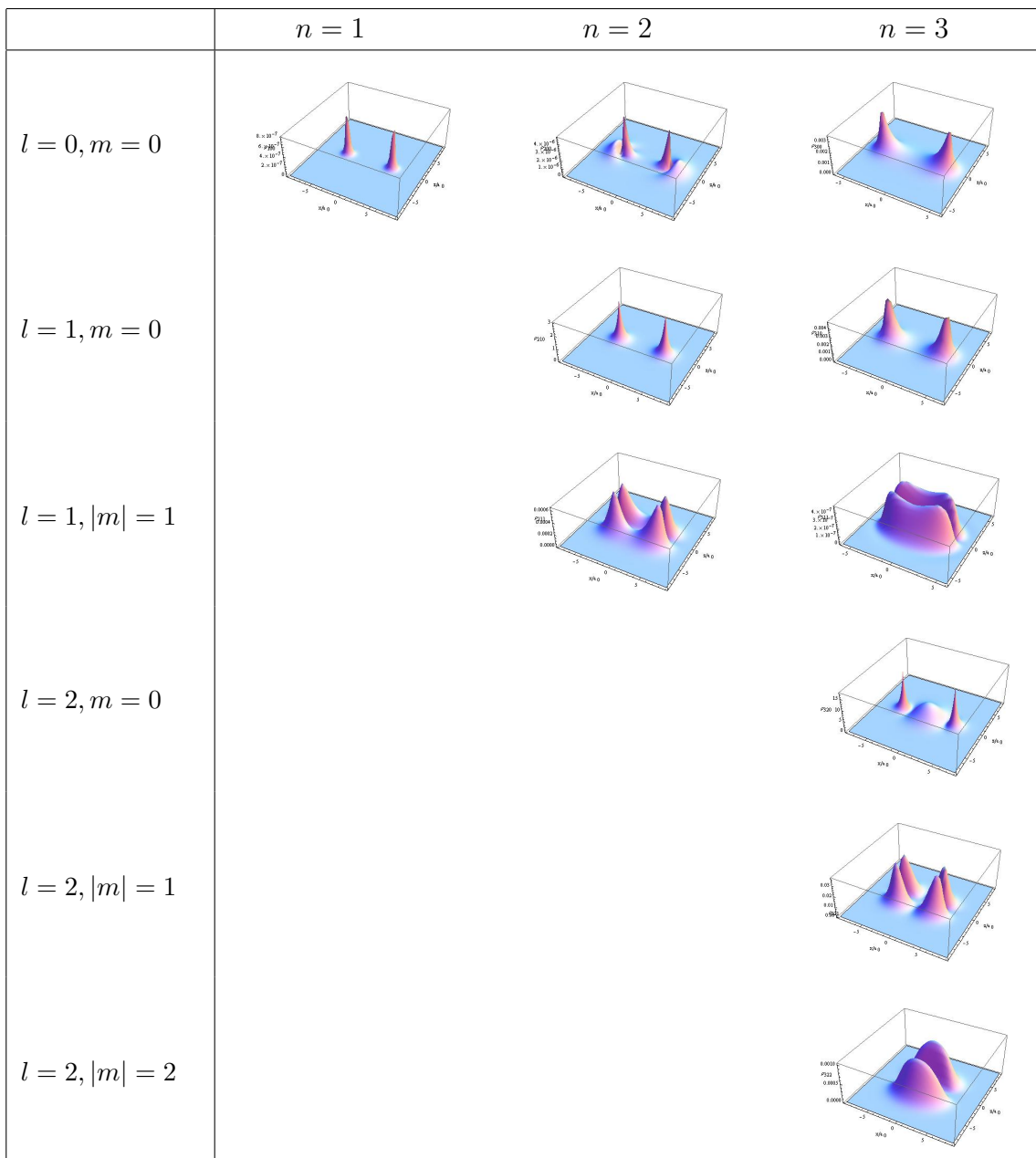


Tabla 5.14: Curvas de nivel para  $a_0^3 |\psi_{nlm}(x_1, x_2 = 0, x_3)|^2$  vs  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_3}{a_0}\right)$  e idénticos niveles con  $\frac{d}{a_0} = 1$ .

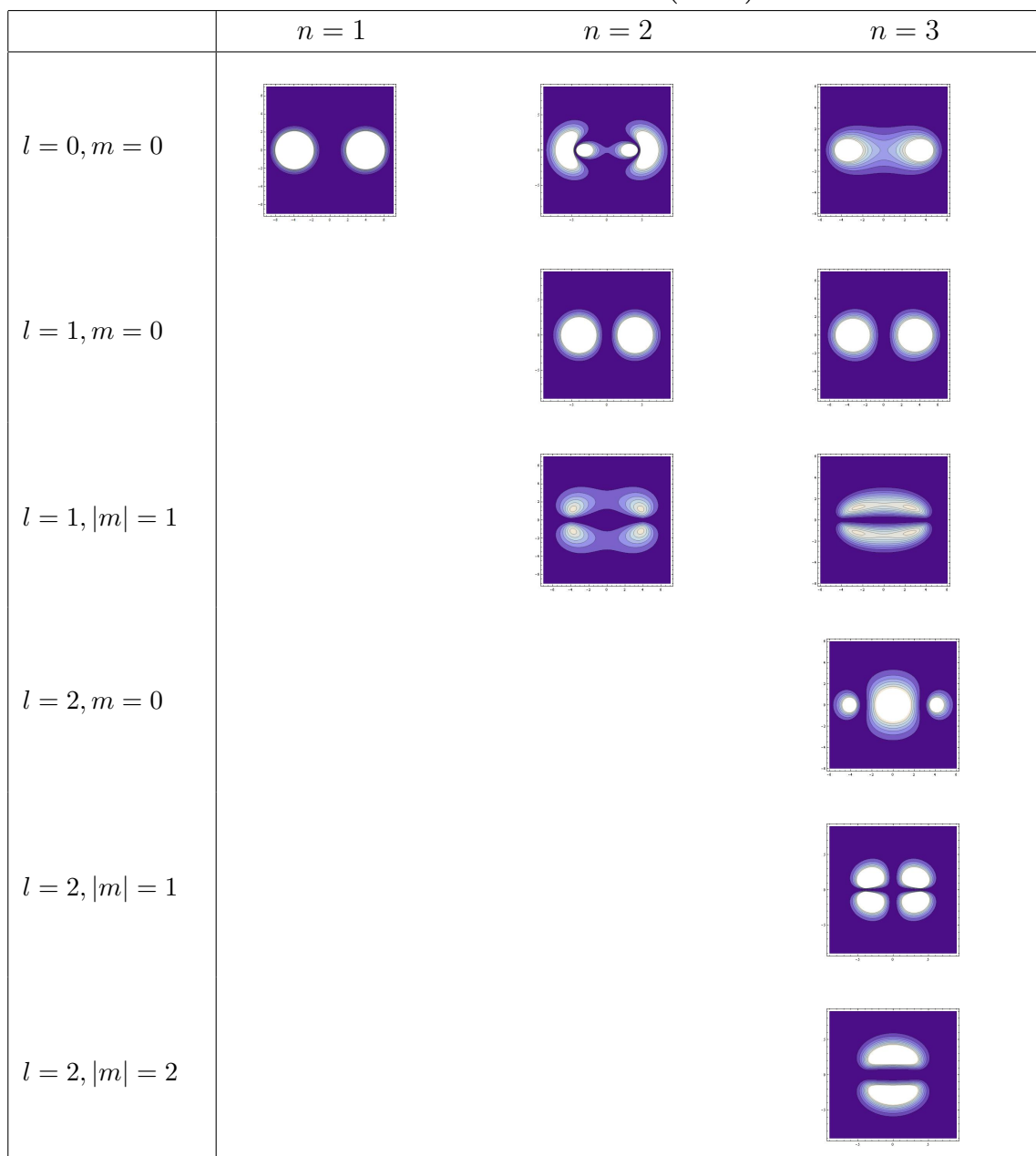


Tabla 5.15: Densidad de probabilidad  $a_0^3 |\psi_{nlm}(x_1, x_2 = 0, x_3)|^2$  vs  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_3}{a_0}\right)$  para  $n = 1, 2, 3$  con  $\frac{d}{a_0} \rightarrow 0$ .

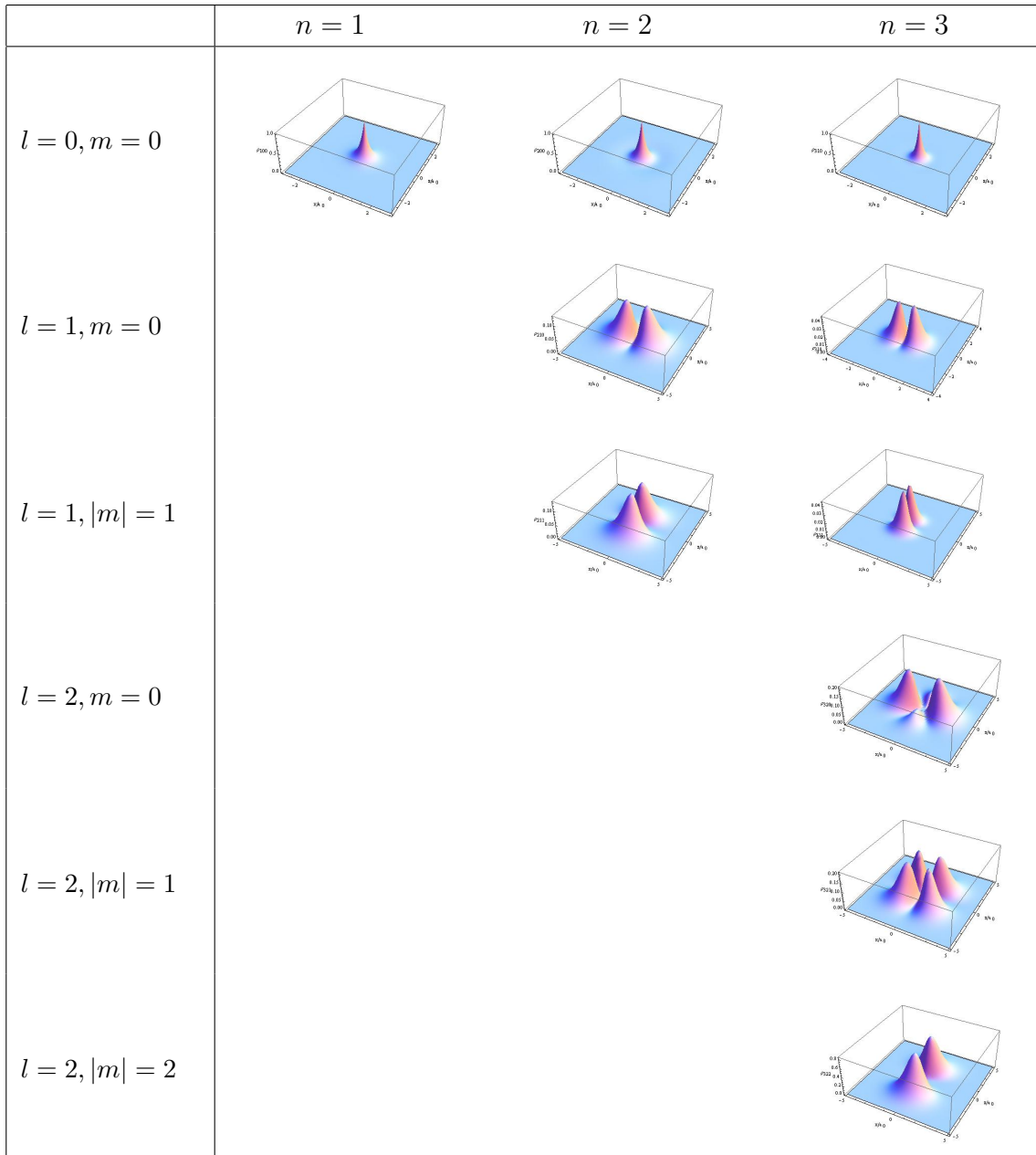
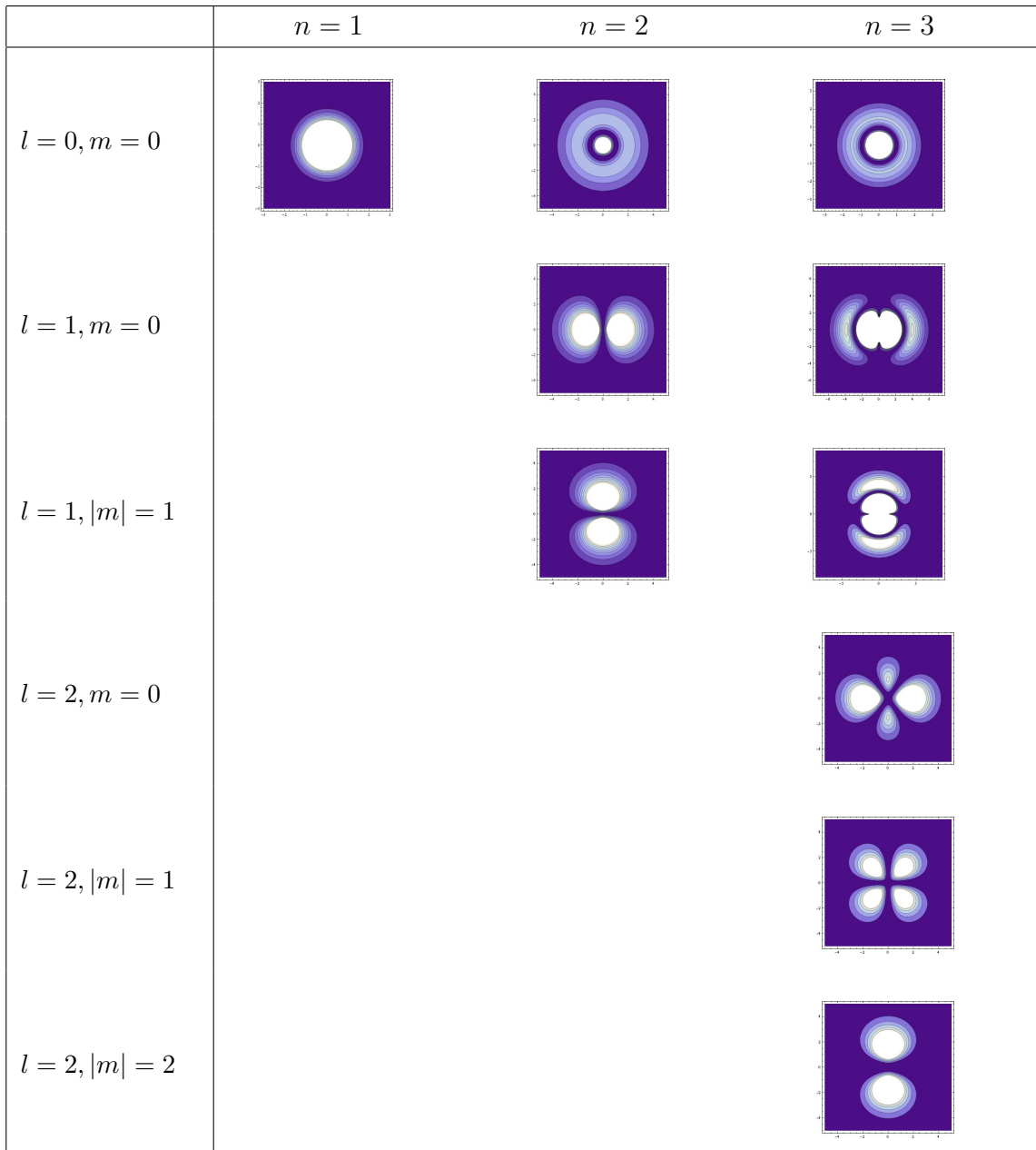


Tabla 5.16: Curvas de nivel para  $a_0^3 |\psi_{nlm}(x_1, x_2 = 0, x_3)|^2$  vs  $\left(\frac{x_1}{a_0}, \frac{x_3}{a_0}\right)$  e idénticos niveles con  $\frac{d}{a_0} = 1$ .



## 5.6. El problema de Euler-Coulomb supersimétrico en dos dimensiones

El punto de partida para definir un sistema en Mecánica Cuántica Supersimétrica que englobe el Hamiltoniano de Euler-Coulomb estudiado en la Sección S.5.2 es la elección de superpotencial. Imitando el procedimiento usado para elevar al marco supersimétrico el problema de Kepler-Coulomb en el plano elegiremos el superpotencial entre las soluciones de la ecuación de Poisson con fuente el potencial de los dos centros<sup>3</sup>:

$$\frac{\hbar}{2\mu} \Delta W = -\frac{\alpha}{r_1} Z_1 - \frac{\alpha}{r_2} Z_2 . \quad (5.50)$$

En rigor, uno debería añadir  $\frac{1}{2\mu} \vec{\nabla} W \vec{\nabla} W$  en el miembro de la izquierda de la ecuación (5.50) y resolver la EDP de tipo Riccati resultante, una tarea imposible que además llevaría a un sistema en que se pierde la separabilidad de la ecuación de Schrödinger en los sectores escalares y por tanto la integrabilidad. Otra vía también ensayada en la Literatura es resolver la ecuación de Hamilton-Jacobi en que se convierte (5.50) en el límite clásico, construir el correspondiente sistema supersimétrico en Mecánica Clásica, y proceder a su cuantificación. Esta ruta es incompatible con el mantenimiento de integrabilidad. Por ejemplo, aplicada en Cambridge al problema de Kepler, [20]-[21], se constató que el vector de Runge-Lenz dejaba de ser un invariante.

Abordamos pues la solución de la ecuación (5.50) mediante el ansatz de separación  $W(\xi, \eta) = \Xi(\xi) + \Sigma(\eta)$  en variables elípticas trigonométricas. La integración de las dos EDO's de primer orden desacopladas resultantes y una buena selección de las constantes de integración nos proporcionan el superpotencial:

$$W(\xi, \eta) = \Xi_\xi(\xi) + \Sigma_\eta(\eta) = -\frac{2\mu\alpha d(Z_1 + Z_2)}{\hbar} \cosh \xi + \frac{2\mu\alpha d(Z_1 - Z_2)}{\hbar} \cos \eta . \quad (5.51)$$

Habida cuenta de que el superpotencial (5.51) se expresa en variables elípticas usaremos el formalismo del Apéndice B para formular el sistema cuántico supersimétrico en este sistema de coordenadas. Las supercargas  $\hat{Q}_E$  y  $\hat{Q}_E^\dagger$  son por tanto de la forma general descrita en las ecuaciones (B.17) y (B.18) con las derivadas covariantes fijadas por el superpotencial (5.51):<sup>4</sup>

$$D_\xi = e_1^\xi \left[ \hbar \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{2\mu\alpha d}{\hbar} (Z_1 + Z_2) \sinh \xi \right], \quad D_\eta = e_2^\eta \left[ \hbar \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{2\mu\alpha d}{\hbar} (Z_1 - Z_2) \sin \eta \right],$$

$$D_\xi^\dagger = e_1^\xi \left[ \hbar \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{2\mu\alpha d}{\hbar} (Z_1 + Z_2) \sinh \xi \right], \quad D_\eta^\dagger = e_2^\eta \left[ \hbar \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{2\mu\alpha d}{\hbar} (Z_1 - Z_2) \sin \eta \right].$$

<sup>3</sup>Asumiendo que el potencial creado por los dos centros Coulombianos surge en  $\mathcal{SH}_0$

<sup>4</sup>El subíndice  $E$  hace referencia a coordenadas elípticas



Las ecuaciones (B.21) y (B.22) definen entonces los Hamiltonianos escalares:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{E0} = & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_E + \frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} \frac{1}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} [(Z_1 + Z_2)^2 \sinh^2 \xi + (Z_1 - Z_2)^2 \sin^2 \eta] \\ & - \frac{\alpha}{d} \frac{1}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} [(Z_1 + Z_2) \cosh \xi + (Z_1 - Z_2) \cos \eta],\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{E2} = & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_E + \frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} \frac{1}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} [(Z_1 + Z_2)^2 \sinh^2 \xi + (Z_1 - Z_2)^2 \sin^2 \eta] \\ & + \frac{\alpha}{d} \frac{1}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} [(Z_1 + Z_2) \cosh \xi + (Z_1 - Z_2) \cos \eta],\end{aligned}$$

donde  $\Delta_E$  es el Laplaciano en elípticas trigonométricas dado por (B.23). Las ecuaciones (B.24) y (B.25) definen a su vez las componentes diagonales del Hamiltoniano matricial:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{E1}^{(11)} = & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_E + \frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} \frac{1}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} [(Z_1 + Z_2)^2 \sinh^2 \xi + (Z_1 - Z_2)^2 \sin^2 \eta] \\ & + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\cosh^2 \xi + \cos^2 \eta - 1}{d^2 (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} - \frac{[\alpha(Z_1 + Z_2)d \cosh \xi + \alpha(Z_1 - Z_2)d \cos \eta] (\cosh^2 \xi + \cos^2 \eta - 2)}{d^2 (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{E1}^{(22)} = & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_E + \frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} \frac{1}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} [(Z_1 + Z_2)^2 \sinh^2 \xi + (Z_1 - Z_2)^2 \sin^2 \eta] \\ & + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\cosh^2 \xi + \cos^2 \eta - 1}{d^2 (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} + \frac{[\alpha(Z_1 + Z_2)d \cosh \xi + \alpha(Z_1 - Z_2)d \cos \eta] (\cosh^2 \xi + \cos^2 \eta - 2)}{d^2 (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2},\end{aligned}$$

mientras que de las ecuaciones (B.26) y (B.27) se obtienen las componentes antidiagonales

$$\begin{aligned}\hat{H}_{E1}^{(12)} = & \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{1}{d^2 (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \left[ 2 \cosh \xi \sinh \xi \frac{\partial}{\partial \eta} - 2 \cos \eta \sin \eta \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \\ & + \frac{\sqrt{(\cosh^2 \xi - 1)(1 - \cos^2 \eta)}}{d (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} [2\alpha(Z_1 + Z_2) \cos \eta + 2\alpha(Z_1 - Z_2) \cosh \xi],\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{E1}^{(21)} = & -\frac{\hbar^2}{\mu} \frac{1}{d^2 (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \left[ 2 \cosh \xi \sinh \xi \frac{\partial}{\partial \eta} - 2 \cos \eta \sin \eta \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \\ & + \frac{\sqrt{(\cosh^2 \xi - 1)(1 - \cos^2 \eta)}}{d (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} [2\alpha(Z_1 + Z_2) \cos \eta + 2\alpha(Z_1 - Z_2) \cosh \xi].\end{aligned}$$

El Hamiltoniano  $\hat{H}_{E0}$  y el segundo operador invariante  $\hat{I}_{E0}$  actuando en el sector puramente bosónico, es decir sobre los estados propios del operador número fermiónico con autovalor 0,  $\hat{F} = 0$ , se pueden escribir como operadores diferenciales en la forma separable:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{E0} &= \frac{1}{d^2 (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left[ \hat{H}_{E0,\xi} + \hat{H}_{E0,\eta} \right] \\ \hat{I}_{E0} &= \frac{\mu}{d^2 (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left[ -d^2 (1 - \cos^2 \eta) \hat{H}_{E,\xi} + d^2 (\cosh^2 \xi - 1) \hat{H}_{E,\eta} \right],\end{aligned}$$

donde  $\hat{H}_{E0,\xi}$  y  $\hat{H}_{E0,\eta}$  dependen de una sola variable:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{E0,\xi} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{2\mu\alpha^2 d^2}{\hbar^2} (Z_1 + Z_2)^2 \sinh^2 \xi - \alpha d (Z_1 + Z_2) \cosh \xi \\ \hat{H}_{E0,\eta} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{2\mu\alpha^2 d^2}{\hbar^2} (Z_1 - Z_2)^2 \sin^2 \eta - \alpha d (1 - \delta) \cos \eta.\end{aligned}$$

Ello implica que la elección de superpotencial ha permitido mantener la separabilidad de la ecuación de Schrödinger al menos en los sectores escalares pues la estructura de  $\hat{H}_{E2}$  es idéntica a la de  $\hat{H}_{E0}$  cambiando el potencial atractivo por repulsivo. El álgebra SUSY garantiza que el espectro positivo en el Sector matricial se obtiene a partir de los autoestados de  $\hat{H}_{E0}$  y  $\hat{H}_{E2}$  y por tanto se puede afirmar que el sistema en su conjunto es integrable. Más aún, se comprueba fácilmente que cuando los dos centros colapsan en uno el superpotencial, las supercargas el Hamiltoniano y el segundo operador invariante supersimétricos devienen idénticos a aquellos que caracterizan el problema de Kepler-Coulomb SUSY de carga  $Z_1 + Z_2$ , un hecho más que avala la elección de superpotencial en la forma (5.51).

Hay sin embargo una diferencia importante con el problema de Kepler-Coulomb. En el caso de un centro, los Hamiltonianos no SUSY  $\hat{H}_{NS}$  y supersimétrico en el sector bosónico  $\hat{H}_0$  difieren únicamente en la constante  $\frac{2\mu\alpha^2 Z^2}{\hbar^2}$ . Esta diferencia es necesaria para obtener un espectro no negativo como requiere el álgebra de supersimetría. Nótese que la constante a añadir es precisamente el módulo de la energía del estado fundamental de un átomo hidrogenoideo en el plano de modo que la energía del estado fundamental en el sector bosónico del sistema supersimétrico es cero. En el caso de dos centros, los Hamiltonianos  $\hat{H}_{NS}$  y  $\hat{H}_0$  difieren en la energía potencial no dependiente de la posición de la partícula

$$\begin{aligned}V_S(x_1, x_2) &= \frac{1}{2\mu} \vec{\nabla} W \vec{\nabla} W = \frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2} \left[ Z_1^2 + Z_2^2 + Z_1 Z_2 \left( \frac{r_1}{r_2} + \frac{r_2}{r_1} - \frac{4d^2}{r_1 r_2} \right) \right] \\ \lim_{d \rightarrow 0} V_S(x_1, x_2) &= \frac{2\mu\alpha^2 (Z_1 + Z_2)^2}{\hbar^2}.\end{aligned}$$

Ello se debe que esta elección de superpotencial da lugar al potencial de dos centros a través de la contribución del Laplaciano pero el cuadrado de su gradiente añade esta pieza que podemos

llamar clásica. Esta pieza garantizará que el espectro del sistema supersimétrico construido sobre el potencial de dos centros Coulombianos sea no negativo.

### 5.6.1. Estados ligados bosónicos: reaparición de las ecuaciones de Razavy y Whittaker-Hill

La estructura descrita del Hamiltoniano y del segundo operador invariante en el Sector  $\hat{F} = 0$  garantiza la separabilidad del problema espectral restringido. El ansatz  $\psi^{(0)}(\xi, \eta) = F^{(0)}(\xi)G^{(0)}(\eta)$  reduce el problema espectral

$$\hat{H}_{E0}\psi^{(0)}(\xi, \eta) = E^{(0)}\psi^{(0)}(\xi, \eta)$$

a las dos ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\left\{ -\hbar^2 \frac{d^2}{d\xi^2} + \left[ \frac{4\mu^2\alpha^2 d^2}{\hbar^2} (Z_1 + Z_2)^2 \sinh^2 \xi - 2\mu\alpha d (Z_1 + Z_2) \cosh \xi - 2\mu d^2 E^{(0)} \cosh^2 \xi \right] \right\} F^{(0)}(\xi) = I F^{(0)}(\xi) \quad (5.52)$$

$$\left\{ \hbar^2 \frac{d^2}{d\eta^2} - \left[ \frac{4\mu^2\alpha^2 d^2}{\hbar^2} (Z_1 - Z_2)^2 \sin^2 \eta - 2\mu\alpha d (Z_1 - Z_2) \cos \eta + 2\mu d^2 E^{(0)} \cos^2 \eta \right] \right\} G^{(0)}(\eta) = I G^{(0)}(\eta) \quad (5.53)$$

donde la constante de separación  $I$  es el valor propio del operador  $\hat{I} = -2\mu d^2 \hat{H}_{E0} - 2\hat{I}_{E0}$  que en coordenadas elípticas trigonométricas se escribe como:

$$\hat{I} = -\frac{2\mu d^2}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left[ \cosh^2 \xi \hat{H}_{E,\eta} + \cos^2 \eta \hat{H}_{E,\xi} \right].$$

En las ecuaciones (5.52) y (5.53) se explicita la necesidad de añadir una energía potencial para obtener un espectro no negativo:  $E^{(0)}$  va multiplicada por  $\cosh^2 \xi$  o  $\cos^2 \eta$  y debe aparecer un potencial de esta forma para elevar a positivos los autovalores de energía de los estados ligados.

Como en el caso no supersimétrico el cambio de variable (5.7) transforma las ecuaciones (5.52) y (5.53) también en las ecuaciones de Razavy y de Whittaker-Hill, respectivamente [24]

$$-\frac{d^2 F^{(0)}(x)}{dx^2} + (\zeta \cosh 2x - M)^2 F^{(0)}(x) = \lambda F^{(0)}(x), \quad (5.54)$$

$$\frac{d^2 G^{(0)}(y)}{dy^2} + (\beta \cos 2y - N)^2 G^{(0)}(y) = \nu G^{(0)}(y), \quad (5.55)$$

aunque los parámetros son distintos con respecto de los del caso no SUSY. Los parámetros que aparecen en la ecuación de Razavy que rige el sector  $\hat{F} = 0$  del sistema supersimétrico son [24]:

$$\zeta = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{4\mu^2\alpha^2 d^2 (Z_1 + Z_2)^2}{\hbar^2} - 2\mu d^2 E^{(0)}}, \quad M^2 = \frac{2(Z_1 + Z_2)^2}{2(Z_1 + Z_2)^2 - \frac{\hbar^2}{\mu\alpha^2} E^{(0)}},$$

$$\lambda = M^2 + \frac{4}{\hbar^2} \left[ I + \frac{4\mu^2\alpha^2 d^2 (Z_1 + Z_2)^2}{\hbar^2} \right],$$

Los parámetros que determinan la ecuación de Whittaker-Hill que aparecen en el marco supersimétrico son a su vez los siguientes [24]:

$$\beta = -\frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{4\mu^2\alpha^2 d^2 (Z_1 - Z_2)^2}{\hbar^2} - 2\mu d^2 E^{(0)}} \quad , \quad N^2 = \frac{2(Z_1 - Z_2)^2}{2(Z_1 - Z_2)^2 - \frac{\hbar^2}{\mu\alpha^2} E^{(0)}} \quad ,$$

$$\nu = N^2 + \frac{4}{\hbar^2} \left[ I + \frac{4\mu^2\alpha^2 d^2 (Z_1 - Z_2)^2}{\hbar^2} \right].$$

Siendo las ecuaciones exactamente las mismas que las del sistema no supersimétrico no es cuestión de repetir ahora el procedimiento de búsqueda y análisis de soluciones llevado a cabo en la Sección S5.2. Nos limitaremos a una descripción cualitativa y daremos los autovalores de energía y del segundo operador invariante que corresponden a los nuevos parámetros aunque obedezcan a las mismas autofunciones, por supuesto adaptadas asimismo a los parámetros que llamaremos SUSY.

Recuérdese que la ecuación de Razavy es quasi-exactamente soluble si  $M = n + 1$  con  $n \in \mathbb{N}$ . Ello ocurre si los niveles de energía son[24]:

$$M = n + 1 \quad \Leftrightarrow \quad E_n^{(0)} = \frac{2\mu\alpha^2 (Z_1 + Z_2)^2}{\hbar^2} \left[ 1 - \frac{1}{(n + 1)^2} \right] \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

precisamente los autovalores de energía de un átomo hidrogenoideo plano supersimétrico en el sector  $\hat{F} = 0$  para los  $n$  pares. La razón de la aparición de nuevos niveles con  $n$  impar en el problema de dos centros es la misma que la explicada en el ámbito no SUSY. Como en aquel caso para estos autovalores de la energía uno busca las soluciones asociadas de la ecuación de Razavy (5.54) usando el ansatz (5.10) que convierte (5.54) en la relación de recurrencia (5.11). Cada nivel de energía da lugar a un subespacio de degeneración de dimensión  $n + 1$  distinguiendo cada autofunción mediante las  $n + 1$  raíces  $\lambda_{nm}$  del polinomio  $P_{n+1}(\lambda)$ , valores del parámetro  $\lambda$  en la ecuación de Razavy que conllevan la truncación de la serie a un polinomio. Como el procedimiento se ha explicitado en la Sección S. 5.2.2. para describir los tres primeros niveles de energía, nos limitamos a mostrar en la Tabla 5.17 los nuevos autovalores. Una primera conclusión: estos autovalores son positivos menos el estado fundamental que tiene energía cero y por tanto es un singlete SUSY, todo ello de acuerdo con supersimetría. Para  $E_n^{(0)}$  e  $I_{nm}^{(0)}$ , los parámetros de la ecuación de Whittaker-Hill (5.55) son [24]:

$$\beta_n = -\frac{4\mu\alpha d}{\hbar^2} \sqrt{\frac{(Z_1 + Z_2)^2}{(n + 1)^2} - 4Z_1 Z_2} \quad , \quad \mu_{nm} = N_n^2 + \frac{4}{\hbar^2} \left[ I_{nm}^{(0)} + \frac{4\mu^2\alpha^2 d^2 (Z_1 - Z_2)^2}{\hbar^2} \right]$$

Tabla 5.17: Valores propios del Hamiltoniano  $\hat{H}_0$  y del operador  $\hat{I}_0$  provenientes de truncar la solución en serie de la ecuación de Razavy (5.54)

Energía	Constante de separación
$E_0^{(0)} = 0$	$I_{01}^{(0)} = 0$
$E_1^{(0)} = \frac{3\mu\alpha^2}{2\hbar^2}(Z_1 + Z_2)^2$	$I_{11}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{4} - \frac{3\mu^2\alpha^2 d^2}{\hbar^2}(Z_1 + Z_2)^2 - \mu\alpha d(Z_1 + Z_2)$ $I_{12}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{4} - \frac{3\mu^2\alpha^2 d^2}{\hbar^2}(Z_1 + Z_2)^2 + \mu\alpha d(Z_1 + Z_2)$
$E_2^{(0)} = \frac{16\mu\alpha^2}{9\hbar^2}(Z_1 + Z_2)^2$	$I_{21}^{(0)} = -\hbar^2 - \frac{32\mu^2\alpha^2 d^2}{9\hbar^2}(Z_1 + Z_2)^2$ $I_{22}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2} - \frac{32\mu^2\alpha^2 d^2}{9\hbar^2}(Z_1 + Z_2)^2 - \frac{\hbar^2}{2}\sqrt{1 + \frac{64\mu^2\alpha^2 d^2}{9\hbar^4}(Z_1 + Z_2)^2}$ $I_{23}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2} - \frac{32\mu^2\alpha^2 d^2}{9\hbar^2}(Z_1 + Z_2)^2 + \frac{\hbar^2}{2}\sqrt{1 + \frac{64\mu^2\alpha^2 d^2}{9\hbar^4}(Z_1 + Z_2)^2}$

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{Z_1+Z_2}{Z_1-Z_2}\right)^2 \left(1 - \frac{1}{(n+1)^2}\right)}} .$$

Excepto en el caso  $n = 0$ ,  $N_n$  no es un entero positivo y la ecuación de WH (5.55) para estos parámetros no es quasi-exactamente soluble. No obstante, como en el caso no SUSY, existen soluciones en forma de serie de la ecuación correspondiente de WH que convergen y proporcionan, multiplicadas por las soluciones finitas de la ecuación de Razavy (5.54), las autofunciones de los estados ligados excitados en el Sector bosónico:  $\Psi_{nm}^{(0)}(\xi, \eta) = F_{nm}^{(0)}(\xi)G^{(0)}(\eta; E_n^{(0)}, I_{nm}^{(0)})$ . Los estados propios del Hamiltoniano SUSY en el sector fermiónico  $\hat{F} = 1$  obtenidos a partir de estos mediante la acción de la supercarga

$$\Psi_{nm}^{(1)}(\xi, \eta) = \hat{Q}^\dagger \Psi_{nm}^{(0)}(\xi, \eta)$$

tienen energía  $E_n^{(1)} = E_n^{(0)}$  y forman, junto con  $\Psi_{nm}^{(0)}(\xi, \eta)$ , pues dobletes del álgebra SUSY. Por completitud mencionaremos que soluciones con energía  $E^{(0)} \geq \frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}$  son estados de scattering bosónicos y podrían en principio ser tratados como soluciones combinadas de este tipo de las ecuaciones de Razavy y WH. No las discutiremos sin embargo en este trabajo.

### 5.6.2. Los estados fundamentales singletes

Cabría preguntarse por la existencia de funciones de onda de tipo Demkov o elementales como aquellas que aparecen en el problema de dos centros no SUSY tanto en dos como en tres dimensiones. La condición necesaria para tener soluciones finitas tanto en la variable radial como en la angular para la misma energía  $E_n^{(0)} = E_k^{(0)}$  es la existencia de soluciones de la ecuación

$$Z_1 \left[ (k+1)\sqrt{n(n+2)} - (n+1)\sqrt{k(k+2)} \right] = Z_2 \left[ (k+1)\sqrt{n(n+2)} + (n+1)\sqrt{k(k+2)} \right] \quad (5.56)$$

sobre dos enteros positivos  $n$  y  $k$  puesto que equivale a tener  $M = n+1$  y  $N = k+1$  en las ecuaciones de Razavy y WH a resolver. Es claro que la ecuación (5.56), mucho más difícil que la diofántica correlativa en el problema no SUSY, no admite soluciones sobre dos enteros si al menos uno de los dos es distinto de cero. En contraposición al problema de dos centros no supersimétricos no hay funciones de onda de Demkov en el espectro positivo del Hamiltoniano supersimétrico de dos centros Coulombianos para ningún valor de la distancia intercentros.

La situación es también diferente respecto del estado fundamental. Comprobamos en la Sección S.5.2 que en el sistema no SUSY el estado fundamental no es de tipo Demkov cuando ambos centros son atractivos. La única solución sobre los enteros de (5.56) es  $n = 0 = k$ , que significa que el estado fundamental en el sistema SUSY es la única función de onda elemental de tipo Demkov. Como además es un modo cero es aniquilado por las dos supercargas y es pues un singlete del álgebra SUSY. Este tipo de estados tiene propiedades muy especiales y juegan un papel central en las propiedades matemáticas y las implicaciones físicas de los sistemas supersimétricos. Conviene pues analizarlo detalladamente. La parte de la función de onda radial no sólo selecciona que la energía del estado fundamental es cero si no que corresponde a un autovalor también nulo del segundo operador invariante: si  $n = 0$ ,  $E_0^{(0)} = 0$  e  $I_{01}^{(0)} = 0$ . La parte angular de la función de onda de este estado es regulada por una ecuación de Whittaker-Hill cuasi-exactamente soluble [69]. Los parámetros son:

$$\beta_0 = -\frac{4d}{a_0}(Z_1 - Z_2) \quad , \quad N_0 = 1 \quad , \quad \nu_{01} = 1 + \frac{16d^2}{a_0^2}(Z_1 - Z_2)^2$$

La raíz  $\nu_{01}$  del polinomio  $Q_1(\nu)$  en el ansatz (5.12), obtenido de la relación de recurrencia (5.13), trunca la serie al orden cero. Más aún, dada la relación entre la constante de separación y el parámetro  $\nu$ , este valor fija esta constante de separación a cero de modo que las ecuaciones de Razavy y WH son compatibles. No sólo eso, si no que siendo  $I_{01} = 0$  y por tanto independiente de  $d$  la compatibilidad existe para cualquier distancia intercentros. El ansatz (5.12) proporciona entonces la parte angular de la función de onda y por tanto, multiplicada por la radial la función

de onda completa del estado fundamental en el sector  $\mathcal{SH}_0$ :

$$\begin{aligned} E_0^{(0)} = 0 \quad , \quad I_{01}^{(0)} = 0 \quad , \quad G_{01}^{(0)}(y) = e^{\frac{2d}{a_0}(Z_1 - Z_2) \cos 2y} \\ \Psi_{0101}^{(0)}(x, y) = F_{01}^{(0)}(x)G_{01}^{(0)}(y) = e^{-\frac{2d}{a_0}(Z_1 + Z_2) \cosh 2x} e^{\frac{2d}{a_0}(Z_1 - Z_2) \cos 2y} . \end{aligned}$$

De hecho, una forma directa de dilucidar el modo cero bosónico de un sistema supersimétrico es exponenciar el superpotencial:

$$\Psi_0(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{\hbar}W(x_1, x_2)} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_{0101}^{(0)}(x_1, x_2) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{2}{a_0}(Z_1 r_1 + Z_2 r_2)} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.57)$$

Claramente  $\hat{Q}$  anula  $\Psi_0(x_1, x_2)$  por pertenecer al sector con  $\hat{F} = 0$  que estabién un elemento del núcleo de  $\hat{Q}^\dagger$ . Es por tanto un modo cero bosónico del Hamiltoniano sin formar un par supersimétrico con ningún autoestado fermiónico. Es posible calcular su norma con ayuda de Mathematica

$$\begin{aligned} N^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 e^{-\frac{2}{\hbar}W(x_1, x_2)} = \frac{\pi}{2} \frac{d}{a_0} \left[ \frac{1}{Z_1 + Z_2} I_0 \left( \frac{4a_0}{d}(Z_1 - Z_2) \right) K_1 \left( \frac{4a_0}{d}(Z_1 + Z_2) \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{Z_1 - Z_2} I_1 \left( \frac{4a_0}{d}(Z_1 - Z_2) \right) K_0 \left( \frac{4a_0}{d}(Z_1 + Z_2) \right) \right] , \end{aligned}$$

para encontrar una respuesta finita en términos de funciones de Bessel del primer y del segundo tipo. El estado fundamental tiene pues energía cero y la supersimetría del sistema no es espontáneamente rota.

### 5.6.3. Dos centros de igual intensidad: funciones propias y valores propios de estado ligado en el caso $Z_1 = Z$

En el caso  $Z_1 = Z_2$  cuando la intensidad de los centros es idéntica, el problema espectral supersimétrico en  $\mathcal{SH}_0$  se simplifica considerablemente en su parte angular. La parte radial sigue gobernada por la ecuación de Razavy y uno sólo ha de adaptar los parámetros a los números atómicos  $Z_1 = Z_2 = Z$  de modo que  $Z_1 + Z_2 = 2Z$  y  $Z_1 - Z_2 = 0$ . La anulación de la diferencia convierte, como en el caso no SUSY, (5.53) en la ecuación de Mathieu [24]

$$-\frac{d^2 G^{(0)}(y)}{dy^2} + (\alpha \cos 4y + \sigma) G^{(0)}(y) = 0 \quad (5.58)$$

con unos parámetros ligeramente diferentes en este caso supersimétrico:

$$\alpha = -\frac{4\mu d^2 E^{(0)}}{\hbar^2} \quad , \quad \sigma = \frac{4}{\hbar^2} (I^{(0)} + \mu d^2 E^{(0)})$$

Así pues las soluciones de energía mayor que cero son combinaciones de las funciones seno y coseno de Mathieu [70, 68] como en el caso no SUSY de las que sólo se diferencian en los valores de los parámetros. Al igual que en el sistema de dos centros con diferente intensidad, sin embargo, el estado fundamental es una excepción, ya que este no se rige por una ecuación de Mathieu. Dado que,  $\alpha_0 = \frac{4\mu d^2 E_0^{(0)}}{\hbar^2} = 0$  y  $\sigma_{01} = \frac{4}{\hbar^2} (I_{01} + \mu d^2 E_0^{(0)}) = 0$  se encuentra que:

$$-\frac{d^2 G_{01}^{(0)}(y)}{dy^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad G_{01}^{(0)}(y) = Ay + B .$$

Si los dos centros tienen la misma intensidad una importante simetría discreta surge: el cambio  $r_1 \leftrightarrow r_2$  no es detectable, por tanto  $\eta \leftrightarrow -\eta$ , o equivalentemente  $y \leftrightarrow y + \frac{\pi}{2}$  es una simetría del sistema, así que nos quedamos con las únicas soluciones invariantes bajo esta transformación, que corresponden a  $G_{01}^{(0)}(y) = B$ . Existen solo dos elecciones independientes que son  $B = 1$  y  $B = 0$ , la primera de las cuales es “par” en  $\eta$ , mientras que la segunda es “impar” en  $\eta$  pero despreciable. El estado fundamental es entonces construido a partir de la función de onda  $\eta$ -independiente par:  $\Psi_{0101}^{(0)}(\xi, \eta) = F_{01}^{(0)}(\xi)G_{01}^{(0)}(\eta) = e^{-\frac{4d}{a_0} \cosh \xi}$ .

Tabla 5.18: Parámetros de las funciones seno y coseno de Mathieu para  $n = 1, 2$

$q_n(d)$	$a_{nm}(d)$
$q_1(d) = \frac{3d^2}{a_0^2}$	$a_{11}(d) = \frac{1}{4} + \frac{2d}{a_0} + \frac{6d^2}{a_0^2}$ $a_{12}(d) = \frac{1}{4} - \frac{2d}{a_0} + \frac{6d^2}{a_0^2}$
$q_2(d) = \frac{32d^2}{9a_0^2}$	$a_{21}(d) = 1 + \frac{64d^2}{9a_0^2}$ $a_{22}(d) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{256d^2}{9a_0^2}} + \frac{64d^2}{9a_0^2}$ $a_{23}(d) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{256d^2}{9a_0^2}} + \frac{64d^2}{9a_0^2}$

Los parámetros de las ecuaciones de Mathieu fijados por las soluciones finitas de la ecuación de Razavy para energías positivas ( $n \geq 1$ ) son :

$$\alpha_n = \frac{4\mu d^2 E_n^{(0)}}{\hbar^2} \quad , \quad \sigma_{nm} = \frac{4}{\hbar^2} (I_{nm} + \mu d^2 E_n^{(0)}) .$$

Como en el caso no SUSY, se elige la combinación [24]

$$G_{nm}^{(0)}(y) = C[a_{nm}(d), q_n(d), 2y] + iS[a_{nm}(d), q_n(d), 2y] ,$$



para construir funciones propias de energía positiva, con miras a considerar el sistema de Kepler-Coulomb en el límite  $d = 0$ , donde los parámetros de las funciones seno y coseno de Mathieu son:  $q_n = \frac{\alpha_n}{8}$ ,  $a_{nm} = -\frac{\sigma_{nm}}{4}$ . Los valores más bajos de estos parámetros se muestran en la Tabla 5.18. En la Tabla 5.19 se recogen gráficas de las densidades de probabilidad de algunas funciones propias para varios valores de  $\bar{h} = +\sqrt{\frac{a_0}{d}}$ .

#### 5.6.4. Comparación entre el espectro supersimétrico $\mathcal{N} = 2$ y el espectro $\mathcal{N} = 0$

El espectro del Hamiltoniano de Euler -dado por la solución del sistema de ecuaciones (??), (??)- así como el espectro del Hamiltoniano supersimétrico de Euler  $\hat{H}_0$  restringido al sector  $\mathcal{SH}_0$  del espacio de Hilbert supersimétrico -dado por la solución del sistema de ecuaciones (5.52), (5.53)- se relacionan a continuación [24]:

$$1. \mathcal{N} = 0 \quad , \quad E_n = -\frac{2d(Z_1+Z_2)^2}{a_0(n+1)^2} \quad , \quad 0 < Z_2 \leq Z_1$$

$$2. \mathcal{N} = 2 \quad , \quad E_n^{(0)} = \frac{2d(Z_1+Z_2)^2}{a_0} \left[ 1 - \frac{1}{(n+1)^2} \right]$$

La degeneración del  $n$ -ésimo nivel de energía es  $n + 1$  en ambos casos y se resuelve por los valores propios del segundo operador invariante, respectivamente  $\hat{I}$  y  $\hat{I}^{(0)}$ .

Como en el problema de Kepler-Coulomb supersimétrico existen estados ligados en  $\mathcal{SH}_1$  de la forma:

$$\Psi_{nm}^{(1)}(r_1, r_2) = \hat{Q}^\dagger \Psi_{nm}^{(0)}(r_1, r_2) \quad , \quad n \geq 1 \quad , \quad m = 1, 2, \dots, n + 1$$

La sorpresa es que, a diferencia del problema de Kepler-Coulomb supersimétrico, existe una función de onda de energía cero en  $\mathcal{SH}_1$  aniquilada por las dos supercargas:

$$\hat{Q}\Psi_0^{(1)}(x_1, x_2) = \hat{Q}^\dagger\Psi_0^{(1)}(x_1, x_2) = 0 \quad , \quad E_0^{(1)} = 0$$

$$\Psi_0^{(1)}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 0 \\ -\text{sign}(x_2) \frac{r_1+r_2}{4dr_1r_2} \sqrt{4d^2 - (r_1 - r_2)^2} \\ \frac{r_2-r_1}{4dr_1r_2} \sqrt{(r_1 + r_2)^2 - 4d^2} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{2(Z_2r_1+Z_1r_2)}{a_0}} .$$

En el límite donde los dos centros coinciden esta función de onda pasa a ser:

$$\lim_{d \rightarrow 0} \psi_0^{(1)}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{x_2}{x_1^2+x_2^2} \\ \frac{x_1}{x_1^2+x_2^2} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{2(Z_1+Z_2)}{a_0} \sqrt{x_1^2+x_2^2}} .$$

Tabla 5.19: Funciones de onda supersimétricas  $\mathcal{N} = 2$  en  $\mathcal{SH}_0$  de dos centros iguales:  $Z_1 = Z_2$ .

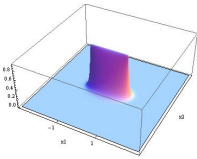
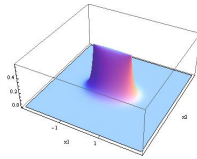
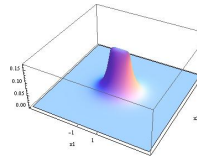
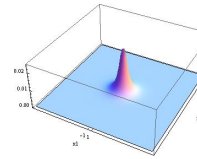
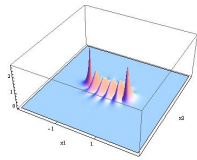
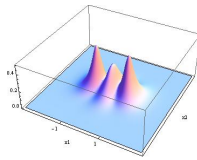
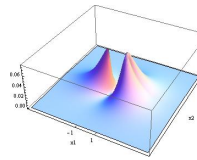
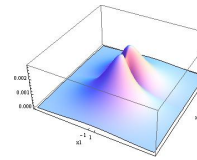
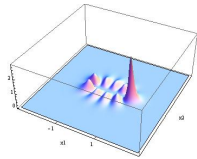
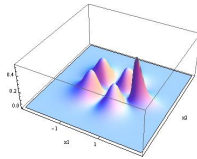
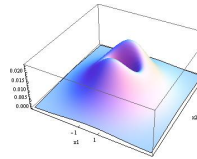
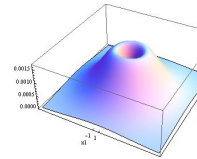
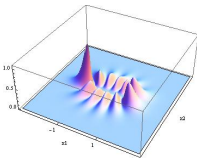
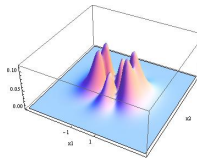
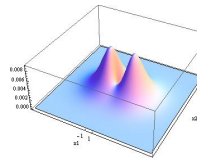
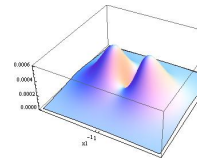
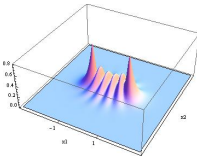
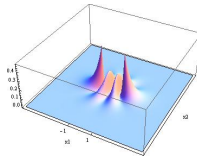
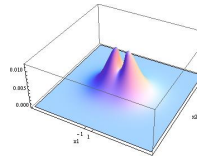
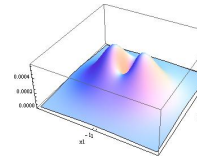
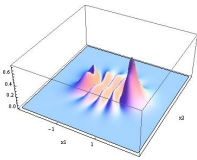
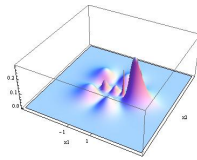
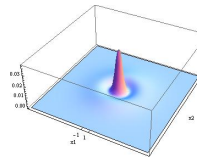
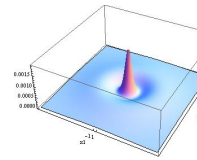
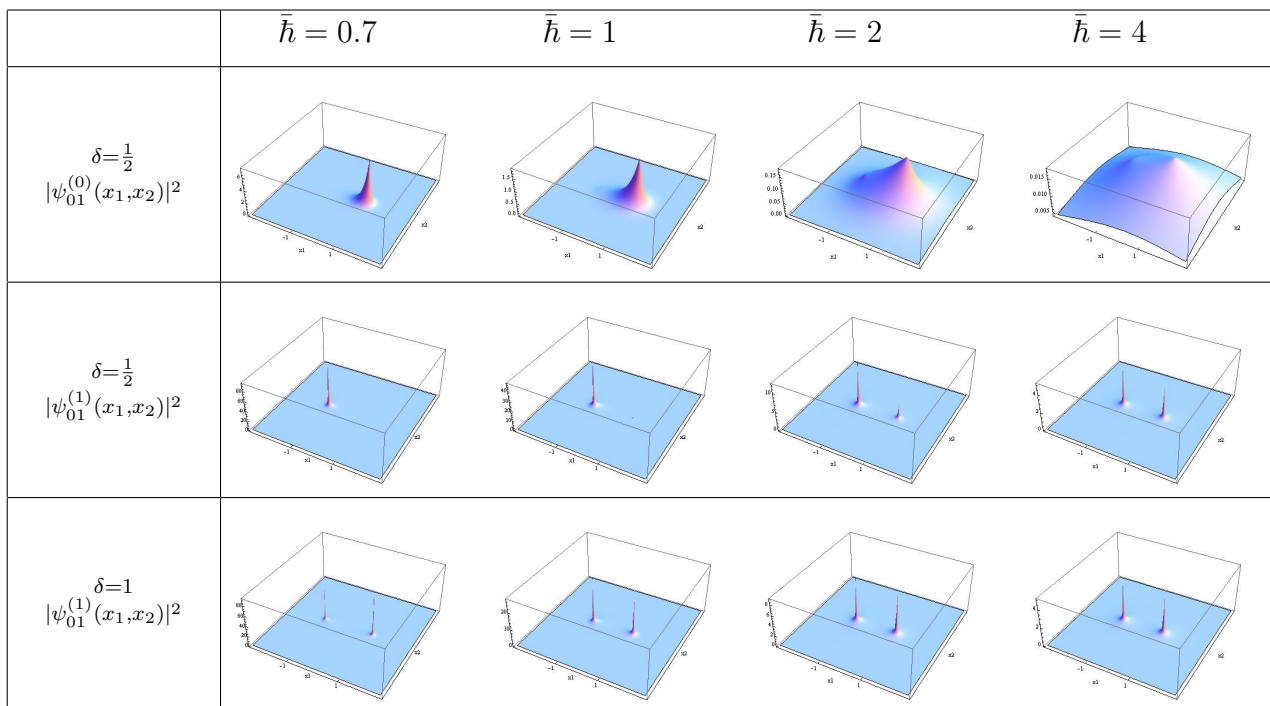
	$\bar{h} = 0.7$	$\bar{h} = 1$	$\bar{h} = 2$	$\bar{h} = 4$
$n = 0, m = 1$				
$n = 1, m = 1$				
$n = 1, m = 2$				
$n = 2, m = 1$				
$n = 2, m = 2$				
$n = 2, m = 3$				

Tabla 5.20: Modos cero supersimétricos  $\mathcal{N} = 2$ .

Obsérvese que la norma, que para  $d > 0$  es finita, diverge cuando los dos centros colapsan:

$$\lim_{d \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \left| \psi_0^{(1)}(x_1, x_2) \right|^2 = \lim_{d \rightarrow 0} 2\pi K_0 \left( \frac{4\mu\alpha d}{\hbar^2} (1 + \delta) \right) I_0 \left( \frac{4\mu\alpha d}{\hbar^2} (1 - \delta) \right) = +\infty .$$

Aquí  $K_0(z)$  e  $I_0(z)$  son funciones de Bessel modificadas del primer y segundo tipos. Existe pues un estado fundamental singlete fermiónico en el sistema de Euler-Coulomb supersimétrico lo que indica que en este sistema no hay ruptura espontánea de supersimetría con índice de Witten cero. No hay, sin embargo, modo cero fermiónico en el problema de Kepler SUSY donde el índice de Witten es uno. La simetría dinámica prescribe que en este último caso el estado fundamental debe pertenecer a la representación escalar de  $\mathbb{SO}(3)$ .

En la Tabla 5.20 se muestra la comparación entre los modos cero bosónicos y fermiónicos, donde el centro situado a la derecha es dos veces más intenso que el centro situado a la izquierda. En el estado fundamental bosónico el electrón está concentrado alrededor del centro más intenso para pequeños valores de  $\hbar$  y se reparte sobre los dos centros cuando los valores de  $\hbar$  se incrementan. En el estado fundamental fermiónico, la superpartícula se comporta en forma opuesta, esto es, para pequeños valores de  $\hbar$  esta se concentra alrededor del centro menos intenso, mientras que para mayores valores  $\hbar$  aparecen dos picos sobre los dos centros. Más aún, para cualquier valor de  $\hbar$  la densidad de probabilidad del estado fundamental en  $\mathcal{SH}_1$  está en todos los casos concentrada alrededor de los centros. Por otro lado, con respecto a las soluciones de scattering con energías mayores que  $\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}(1 + \delta)^2$ , la estructura del espectro es cualitativamente idéntica al espectro del problema de Kepler supersimétrico. Existen pues estados de scattering en  $\mathcal{SH}_0$  vinculados a los estados de scattering en  $\mathcal{SH}_1$  a través de la supercarga  $\hat{Q}^\dagger$  y estados de scattering en  $\mathcal{SH}_2$  vinculados a los estados de scattering en  $\mathcal{SH}_1$  a través de la supercarga  $\hat{Q}$ , esto es esquematizado en la Figura 5.8:

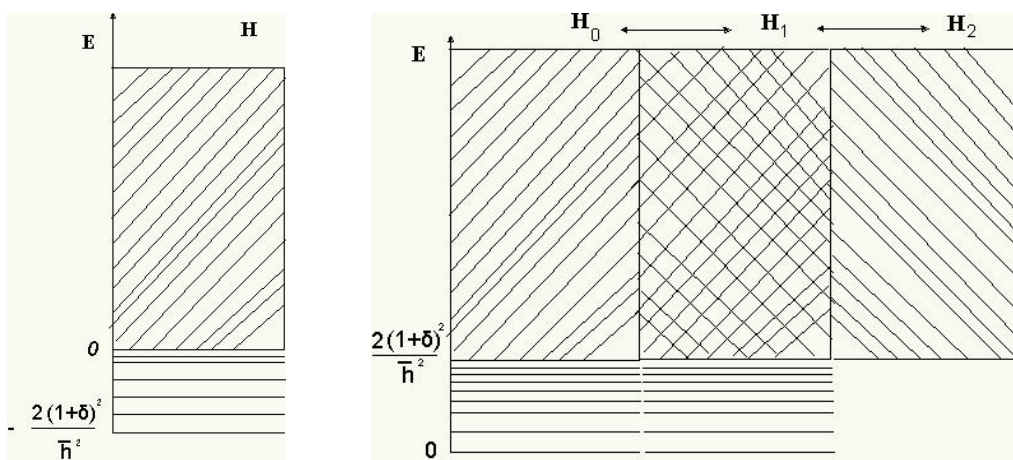


Figura 5.8: Espectro del Hamiltoniano de Euler (izquierda) y espectro del Hamiltoniano de Euler supersimétrico (derecha).

# Capítulo 6

## Fluctuaciones cuánticas de campos escalares $1 + 1$ dimensionales en un campo de fondo clasico

### 6.1. Energía de Casimir

En 1948 mientras investigaba las fuerzas de Van der Waals en fluidos coloidales el físico holandés Hendrick Brugt Gerhard Casimir predijo que las fluctuaciones del vacío electromagnético (estado fundamental del campo electromagnético cuántico) sería la causa de una fuerza atractiva entre dos placas paralelas neutras perfectamente conductoras [26]. Esto se conoce como efecto Casimir y es un efecto puramente cuántico ya que en el marco de la electrodinámica clásica no existe tal fuerza. La electrodinámica cuántica, sin embargo, contempla la creación/destrucción de pares electrón-positrón en el vacío electromagnético<sup>1</sup> los cuales, aunque no directamente observables, se manifiestan por cortos periodos de tiempo dando lugar a correcciones cuánticas en algunos procesos físicos. Estos pares son creados de la nada y existen por un periodo de tiempo compatible con la relación de incertidumbre de Heisenberg  $\Delta t \Delta E = \frac{\hbar}{2}$  antes de ser aniquilados de vuelta al vacío, fenómenos en que se viola la conservación de la energía por un lapso de tiempo cortísimo y al que se alude con el nombre de fluctuaciones del vacío. La energía de estas fluctuaciones, que se suele denominar como energía del punto cero, es en rigor infinita incluso en ausencia de placas ó cualquier otro dispositivo externo al campo electromagnético. Lo que es medible, sólo las diferencias de energías son sensibles, es la energía del punto cero debida a fluctuaciones del campo electromagnético en presencia de las placas con respecto a la misma magnitud en ausencia de cualquier influencia

---

<sup>1</sup>Este proceso se denomina polarización del vacío.

externa. Las placas modifican la estructura del espectro de fluctuaciones del vacío con respecto a la que ocurre en ausencia de placas de modo que se genera una presión de radiación en la región entre placas dando lugar a una fuerza atractiva entre ellas. Se puede entender pues que el origen del efecto Casimir es esencialmente geométrico ya que es la existencia de fronteras (placas conductoras) la que modifica la estructura del vacío electromagnético: los modos normales de oscilación del campo, que en el ámbito cuántico dan lugar a fotones y estos a los pares electrón/positrón, cambian al introducir las placas debido a que la componente tangencial del campo eléctrico en la superficie de las mismas debe anularse.

De modo general se define la energía del vacío -energía de Casimir- de un campo cuántico en la forma [72]

$$E_{vac}[\partial\Gamma] = E_0[\partial\Gamma] - E_0[0] ,$$

donde  $\partial\Gamma$  representa una frontera arbitraria,  $E_0[\partial\Gamma]$  es la energía total del vacío en presencia de las fronteras y  $E_0[0]$  es la energía total del vacío en el caso en el que no haya fronteras presentes. Modificaciones diversas de la energía del vacío debida a las fluctuaciones de un campo cuántico responden a factores tales como: la naturaleza del campo de “fondo” en el ámbito del campo cuántico considerado, la geometría de las fronteras, la dimensión del espacio-tiempo y/o la posible curvatura del espacio-tiempo. El conjunto de fenómenos derivados de las fluctuaciones del vacío de un campo cuántico en todas estas situaciones descritas se designa en forma genérica como efecto Casimir [27]. Conceptualmente imaginado por Casimir en conversaciones con Bohr en torno a 1949, sólo es en la década de los noventa cuando encuentra verificación experimental.

Se han estudiado profusamente los efectos de la geometría de las fronteras y los distintos tipos de condiciones de contorno sobre la estructura del vacío de campos cuánticos, en particular los casos de fronteras ideales. La incorporación de condiciones de contorno en una teoría cuántica de campos relativista usualmente va acompañada de cierto grado de idealización: en primer lugar, es frecuente considerar fronteras estáticas, con localización y forma determinadas. A continuación las condiciones de contorno conllevan alguna aproximación. Por ejemplo, las condiciones de contorno de Dirichlet fuerzan la anulación de las fluctuaciones del campo en la frontera, que resulta así impenetrable a la propagación de los quanta del campo.

No obstante, en condiciones realistas, las fronteras no son perfectamente suaves y estáticas. Además, para ciertas frecuencias las fronteras resultan total ó parcialmente transparentes. Una placa metálica neutra no es una frontera impenetrable para todas las frecuencias asociadas a un campo electromagnético cuántico. La descripción en términos de fronteras y condiciones de contorno ideales por tanto no es completamente apropiada.

En orden a obtener una aproximación más precisa de estos fenómenos se ha propuesto mantener las fronteras estáticas y simular ciertas condiciones de contorno más realistas por un potencial

externo:  $U(\vec{x})$  [73]. Al fluctuar no de forma libre sino sometido a un potencial externo los modos de fluctuación de un campo cuántico se ven modificados como ocurre en el efecto Casimir con la diferencia de que no existen paredes sobre las cuales se ejerza una fuerza [73] en el caso de considerar potenciales genéricos como por ejemplo solitónicos. En este contexto, sin embargo, se ha sugerido que el efecto Casimir entre placas paralelas neutras perfectamente conductoras puede ser descrito considerando un campo de fondo dado por dos barreras delta de Dirac de intensidad infinita [74, 76, 77, ?]. La implicación para dos placas semi- o parcialmente transparentes de este truco matemático se trata en [78] Bordag et. al. donde se estudia la interacción inducida por efectos cuánticos en el vacío entre dos barreras delta de Dirac idénticas en el caso de fluctuaciones de campos escalares y espinoriales. Es este marco teórico el que nos proponemos estudiar en este Capítulo en el caso particular de un campo escalar restringido a un espacio tiempo bidimensional. Los resultados obtenidos anteriormente en el Capítulo 2 y el Apéndice A sobre los procesos de scattering unidimensional de una partícula en el potencial de dos deltas de Dirac serán pues básicos en el desarrollo del Capítulo presente.

Desarrollos teóricos provenientes del análisis de procesos multi-scattering en fenómenos ópticos son de gran utilidad en esta tarea. En particular Kenneth y Klich exploraron la aproximación de scattering a la descripción del efecto Casimir en términos del operador  $\mathbf{T}$  o matriz de transferencia que surge en la resolución de la ecuación de Lippmann-Schwinger del scattering [79, ?]. En la referencia [79] se estudia el caso de un campo escalar acoplado a un fondo dieléctrico y se expresa la energía de Casimir de objetos compactos en términos de la fórmula llamada  $\mathbf{TGTG}$  donde cada  $\mathbf{T}$  alude al scattering por cada uno de los objetos mientras que cada  $G$  (función de Green) describe la propagación libre de las fluctuaciones hasta/desde uno de los obstáculos ó la propagación entre obstáculos. Diversas aplicaciones y extensiones de este sugestivo formalismo en situaciones más generales se consideran en [?] además de estudiarse detalladamente las propiedades analíticas del llamado operador  $TGTG$ .

## 6.2. La ecuación de campo y la función de Green

Las fluctuaciones de campos escalares unidimensionales

$$\begin{aligned} \Phi(x^\mu) : \mathbb{R}^{1,1} &\rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad x^\mu \in \mathbb{R}^{1,1} \quad , \quad \mu = 0, 1 \quad , \quad x^0 = t \quad , \quad x^1 = x \\ x_\mu x^\mu &= t^2 - x^2 = g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu \quad , \quad g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1) \end{aligned}$$

sobre campos de fondo clásicos estáticos modelados por la función  $U(x)$  son gobernados por la acción:

$$S[\Phi] = \int d^2x \left[ \frac{1}{2} \partial_\mu \Phi \partial^\mu \Phi - \frac{1}{2} U(x) \Phi^2(x, t) \right] \quad , \quad \partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad . \quad (6.1)$$



Con el fin de tener un problema de scattering bien definido imponemos la condición de área finita sobre el “fondo” clásico  $U(x)$  [8]

$$\lim_{x \pm \infty} U(x) = m^2, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx [U(x) - m^2] < +\infty$$

La ecuación de campo clásica y la ecuación de la función de Green proveniente de la acción (6.1) son:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right] \Phi(x, t) = 0, \quad (6.2)$$

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right] G(x, t; x', t') = \delta(x - x')\delta(t - t'). \quad (6.3)$$

La descomposición de Fourier en la coordenada temporal del campo fluctuante

$$\Phi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega t} \phi_\omega(x),$$

y el uso de la ecuación de campo proporcionan el operador de Schrödinger de fluctuación estática

$$-\phi_\omega''(x) + U(x)\phi_\omega(x) = \omega^2\phi_\omega(x).$$

La misma descomposición de Fourier lleva a la función de Green reducida

$$G(x, t; x', t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega(t'-t)} G_\omega(x, x') \quad (6.4)$$

y su correspondiente ecuación diferencial

$$\left[ -\omega^2 - \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] G_\omega(x, x') = \delta(x - x').$$

La función de Green reducida es usada para calcular la energía de Casimir ó bien mediante el cálculo del tensor de tensiones ó bien en el marco del formalismo **TGTG** desarrollado en las referencias [77, ?, ?, 80].

### 6.3. El tensor momento-energía

El valor esperado de la energía en el estado de vacío de un campo cuántico está relacionado con uno de los valores esperados de un importante observable de campo local: el tensor momento-energía  $T^{\mu\nu}$ . En efecto, la componente (0, 0) de este tensor es la densidad de energía del campo, las componentes (0,  $i$ ) caracterizan los flujos de energía ó momentos mientras que

las componentes  $(i, k)$  describen las propiedades mecánicas del vacío como el tensor de tensiones de un medio continuo [77, ?].

El tensor momento-energía, vía teorema de Nöther, responde a las traslaciones espacio-temporales de la acción funcional (6.1), esto es:

$$T_{\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial g^{\mu\nu}} = \partial_\mu \Phi \partial_\nu \Phi - g_{\mu\nu} \mathcal{L} \quad ,$$

donde tomaremos la densidad Lagrangiana  $\mathcal{L}$  de un campo escalar sin masa en el fondo estático  $U(x)$  como:

$$\mathcal{L} = \left[ \frac{1}{2} \partial_\mu \Phi \partial^\mu \Phi - \frac{1}{2} U(x) \Phi^2(x, t) \right].$$

Nótese que el efecto del “fondo” estático  $U(x)$  equivale a la inducción de una masa dependiente de la posición sobre las fluctuaciones del campo. La componente  $(0, 0)$  del tensor momento-energía, la densidad de energía para cualquier evolución del campo, es por tanto:

$$\begin{aligned} T_{00}(x, t) &= \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 + U(x) \Phi^2(x, t) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[ -\Phi(x, t) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - \Phi(x, t) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + U(x) \Phi^2(x, t) \right]. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Para las soluciones de las ecuaciones de campo derivadas de la acción (6.1) una integración parcial en (6.5) simplifica la expresión de la densidad de energía en la forma:

$$T_{00}(x, t) = \left( \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)^2 .$$

Dado que la función de Green es también el valor esperado en el vacío del producto cronológico de dos operadores de campo

$$G(x, t; x', t') = i \langle 0 | T[\hat{\Phi}(x, t) \hat{\Phi}(x', t')] | 0 \rangle ,$$

resulta que el valor esperado en el vacío de la densidad de energía se expresa en términos de la función de Green en la forma [?]:

$$\langle 0 | \hat{T}_{00}(x) | 0 \rangle = \frac{1}{i} \partial_t \partial_{t'} G(x, t; x', t') \Big|_{x=x', t=t'} \quad , \quad (6.6)$$

mientras que la energía total del vacío es la integral de  $\langle 0 | \hat{T}_{00}(x) | 0 \rangle$  sobre toda la recta real. La expresión (6.6) es la fórmula básica que relaciona la función de Green con el valor esperado en el vacío de la componente  $(0, 0)$  del tensor momento-energía y es en consecuencia el fundamento del método del tensor momento-energía para calcular la energía de Casimir de un campo cuántico.

## 6.4. El método TGTG en teorías escalares 1 + 1 dimensionales

Basándonos en las Referencias [78], [29], [27], y [80] resumimos en esta Sección las fórmulas y resultados principales que conducen a la fórmula **TGTG** que determina la energía de Casimir, o equivalentemente, la interacción inducida por fluctuaciones cuánticas del vacío, entre dos objetos compactos en teorías de campos escalares en espacio-tiempos de (1 + 1) dimensiones. La definición formal de la matriz de transferencia **T** del scattering se sigue de la ecuación integral del scattering para la función de Green del operador proveniente de la ecuación de Lippman-Schwinger que describe el proceso de scattering desencadenado por el operador de Schrödinger

$$\mathbf{K} = -\frac{d^2}{dx^2} + U(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + m^2 + V(x) = \mathbf{K}^0 + V(x) \quad .$$

Esto es,

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}^{(0)} - \mathbf{G}^{(0)} \cdot \mathbf{V} \cdot \mathbf{G} \equiv \mathbf{G} = \mathbf{G}^{(0)} - \mathbf{G}^{(0)} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{G}^{(0)} \quad , \quad (6.7)$$

donde **G** y **G**<sup>(0)</sup> son respectivamente las funciones de Green o resolventes de los operadores **K** y **K**<sup>0</sup>, define el operador o matriz de transferencia **T** en términos del operador potencial y la función de Green libre, veáse [8], [16] y el Apéndice A. Más aún, la resolución del ecuación integral del scattering para la función de Green (refmatT) mediante suma de la serie de Born por la derecha  $\mathbf{G} = \mathbf{G}^{(0)} \cdot (\mathbf{I} + \mathbf{V} \cdot \mathbf{G}^{(0)})^{(-1)}$  da lugar a la relación

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}^{(0)} - \frac{\mathbf{G}^{(0)} \cdot \mathbf{V} \cdot \mathbf{G}^{(0)}}{\mathbf{I} + \mathbf{V} \cdot \mathbf{G}^{(0)}} = \mathbf{G}^{(0)} - \mathbf{G}^{(0)} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{G}^{(0)} \quad , \quad (6.8)$$

de donde se sigue la definición formal de la matriz de transferencia:

$$\mathbf{T} = \frac{\mathbf{V}}{\mathbf{I} + \mathbf{V} \cdot \mathbf{G}^{(0)}} \quad .$$

Escrita explícitamente en términos de los correspondientes núcleos integrales en nuestro caso unidimensional aplicado a la función de Green reducida toma la forma

$$G_{\omega}^{(V)}(x, y) = G_{\omega}^{(0)}(x, y) + \int dz_1 dz_2 G_{\omega}^{(0)}(x, z_1) T_{\omega}^{(V)}(z_1, z_2) G_{\omega}^{(0)}(z_2, y) \quad .$$

La expresión general para el núcleo integral del operador **T** puede entonces ser obtenida (ver referencia [80] para una demostración detallada) en forma de serie de Born:

$$\begin{aligned} T_{\omega}(x, y) = & -V(x)\delta(x-y) + V(x)G_{\omega}^{(0)}(x, y)V(y) - \int dz_1 V(x)G_{\omega}^{(0)}(x, z_1)G_{\omega}^{(0)}(z_1, y)V(y) + \\ & + \int dz_1 \int dz_2 V(x)G_{\omega}^{(0)}(x, z_1)G_{\omega}^{(0)}(z_1, z_2)V(z_2)G_{\omega}^{(0)}(z_2, y)V(y) - \dots \quad . \end{aligned}$$

Un caso que centrará nuestra atención es el de dos objetos compactos disjuntos en una dimensión modelados por un potencial de la forma

$$V(x) = V_1(x) + V_2(x)$$

donde  $V_1(x)$  y  $V_2(x)$  son funciones de soporte compacto en dos subconjuntos de intersección nula en  $\mathbb{R}$ . En este caso los potenciales  $V_i(x)$ ,  $i = 1, 2$  que describen los dos objetos definen separadamente dos problemas de Schrödinger dados por los operadores

$$\hat{K}_\omega^{(i)} = -\frac{d^2}{dx^2} + m^2 + V_i(x), \quad i = 1, 2$$

y existe por tanto una matriz de transferencia  $\mathbf{T}_\omega^{(i)}$  por cada uno de los cuerpos. El formalismo de la matriz  $\mathbf{T}$  se adapta así perfectamente al estudio de procesos de scattering sucesivos por los dos cuerpos, una situación que ocurre de facto en el dispositivo original del efecto Casimir donde dos placas separadas perturban las fluctuaciones cuánticas del vacío. Es bajo estas hipótesis como Kenneth y Klich [29] propusieron la fórmula **TGTG** para calcular la energía de interacción entre dos placas (o dos objetos compactos disjuntos) inducida en el vacío por fluctuaciones cuánticas. En un mundo unidimensional la fórmula reza:

$$E_0^{\text{int}} = -\frac{i}{2} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \text{Tr}_{L^2} \ln(\hat{I} - \hat{M}_\omega), \quad (6.9)$$

donde el operador  $\hat{M}_\omega$  y su núcleo integral están definidos como

$$\hat{M}_\omega = \hat{G}_\omega^{(0)} \hat{T}_\omega^{(2)} \hat{G}_\omega^{(0)} \hat{T}_\omega^{(1)},$$

$$M_\omega(x, y) = \int dz_1 dz_2 dz_3 [G_\omega^{(0)}(x, z_1) T_\omega^{(2)}(z_1, z_2) G_\omega^{(0)}(z_2, z_3) T_\omega^{(1)}(z_3, y)]. \quad (6.10)$$

En general los operadores  $\hat{K}_\omega^{(i)}$ ,  $i = 1, 2$  son definidos sobre un espacio de Hilbert que no es isomorfo al espacio de Hilbert desplegado por los estados propios del operador  $\hat{K}_0$ <sup>2</sup>. Cuando esto sucede el operador  $\hat{G}_0 \equiv \hat{G}_\omega^{(0)}$  es definido sobre un espacio de Hilbert diferente a aquel en que operan las matrices  $\hat{T}_i$ ,  $i = 1, 2$ . Por tanto el producto  $\hat{G}_0 \cdot \hat{T}_i$ ,  $i = 1, 2$ , no es definido y la fórmula (6.9) no es válida. Para evitar este problema realizamos una rotación de Wick  $\omega \rightarrow i\xi$  de modo que las teorías cuánticas correspondientes están definidas sobre espacios Euclideos, todos los operadores actúan sobre el mismo espacio de Hilbert puesto que no hay polos en el propagador, y la fórmula **TGTG** pasa a ser:

$$E_0^{\text{int}} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{d\xi}{\pi} \text{Tr}_{L^2} \ln(\hat{I} - \hat{M}_{i\xi}).$$

---

<sup>2</sup>Cuando los operadores  $\hat{K}_\omega^{(i)}$ ,  $i = 1, 2$ , tienen espectro discreto además de continuo el espacio de Hilbert subtendido por los estados propios de  $\hat{K}_\omega^{(i)}$ ,  $i = 1, 2$  difiere de aquel en que los estados propios de  $\hat{K}_\omega^{(0)}$  forman un sistema completo.

Hay que resaltar que ahora todos los operadores que entran en la fórmula **TGTG** son las versiones con rotación euclidea donde el tiempo y la energía que caracterizan la propagación de partículas libres son cantidades imaginarias puras.

La fórmula (6.9) no tiene en cuenta explícitamente los efectos disipativos. Hay algunos fenómenos disipativos, sin embargo, que están implícitos en la fórmula (6.9). Siempre que la norma en  $L^2$  del operador  $\hat{M}_\omega$  se haga mayor que uno ( $\|\hat{M}_\omega\|_{L^2} > 1$ ) la interacción de Casimir en el vacío

$$\mathrm{Tr}_{L^2} \ln (\hat{1} - \hat{M}_\omega) \in \mathbb{C} ,$$

adquiere una parte imaginaria. Este tipo de fenómenos disipativos surgen, por ejemplo, cuando aparecen estados ligados de energía negativa en los estados de una partícula sobre los cuales la teoría cuántica de campos es construida. Siempre que la unitariedad es preservada, todas las leyes de conservación que son consecuencia de la versión cuántica del teorema de Nöther siguen siendo validas.

## 6.5. Energía de Casimir, la traza del núcleo del calor y la función zeta

Los estados de una partícula de la teoría cuántica de campos son dados por las funciones propias del operador de Schrödinger

$$\hat{K} = \hat{K}_0 + U(x) .$$

En general este operador posee tanto espectro discreto como continuo

$$\hat{K}\psi_j(x) = \omega_j^2\psi_j(x) \quad , \quad j = 1, 2, \dots, l \quad l \in \mathbb{N} \quad (6.11)$$

$$\hat{K}\psi_k(x) = \omega(k)^2\psi_k(x; k) \quad , \quad \omega(k)^2 = k^2 + m^2 \quad k \in \mathbb{R} \quad (6.12)$$

Para cada  $k \in \mathbb{R}$  la ecuación diferencial (6.12) admite dos soluciones linealmente independientes: ondas incidentes de izquierda a derecha  $\psi_r(x, k)$  y ondas incidentes de derecha a izquierda  $\psi_l(x, k)$ . El comportamiento asintótico de estas soluciones es determinado por las amplitudes de scattering [8, 16]

$$\psi_k^r(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho^r(k)e^{-ikx} \\ \sigma^r(k)e^{ikx} \end{cases} \quad , \quad \psi_k^l(x) = \begin{cases} \sigma^l(k)e^{-ikx} \\ e^{-ikx} + \rho^l(k)e^{ikx} \end{cases} \quad , \quad \begin{matrix} x \rightarrow -\infty \\ x \rightarrow \infty \end{matrix} \quad (6.13)$$

El Wronskiano de estas dos soluciones de scattering independientes está dado en términos de la amplitud de transmisión  $\sigma(k)$

$$W[\psi_k^r(x), \psi_k^l(x)] = -2ik \sigma(k) \equiv W_{rl}(k) .$$

La función de Green reducida definida en (6.4) puede ser obtenida a partir de estas dos soluciones de scattering independientes usando la siguiente expresión (ver [?]):

$$G_{\omega}^{(1\delta)}(x, x') = \frac{1}{W_{rl}(k)} \left[ \theta(x - x') \psi_k^r(x) \psi_k^l(x') + \theta(x' - x) \psi_k^r(x') \psi_k^l(x) \right], \quad (6.14)$$

donde  $\theta(x)$  es la función escalón de Heaviside dada por (2.2).

El espectro discreto del operador  $\hat{K}$  está determinado por los polos de la amplitud de transmisión  $\sigma(k)$  en el plano complejo  $k$  localizados en el eje de momento imaginario positivo  $k_j = i\kappa_j$  ( $\kappa_j > 0$ )

$$\psi_j(x) = \begin{cases} e^{\kappa_j x} & , \quad x \rightarrow -\infty \\ \frac{\sigma(i\kappa_j)}{\rho_r(i\kappa_j)} e^{-\kappa_j x} & , \quad x \rightarrow \infty \end{cases}$$

Los valores propios que conforman el espectro discreto son dados por  $\omega_j = -\kappa_j^2 + m^2$ . Nótese que en  $k_j = i\kappa_j$  el Wronsiario tiene polos y la doble degeneración de las funciones propias desaparece.

La traza del calor y la función zeta espectral recopilan esta información espectral a través de las definiciones

$$h_{\hat{K}}(\tau) = \sum_{j=1}^l e^{-\tau\omega_j^2} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \left[ L + \frac{d\delta}{dk}(k) \right] e^{-\tau\omega^2(k)}$$

$$\zeta_{\hat{K}}(s) = \sum_{j=1}^l \omega_j^{-2s} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \left[ L + \frac{d\delta}{dk}(k) \right] \omega^{-2s}(k)$$

donde  $\tau \in \mathbb{R}^+$  y  $s \in \mathbb{C}$  son respectivamente un parámetro real positivo y uno complejo<sup>3</sup>. Estas dos funciones espectrales están relacionadas por medio de la transformada de Mellin

$$\zeta_{\hat{K}}(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} d\tau \tau^{s-1} h_{\hat{K}}(\tau) .$$

En consecuencia la energía inducida por las fluctuaciones cuánticas alrededor del objeto descrito por el potencial  $V(x)$  medida con respecto a la energía inducida en el vacío es:

$$E_C = \frac{1}{2} \left[ \zeta_{\hat{K}} \left( -\frac{1}{2} \right) - \zeta_{\hat{K}^0} \left( -\frac{1}{2} \right) \right]$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^l \omega_j - \frac{m}{4} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{d\delta}{dk}(k) \omega(k) . \quad (6.15)$$

<sup>3</sup>Aquí se asume que no hay modos cero  $\omega_j^2 \neq 0, \forall j$ , y no hay estados semi-ligados,  $\omega_l^2 < m^2$ , en el espectro de  $K$ . Físicamente el parámetro  $\tau = \frac{1}{mK_B T}$  se entiende como una temperatura inversa ficticia auxiliar de dimensiones de área:  $[\tau] = L^2$

Un punto sutil es la existencia de un estado semi-ligado de valor propio  $\omega_{1/2} = m$  en el espectro de  $\hat{K}_0$ , la función constante. De acuerdo al teorema de Levinson en una dimensión este debe tenerse en cuenta con un peso de un medio, ver [81]; esta es la razón para restar el factor  $m/4$  en esta fórmula. Otro punto aun mas sutil es la regularización implícitamente usada en la derivación de la formula (6.15). Un corte en la energía nos permite gestionar un dominio de integración finita,  $\int_{-\Lambda}^{\Lambda} dk$ , en etapas intermedias. Es sabido a partir del marco de trabajo de la cuantización de solitones que la regularización correcta, cuando el operador  $\hat{K}$  tiene un numero finito de estados ligados, es establecer un punto de corte en el número de modos de fluctuación de ambos  $\hat{K}$  y  $\hat{K}_0$ . En el limite de longitud infinita  $L$  esta prescripción requiere una integración por partes en la integral sobre el momento de la cual es obtenida la energía cuántica del objeto extendido en la forma de DHN, [82]:

$$E_C^{\text{DHN}} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^l \omega_j - \frac{m}{4} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{d\omega}{dk}(k) \delta(k) .$$

Para una detallada demostración y discusión sobre esta fórmula véase también la referencia [83].

## 6.6. Fluctuaciones de un campo escalar en un campo de fondo de potenciales delta de Dirac

Los potenciales delta de Dirac se han estudiado extensamente en libros de texto estándar sobre mecánica cuántica (ver por ejemplo [8]). En el Apéndice A. se recogen los principales resultados y se establece la notación para los potenciales con una, dos y tres deltas de Dirac.

### 6.6.1. Campo de fondo de una delta de Dirac

El potencial que gobierna las fluctuaciones masivas en el campo de fondo de una delta de Dirac esta dado por:

$$U^{(1\delta)}(x) = m^2 + \alpha\delta(x) \quad , \quad m^2 = \mu^2 + \frac{\alpha^2}{4} .$$

El término  $\frac{\alpha^2}{4}$  en la elección de la fluctuación de la masa es agregado para garantizar que los posibles estados ligados tengan energía no negativa. Incluso si elegimos  $\mu = 0$  la energía del vacío siempre será real y la teoría cuántica de campos correspondiente es unitaria. Los estados de una partícula de la teoría cuántica de campos son las funciones propias del operador de Schrödinger

$$\hat{K}^{1\delta} = \hat{K}^0 + \alpha\delta(x) \quad , \quad \hat{K}^0 = -\frac{d^2}{dx^2} + m^2 .$$

La extensión autoadjunta del operador  $\hat{K}^{1\delta}$  esta definida por las condiciones de empalme de la delta de Dirac (A.26). Estas condiciones de empalme determinan tanto los estados propios en el espectro continuo como los estados propios en el espectro discreto:

- Los estados de scattering (espectro continuo) para el problema de Schrödinger de una sola delta

$$\hat{K}^{1\delta}\psi_k(x) = (k^2 + m^2)\psi_k(x) \quad , \quad k \in \mathbb{R}$$

son de la forma general (6.13) pero este comportamiento asintótico genérico se extiende a la totalidad de la línea real excepto en el origen [8]

$$\psi_k^r(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho(k)e^{-ikx} \\ \sigma(k)e^{ikx} \end{cases} \quad , \quad \psi_k^l(x) = \begin{cases} \sigma(k)e^{-ikx} \\ e^{-ikx} + \rho(k)e^{ikx} \end{cases} \quad , \quad \begin{matrix} x < 0 \\ x > 0 \end{matrix}$$

Solucionando el sistema de ecuaciones resultante de imponer las condiciones de empalme (A.26) sobre estas ondas de scattering obtenemos las amplitudes de scattering

$$\rho(k) = \frac{\alpha}{2ik - \alpha} \quad , \quad \sigma(k) = \frac{2ik}{2ik - \alpha} \quad (6.16)$$

- Cuando el acoplamiento es negativo  $\alpha < 0$  y el potencial delta es atractivo, la amplitud de scattering  $\sigma(k)$  tiene un polo en el eje imaginario positivo. En este caso el pozo delta tiene un estado ligado:

$$k_b = -i\kappa_b = -i\frac{\alpha}{2} \quad , \quad \omega_b^2 = -\kappa_b^2 + m^2 = \mu^2$$

$$\psi_b(x) = \sqrt{-\frac{\alpha}{2}} \exp\left[\frac{\alpha}{2}|x|\right].$$

Usando la fórmula (6.14) la función de Green reducida para el potencial delta es escrita como

$$G_\omega^{(1\delta)}(x, x') = \begin{cases} G_\omega^{(0)} - \frac{\alpha}{2ik - \alpha} \frac{e^{ik(|x|+|x'|)}}{2ik} & , \quad \text{sgn}(xx') = +1 \\ -\frac{e^{ik|x-x'|}}{2ik - \alpha} & , \quad \text{sgn}(xx') = -1 \end{cases}$$

mientras que

$$G_\omega^{(0)}(x, x') = -\frac{e^{ik|x-x'|}}{2ik}$$

es la función de Green reducida para el operador  $\hat{K}^0$ .



### 6.6.2. Campo de fondo de dos deltas de Dirac

El potencial que gobierna las fluctuaciones masivas en un campo de fondo de dos deltas de Dirac es:

$$U^{(2\delta)}(x) = m^2 + \alpha\delta(x - a) + \beta \quad , \quad a > 0 \quad (6.17)$$

$$m^2 = \mu^2 + \frac{\alpha^2}{4} + \frac{\beta^2}{4} . \quad (6.18)$$

Se elige la masa de las fluctuaciones en tal forma que la sustracción de la energía de las deltas individuales no induce contribuciones imaginarias espurias a la energía del vacío. Al hacer esto, incluso las posibles energías de estado ligado de los pozos delta aislados siempre serán positivas. Esta selección de la masa asegura que la correspondiente teoría cuántica de campo es unitaria y por tanto la energía del vacío es real, excepto en el caso que la energía del estado fundamental de la configuración de dos deltas es menor que la suma de las energías de estado ligado de cada pozo delta por separado. El problema analítico planteado por el potencial (6.17) es adecuado para la descripción física de dos placas paralelas parcialmente transparentes infinitamente delgadas. En esta imagen física los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$  desempeñan el papel de las frecuencias del plasma que modelan las placas (ver refs. [75, 77, 84]).

Los estados de una partícula de la teoría cuántica de campo son las funciones propias del operador de Schrödinger

$$\hat{K}^{2\delta} = \hat{K}^0 + \alpha\delta(x - a) + \beta\delta(x + a) .$$

La extensión autoadjunta del operador  $\hat{K}^{2\delta}$  a los puntos  $x = \pm a$  es definida por las condiciones de empalme (A.32). Este operador tiene un espectro continuo y para ciertos valores de los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$  también exhibe espectro discreto. Tanto los estados propios del espectro continuo como los estados propios del espectro discreto son determinados a partir de las condiciones de empalme de la delta de Dirac en forma similar a lo hecho en el caso del potencial con una sola delta, ver parágrafo A.6 del apéndice A.

La función de Green reducida de las dos deltas en las zonas donde los dos puntos pueden coincidir tiene la estructura

$$G_{\omega}^{(2\delta)}(x, x') = G_{\omega}^{(0)}(x - x') + \begin{cases} \delta G_{\omega,2}^{(2\delta)}(x, x') & , \quad x, x' < -a \\ \delta G_{\omega,1}^{(2\delta)}(x, x') & , \quad |x|, |x'| < a \\ \delta G_{\omega,3}^{(2\delta)}(x, x') & , \quad x, x' > a \end{cases}$$

Las diferentes componentes  $\delta G_{\omega,j}^{(2\delta)}(x, x')$  se calculan usando la fórmula (6.14):

$$\delta G_{\omega,2}^{(2\delta)}(x, x') = \frac{e^{-ik(x+x')}}{2k\Delta(k)} [\alpha(2k + i\beta)e^{-2iak} + \beta(2k - i\alpha)e^{2iak}] \quad (6.19)$$

$$\begin{aligned} \delta G_{\omega,1}^{(2\delta)}(x, x') &= \frac{e^{2iak}}{2k\Delta(k)} \left[ \alpha(2k + i\beta)e^{ik(x+x')} + \beta(2k + i\alpha)e^{-ik(x+x')} \right] \\ &\quad - \frac{i\alpha\beta}{k\Delta(k)} e^{4iak} \cos[k(x - x')] \end{aligned} \quad (6.20)$$

$$\delta G_{\omega,3}^{(2\delta)}(x, x') = \frac{e^{ik(x+x')}}{2k\Delta(k)} \left[ \alpha(2k - i\beta)e^{2iak} + \beta(2k + i\alpha)e^{-2iak} \right]. \quad (6.21)$$

### 6.6.3. Tensor de tensiones de una delta y energía de Casimir

Una renormalización apropiada del valor esperado en el vacío del tensor momento-energía requiere la sustracción del valor esperado en el vacío del tensor momento-energía de la teoría libre [?]. Por tanto la densidad de energía del vacío para las fluctuaciones cuánticas escalares en torno de un fondo de una delta clásica medida con respecto a la densidad de energía del vacío del campo libre de fluctuaciones es

$$\begin{aligned} \langle 0 | [\hat{T}_{00}^{1\delta}(x) - \hat{T}_{00}^0(x)] | 0 \rangle &= \frac{1}{i} \partial_t \partial_{t'} [G^{(1\delta)}(x, t; x', t') - G^{(0)}(x, t; x', t')] \Big|_{x=x', t=t'} \\ &= \frac{\alpha}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\omega^2 e^{2i\sqrt{\omega^2 - m^2}|x|}}{2i\sqrt{\omega^2 - m^2} (2i\sqrt{\omega^2 - m^2} - \alpha)}. \end{aligned}$$

Para garantizar que todos los productos de operadores están bien definidos y por lo tanto que todas las integrales están bien definidas es necesario realizar una rotación euclídea  $\omega = i\xi$  (ver referencias [?, 80])

$$\langle 0 | [\hat{T}_{00}^{1\delta}(x) - \hat{T}_{00}^0(x)] | 0 \rangle = -\frac{\alpha}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{2\pi} \frac{\xi^2 e^{-2\sqrt{\xi^2 + m^2}|x|}}{\sqrt{\xi^2 + m^2} (2\sqrt{\xi^2 + m^2} + \alpha)}.$$

Usando la densidad de energía rotada la energía de Casimir de la única delta es:

$$E_C^{1\delta}(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle 0 | [\hat{T}_{00}^{1\delta}(x) - \hat{T}_{00}^{(0)}(x)] | 0 \rangle = -\frac{\alpha}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{2\pi} \frac{\xi^2}{(\xi^2 + m^2) (2\sqrt{\xi^2 + m^2} + \alpha)}.$$

Realizando el cambio de variable a  $\xi^2 = z^2 - m^2$  como se hace en la referencia [80] obtenemos la energía de Casimir a partir del conocimiento del tensor de tensiones ( $E_C^{1\delta}|_{\text{ST}}(\alpha)$ )

$$E_C^{1\delta}|_{\text{ST}}(\alpha) = -\frac{\alpha}{2\pi} \int_m^{\infty} dz \frac{\sqrt{z^2 - m^2}}{z(2z + \alpha)}. \quad (6.22)$$

Este resultado también es obtenido en las referencias [77, 78] siguiendo el mismo procedimiento basado en el tensor de tensiones. Mas adelante vamos a comparar la energía de Casimir

obtenida en este calculo con los resultados para la misma magnitud obtenidos mediante el uso del operador  $\hat{T}$  y los métodos de la traza del calor.

La integración en (6.22) presenta una divergencia ultravioleta, así que elegimos regularizar  $E_C^{1\delta}|_{ST}$  mediante la elección de una frecuencia de corte ultravioleta  $\Lambda = \frac{1}{\varepsilon}$ :

$$\begin{aligned} E_C^{1\delta}(\alpha, \mu, \varepsilon)|_{ST} &= \frac{-i}{4\pi} \sqrt{4m^2 - \alpha^2} \log \left[ \frac{-\alpha + i\sqrt{(4m^2 - \alpha^2)(1 - m^2\varepsilon^2)} - 2m^2\varepsilon}{m(\alpha\varepsilon + 2)} \right] \\ &\quad - \frac{\alpha}{4\pi} \log \left[ \sqrt{\frac{1}{m^2\varepsilon^2} - 1} + \frac{1}{m\varepsilon} \right] - \frac{m}{2\pi} \arctan \left[ \left( \frac{1}{m^2\varepsilon^2} - 1 \right)^{-1/2} \right] \\ &\quad + \frac{1}{4} \left( m + \sqrt{4m^2 - \alpha^2} \right) \end{aligned}$$

Para establecer la escala en el regulador se selecciona el criterio de renormalización de masa infinita: La parte finita de la energía de Casimir regularizada debe ser cero ya que cuando  $m \rightarrow \infty$  no hay fluctuaciones cuánticas en absoluto!. Para cumplir con esta condición de congelación de las fluctuaciones cuánticas muy pesadas es necesario reajustar la escala en el regulador<sup>4</sup>:

$$\varepsilon = \frac{2}{me} \tilde{\varepsilon}$$

tal que  $E_C^{1\delta}(m \rightarrow \infty)|_{ST, \text{fin}} = 0$ . La divergencia de  $E_C^{1\delta}(\alpha, \mu, \tilde{\varepsilon})|_{ST}$  es por tanto regularizada:  $E_C^{1\delta}(\alpha, \mu, \tilde{\varepsilon})|_{ST, \text{div}} = \alpha \log(\tilde{\varepsilon})/4\pi$ .

#### 6.6.4. Tensor de tensiones de dos deltas y energía de Casimir

El cálculo de la energía de interacción en el vacío de origen cuántico entre dos placas delta requiere restar no solo la energía del vacío del fondo constante sino también las energías del vacío de cada placa delta individual. En consecuencia la función de Green de dos deltas renormalizada que debe ser usada para calcular la energía de interacción en el vacío de origen cuántico es:

$$\begin{aligned} \bar{G}_\omega^{(2\delta)}(x, x'; \alpha, \beta, a) &= G_\omega^{(2\delta)}(x, x'; \alpha, \beta, a) - G_\omega^{(0)}(x - x') - G_\omega^{(1\delta)}(x + a, x' + a; \alpha) - \\ &\quad - G_\omega^{(1\delta)}(x - a, x' - a; \beta) . \end{aligned}$$

El valor esperado en el vacío del tensor de tensiones de las dos deltas renormalizado

$$\hat{T}_{00}^{2\delta R}(x) = \hat{T}_{00}^{2\delta}(x) - \hat{T}_{00}^{1\delta}(x) - \hat{T}_{00}^{1\delta}(x) - \hat{T}_{00}^{\text{vac}}(x)$$

<sup>4</sup>Nótese que el nuevo regulador  $\tilde{\varepsilon}$  no tiene dimensiones.

está dado en términos de la función de Green reducida renormalizada escrita anteriormente como

$$\langle 0 | \hat{T}_{00}^{2\delta R}(x) | 0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{2\pi i} \omega^2 \bar{G}_{\omega}^{(2\delta)}(x, x; \alpha, \beta, a) . \quad (6.23)$$

Nótese que el integrando en esta última expresión para la energía de interacción del vacío cuántico debe coincidir con la densidad espectral:

$$\frac{1}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \bar{G}_{\omega}^{(2\delta)}(x, x; \alpha, \beta, a) = \frac{\varrho^{(2\delta)}(k, \alpha, \beta, a)}{k} ,$$

donde  $k = \sqrt{\omega^2 - m^2}$ .

Para pasar de las densidades de energía del vacío a las energías de Casimir necesitamos las siguientes integraciones de las funciones dependientes de  $x$  sobre las tres zonas de scattering en la ecuación (6.23):

$$\int_{-\infty}^{-a} dx e^{-2ikx} = -\frac{e^{2iak}}{2ik} = \int_a^{\infty} dx e^{2ikx} \quad , \quad \int_{-a}^a dx e^{2ikx} = \frac{\sin 2ak}{k} = \int_{-a}^a dx e^{-2ikx} \quad ,$$

$$2 \int_{-a}^a dx = 4a .$$

La integral en la segunda fila surge del término coseno en la función de Green donde ambos argumentos se encuentran en la zona 1.  $x'$  tiende a  $x$  ya sea desde la izquierda o desde la derecha. Por tanto en el módulo del argumento del coseno ambas posibilidades deben tenerse en cuenta por separado, así que el factor 2 debe ser incluido.

Usando las ecuaciones (6.19)-(6.21) obtenemos la contribución a la densidad espectral de cada zona:

$$\frac{1}{k} \varrho_1^{(2\delta)}(k) = \frac{i(1 - e^{4iak})}{4k^2} \left[ \frac{\alpha(2k + i\beta)}{\Delta(k)} - \frac{\alpha}{2k + i\alpha} + \frac{\beta(2k + i\alpha)}{\Delta(k)} - \frac{\beta}{2k + i\beta} \right] - \frac{4ia\alpha\beta}{k\Delta(k)} e^{4iak}$$

$$\frac{1}{k} \varrho_2^{(2\delta)}(k) = \frac{i}{4k^2} \left\{ \frac{\alpha(2k + i\beta)}{\Delta(k)} - \frac{\alpha}{2k + i\alpha} + \left[ \frac{\beta(2k - i\alpha)}{\Delta(k)} - \frac{\beta}{2k + i\beta} \right] e^{4iak} \right\}$$

$$\frac{1}{k} \varrho_3^{(2\delta)}(k) = \frac{i}{4k^2} \left\{ \left[ \frac{\alpha(2k - i\beta)}{\Delta(k)} - \frac{\alpha}{2k + i\alpha} \right] e^{4iak} + \frac{\beta(2k + i\alpha)}{\Delta(k)} - \frac{\beta}{2k + i\beta} \right\} .$$

La densidad espectral total por número de onda, proporcionada por las fluctuaciones en las tres zonas, es la suma de las cantidades anteriores, esto es:

$$\begin{aligned} \frac{1}{k} \varrho^{(2\delta)}(k, ) &= \frac{1}{k} \varrho_1^{(2\delta)}(k) + \frac{1}{k} \varrho_2^{(2\delta)}(k) + \frac{1}{k} \varrho_3^{(2\delta)}(k) \\ &= -\frac{2\alpha\beta[1 + 2a(\alpha - 2ik)]}{k(2k + i\alpha) [(2k + i\alpha)(2k + i\beta)e^{-4iak} + \alpha\beta]} . \end{aligned}$$

La energía de Casimir es la integral de  $\varrho^{(2\delta)}(k)/k$  ponderada con  $\omega^2$  sobre todo el rango de frecuencias:

$$E_C^{(2\delta)}(\alpha, \beta, a) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\sqrt{\omega^2 - m^2}} \omega^2 \varrho^{(2\delta)}\left(\sqrt{\omega^2 - m^2}\right).$$

La integral sobre las frecuencias tiene problemas de convergencia debido a las funciones oscilatorias en el integrando y problemas de unitariedad planteados por los estados ligados en el espacio de Minkowski. Para evitar estos problemas se realiza la rotación euclidea  $\omega = i\xi$  y cambiamos la variable al momento imaginario  $\kappa = -ik = \sqrt{\xi^2 + m^2}$  (ver referencias [?, 80]). La energía de Casimir es finalmente escrita como la integral:

$$E_C^{(2\delta)}(\alpha, \beta, a) |_{ST} = -\frac{1}{\pi} \int_m^{\infty} d\kappa \frac{\alpha\beta[1 + 2a(\alpha + 2\kappa)]\sqrt{\kappa^2 - m^2}}{(2\kappa + \alpha)[(2\kappa + \alpha)(2\kappa + \beta)e^{4a\kappa} - \alpha\beta]}.$$

En el caso de la doble delta la integral obtenida no presenta divergencias ultravioleta porque todas las divergencias han sido sustraídas teniendo en cuenta la función de Green reducida renormalizada  $\bar{G}_\omega^{(2\delta)}(x, x'; \alpha, \beta, a)$ . La energía de interacción en el vacío entre ambas deltas es la parte de la energía total que depende de la distancia entre ellas (ver [78, ?, 80, 85, 86]).

## 6.7. Energías de Casimir a partir de la matriz de transferencia

En esta sección usaremos el operador  $\hat{T}$  para calcular la energía del vacío para una sola placa delta semitransparente y la energía de interacción en el vacío de origen cuántico entre dos placas delta semitransparentes. Comenzamos proporcionando la fórmula general para el operador  $\hat{T}$  generado por un potencial concentrado en un punto.

### 6.7.1. La matriz de transferencia para potenciales concentrados en puntos

La forma general de los estados de scattering para un potencial concentrado en  $x = 0$  es dada por:

$$\psi_k^r(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho^r(k)e^{-ikx} \\ \sigma^r(k)e^{ikx} \end{cases}, \quad \psi_k^l(x) = \begin{cases} \sigma^l(k)e^{-ikx} \\ e^{-ikx} + \rho^l(k)e^{ikx} \end{cases}, \quad \begin{matrix} x < 0 \\ x > 0 \end{matrix}$$

donde de nuevo  $k = \sqrt{\omega^2 - m^2}$ .

Nótese que a partir de la teoría de scattering se puede asegurar que  $\sigma^r(k) = \sigma^r(k) = \sigma(k)$

[8, 16]. Mediante el uso de la fórmula (6.14) la forma general de la función de Green para un potencial puntual es:

$$G_\omega(x, x') = \begin{cases} G_\omega^{(0)} - \frac{\rho^r(k)}{2ik} e^{-ik(x+x')} & , \quad x, x' < 0 \\ G_\omega^{(0)} - \frac{\rho^l(k)}{2ik} e^{ik(x+x')} & , \quad x, x' > 0 \\ G_\omega^{(0)} - \frac{\sigma(k)-1}{2ik} e^{ik|x+x'|} & , \quad \text{sgn}(xx') = -1 \end{cases}$$

De la definición de la matriz de transferencia

$$G_\omega(x, y) = G_\omega^{(0)}(x, y) - \int dz \int dz' G_\xi^{(0)}(x, z) T_\omega(z, z') G_\xi^{(0)}(z', y)$$

y usando la ecuación diferencial de la función de Green libre

$$\left(-\omega^2 - \frac{d^2}{dx^2}\right) G_\omega^{(0)}(x, y) = \delta(x - y)$$

obtenemos una fórmula general alternativa para la matriz de transferencia

$$T_\omega(x, y) = - \left(\omega^2 + \frac{d^2}{dy^2}\right) \left(\omega^2 + \frac{d^2}{dx^2}\right) \delta G_\omega(x, y) ,$$

donde se ha definido

$$\delta G_\omega(x, y) = G_\omega(x, y) - G_\omega^{(0)}(x, y)$$

Actuando con  $(\omega^2 + d^2/dx^2)$  (equivalentemente para  $(\omega^2 + d^2/dy^2)$ ) sobre  $\delta G_\omega(x, y)$  obtenemos siempre 0 cuando  $\text{sgn}(x) = \text{sgn}(y)$  porque en estas zonas las exponenciales no contienen valores absolutos. Por tanto la única contribución no trivial a la matriz de transferencia se da cuando actuamos con  $(\omega^2 + d^2/dx^2)$  y  $(\omega^2 + d^2/dy^2)$  sobre  $\delta G_\omega$  en el caso donde  $\text{sgn}(x) \neq \text{sgn}(y)$ . Las derivadas de las funciones que dependen de los valores absolutos son:

$$\frac{d}{dx} f(|x|) = f'(|x|) \text{sgn}(x) \quad , \quad \frac{d^2}{dx^2} f(|x|) = 2f'(|x|)\delta(x) + f''(|x|) .$$

Teniendo en cuenta que

$$e^{ik|x-y|} = \begin{cases} e^{ik(|x|+y)} & , \quad x < 0 \quad , \quad y > 0 \\ e^{ik(x+|y|)} & , \quad x > 0 \quad , \quad y < 0 \end{cases}$$

inmediatamente obtenemos para  $\text{sgn}(x) \neq \text{sgn}(y)$

$$\left(\omega^2 + \frac{d^2}{dy^2}\right) \left(\omega^2 + \frac{d^2}{dx^2}\right) e^{ik|x-y|} = -4k^2 \delta(x) \delta(y) .$$

Con este resultado la expresión de la matriz de transferencia para potenciales puntuales arbitrarios es dada por:

$$T_\omega(x, y) = 2ik[\sigma(k) - 1] \delta(x) \delta(y) . \quad (6.24)$$

Nótese que cuando el potencial está concentrado en otro punto distinto de cero este resultado es válido simplemente transformando  $x \mapsto x - x_0$ ,  $y \mapsto y - x_0$ .

### 6.7.2. Matriz de transferencia de una delta y energía de Casimir

Usando las fórmulas generales (6.16) y (6.24) el operador  $\mathbf{T}$  rotado al espacio euclideo para el potencial delta es:

$$T_{i\xi}^{(1\delta)}(x, x') = \frac{2\kappa\alpha}{2\kappa + \alpha} \delta(x)\delta(x'), \quad (6.25)$$

donde  $\kappa = \sqrt{\xi^2 + m^2}$ .

La fórmula  $\mathbf{TG}$  para la energía de Casimir de la configuración  $1\delta$  es (ver refs. [?, ?, 80])

$$\begin{aligned} E_C^{1\delta}(\alpha) &= -\frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{d\xi}{\pi} \text{Tr}_{L^2} \ln \frac{\mathbf{G}_{i\xi}^{(0)} \left( \mathbf{1} - \mathbf{T}_{i\xi}^{(1\delta)} \cdot \mathbf{G}_{i\xi}^{(0)} \right)}{\mathbf{G}_{i\xi}^{(0)}} \\ &= \int_0^\infty \frac{d\xi}{2\pi} \ln \left[ 1 - \frac{\alpha}{2\sqrt{\xi^2 + m^2} + \alpha} \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_m^\infty \frac{\kappa d\kappa}{\sqrt{\kappa^2 - m^2}} \ln \left[ 1 - \frac{\alpha}{2\kappa + \alpha} \right]. \end{aligned}$$

En la última parte de esta sección comparamos este resultado con la energía del vacío obtenida a partir del tensor momento-energía.

### 6.7.3. Regularización ultravioleta de la energía de Casimir de una delta en el formalismo TG

Regularizamos la energía en el vacío debida a las fluctuaciones pesadas en la configuración de una delta cortando la integral en la formula  $\mathbf{TG}$  en un momento ultravioleta finito  $\kappa_{UV} = \frac{1}{\epsilon}$ :

$$E_C^{1\delta}(\alpha, \mu, \epsilon) = -\frac{1}{2\pi} \int_m^{1/\epsilon} \frac{\kappa d\kappa}{\sqrt{\kappa^2 - m^2}} \ln \left( 1 - \frac{\alpha}{\alpha + 2\kappa} \right). \quad (6.26)$$

La integración analítica de (6.26) da, hasta la aproximación logarítmica dominante, el siguiente resultado:

$$E_C^{1\delta}(\alpha, \mu, \epsilon) = -\frac{1}{8\pi} \left[ \alpha \left( \ln \frac{m^2 \epsilon^2}{4} - 2 \right) + 2\pi m \right] - \frac{i\mu}{4\pi} \left[ \ln \frac{(-2\mu + i\alpha)^2}{4m^2} - i\pi \right] + \mathcal{O}(\epsilon).$$

Debido a que  $\log(x + iy) = \log(x^2 + y^2)/2 + i \arctan(y/x)$ , comprobamos que la energía del vacío regularizada es en efecto real:

$$E_C^{1\delta}(\alpha, \mu, \epsilon) = -\frac{1}{8\pi} \left[ \alpha \left( \ln \frac{m^2 \epsilon^2}{4} - 2 \right) + 2\pi m \right] - \frac{\mu}{4\pi} \left[ 2 \arctan \left( \frac{\alpha}{2\mu} \right) + \pi \right] + \mathcal{O}(\epsilon). \quad (6.27)$$

En el límite físico  $\epsilon \rightarrow 0$  la energía del vacío regularizada  $E_C^{1\delta}(\alpha, \mu, \epsilon)$  es divergente logarítmicamente. Para establecer la escala en el regulador se selecciona el criterio de renormalización de masa infinita. El límite  $\mu \rightarrow \infty$  de (6.27) es:

$$E_C^{1\delta}(\alpha, \mu, \epsilon) = \frac{1}{4} \left[ \frac{\alpha}{\pi} \ln \left( \frac{2}{\mu\epsilon} \right) - 2\mu \right] + \mathcal{O} \left( \frac{1}{\mu} \right).$$

Por tanto necesitamos un reajuste de la escala del regulador

$$\epsilon = \frac{2e^{-\frac{2\pi\mu}{\alpha}}}{\mu} \tilde{\epsilon}$$

con el fin de encajar en el criterio de renormalización de masa infinita:

$$E_C^{1\delta}(\alpha, \mu, \tilde{\epsilon}) = -\frac{\alpha}{8\pi} \left[ \ln \frac{m^2}{\mu^2} - \frac{4\pi\mu}{\alpha} + \ln(\tilde{\epsilon}^2) - 2 \right] - \frac{1}{8\pi} \left\{ 2\pi m + 2\mu \left[ 2 \arctan \left( \frac{\alpha}{2\mu} \right) + \pi \right] \right\} + \mathcal{O}(\tilde{\epsilon}).$$

Dejando aparte la divergencia logarítmica, obtenemos la parte finita universal

$$E_C^{1\delta} |_{\text{FP}}(\alpha, \mu) = -\frac{\alpha}{8\pi} \left[ \ln \frac{m^2}{\mu^2} - \frac{4\pi\mu}{\alpha} - 2 \right] - \frac{1}{8\pi} \left\{ 2\pi m + 2\mu \left[ 2 \arctan \left( \frac{\alpha}{2\mu} \right) + \pi \right] \right\}$$

que tiende a cero en el límite  $\mu \rightarrow \infty$ . Así, un ajuste fino de las renormalizaciones finitas es necesario para tener en cuenta el hecho de que las fluctuaciones cuánticas pesadas se congelan en el límite de masa infinita.

Nótese que con este ajuste de escala del regulador -diferente del ajuste de escala usado en la versión obtenida a partir del tensor de tensiones de la energía de Casimir por el factor  $e^{1-\frac{2\pi\mu}{\alpha}}$ - las divergencias logarítmicas de las energías de Casimir de una delta obtenidas mediante el formalismo **TG** o el tensor de tensiones - $ST$ - son las mismas.

#### 6.7.4. Matriz de transferencia de dos deltas y energía de Casimir

Las matrices  $T$  para las deltas desplazadas son inmediatamente obtenidas del operador  $\hat{T}$  para una única delta situada en el origen dado en la fórmula (6.25):

$$T^{(\alpha)}(x_1, x_2) = \delta(x_1 + a)\delta(x_2 + a) \frac{2\kappa\alpha}{2\kappa + \alpha}, \quad T^{(\beta)}(x_1, x_2) = \delta(x_1 - a)\delta(x_2 - a) \frac{2\kappa\beta}{2\kappa + \beta}$$

donde  $\kappa = \sqrt{\xi^2 + m^2}$ .

La expresión general (6.10) y la expresión explícita para los núcleos del operador  $\hat{T}$  para cada delta nos permiten estimar el núcleo del operador  $\hat{M}_\xi$  para el sistema doble delta:

$$M_\xi^{2\delta}(x, x') = \frac{\alpha\beta e^{-2a\kappa}}{(2\kappa + \alpha)(2\kappa + \beta)} e^{-\kappa|x+a|} \delta(x' - a).$$



Del núcleo  $M_\xi^{2\delta}(x, x')$  obtenemos después de la correspondiente integración sobre toda la recta real la traza de la matriz  $M$  en términos de  $\kappa = \sqrt{\xi^2 + m^2}$ :

$$\text{Tr}_{L^2} \hat{M}_\xi^{2\delta} = \int_{-\infty}^{\infty} dx M_\xi^{2\delta}(x, x) = \frac{\alpha\beta e^{-4\kappa a}}{(2\kappa + \alpha)(2\kappa + \beta)}.$$

La expansión formal en serie de  $\log(1 - x)$  muestra que

$$\text{Tr}_{L^2} \ln \left( 1 - \hat{M}_\xi^{2\delta} \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \left[ \text{Tr}_{L^2} \hat{M}_\xi^{2\delta} \right]^n = \ln \left( 1 - \text{Tr}_{L^2} \hat{M}_\xi^{2\delta} \right).$$

Aplicando estos resultados en el integrando de la fórmula **TGTG**

$$E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{d\xi}{2\pi} \text{Tr}_{L^2} \ln \left( \hat{1} - \hat{M}_\xi^{2\delta} \right)$$

obtenemos en el caso del potencial doble delta la siguiente energía de Casimir en el vacío cuántico calculada en el formalismo **TGTG**:

$$E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a) = \int_0^\infty \frac{d\xi}{4\pi} \ln \left[ 1 - \frac{\alpha\beta e^{-4\kappa a}}{(2\kappa + \alpha)(2\kappa + \beta)} \right],$$

o más explícitamente

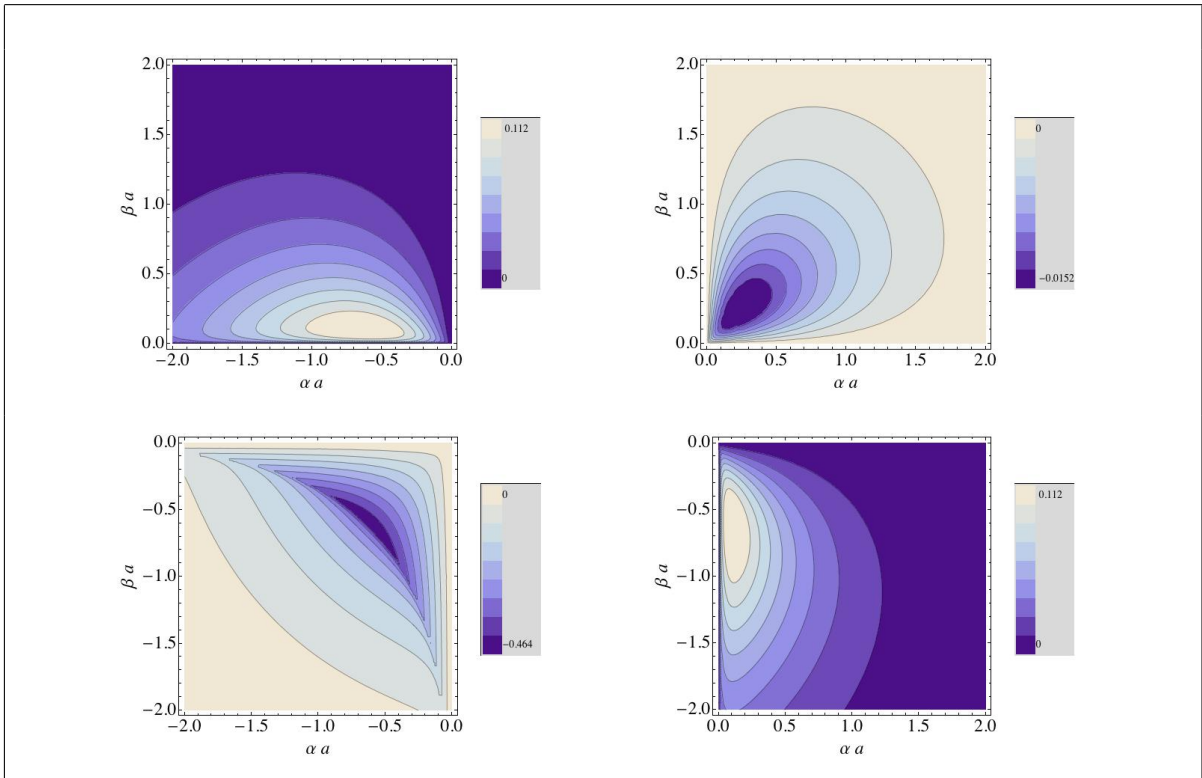
$$\begin{aligned} E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a) &= \int_0^\infty \frac{d\xi}{2\pi} \ln \left[ 1 - \frac{\alpha\beta e^{-4a\sqrt{\xi^2 + m^2}}}{\left( 2\sqrt{\xi^2 + m^2} + \alpha \right) \left( 2\sqrt{\xi^2 + m^2} + \beta \right)} \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_m^\infty \frac{\kappa d\kappa}{\sqrt{\kappa^2 - m^2}} \ln \left[ 1 - \frac{\alpha\beta e^{-4\kappa a}}{(2\kappa + \alpha)(2\kappa + \beta)} \right], \end{aligned} \quad (6.28)$$

donde un cambio de variable de integración de la energía euclídea al momento euclideo ha sido realizado en el último paso. Estas integrales no pueden calcularse analíticamente en general. Alternativamente, la Tabla 6.1 muestra gráficas en Mathematica de estas integrales estimadas numéricamente como funciones de  $\alpha$  y  $\beta$ . Los resultados son recogidos en la Tabla 6.1 que muestra gráficas seleccionadas de las curvas de nivel de la parte real de la energía de Casimir sobre el plano  $\alpha a : \beta a$ . Observamos que la energía de Casimir es negativa si los acoplamientos de las interacciones delta que modelan las placas tienen el mismo signo, que son ya sea repulsivas o atractivas. Si los signos son diferentes, en el segundo y cuarto cuadrantes, la energía de Casimir, no obstante, es positiva.

Por tanto, la fuerza de Casimir

$$F_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a) = -\frac{1}{2} \frac{dE_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a)}{da} = -\frac{2\alpha\beta}{\pi} \int_m^\infty \frac{\kappa^2 d\kappa}{\sqrt{\kappa^2 - m^2}} \frac{1}{e^{4a\kappa}(2\kappa + \alpha)(2\kappa + \beta) - \alpha\beta}$$

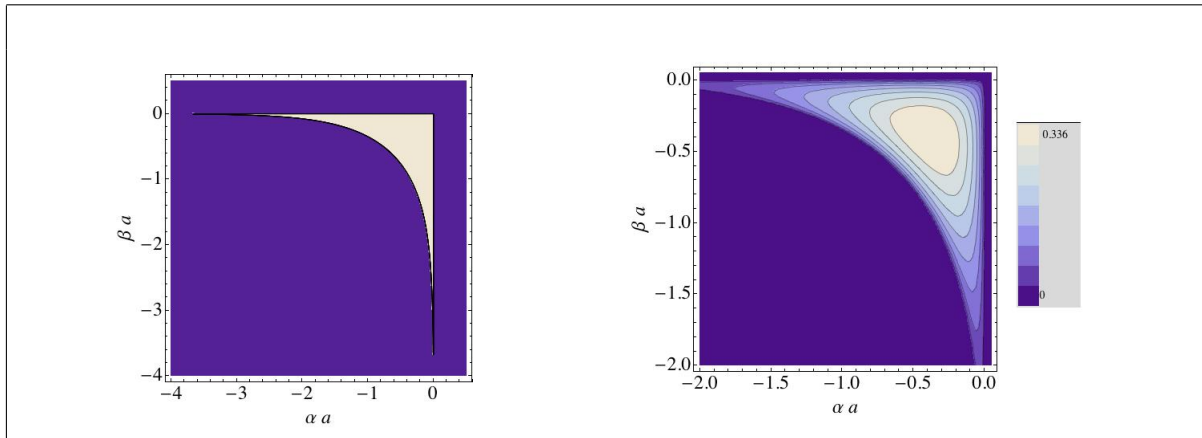
Tabla 6.1: Curvas de nivel de la parte real de la energía de Casimir sin dimensiones  $2\pi a E_c^{2\delta}$  como función de los parámetros sin dimensiones  $\alpha a$  y  $\beta a$ .



puede ser atractiva o repulsiva. Genéricamente, encontramos atracción si los acoplamientos de las interacciones delta que modelan las placas tienen el mismo signo y repulsión cuando  $\text{sgn}\alpha \neq \text{sgn}\beta$ . Energías y fuerzas de Casimir nulas son encontradas cuando nos movemos en todo el plano  $\alpha : \beta$  de acoplamientos.

La elección  $\mu = 0$  en la definición de  $m^2$  deja espacio para una pequeña parte imaginaria de la energía de Casimir en una pequeña región del plano  $\alpha : \beta$  mostrada en la Tabla 6.2. Esto ocurre porque para estos valores negativos muy débiles de  $\alpha a$  y  $\beta a$  el valor propio del único estado ligado del pozo doble delta es más negativo que la suma de los valores propios de los dos pozos delta individuales:  $-\alpha/2 - \beta/2$ . Así, las fluctuaciones pesadas  $m^2 = \frac{\alpha^2}{4} + \frac{\beta^2}{4}$  no empujan

Tabla 6.2: Zona en el plano  $(\alpha a)(\beta a)$  donde la parte imaginaria de la energía de Casimir es diferente de cero y curvas de nivel de la parte imaginaria de la energía de Casimir sin dimensiones  $2\pi a E_c^{2\delta}$  en esta region



lo suficiente el valor propio negativo para invertir su signo y la teoría cuántica de campo es no unitaria<sup>5</sup>. Cuando la teoría cuántica de campo es unitaria la norma del operador  $\hat{M}_\xi$  es menor que uno. Por tanto la expansión en serie de Taylor del logaritmo que aparece en el integrando de la fórmula **TGTG** tiene sentido. No obstante cuando el problema de Schrödinger que da los estados de una partícula tiene estados de energía negativa la norma de  $\hat{M}_\xi$  se hace mayor que uno y la energía de interacción inducida en el vacío tiene un valor complejo. El significado físico de una energía del vacío compleja refleja la existencia de creación/destrucción de partículas escalares en el vacío. Este efecto es un “**primo bosónico**” del efecto Schwinger donde pares electrón/positrón son creados a partir del vacío en el fondo de fuertes campos eléctricos (ver refs. [87, 88, 89]). Aquí, la absorción y/o emisión de las fluctuaciones del campo escalar por

<sup>5</sup>Por supuesto, hay un valor mínimo de  $\mu > 0$  tal que todos los valores propios se hacen positivos y la teoría cuántica de campo del sistema se hace unitaria.

las placas es el fenómeno físico responsable de la parte imaginaria de la energía

#### 6.7.4.1. Límite Dirichlet sin masa, placas perfectamente conductoras

Cuando imponemos  $\mu = i\sqrt{\alpha^2 + \beta^2/4}$  las fluctuaciones cuánticas se hacen no masivas, i.e.,  $m = 0$ . Por tanto de la fórmula (6.28) obtenemos la energía de interacción en el vacío de origen cuántico para fluctuaciones cuánticas sin masa

$$E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a)|_{m=0} = \int_0^\infty \frac{d\kappa}{2\pi} \ln \left[ 1 - \frac{\alpha\beta e^{-4\kappa a}}{(2\kappa + \alpha)(2\kappa + \beta)} \right].$$

Integrando por partes en esta última expresión obtenemos una fórmula alternativa para  $E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a)|_{m=0}$ :

$$E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a)|_{m=0} = - \int_0^\infty \frac{\kappa d\kappa}{2\pi} \frac{d}{d\kappa} \ln \left[ 1 - \frac{\alpha\beta e^{-4\kappa a}}{(2\kappa + \alpha)(2\kappa + \beta)} \right]$$

que puede ser directamente relacionada con la traza del operador  $\left(\hat{K}^{2\delta}|_{m=0}\right)^{1/2}$  mediante el uso del teorema del residuo de Cauchy para calcular la suma sobre ceros de una función holomorfa  $f(z)$ ,

$$\sum_{k_n \in \text{zeros}(f)} k_n^p = \oint_C \frac{z^p dz}{2\pi i} \frac{d}{dz} \ln [f(z)] ,$$

donde  $C$  es un contorno en el plano complejo  $z$  que encierra todos los ceros de  $f(z)$ . Hacemos hincapié en que  $E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a)|_{m=0}$  está bien definida solo para  $\alpha, \beta > 0$  ya que la sustracción de la energía del vacío de una sola delta induce una contribución imaginaria cuando cualquiera de los acoplamientos delta es negativo. Para cualquier  $\alpha, \beta > 0$  la energía del vacío  $E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a)|_{m=0}$  debe ser calculada numéricamente. Las curvas de nivel de  $E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a)|_{m=0}$  como una función de  $\alpha a$ , y  $\beta a$  pueden verse en la Figura 6.1. Cuando  $\alpha, \beta \rightarrow \infty$  la integral en  $E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a)|_{m=0}$  puede ser evaluada exactamente, dando lugar al bien conocido resultado de la energía de interacción en el vacío de origen cuántico entre dos placas perfectamente conductoras (Condiciones de frontera de Dirichlet; ver referencia [85]):

$$\lim_{\alpha, \beta \rightarrow \infty} E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a)|_{m=0} = -\frac{\pi}{24(2a)} .$$

Esta es la versión escalar unidimensional del resultado original obtenido por H. B. G. Casimir para el campo electromagnético en el caso tridimensional en la referencia [26].

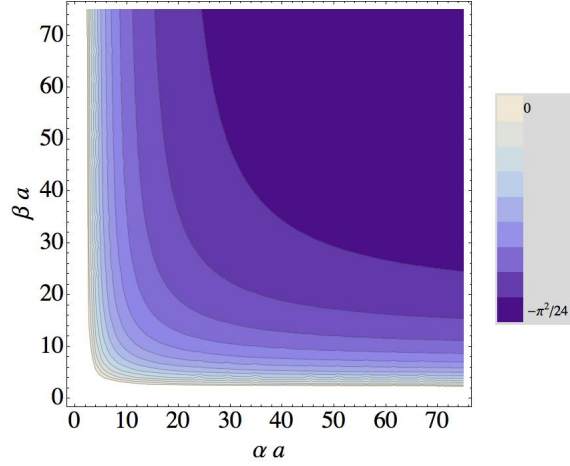


Figura 6.1: Curvas de nivel de la energía de Casimir adimensional  $2\pi a E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a)|_{m=0}$  en la región  $\alpha, \beta > 0$

### 6.7.5. Comparación entre las energías de Casimir en los formalismos TG y del tensor de tensiones

Vale la pena comparar los resultados obtenidos en el formalismo TG con la respuesta obtenida en el formalismo del tensor de tensiones. En el caso de una única delta una integración parcial simple da la conexión entre los resultados alcanzados mediante estos dos métodos alternativos:

$$\begin{aligned} E_C^{1\delta}|_{\text{TG}}(\alpha) &= \frac{1}{2\pi} \int_m^\infty \frac{z dz}{\sqrt{z^2 - m^2}} \log\left(1 - \frac{\alpha}{2z + \alpha}\right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{z^2 - m^2} \log\left(1 - \frac{\alpha}{2z + \alpha}\right) \Big|_m^\infty - \frac{\alpha}{2\pi} \int_m^\infty dz \frac{\sqrt{z^2 - m^2}}{z(2z + \alpha)} \\ &\Rightarrow E_C^{1\delta}|_{\text{TG}}(\alpha) = -\frac{\alpha}{4\pi} + E_C^{1\delta}|_{\text{ST}}(\alpha). \end{aligned}$$

Vemos que las energías de Casimir calculadas por medio de estos dos diferentes métodos difieren en un término constante finito que es precisamente igual a menos  $\frac{1}{2\pi}$  veces la energía del estado ligado/antiligado.

Podemos también comparar las energías de Casimir de las dos placas modeladas con una doble delta calculadas por medio de estos dos diferentes procedimientos a través de la integración parcial en (6.28):

$$E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\kappa^2 - m^2} \ln \left[ 1 - \frac{\alpha\beta e^{-4a\kappa}}{(2\kappa + \alpha)(2\kappa + \beta)} \right] \Big|_m^\infty -$$

$$-\frac{\alpha\beta}{\pi} \int_m^\infty d\kappa \frac{\sqrt{\kappa^2 - m^2} [1 + 2a(\alpha + 2\kappa)]}{(2\kappa + \alpha)[(2\kappa + \alpha)(2\kappa + \beta)e^{4a\kappa} - \alpha\beta]} .$$

En contraste con lo que sucede con una sola delta los dos métodos conducen a exactamente el mismo resultado para el sistema doble delta debido a que el término de frontera es cero:

$$E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a) |_{\text{TGTG}} = E_C^{2\delta}(\alpha, \beta, a) |_{\text{ST}} .$$

## 6.8. Energías de Casimir a partir de funciones espectrales

El modelo sine-Gordon (1 + 1)-dimensional de un campo escalar es caracterizado por la acción funcional:

$$S[\phi] = \int d^2x \left[ \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{m^4}{\lambda} \left( 1 - \cos \frac{\sqrt{\lambda}}{m} \phi \right) \right] .$$

Las ecuaciones de primer orden o BPS

$$\frac{d\phi}{dx} = \mp 2 \frac{m^2}{\sqrt{\lambda}} \sin \frac{\sqrt{\lambda}}{2m} \phi \quad (6.29)$$

son solucionadas por los kinks u ondas solitarias:

$$\phi_K(x) = \frac{m}{\sqrt{\lambda}} \left\{ (-1)^a 4 \arctan [e^{\pm m(x-b)}] + 2\pi n \right\} ,$$

donde  $a = 0, 1$ ,  $b \in \mathbb{R}$  y  $n \in \mathbb{Z}$ . Pequeñas deformaciones de estas ondas no lineales que son también soluciones de las ecuaciones BPS (6.29) pertenecen al núcleo del operador diferencial de primer orden  $\partial = \frac{d}{dx} + m \tanh(mx)$  (hemos elegido  $a = b = n = 0$ ). Las fluctuaciones del kink seno-Gordon a segundo orden son gobernadas por el operador de Schrödinger:

$$\hat{K}^{\text{sG}} = \partial^\dagger \partial = -\frac{d^2}{dx^2} + m^2 - \frac{2m^2}{\cosh^2 mx} . \quad (6.30)$$

El espectro de este operador es, pues, la información básica necesaria para calcular la energía cuántica inducida por fluctuaciones a un lazo en presencia del kink. En el régimen de acoplamiento ultrafuerte y kink infinitamente delgado (limite cuerda del kink),  $m, \lambda \rightarrow +\infty$  tal que  $m^2/\sqrt{\lambda} = \text{const.} \equiv \alpha/2 < \infty$ , tenemos la aproximación  $m^2 \tanh(mx)/\sqrt{\lambda} \simeq \frac{\alpha}{2} \text{sgn}(x)$ . En este limite el operador de segundo orden (6.30) se hace

$$\hat{K}^{1\delta} = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\alpha^2}{4} - \alpha \delta(x) \quad , \quad \alpha > 0 ,$$

i.e., el Hamiltoniano de un pozo delta desplazado de tal forma que la energía del estado ligado es precisamente cero. Esto es requerido por la física de solitones y el motivo para introducir el factor un medio en el límite cuerda del kink. El objetivo en esta sección es acometer el cálculo de las energías de Casimir en fondos delta usando la maquinaria teórica desarrollada en el estudio de las fluctuaciones a un lazo de kinks. Desde este punto de vista la interacción debida a fluctuaciones cuánticas en el vacío entre dos placas delta de Dirac puede ser entendida como la interacción inducida por efectos cuánticos en el vacío entre dos kinks sine-Gordon cuando ambos kinks pueden considerarse infinitamente delgados comparados con la distancia entre ellos (ver referencia [80]).

### 6.8.1. La fórmula de Dashen-Hasslacher-Neveu para la energía de Casimir inducida sobre una única placa delta

Ahora aplicamos la fórmula Dashen-Hasslacher-Neveu para calcular en un tercer enfoque la energía de Casimir de una placa modelada por una delta de Dirac. Los ingredientes son los datos espectrales de los operadores

$$\hat{K}^{1\delta} = -\frac{d^2}{dx^2} + m^2 + \alpha\delta(x) \quad , \quad \hat{K}^0 = -\frac{d^2}{dx^2} + m^2$$

considerados en secciones precedentes (como antes, denotamos  $m^2 = \mu^2 + \frac{\alpha^2}{4}$ ). Los datos necesarios que entran en la formula DHN se recogen de los espectros discreto y continuo de  $\hat{K}^{1\delta}$  and  $\hat{K}^0$ :

#### 1. Espectro discreto:

- Existe un estado semi-ligado (singlete) de  $\hat{K}^0$ , la función constante. Los estados semi-ligados se caracterizan por energías que se encuentran en el umbral del espectro continuo. Así, el valor propio de estado semi-ligado de  $\hat{K}^0$  es precisamente:

$$\omega_m^2 = m^2 = \mu^2 + \frac{\alpha^2}{4}$$

- Hay un estado ligado en el espectro de  $\hat{K}^{1\delta}$  si y solo si  $\alpha < 0$ . El valor propio correspondiente es conocido por ser:

$$\omega_\mu^2 = m^2 - \frac{\alpha^2}{4} = \mu^2$$

#### 2. Espectro continuo:

La información necesaria del espectro continuo es la densidad espectral. Eligiendo un intervalo de normalización muy largo de longitud  $L$  imponemos condiciones de frontera periódicas sobre las funciones propias de  $\hat{K}^0$  y de  $\hat{K}^{1\delta}$ :

$$e^{iqL} = e^{i[kL + \delta^{1\delta}(k)]} = 1 \quad \Rightarrow \quad qL = kL + \delta^{1\delta}(k) = 2\pi n \quad , \quad n \in \mathbb{Z} .$$

Aquí  $q = \frac{2\pi}{L}n$  denota el momento de la onda plana de las funciones propias de  $\hat{K}^0$  compatible con las condiciones de frontera periódicas. A su vez  $k$ , son los momentos de las ondas propias de scattering de  $\hat{K}^{1\delta}$  determinados a partir de las ecuaciones de la derecha en (2) en términos de los defasajes totales inducidos por el potencial delta. Para  $L$  muy grande se definen las densidades espectrales que caracterizan el espectro continuo en la forma:

$$\varrho^0 = \frac{dn}{dq} = \frac{L}{2\pi} \quad , \quad \varrho^{1\delta} = \frac{dn}{dk} = \frac{L}{2\pi} + \frac{d\delta^{1\delta}}{dk}(k) .$$

- (i) Los valores propios en el espectro continuo de  $\hat{K}^0$  son por lo tanto  $\omega^2(k) = k^2 + m^2$  mientras que la densidad espectral es constante:  $\varrho^0 = \frac{L}{2\pi}$ .
- (ii) A partir de los defasajes en los canales par e impar

$$e^{2i\delta_{\pm}^{1\delta}(k)} = \frac{2ik \pm \alpha}{2ik - \alpha} \quad \equiv \quad \begin{cases} \delta_{+}^{1\delta}(k) = -\arctan \frac{\alpha}{2k} \\ \delta_{-}^{1\delta}(k) = 0 \end{cases}$$

identificamos el defasaje total:  $\delta^{1\delta}(k) = -\arctan \frac{\alpha}{2k}$ . Los valores propios en el espectro continuo de  $\hat{K}^{1\delta}$  son idénticos a aquellos de  $\hat{K}^0$ :  $\omega^2(k) = k^2 + m^2$ . Las densidades espectrales, no obstante, difieren:

$$\varrho^{1\delta}(k) = \frac{1}{2\pi} \left( L + \frac{d\delta^{1\delta}}{dk} \right) = \frac{1}{2\pi} \left( L + \frac{2\alpha}{4k^2 + \alpha^2} \right) .$$

La energía de Casimir de la función delta es ahora proporcionada por “casi” la formula DHN:

$$\begin{aligned} E_C^{1\delta} &= \theta(-\alpha) \frac{\mu}{2} - \frac{m}{4} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2} (\varrho^{1\delta} - \varrho^0) \sqrt{k^2 + m^2} \\ &= \theta(-\alpha) \frac{\mu}{2} - \frac{m}{4} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\alpha}{4k^2 + \alpha^2} \sqrt{k^2 + m^2} , \end{aligned} \quad (6.31)$$

donde  $\theta(z)$  es la función escalón de Heaviside y el factor 1/2 adicional que entra en la sustracción del estado semi-ligado de  $\hat{K}^0$  se debe al teorema de Levinson unidimensional. La integración en (6.31) presenta una divergencia ultravioleta. La regularización más habitual es el uso de un corte en la energía:

$$E_C^{1\delta}(\varepsilon) = \theta(-\alpha) \frac{\mu}{2} - \frac{m}{4} + \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{1/\varepsilon} dk \frac{\sqrt{k^2 + m^2}}{4k^2 + \alpha^2} , \quad (6.32)$$



con lo cual se obtiene

$$E_C^{1\delta}(\varepsilon) = \theta(-\alpha) \frac{\mu}{2} - \frac{m}{4} + \frac{\mu}{2\pi} \arctan \left[ \frac{2\mu}{\alpha} \frac{1}{\sqrt{m^2\varepsilon^2 + 1}} \right] + \frac{\alpha}{8\pi} \log \left[ \frac{(1 + \sqrt{1 + m^2\varepsilon^2})^2}{m^2\varepsilon^2} \right].$$

La fórmula DHN “verdadera”, conocida en la teoría cuántica de solitones, requiere una sustracción modo a modo de fluctuaciones para llevar a cabo la renormalización de la energía del punto cero en el vacío ya que los fondos solitónicos, en contraste a los fondos constantes, tienen estados ligados. En términos prácticos este procedimiento requiere una integración parcial en la contribución a la energía de Casimir de la parte continua del espectro:

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \frac{k\delta(k)}{\sqrt{k^2 + m^2}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \frac{\delta}{dk}(k) \sqrt{k^2 + m^2} - \frac{1}{2\pi} \delta(k) \sqrt{k^2 + m^2} \Big|_0^\infty, \quad (6.33)$$

tal que la integral en el lado izquierdo de esta ecuación (6.33) debe ser usada en la fórmula de la energía de Casimir. Por lo tanto, la diferencia entre tomar en cuenta todos los modos hasta una energía dada, no igual en número en fondos solitónicos como en fondos constantes, es determinada a partir del desfase en infinito y en el origen. Aplicada al fondo de una delta la ecuación (6.33) conduce a la fórmula DHN precisa para la energía de Casimir:

$$E_C^{1\delta} |_{\text{DHN}} = \frac{\theta(-\alpha)}{2} (\mu - m) + \frac{\alpha}{4\pi} + \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty dk \frac{\sqrt{k^2 + m^2}}{4k^2 + m^2},$$

i.e., solo términos finitos modifican el resultado mostrado previamente en (6.31) y no hay necesidad de repetir la regularización ya implementada en (6.32). Mencionamos, sin embargo, que en [90] un término de autointeracción  $\phi^4$  ha sido agregado al Lagrangiano dando lugar a un vértice de orden cuatro que induce un contratérmino de renormalización de la masa. Teniendo en cuenta la contribución de este término a la energía de Casimir el autor muestra que la divergencia ultravioleta desaparece, al igual que en la física de solitones.

## 6.8.2. La traza del calor de una delta y función zeta espectral

Ahora implementamos el método de regularización de la función zeta espectral para controlar las divergencias ultravioleta en la energía de Casimir generada en torno a una delta. Necesitamos una herramienta intermedia: la traza del calor asociada.

### 6.8.2.1. La traza del calor de $\hat{K}^{1\delta}$

La traza del calor de una delta es definida a partir del espectro de  $\hat{K}^{1\delta}$  en la forma:

$$h_{\hat{K}^{1\delta}}[\tau] = \text{Tr}_{L^2} e^{-\tau K^{1\delta}}$$

$$\begin{aligned}
&= \theta(-\alpha)e^{-\tau\mu^2} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left( L + \frac{2\alpha}{4k^2 + \alpha^2} \right) e^{-\tau(k^2+m^2)} \\
&= L \frac{e^{-\tau m^2}}{\sqrt{4\pi\tau}} + \frac{e^{-\tau\mu^2}}{2} \left( 1 - \operatorname{Erf} \left[ \frac{\alpha}{2} \sqrt{\tau} \right] \right). \tag{6.34}
\end{aligned}$$

A partir de la representación en serie de potencias de la función de error complementaria

$$\operatorname{Erfc}[z] = 1 - \operatorname{Erf}[z] = 1 - \frac{e^{-z^2}}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2^n}{(2n-1)!!} z^{2n-1}$$

inferimos la expansión a altas temperaturas de la traza del calor de  $\hat{K}^{1\delta}$

$$h_{\hat{K}^{1\delta}}[\tau] = \frac{L}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\tau m^2} + \frac{e^{-\tau\mu^2}}{2} - \frac{e^{-\tau\mu^2}}{\sqrt{4\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2^n}{(2n-1)!!} \left( \frac{\alpha}{2} \sqrt{\tau} \right)^{2n-1}, \tag{6.35}$$

En este caso la serie (6.35) es verdaderamente convergente en lugar de una serie asintótica debido a la integrabilidad del problema espectral de una delta. Cálculos previos de los coeficientes de los núcleos del calor para fondos no suaves han sido realizados en la referencia [91]. Teniendo en cuenta los desarrollos en serie de la función error y la función exponencial los coeficientes del núcleo del calor para el potencial delta pueden ser fácilmente calculados a partir de la última fórmula en (6.34):

$$\begin{aligned}
a_{-1/2}^{(1\delta)} &= L/\sqrt{4\pi} \quad , \quad a_r^{(1\delta)} = \frac{(-1)^r \mu^{2r}}{2r!} \quad , \\
a_{r+1/2}^{(1\delta)} &= \frac{(-1)^{r+1}}{\sqrt{4\pi}} \left[ \frac{Lm^{2(r+1)}}{(r+1)!} + \mu^{2r} \alpha \sum_{j=0}^r \frac{(\alpha/2\mu)^{2j}}{j!(r-j)!(2j+1)} \right],
\end{aligned}$$

donde  $r = 0, 1, 2, \dots$  es un número natural. La traza del calor para el sistema de una única delta es escrita en términos de los coeficientes del núcleo del calor como la serie:

$$h_{\hat{K}^{1\delta}}[\tau] = \sum_{r=0}^{\infty} \left[ a_r^{(1\delta)} + a_{r-1/2}^{(1\delta)} \tau^{-1/2} \right] \tau^r .$$

### 6.8.2.2. La función zeta espectral de $\mathbf{K}^{1\delta}$

La función zeta espectral de una delta  $\zeta_{\hat{K}^{1\delta}}[s]$  es la transformada de Mellin de la traza del calor

$$\zeta_{\hat{K}^{1\delta}}[s] = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} d\tau \tau^{s-1} h_{\hat{K}^{1\delta}}[\tau]$$

Por tanto, obtenemos

$$\zeta_{\hat{K}^{1\delta}}[s] = \frac{1}{2} \frac{1}{\mu^{2s}} + \frac{L}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{m^{2s-1}} \frac{\Gamma(s - \frac{1}{2})}{\Gamma(s)} - \frac{\alpha}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{m^{2s+1}} \frac{\Gamma(s + \frac{1}{2})}{\Gamma(s)} {}_2F_1 \left[ \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + s, \frac{3}{2}; -\frac{\alpha^2}{4\mu^2} \right]$$

con la información espectral codificada en la función hipergeométrica de Gauss  ${}_2F_1[a, b, c; z]$ . La estructura meromorfa de la función zeta espectral es descifrada a partir de la transformada de Mellin de la expansión de la traza del calor:

$$\begin{aligned} \zeta_{\hat{K}^{1\delta}}[s] &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty d\tau \tau^{s-1} \left( \frac{e^{-\tau m^2 L}}{\sqrt{4\pi\tau}} + \frac{1}{2} e^{-\tau\mu^2} \right) - \\ &\quad - \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty d\tau \tau^{s-1} \frac{e^{-\tau m^2}}{\sqrt{4\pi}} \sum_{n=1}^\infty \frac{2^n}{(2n-1)!!} \left( \frac{\alpha}{2} \sqrt{\tau} \right)^{2n-1}. \end{aligned}$$

De esto se obtiene

$$\zeta_{\hat{K}^{1\delta}}[s] = \frac{L}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{m^{2s-1}} \frac{\Gamma(s - \frac{1}{2})}{\Gamma(s)} + \frac{1}{2} \frac{1}{\mu^{2s}} - \frac{1}{\sqrt{4\pi}\alpha} \sum_{n=1}^\infty \frac{\alpha^{2n}}{2^n (2n-1)!!} \frac{\Gamma(s+n - \frac{1}{2})}{m^{2s+2n-1} \Gamma(s)}$$

y comprobamos que los polos de  $\zeta_{\hat{K}^{1\delta}}$  surgen en los puntos:  $s+n - \frac{1}{2} = 0, -1, -2, \dots$  o equivalentemente,  $s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2}, \dots$

### 6.8.2.3. Energía de Casimir de una delta en términos de la función zeta espectral

El procedimiento de regularización de la función zeta estándar prescribe un valor finito para la energía de Casimir de una delta divergente mediante la asignación del resultado obtenido a partir de la función zeta espectral en un punto regular  $s \in \mathbb{C}$ :

$$E_C^{1\delta}(s, \mu, \alpha, M) = \frac{1}{2} M^{2s+1} (\zeta_{\hat{K}^{1\delta}}[s] - \zeta_{\hat{K}^0}[s]),$$

$$\zeta_{\hat{K}^0}[s] = 2^{2s} \frac{1}{m^{2s}} + \frac{mL}{\sqrt{4\pi}} \frac{\Gamma(s - \frac{1}{2})}{m^{2s} \Gamma(s)}.$$

Aquí  $M$  es un parámetro de dimensiones inverso de longitud introducido para mantener las dimensiones de la energía  $L^{-1}$  en todos los puntos  $s \in \mathbb{C}$ . Nótese que hemos sustraído la energía del punto cero en el vacío también regularizada por medio de la función zeta espectral correspondiente.

El límite  $s \rightarrow -\frac{1}{2}$  donde la energía de Casimir física surge,  $E_C^{1\delta}(\alpha, \mu) = \lim_{s \rightarrow -\frac{1}{2}} E_C^{1\delta}(s, \mu, \alpha, M)$ , es muy delicado, ya que es un polo de la función zeta espectral de una delta. No obstante, el análisis de la energía de Casimir cerca del polo nos permite aislar la parte divergente:

$$E_C^{1\delta}(\alpha, \mu) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} E_C^{1\delta} \left( -\frac{1}{2} + \varepsilon, \mu, \alpha, M \right),$$

esto es

$$E_C^{1\delta}(\alpha, \mu) = \frac{1}{4} (\mu - m) - \frac{\alpha}{8\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} {}_2F_1 \left[ \frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}; -\frac{\alpha^2}{4\mu^2} \right] + \frac{\alpha}{8\pi} {}_2F_1' \left[ \frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}; -\frac{\alpha^2}{4\mu^2} \right],$$

donde la singularidad se manifiesta en el polo de la función  $\Gamma$  en el origen. Para derivar esta fórmula se utilizo:

$$\Gamma(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} \Gamma(1 + \varepsilon)$$

$${}_2F_1 \left[ \frac{1}{2}, \varepsilon, \frac{3}{2}; -\frac{\alpha^2}{4\mu^2} \right] = {}_2F_1 \left[ \frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}; -\frac{\alpha^2}{4\mu^2} \right] + \varepsilon {}_2F_1' \left[ \frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}; -\frac{\alpha^2}{4\mu^2} \right]$$

donde la prima significa derivada de la función hipergeométrica con respecto al segundo argumento.

La energía de Casimir de una delta calculada a partir de la expansión del núcleo del calor

$$E_C^{1\delta}(\alpha, \mu) = \frac{1}{4}(\mu - m) - \frac{1}{\alpha\sqrt{4\pi}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{2^n(2n-1)!!} \frac{\Gamma(-1 + \varepsilon + n)}{\Gamma(-\frac{1}{2})}$$

muestra que la singularidad solo se manifiesta en el termino  $n = 1$ .

### 6.8.3. Energía de Casimir de dos deltas a partir de las funciones espectrales del calor y zeta

Con el fin de calcular las energías de Casimir de las dos deltas a partir de las funciones espectrales reescribimos los defasajes del operador de Schrödinger  $\hat{K}^{2\delta}$  para dos deltas de la misma intensidad en la forma:

$$e^{2i\delta_{\pm}(k)} = t(k) \pm r(k) \quad , \quad \delta^{2\delta}(k) = \delta_+(k) + \delta_-(k)$$

$$e^{2i\delta_{\pm}(k)} = \frac{2ik + \alpha (1 \pm e^{-2iak})}{2ik - \alpha (1 \pm e^{2iak})}$$

La elección de deltas con pesos idénticos se hace para simplificar las fórmulas. La densidad espectral sobre un intervalo de gran longitud,  $L \rightarrow \infty$ , es:

$$\varrho^{2\delta}(k) = \frac{L}{2\pi} + \frac{1}{4\pi i} \frac{d}{dk} \left\{ \ln \left[ \frac{\alpha^2 e^{-4iak} - (2ik + \alpha)^2}{\alpha^2 e^{4iak} - (2ik - \alpha)^2} \right] \right\}.$$

#### 6.8.3.1. La traza de la función espectral del calor y función zeta de $\hat{K}^{2\delta}$

El conocimiento de los datos de scattering del operador de Schrödinger  $\hat{K}^{2\delta}$  nos permite escribir la traza de la función espectral del calor y la función zeta. La traza del calor es:

$$h_{\hat{K}^{2\delta}}(\tau) = \theta(-\alpha) e^{-\tau\omega_1^2} + \theta\left(-\alpha - \frac{1}{a}\right) e^{-\tau\omega_2^2} + \int_{-\infty}^{\infty} dk \varrho^{2\delta}(k) e^{-\tau(k^2+m^2)} ,$$

fórmula que codifica la contribución (condicional) de los estados ligados (primera fila) y los estados de scattering (segunda fila). Después de una integración parcial se obtiene:

$$h_{\hat{K}^{2\delta}}(\tau) = \theta(-\alpha)e^{-\tau\omega_1^2} + \theta\left(-\alpha - \frac{1}{a}\right)e^{-\tau\omega_2^2} + \frac{L}{\sqrt{4\pi\tau}}e^{-\tau m^2} + \\ + \tau \int_{-\infty}^{\infty} \frac{kdk}{2\pi i} \ln \left[ \frac{\alpha^2 e^{-4iak} - (2ik + \alpha)^2}{\alpha^2 e^{4iak} - (2ik - \alpha)^2} \right] e^{-\tau(k^2 + m^2)} .$$

La transformada de Mellin de estas expresiones conduce a la función zeta espectral de las dos deltas

$$\zeta_{\hat{K}^{2\delta}}(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int d\tau \tau^{s-1} h_{\hat{K}^{2\delta}}(\tau) \\ = \frac{L}{\sqrt{4\pi}} \frac{\Gamma(s - \frac{1}{2})}{\Gamma(s)} \frac{1}{m^{2s-1}} + \frac{1}{\omega_1^{2s}} \theta(-\alpha) + \frac{1}{\omega_2^{2s}} \theta\left(-\alpha - \frac{1}{a}\right) + \\ + s \int_{-\infty}^{\infty} \frac{kdk}{2\pi i (k^2 + m^2)^{s+1}} \ln \left[ \frac{\alpha^2 e^{-4iak} - (2ik + \alpha)^2}{\alpha^2 e^{4iak} - (2ik - \alpha)^2} \right]$$

### 6.8.3.2. La fórmula DHN para la energía de Casimir entre dos cuerpos

La traducción estricta de la formula DHN daría la energía del vacío de las dos deltas en el valor  $s = -\frac{1}{2}$  de la función zeta espectral como:

$$E_C^{2\delta} |_{DHN} = \frac{1}{2} \lim_{s \rightarrow -\frac{1}{2}} [\zeta_{\hat{K}^{2\delta}}(s) - \zeta_{\hat{K}^0}(s)] .$$

Haciendo esto renunciamos a sustraer las contribuciones de las auto-energías de las deltas individuales. En efecto, la fórmula DHN original se aplica a objetos individuales. Para generalizar esta expresión a estructuras formadas por dos cuerpos nuestro criterio es reproducir el resultado riguroso obtenido a partir de la fórmula **TGTG**. Por lo tanto tenemos que trabajar con una densidad espectral renormalizada

$$\bar{\varrho}^{2\delta}(k) = \varrho^{2\delta}(k) - \varrho^{1\delta}(k, a) - \varrho^{1\delta}(k, -a) - \varrho^0 \\ = \frac{1}{4\pi i} \frac{d}{dk} \left\{ \ln \left[ \frac{\alpha^2 e^{-4iak} - (2ik + \alpha)^2}{\alpha^2 e^{4iak} - (2ik - \alpha)^2} \right] - \ln \left[ \frac{(2ik + \alpha)^2 - \alpha^2 e^{-4ika}}{(2ik - \alpha)^2 - \alpha^2 e^{4ika}} \left( 1 - \frac{\alpha^2 e^{4ika}}{(2ik - \alpha)^2} \right)^{-1} \right] \right\} \\ = \frac{1}{4\pi i} \frac{d}{dk} \left\{ \ln \left[ 1 - \frac{\alpha^2 e^{4ika}}{(2ik - \alpha)^2} \right] \right\}$$

donde la sustracción de las deltas individuales desplazados una con respecto a la otra en  $2a$  da exactamente la densidad **TGTG**. A partir de la densidad espectral renormalizada escribimos la energía de Casimir de las dos deltas DHN renormalizada por medio de la formula DHN

generalizada a dos cuerpos

$$\begin{aligned} \overline{E}_C^{2\delta} |_{\text{DHN}}(\alpha, a) = & \frac{\omega_1}{2}\theta(-\alpha) + \frac{\omega_2}{2}\theta\left(-\alpha - \frac{1}{a}\right) - \frac{m}{4} - \mu\theta(-\alpha) - \\ & - \frac{1}{4\pi i} \int_0^\infty \frac{kdk}{\sqrt{k^2 + m^2}} \ln \left[ 1 - \frac{\alpha^2 e^{4ika}}{(2ik - \alpha)^2} \right]. \end{aligned}$$

Nótese que hemos restado también las raíces cuadradas de los valores propios de los estados semi-ligados del Hamiltoniano libre y los dos valores propios de estado ligado de las deltas individuales.



# Conclusiones

Los principales resultados y conclusiones que se han obtenido mediante la elaboración de este trabajo, son los siguientes:

**1.** Caracterización de la extensión supersimétrica de sistemas descritos por dos y tres deltas de Dirac en una dimensión detallando su espectro de energía y funciones de onda asociadas. Esto se ha hecho partiendo del estudio de la extensión supersimétrica de un sistema en que una partícula se mueve en una recta encontrando en un mismo punto un potencial delta de Dirac junto con un escalón. Este sistema en particular se identifica como fundamental en la supersimetrización de sistemas con un número finito de deltas de Dirac además de que constituye uno de los pocos casos conocidos donde explícitamente ocurre ruptura de supersimetría en un cierto régimen relativo entre la intensidad de la interacción delta y la amplitud del escalón. En general, sin embargo, se encuentra un estado fundamental de tipo singlete, un modo cero, bien en el sector bosónico, bien en el sector fermiónico. Supersimetría es manifiesta y el índice de Witten es 1.

**2.** Estudio de la extensión supersimétrica de sistemas descritos por infinitas deltas con signos alternos. En este caso se demuestra que la relación de dispersión -invariante con respecto al signo de la constante de acoplamiento- da lugar a bandas de estados propagantes vinculadas por supersimetría. Las funciones de onda asociadas son doblemente degeneradas y corresponden a ondas propagantes moviéndose ya sea de izquierda a derecha o en el sentido opuesto. Se demuestra también la aparición de una banda de estados no propagantes bosónica y una fermiónica vinculadas por supersimetría, en estas bandas, no obstante, las funciones de onda son no degeneradas. Además se establece la existencia de dos modos cero, que dan lugar a dos estados fundamentales de tipo singlete no relacionados por las supercargas. Este sistema es pues excepcional: la supersimetría es manifiesta, no rota espontáneamente, pero el índice de Witten es cero.



3. Extension supersimétrica del sistema cuántico de Lieb-Liniger-Yang de  $N$  partículas que se mueven sobre una línea con interacciones de contacto de tipo delta de Dirac. La elección de superpotencial conduce a un sistema cuántico supersimétrico que respeta la integrabilidad. En particular, el ansatz de Bethe y sus variantes permiten identificar los estados de colisión (o los de tipo polimero si el acoplamiento es atractivo) en el sector bosónico de forma análoga al del sistema no supersimétrico. Esto conduce directamente a la factorización de la matriz  $S$  entre  $N$  partículas en términos de la matriz  $S$  entre dos partículas. Para  $N = 2$  y  $N = 3$  se demuestra además que existen dos modos cero, uno en un sector bosónico y el otro en un sector fermiónico, cuando el acoplamiento es atractivo, exactamente la misma situación encontradas para infinitas deltas alternadas supersimétricas..
4. Formulación de una extensión supersimétrica del problema cuántico de Kepler-Coulomb en dos y en tres dimensiones que respeta la simetría dinámica  $\mathbb{SO}(3)$  o  $\mathbb{SO}(4)$  debida a la invariancia del vector de Runge-Lenz-Wipf. La extensión supersimétrica elegida es por tanto sobreintegrable y el espectro de energía y las funciones de onda asociadas se determinan mediante métodos algebraicos. Se verifica que en estos sistemas, tanto en dos como en tres dimensiones, hay un único estado fundamental de energía cero de tipo bosónico y la supersimetría es respetada por el estado fundamental mientras que el índice de Witten es uno.
5. Formulación de sistemas supersimétricos que engloban los sistemas de Euler/Coulomb y Jacobi/Coulomb, dos centros de fuerza Newtonianos en dos o tres dimensiones. Los superpotenciales son elegidos de modo que el segundo operador invariante sobreviva en el ámbito supersimétrico. El precio a pagar es la modificación del potencial de modo que la energía sea no negativa. Se encuentran en ambos casos modos cero tanto en sectores bosónicos como fermiónicos.
6. Comparación entre los espectros del problema de Kepler-Coulomb supersimétrico  $\mathcal{N} = 2$  con los espectros del problema de Euler-Coulomb  $\mathcal{N} = 2$  en dos y tres dimensiones. La separabilidad en coordenadas elípticas se utiliza para demostrar que una parte del espectro de los problemas de Euler/Coulomb y Jacobi/Coulomb se puede identificar resolviendo infinitas ecuaciones solubles quasi-exactamente que proporcionan autovalores y autofunciones relacionadas con las de átomos hidrogenoideos. En particular se obtienen las del átomo de hidrógeno en el límite de distancia intercentros cero de dos centros de la misma carga. Se demuestra también que en este límite el modo cero fermiónico deviene no normalizable.
7. Tratamiento analítico completo del efecto Casimir en una teoría de un campo escalar en un espacio-tiempo bidimensional mediante una simulación de las placas metálicas por potenciales

de Dirac. Esta modelización permite considerar situaciones en que las placas son parcialmente transparentes. Se calcula explícitamente la energía inducida por las fluctuaciones cuánticas de un campo escalar en presencia de un objeto externo localizado en dos puntos sobre una recta y modelado por dos potenciales delta de Dirac mediante tres procedimientos complementarios: el formalismo de las funciones de Green, el método de scattering por varios centros materializado en términos de la fórmula  $TGTG$  y la idealización como límite “cuerda” del kink y aplicación en consonancia de la fórmula de Dashen, Hasslacher y Neveu deducida en el marco de la teoría cuántica de solitones.



# Apéndice A

## Scattering unidimensional

En general la teoría de scattering describe sistemas interactuantes en escalas de tiempo y espacio muy grandes en comparación con la escala de tiempo y espacio de la interacción [8, 32]. En mecánica cuántica esta situación es implementada en sistemas unidimensionales asumiendo que en regiones muy alejadas de la región de interacción los estados de una partícula son ondas planas libres  $e^{\pm ikx}$ , funciones propias del Hamiltoniano de partícula libre:  $\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2}$ . Así, la teoría de scattering es adecuada para potenciales que decrezcan lo suficientemente rápido en  $x \rightarrow \pm\infty$  como para que sus soluciones coincidan asintóticamente con las ondas planas.

### A.1. Amplitudes de scattering

Supongamos que la interacción es caracterizada por un potencial  $V(x)$  dado por una función continua a trozos de la recta real a  $\mathbb{R}$  tal que:

$$V_0 \equiv \inf V(x) > -\infty \quad , \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = V_{\pm}$$

donde  $\inf V(x)$  es el mínimo valor de  $V(x)$ , elegido mayor que  $-\infty$  para tratar con espectros acotados inferiormente y los límites constantes pueden ser elegidos sin pérdida de generalidad tales que  $V_- \leq V_+ < +\infty$ .  $V(x)$  divide la recta real  $\mathbb{R}$  en  $j$  intervalos delimitados por  $j - 1$  puntos donde discontinuidades finitas y/o discontinuidades infinitas de  $V(x)$  ocurren. El Hamiltoniano  $\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$  tiene un espectro discreto o “puntual” para energías en el rango  $E \in (V_0, V_-)$  y un espectro continuo no degenerado si  $E \in (V_-, V_+)$  que se hace doblemente degenerado cuando  $V_+ < E < +\infty$ . Hay dos soluciones linealmente independientes funciones propias de scattering

$$\frac{d^2\psi(x, E)}{dx^2} + [E - V(x)]\psi(x, E) = 0 \quad -\infty < x < \infty \quad (\text{A.1})$$

que se comportan asintóticamente como ondas planas:

$$\psi_r(x, E) = \begin{cases} e^{ik_-x} + \rho_r(E)e^{-ik_-x} \\ \sigma_r(E)e^{ik_+x} \end{cases}, \quad \psi_l(x, E) = \begin{cases} \sigma_l(E)e^{-ik_-x} \\ e^{-ik_+x} + \rho_l(E)e^{ik_+x} \end{cases}, \quad \begin{matrix} x \rightarrow -\infty \\ x \rightarrow \infty \end{matrix}$$

donde  $k_{\pm} = \sqrt{E - V_{\pm}}$ .

Las ondas de scattering  $\psi_r(x, E)$ , respectivamente  $\psi_l(x, E)$ , son así caracterizadas por las amplitudes de transmisión  $\sigma_r(E)$  y de reflexión  $\rho_r(E)$ , respectivamente  $\sigma_l(E)$  y  $\rho_l(E)$ . La onda incidente (no dispersada) en  $\psi_r$  se mueve hacia la derecha (scattering “diestro”) mientras que la onda incidente en  $\psi_l$  se mueve hacia la izquierda (scattering “zurdo”).

Es bien conocido que el determinante de Wronski de dos soluciones degeneradas de la ecuación de Schrödinger es constante (independiente de  $x$ ) y diferente de cero y finito si las soluciones son linealmente independientes:

$$\psi_1'' - [V(x) - E]\psi_1 = 0 \quad , \quad \psi_2'' - [V(x) - E]\psi_2 = 0 \quad ,$$

$$\frac{d}{dx}W(\psi_1, \psi_2) = \frac{d}{dx}(\psi_1\psi_2' - \psi_1'\psi_2) = 0 \quad .$$

En consecuencia la constancia del Wronskiano impone relaciones entre las amplitudes de dispersión con fuerte significado físico<sup>1</sup> [8, 32]:

$$\frac{i}{2}W(\psi_r(x, E), \psi_r^*(x, E)) = k_-[1 - |\rho_r(E)|^2] = k_+|\sigma_r(E)|^2 \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{i}{2}W(\psi_l(x, E), \psi_l^*(x, E)) = -k_+[1 - |\rho_l(E)|^2] = -k_-|\sigma_l(E)|^2 \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{i}{2}W(\psi_r(x, E), \psi_l(x, E)) = k_+\sigma_r(E) = k_-\sigma_l(E) \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{i}{2}W(\psi_r(x, E), \psi_l^*(x, E)) = k_+\rho_l^*(E)\sigma_r(E) = -k_-\rho_r(E)\sigma_l^*(E) \quad (\text{A.5})$$

Es fácil ver a partir de (A.4) que los coeficientes de transmisión “diestro” y “zurdo” definidos por  $T_r(E) = \frac{k_+}{k_-}|\sigma_r(E)|^2$  y  $T_l(E) = \frac{k_-}{k_+}|\sigma_l(E)|^2$  son iguales:  $T_r(E) = T_l(E) = T(E)$ . A partir de (A.2) y (A.3) (junto con (A.4)) es posible comprobar que también los coeficientes de reflexión  $R_r(E) = |\rho_r|^2$  y  $R_l(E) = |\rho_l|^2$  son iguales:  $R_r(E) = R_l(E) = R(E)$ . El uso de las mismas tres ecuaciones nos permite mostrar la conservación del flujo de densidad de probabilidad:

$$T(E) + R(E) = \frac{k_+}{k_-}|\sigma_r(E)|^2 + |\rho_r(E)|^2 = \frac{k_-}{k_+}|\sigma_l(E)|^2 + |\rho_l(E)|^2 = 1 \quad .$$

<sup>1</sup> $\mathcal{O}^*$  denota el complejo conjugado de  $\mathcal{O}$

Finalmente, (A.4) obliga a las fases de las amplitudes de transmisión  $\sigma_r(E) = |\sigma_r(E)|e^{2i\delta_r(E)}$  y  $\sigma_l(E) = |\sigma_l(E)|e^{2i\delta_l(E)}$  a ser iguales  $\delta_r(E) = \delta_l(E) = \delta(E)$ , mientras que (A.5) establece un vínculo entre las fases de las amplitudes de reflexión y de transmisión:

$$\varphi_r(E) + \varphi_l(E) = \frac{\pi}{2} - 2\delta(E) ,$$

si  $\rho_r(E) = |\rho_r(E)|e^{2i\varphi_r(E)}$  y  $\rho_l(E) = |\rho_l(E)|e^{2i\varphi_l(E)}$ .

Los estados ligados también están codificados en los datos de scattering.  $E_n$  son  $n$  polos de ambas  $\sigma_r(E_n)$  y  $\sigma_l(E_n)$  tal que el Wronkiano se hace infinito y  $\psi_r$  y  $\psi_l$  dejan de ser linealmente independientes. Los polos existen solo si  $V_0 < E_n$ . Las funciones propias de estado ligado asintóticamente toman la forma

$$\psi_n(x) = N \begin{cases} e^{\kappa_-^{(n)}x} & , \quad x \ll 0 \\ e^{-\kappa_+^{(n)}x} & , \quad x \gg 0 \end{cases} , \quad k_{\pm}^{(n)} = i\kappa_{\pm}^{(n)} = \pm i\sqrt{V_{\pm} - E_n}$$

que son normalizables solo si el polo ocurre para  $V_0 < E_n < V_-$  y  $\kappa_{\pm}^{(n)} > 0$  (polos para los que  $\kappa_{\pm}^{(n)} < 0$  son llamados estados antiligados).

## A.2. Matriz $S$ , defasajes y densidad espectral

En el caso especial pero muy frecuente  $V_+ = V_- = v \equiv k_+ = k_- = k = \sqrt{E - v}$  los diferentes Wronskianos se hacen [8, 32]:

$$\frac{i}{2}W(\psi_r(x, k), \psi_r^*(x, k)) = k[1 - |\rho_r(k)|^2] = k|\sigma_r(k)|^2 \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{i}{2}W(\psi_l(x, k), \psi_l^*(x, k)) = -k[1 - |\rho_l(k)|^2] = -k|\sigma_l(k)|^2 \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{i}{2}W(\psi_r(x, k), \psi_l(x, k)) = k\sigma_r(k) = k\sigma_l(k) \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{i}{2}W(\psi_r(x, k), \psi_l^*(x, k)) = k\rho_l^*(k)\sigma_r(k) = -k\rho_r(k)\sigma_l^*(k) . \quad (\text{A.9})$$

Las amplitudes de transmisión son ahora iguales,  $\sigma_r(k) = \sigma_l(k) = \sigma(k)$ , así como los módulos de las amplitudes de reflexión:  $|\rho_r(k)| = |\rho_l(k)|$ . La ecuación (A.9) es entonces equivalente a  $\rho_r(k)\sigma^*(k) + \rho_l^*(k)\sigma(k) = 0$ . Por tanto la matriz  $S$  de scattering

$$S(k) = \begin{pmatrix} \sigma(k) & \rho_r(k) \\ \rho_l(k) & \sigma(k) \end{pmatrix} , \quad S^\dagger(k) = \begin{pmatrix} \sigma^*(k) & \rho_l^*(k) \\ \rho_r^*(k) & \sigma^*(k) \end{pmatrix}$$

es unitaria:

$$S^\dagger S = \begin{pmatrix} |\sigma|^2 + |\rho_l|^2 & \sigma^* \rho_r + \sigma \rho_l^* \\ \sigma^* \rho_l + \sigma \rho_r^* & |\sigma|^2 + |\rho_r|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\sigma|^2 + |\rho_r|^2 & \sigma^* \rho_r + \sigma \rho_l^* \\ \sigma^* \rho_l + \sigma \rho_r^* & |\sigma|^2 + |\rho_l|^2 \end{pmatrix} = S S^\dagger$$

El significado conceptual de este operador, la razón de su nombre, se ve a través de la acción sobre la base de ondas planas degeneradas:

$$S(k) \begin{pmatrix} e^{ikx} \\ e^{-ikx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma(E)e^{ikx} + \rho_r(E)e^{-ikx} \\ \rho_l(E)e^{ikx} + \sigma(E)e^{-ikx} \end{pmatrix}, \quad \frac{i}{2}W(e^{-ikx}, e^{ikx}) = -k$$

que muestra como los estados estacionarios máximamente deslocalizados se aplican en las ondas dispersadas puras, respectivamente moviéndose hacia la derecha y hacia la izquierda cuando paquetes de onda localizados se forman a partir de ellos.

Los valores propios de la matriz  $S$  son así fases puras

$$\lambda_{\pm}(k) = \frac{\text{tr}S(k) \pm \sqrt{(\text{tr}S)^2(k) - 4\det S(k)}}{2} = \sigma(k) \pm \sqrt{\rho_l(k)\rho_r(k)} = e^{2i\delta_{\pm}(k)}. \quad (\text{A.10})$$

Aquí

$$\delta_{\pm}(k) = \frac{1}{2i} \log \left[ \sigma(k) \pm \sqrt{\rho_r(k)\rho_l(k)} \right] = \frac{1}{2} \arctan \left[ \frac{\text{Im}(\sigma(k) \pm \sqrt{\rho_l(k)\rho_r(k)})}{\text{Re}(\sigma(k) \pm \sqrt{\rho_l(k)\rho_r(k)})} \right]$$

son los defasajes. En efecto, las ondas propias de la matriz  $S$  son de la forma:

$$S(k) \begin{pmatrix} f^1(x) \\ f_{\pm}^2(x) \end{pmatrix} = \left( \sigma(k) \pm \sqrt{\rho_l(k)\rho_r(k)} \right) \begin{pmatrix} f^1(x) \\ f_{\pm}^2(x) \end{pmatrix} \Rightarrow f_{\pm}^2(x) = \pm \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_r}} f^1(x).$$

Elijiendo, e.g.,  $f^1(x) = e^{ikx}$  la acción de  $S$  sobre estas funciones propias produce:

$$S \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_r}} \end{pmatrix} e^{ikx} = (\sigma \pm \sqrt{\rho_r \rho_l}) \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_r}} \end{pmatrix} e^{ikx} = e^{ikx + \log(\sigma \pm \sqrt{\rho_r \rho_l})} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_r}} \end{pmatrix}.$$

Por tanto, el defasaje total  $\delta(k)$  es:

$$e^{ikx + \frac{1}{2} \log[\sigma^2(k) - \rho_r(k)\rho_l(k)]} = e^{ikx + i\delta(k)} = e^{ikx + i[\delta_+(k) + \delta_-(k)]}.$$

Imponiendo condiciones de frontera periódicas sobre las ondas de scattering sobre un intervalo muy largo de longitud  $L$  exige a los momentos satisfacer la ecuación trascendente:

$$e^{i[kL + \delta(k)]} = 1, \quad kL + \delta(k) = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z},$$

En el límite  $L \rightarrow \infty$  uno define la densidad espectral

$$\varrho(k) = \frac{dn}{dk} = \frac{L}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \frac{d\delta}{dk}(k)$$

con el fin de caracterizar el espectro continuo en el problema de scattering de  $V(x)$ .

### A.3. Ecuación de Lippmann-Schwinger

La ecuación de Schrödinger (A.1) se puede escribir en la forma

$$(E - \hat{H}_0)\psi = \hat{V}\psi, \quad (\text{A.11})$$

donde las soluciones de scattering  $\psi$  son una superposición  $\psi = \psi_0 + \psi_{scatt}$  de estados libres y estados dispersados.

Si sustituimos  $\psi = \psi_0 + \psi_{scatt}$  en (A.11) y resolvemos para  $\psi_{scatt}$  se encuentra<sup>2</sup>

$$\psi_{scatt} = \hat{G}\hat{V}\psi_0 \quad (\text{A.12})$$

donde  $\hat{G}$  es la función de Green del operador  $\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ .

En consecuencia los estados de scattering son de la forma  $\psi = (\hat{I} + \hat{G}\hat{V})\psi_0$ , expresión que es de poca utilidad debido a la dificultad de encontrar la función de Green  $\hat{G}$  analíticamente.

Por otro lado si sustituimos  $\psi$  en la parte derecha de (A.11) y resolvemos para  $\psi_{scatt}$  se encuentra<sup>3</sup>

$$\psi_{scatt} = \hat{G}_0\hat{V}\psi \quad (\text{A.13})$$

donde  $\hat{G}_0$  es la función de Green del operador  $\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2}$ .

Por tanto los estados de scattering satisfacen la ecuación de Lippmann-Schwinger en una dimensión<sup>4</sup>

$$\psi = \psi_0 + \hat{G}_0\hat{V}\psi \quad (\text{A.14})$$

La solución de la ecuación de Lippmann-Schwinger (A.14) está dada por:

$$\psi = (\hat{I} - \hat{G}_0\hat{V})^{-1}\psi_0$$

donde  $\hat{I}$  es el operador identidad.

También podemos solucionar la ecuación de Lippmann-Schwinger utilizando el método de iteración. Para hacer esto tomamos como aproximación a orden cero  $\psi^{(0)} = \psi_0$  y usamos (A.14) para obtener la aproximación a orden uno  $\psi^{(1)} = (\hat{I} + \hat{G}_0\hat{V})\psi_0$  la cual al ser insertada en (A.14) da como resultado la aproximación a orden dos  $\psi^{(2)} = (\hat{I} + \hat{G}_0\hat{V} + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V})\psi_0$ . Luego de un número infinito de iteraciones se obtiene la expresión

$$\psi = (\hat{I} + \hat{G}_0\hat{V} + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \dots)\psi_0, \quad (\text{A.15})$$

<sup>2</sup>La función de Green del operador  $\hat{H}$  se define en la forma  $\hat{G} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (E - \hat{H}_0 - \hat{V} + i\epsilon)^{-1}$ .

<sup>3</sup>La función de Green del operador  $\hat{H}_0$  se define en la forma  $\hat{G}_0 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (E - \hat{H}_0 + i\epsilon)^{-1}$ .

<sup>4</sup>En notación de Dirac esta ecuación se escribe como  $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \hat{G}_0\hat{V}|\psi\rangle$



denominada serie de Born.

Ahora bien, a partir de (A.15) podemos escribir el estado  $\psi_{scatt} = \psi - \psi_0$  en la forma

$$\psi_{scatt} = (\hat{G}_0\hat{V} + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \cdots)\psi_0, \quad (\text{A.16})$$

expresión que puede ser factorizada como

$$\psi_{scatt} = \hat{G}_0(\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \cdots)\psi_0 = G_0T\psi_0, \quad (\text{A.17})$$

y que define el operador de Lippmann-Schwinger<sup>5</sup>  $\hat{T}$ .

Sustituyendo  $\psi_0 = (\hat{I} - \hat{G}_0\hat{V})\psi$  en (A.17) y comparando con (A.13) se encuentra<sup>6</sup>

$$\hat{T} = \hat{V}(\hat{I} - \hat{G}_0\hat{V})^{-1}. \quad (\text{A.18})$$

Dada la dificultad de evaluar la función de Green  $\hat{G}$  analíticamente es conveniente disponer de una expansión perturbativa. Esta se obtiene comparando las ecuaciones (A.12) y (A.16) con lo cual se deduce la expresión

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \cdots \quad (\text{A.19})$$

que se puede reescribir en la forma

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}(\hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \cdots) = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}, \quad (\text{A.20})$$

o alternativamente como

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + (\hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \cdots)\hat{V}\hat{G}_0 = \hat{G}_0 + \hat{G}\hat{V}\hat{G}_0. \quad (\text{A.21})$$

Factorizando el operador  $\hat{T}$  en la forma  $\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}(\hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \cdots)\hat{V}$  y usando la ecuación (A.19) obtenemos

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}\hat{V}. \quad (\text{A.22})$$

Multiplicando esta expresión a la izquierda por el operador  $\hat{G}_0$  y utilizando la ecuación (A.20) se encuentra

$$\hat{G}_0\hat{T} = \hat{G}\hat{V}. \quad (\text{A.23})$$

Similarmente al multiplicar (A.22) a la derecha por el operador  $\hat{G}_0$  y utilizar la ecuación (A.21) se encuentra

$$\hat{T}\hat{G}_0 = \hat{V}\hat{G}.$$

<sup>5</sup>La relación entre la matriz  $T$  y la matriz  $S$  es tal que  $T = S - I$ .

<sup>6</sup>Una expresión equivalente es  $\hat{T} = (\hat{I} - \hat{V}\hat{G}_0)^{-1}\hat{V}$ . Para ver esta equivalencia se aplica a la derecha de ambas ecuaciones el operador  $\hat{I} - \hat{V}\hat{G}_0$  y a la izquierda de ambas ecuaciones el operador  $\hat{I} - \hat{G}_0\hat{V}$ , lo que da como resultado  $\hat{V} - \hat{V}\hat{G}_0\hat{V} = \hat{V} - \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}$ .

Finalmente reemplazando (A.23) en (A.22) obtenemos

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{T}, \quad (\text{A.24})$$

que corresponde a la ecuación de Lippmann-Schwinger para el operador  $\hat{T}$  y cuya solución coincide con (A.18).

Si solucionamos por el método de iteración tomamos como aproximación a orden cero  $\hat{T}^{(0)} = \hat{V}$  y usamos (A.24) para obtener la aproximación a orden uno  $\hat{T}^{(1)} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}$  la cual al ser insertada en (A.24) da como resultado la aproximación a orden dos  $\hat{T}^{(2)} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}$ , de tal forma que luego de un número infinito de iteraciones se obtiene la expresión

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \dots$$

que corresponde a la serie de Born.

Expresando la ecuación (A.19) en la forma  $\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0(\hat{V}\hat{G}_0 + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \dots)$  y teniendo en cuenta que  $\hat{T}\hat{G}_0 = \hat{V}\hat{G}_0 + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \dots$  se obtiene la identidad

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{T}\hat{G}_0. \quad (\text{A.25})$$

Es claro que el problema de scatterig esta solucionado en forma exacta una vez se conoce la matriz  $T$ , no obstante si una forma explicita de esta matriz no se conoce podemos hacer una aproximación a orden cero en el potencial, esto es  $T \simeq V$ .

## A.4. El potencial delta de Dirac

El Hamiltoniano para una partícula moviéndose en la recta real en presencia de un potencial delta de Dirac en el origen es:

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + \mu\delta(x),$$

donde  $\delta(x)$  es la distribución delta de Dirac,  $[\delta] = L^{-1}$ , con intensidad  $\mu \in \mathbb{R}$ . Para  $\mu \in \mathbb{R}^+$  el potencial corresponde a una barrera delta de Dirac mientras que para  $\mu \in \mathbb{R}^-$  el potencial corresponde a un pozo delta de Dirac. Así, la línea real es dividida en dos zonas

$$1) \text{ Zona I : } x < 0 \quad , \quad 2) \text{ Zona II : } x > 0$$

La extensión autoadjunta del Hamiltoniano libre equivalente al Hamiltoniano (A.4), i.e., para extender las funciones propias de  $\hat{H}$  en cada zona a toda la recta real, demanda imponer la continuidad de las funciones propias  $\psi$  y la discontinuidad de  $\psi'$  en el punto  $x = 0$

$$\psi'(0) - \psi'(0) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{0-\delta}^{0+\delta} dx V(x)\psi(x)$$

Por tanto el problema espectral es equivalente a solucionar la ecuación de Schrödinger

$$-\psi'' + \mu\delta(x) = E\psi(x)$$

junto con las condiciones de empalme en el origen, ver [16]

$$\psi(0_-; E) = \psi(0_+; E) \quad , \quad \psi'(0_+; E) - \psi'(0_-; E) = \mu\psi(0_+; E) \quad (\text{A.26})$$

### A.4.1. Soluciones de scattering

Si  $E > 0$  las soluciones de scattering son de la forma (ondas entrando desde la izquierda  $\psi_k^r$  y ondas entrando desde la derecha  $\psi_k^l$ ) [8]

$$\psi_k^r(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho^r(k)e^{-ikx} \\ \sigma^r(k)e^{ikx} \end{cases} \quad , \quad \psi_k^l(x) = \begin{cases} \sigma^l(k)e^{-ikx} \\ e^{-ikx} + \rho^l(k)e^{ikx} \end{cases} \quad , \quad \begin{matrix} x < 0 \\ x > 0 \end{matrix}$$

donde  $k = \sqrt{E}$ . Nótese que debido a la invariancia de la ecuación de Schrödinger bajo inversión temporal  $\sigma^r(k) = \sigma^l(k) = \sigma(k)$  mientras que  $\rho^r(k) = \rho^l(k) = \rho(k)$  debido a la invariancia del potencial delta bajo  $x \rightarrow -x$ . Para un  $k \in \mathbb{R}$  fijo las funciones de onda  $\psi_k^r(x)$  y  $\psi_k^l(x)$  son completamente caracterizadas por las amplitudes de transmisión  $\sigma(k)$  y de reflexión  $\rho(k)$ .

Imponiendo las condiciones de empalme (A.26) sobre estas ondas de scattering obtenemos un sistema de dos ecuaciones algebraicas lineales en las dos incógnitas  $\sigma$  y  $\rho$ . Solucionando este sistema, las amplitudes de scattering son calculadas fijando en esta forma las soluciones de onda de scattering “diestro” y “zurdo”

$$\rho(k) = \frac{\mu}{2ik - \mu} \quad , \quad \sigma(k) = \frac{2ik}{2ik - \mu}$$

Los defasajes son

$$\delta_+ = \frac{1}{2i} \ln \left[ \frac{2ik + \mu}{2ik - \mu} \right] \quad , \quad \delta_- = 0.$$

así que el scattering se puede describir solo con  $\delta_+$  y por tanto es unimodal [?].

La densidad espectral sobre un intervalo de longitud  $L$  resulta ser

$$\varrho = \frac{L}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \frac{d\delta_+}{dk} = \frac{L}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \frac{\mu}{4k^2 + \mu^2}$$

### A.4.2. Soluciones de estado ligado

Cuando el acoplamiento es negativo  $\mu \in \mathbb{R}^-$  y el potencial delta es atractivo, la amplitud de scattering tiene un único polo en el eje imaginario positivo  $k = i\kappa = i\frac{\mu}{2}$  que corresponde a un estado ligado [16]

$$\psi_0(x) = \sqrt{-\frac{\mu}{2}} \exp \left[ \frac{\mu}{2}|x| \right] ,$$

cuya energía es  $E = -\frac{\mu^2}{4}$ .

## A.5. El potencial escalón con una delta de Dirac

En mecánica cuántica ordinaria el Hamiltoniano<sup>7</sup> para una partícula moviéndose en la línea real y confrontando un potencial escalón con una delta de Dirac en el origen es:

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + \mu\delta(x) + \frac{g}{2}\varepsilon(x) + \frac{g}{2},$$

donde  $\delta(x)$  y  $\varepsilon(x)$  son respectivamente las distribuciones delta de Dirac y signo,  $\mu$  es un parámetro de dimensiones  $L^{-1}$  que corresponde a la intensidad del potencial  $\delta$  y  $g$  con dimensiones  $L^{-2}$  mide la altura del escalón. Por tanto, la línea real es dividida en dos zonas

$$1) \text{ Zona I : } x < 0 \quad , \quad 2) \text{ Zona II : } x > 0$$

El problema espectral es equivalente a solucionar la ecuación de Schrödinger

$$-\psi'' + \left[ \mu\delta(x) + \frac{g}{2}\varepsilon(x) + \frac{g}{2} \right] \psi(x) = E\psi(x), \quad (\text{A.27})$$

junto con las condiciones de empalme en el origen

$$\psi(0_-; E) = \psi(0_+; E) \quad , \quad \psi'(0_+; E) - \psi'(0_-; E) = \mu\psi(0_+; E) \quad (\text{A.28})$$

las cuales deben ser satisfechas por las soluciones de scattering.

### A.5.1. Soluciones de scattering

Las condiciones de empalme (A.28) definen la extensión autoadjunta del Hamiltoniano de partícula libre equivalente al potencial delta de Dirac y el hecho que  $k_- = k = \sqrt{E}$  sobre el semieje negativo mientras que  $k_+ = p = \sqrt{E - g}$  sobre el semieje positivo es debido al salto en energía en el potencial escalón. Junto con el ansatz de las ondas de scattering (ondas entrando hacia la barrera delta/escalón -o pozo- desde la izquierda  $\psi^r$  y ondas entrando hacia la barrera delta/escalón -o pozo- desde la derecha  $\psi^l$ )

$$\psi^r(x, E) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho^r(E)e^{-ikx} \\ \sigma^r(E)e^{ipx} \end{cases} \quad , \quad \psi^l(x, E) = \begin{cases} \sigma^l(E)e^{-ikx} \\ e^{-ipx} + \rho^l(E)e^{ipx} \end{cases} \quad , \quad \begin{matrix} x < 0 \\ x > 0 \end{matrix}$$

Las condiciones (A.28) nos permiten identificar las amplitudes de scattering

$$\sigma^r(E) = \frac{2k}{k + p + i\mu} \quad , \quad \rho^r(E) = \frac{k - p - i\mu}{k + p + i\mu} \quad , \quad \sigma^l(E) = \frac{2p}{k + p + i\mu} \quad , \quad \rho^l(E) = \frac{-k + p - i\mu}{k + p + i\mu}$$

<sup>7</sup>en un sistema de unidades tales que  $\hbar = 1, m = \frac{1}{2}$ .

como solución de un sistema de dos ecuaciones lineales algebraicas con dos incógnitas. La conservación del flujo de densidad de probabilidad total es manifiesta

$$\begin{aligned} \frac{k}{p} |\sigma^r(E)|^2 + |\rho^r(E)|^2 &= \frac{p}{E} |\sigma^l(E)|^2 + |\rho^l(E)|^2 = \\ &= \frac{k}{p} \left| \frac{2k}{k+p+i\mu} \right|^2 + \left| \frac{k-p-i\mu}{k+p+i\mu} \right|^2 = \frac{k}{p} \left| \frac{2p}{k+p+i\mu} \right|^2 + \left| \frac{-k+p-i\mu}{k+p+i\mu} \right|^2 = 1 \end{aligned}$$

### A.5.2. Soluciones de estado ligado/antiligado

Los polos de las amplitud de transmisión  $\sigma^r$  y  $\sigma^l$ , esto es, las soluciones puramente imaginarias de la ecuación  $k+p+i\mu = i(\kappa+\pi+\mu) = 0$ , corresponden a soluciones ligadas o antiligadas de la ecuación de Schrödinger (A.27) de la forma<sup>8</sup>

$$\psi(x) = N [e^{\kappa x} \theta(-x) + e^{-\pi x} \theta(x)] \quad (\text{A.29})$$

si  $k = i\kappa$  y  $p = i\pi$  con  $\kappa \in \mathbb{R}$ ,  $\pi \in \mathbb{R}$ . La existencia de estados ligados es un problema mas sutil que en el caso  $g = 0$ . Asumiendo  $g > 0$  ( $g < 0$  produce un análisis completamente análogo intercambiando  $\kappa$  y  $\pi$ ) hay varias posibilidades:

1.  $\mu > 0$ : El potencial  $\delta$  es repulsivo y las amplitudes de transmisión  $\sigma^r$  and  $\sigma^l$  tienen un único polo puramente imaginario en  $k+p = i(\kappa+\pi) = -i\mu$ . De la relación  $\kappa^2 - \pi^2 = -g$  el polo en términos de  $\kappa$  y  $\pi$  puede ser separadamente identificado:  $\kappa = -\frac{1}{2} \left( \mu - \frac{g}{\mu} \right)$  y  $\pi = -\frac{1}{2} \left( \mu + \frac{g}{\mu} \right)$ . Dado que  $\pi < 0$  la función de onda asociada (A.29) es no normalizable. En consecuencia, este polo corresponde a un estado antiligado.
2.  $\mu < 0$ ,  $|\mu|^2 > g$ : El potencial  $\delta$  es atractivo y el polo de las amplitudes de transmisión  $\sigma^r$  y  $\sigma^l$  es encontrado en:  $\kappa = \frac{1}{2} \left( |\mu| - \frac{g}{|\mu|} \right)$  y  $\pi = \frac{1}{2} \left( |\mu| + \frac{g}{|\mu|} \right)$ . Así,  $\kappa > 0$  y  $\pi > 0$  por tanto un estado ligado (normalizable) corresponde al polo en este rango de los parámetros. Si  $\mu < 0$  y  $|\mu|^2 > g$  existe un estado ligado de energía  $E = -\kappa^2 = -\frac{1}{4} \left( |\mu| - \frac{g}{|\mu|} \right)^2$  y función de onda normalizada:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{|\mu|^4 - g^2}{2|\mu|^3}} \left\{ \exp \left[ \frac{|\mu|^2 - g}{2|\mu|} x \right] \theta(-x) + \exp \left[ -\frac{|\mu|^2 + g}{2|\mu|} x \right] \theta(x) \right\} \quad (\text{A.30})$$

3.  $\mu < 0$ ,  $|\mu|^2 < g$ : La diferencia es que ahora  $\kappa = \frac{|\mu|^2 - g}{2|\mu|} < 0$  y la función de onda (A.30) se hace no normalizable (la norma es imaginaria). El polo en este rango de los parámetros produce un estado antiligado.

En resumen, hay un estado ligado si y solo si el potencial  $\delta$  se hace un pozo atractivo,  $\mu < 0$ , lo bastante fuerte,  $|\mu|^2 > g$ , para superar la repulsión en el escalón  $g$ .

<sup>8</sup> $\theta(x)$  es la función escalón de Heaviside

## A.6. El potencial doble delta de Dirac

En este caso el Hamiltoniano es:

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + \alpha\delta(x+a) + \beta\delta(x-a) \quad . \quad (\text{A.31})$$

La energía potencial es la distribución  $U(x) = \alpha\delta(x+a) + \beta\delta(x-a)$  centrada en los dos puntos  $x = a$  y  $x = -a$  con intensidades  $\alpha \in \mathbb{R}$  y  $\beta \in \mathbb{R}$ . Para  $\alpha \in \mathbb{R}^+$  y  $\beta \in \mathbb{R}^+$  el potencial corresponde a dos barreras delta de Dirac mientras que para  $\alpha \in \mathbb{R}^-$  y  $\beta \in \mathbb{R}^-$  el potencial corresponde a dos pozos delta de Dirac. Así, la línea real es dividida en tres zonas

$$1) \text{ Zona II : } x < -a \quad , \quad 2) \text{ Zona I : } -a < x < a \quad , \quad 3) \text{ Zona III : } x > a$$

Ahora bien, la extensión autoadjunta del Hamiltoniano libre equivalente al Hamiltoniano (A.31), i.e., para extender las funciones propias de  $\hat{H}$  en cada zona a toda la recta real, demanda imponer la continuidad de las funciones propias  $\psi$  y la discontinuidad de  $\psi'$  en los puntos  $x = \pm a$ , esto es,  $\psi'(\pm a_+) - \psi'(\pm a_-) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\pm a-\delta}^{\pm a+\delta} dx V(x)\psi(x)$ :

$$\begin{aligned} \psi(-a_-; E) &= \psi(-a_+; E) \quad , \quad \psi'(-a_+; E) - \psi'(-a_-; E) = \alpha\psi(-a_+; E) \\ \psi(a_-; E) &= \psi(a_+; E) \quad , \quad \psi'(a_+; E) - \psi'(a_-; E) = \beta\psi(a_+; E) \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

### A.6.1. Soluciones de scattering

Si  $E > 0$  las soluciones de scattering son de la forma (ondas entrando desde la izquierda  $\psi_k^r$  y ondas entrando desde la derecha  $\psi_k^l$ )

$$\psi_k^r(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho^r(k)e^{-ikx} \\ A^r(k)e^{ikx} + B^r(k)e^{-ikx} \\ \sigma(k)e^{ikx} \end{cases} \quad , \quad \psi_k^l(x) = \begin{cases} \sigma(k)e^{-ikx} \\ A^l(k)e^{ikx} + B^l(k)e^{-ikx} \\ e^{-ikx} + \rho^l(k)e^{ikx} \end{cases} \quad , \quad \begin{matrix} x \in \text{II} \\ x \in \text{I} \\ x \in \text{III} \end{matrix}$$

Claramente, estas soluciones son funciones propias del operador de Schrödinger en cada zona, nótese que en la zona intermedia las soluciones son una superposición de ondas planas con vectores de onda opuestos. Las condiciones de empalme (A.32) sobre estas ondas de scattering son equivalentes a un sistema de cuatro ecuaciones algebraicas para las cuatro incógnitas  $\sigma$ ,  $\rho$ ,  $A$  y  $B$ . La solución se obtiene fácilmente mediante la regla de Cramer

$$\begin{aligned} \rho^r(k) &= -\frac{ie^{-2iak} [\alpha(2k + i\beta) + \beta e^{4iak}(2k - i\alpha)]}{\Delta(k)} \\ A^r(k) &= \frac{2k(2k + i\beta)}{\Delta(k)} \quad , \quad B^r(k) = -\frac{2ik\beta e^{2iak}}{\Delta(k)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\rho^l(k) &= -\frac{ie^{-2iak} [\alpha e^{4iak}(2k - i\beta) + \beta(2k + i\alpha)]}{\Delta(k)} \\ A^l(k) &= -\frac{2ik\alpha e^{2iak}}{\Delta(k)}, \quad B^l(k) = \frac{2k(2k + i\alpha)}{\Delta(k)} \\ \sigma(k) &= \frac{4k^2}{\Delta(k)}\end{aligned}$$

el común denominador  $\Delta(k)$  es dado por:

$$\Delta(k) = 4k^2 + \alpha\beta(e^{4iak} - 1) + 2ik(\alpha + \beta).$$

De estos datos obtenemos la matriz de scattering<sup>9</sup>

$$S[k, \alpha, \beta, a] = \begin{pmatrix} \frac{4k^2}{\Delta(k)} & \frac{-ie^{-2iak} [\alpha e^{4iak}(2k - i\beta) + \beta(2k + i\alpha)]}{\Delta(k)} \\ \frac{-ie^{-2iak} [\alpha(2k + i\beta) + \beta e^{4iak}(2k - i\alpha)]}{\Delta(k)} & \frac{4k^2}{\Delta(k)} \end{pmatrix}$$

Nótese que debido a la invariancia de la ecuación de Schrödinger bajo inversión temporal (rota por el potencial escalón en el ejemplo previo)  $\sigma^r = \sigma^l$  mientras que  $\rho^r = \rho^l$  solo para potenciales invariantes bajo  $x \rightarrow -x$  (pares).

Con los datos de scattering dados en (A.6.1) se obtiene para los defasajes las expresiones

$$e^{2i\delta_{\pm}} = \frac{4k^2 \pm \sqrt{-2\alpha^2\beta^2 + 2\alpha\beta \cos(4ak) (\alpha\beta - 4k^2) + 4\alpha\beta k(\alpha + \beta) \sin(4ak) - 4k^2(\alpha^2 + \beta^2)}}{4k^2 + \alpha\beta(e^{4iak} - 1) - 2ik(\alpha + \beta)}.$$

### A.6.2. Soluciones de estado ligado/antiligado

Para energías negativas buscamos estados ligados. La forma de estas soluciones (no degeneradas) en las tres zonas es:

$$\psi_B(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & , \quad x \in \text{II} \\ Be^{\kappa x} + Ce^{-\kappa x} & , \quad x \in \text{I} \\ De^{-\kappa x} & , \quad x \in \text{III} \end{cases} \quad (\text{A.33})$$

donde  $\kappa = \sqrt{|E|} \in \mathbb{R}$ .

Las condiciones de empalme extendiendo las soluciones de este tipo a toda la recta real son equivalentes al sistema lineal homogéneo:

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & -e^{\kappa a} & -e^{-\kappa a} & 0 \\ (\kappa + \beta)e^{-\kappa a} & \kappa e^{\kappa a} & -\kappa e^{-\kappa a} & 0 \\ 0 & -e^{-\kappa a} & -e^{\kappa a} & e^{-\kappa a} \\ 0 & -\kappa e^{-\kappa a} & \kappa e^{\kappa a} & (\kappa + \alpha)e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.34})$$

<sup>9</sup>Aquí  $\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) = \lim_{x \rightarrow -\infty} V(x)$  y la matriz  $S$  es el operador que describe el scattering

Existen soluciones no triviales de (A.34) solo si el determinante de esta matriz

$$\det\Delta(i\kappa) = \alpha\beta e^{-4a\kappa} - (2\kappa + \alpha)(2\kappa + \beta)$$

es cero. Insistimos en que este determinante no es más que el denominador de la amplitud de transmisión evaluado en  $k = i\kappa$ . Por tanto, los estados ligado/antiligado aparecen como polos puramente imaginarios de la amplitud de transmisión en el plano complejo  $k$ . Debido a la forma de las funciones de onda (A.33) solo los polos en la mitad superior del plano  $k$  dan lugar a estados ligados. Los polos en  $\kappa < 0$  dan lugar a estados no normalizables denominados estados antiligados.

Definiendo  $g(\kappa, a) = e^{-4a\kappa}$  y  $f(\kappa, \alpha, \beta) = \left(1 + \frac{2\kappa}{\alpha}\right) \left(1 + \frac{2\kappa}{\beta}\right)$  vemos que solo aquellos valores de  $\kappa > 0$  que satisfacen

$$g(\kappa_B, a) = f(\kappa_B, \alpha, \beta) \quad \text{con } \kappa_B > 0 \quad (\text{A.35})$$

producen estados ligados.

En este caso  $g$  es una familia de curvas exponenciales con pendientes  $-4a$  en el origen y  $f$  una familia biparámetrica de parábolas. Nótese que  $g(0; a) = f(0; \alpha, \beta) = 1, \forall a, \alpha, \beta$  así que las curvas en  $g$  y  $f$  son tales que ellas se intersecan en el origen. Dado que (A.35) es una ecuación trascendente no es soluble analíticamente en  $\kappa$  (el punto  $\kappa = 0$  da una función propia cero y por tanto un estado no físico). No obstante, un análisis cualitativo acerca de la existencia de estados ligados es posible teniendo en cuenta el comportamiento de las funciones en (A.35) caracterizado por sus pendientes en el origen y el punto crítico de  $f$ :

$$\begin{aligned} g'(\kappa, a) &= -4ae^{-4a\kappa}, & g'(0, a) &= -4a, \\ f'(\kappa, \alpha, \beta) &= \frac{8}{\alpha\beta}\kappa + \frac{2}{\alpha} + \frac{2}{\beta}, & f'(0, \alpha, \beta) &= 2\frac{\alpha + \beta}{\alpha\beta}, & f''(\kappa, \alpha, \beta) &= \frac{8}{\alpha\beta} \\ f'(\kappa_c, \alpha, \beta) &= 0 \Leftrightarrow \kappa_c = -\frac{\alpha + \beta}{4}, & f(\kappa_c, \alpha, \beta) &= -\frac{(\alpha - \beta)^2}{4\alpha\beta}. \end{aligned}$$

En efecto, el número de intersecciones de  $g$  y  $f$  depende de los valores relativos de sus tangentes en el origen. Las tangentes son iguales sobre la hipérbola

$$g'(0, a) = f'(0, \alpha, \beta) \Leftrightarrow -2a = \frac{\alpha + \beta}{\alpha\beta} \Leftrightarrow \begin{cases} \beta = -\frac{\alpha}{2a\alpha+1} \\ \alpha = -\frac{\beta}{2a\beta+1} \end{cases} \quad (\text{A.36})$$

en el espacio de parámetros  $(\alpha, \beta)$  que separa regímenes con diferente número de estados ligados. Esta hipérbola está centrada en el punto  $(\alpha = -\frac{1}{2a}, \beta = -\frac{1}{2a})$  y los vértices están en el origen  $(\alpha = 0, \beta = 0)$  y el punto  $(\alpha = -\frac{1}{a}, \beta = -\frac{1}{a})$ . Ahora bien, de los límites  $\lim_{\alpha \rightarrow -\frac{1}{2} \pm} \beta =$



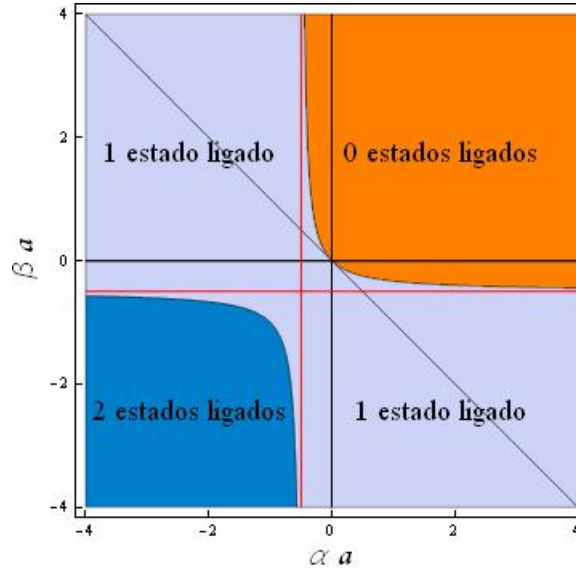


Figura A.1: Distribución de estados ligados en el plano  $(\alpha a) - (\beta a)$ . Las diferentes zonas están limitadas por las ramas de la hipérbola  $-\frac{1}{2\alpha} - \frac{1}{2\beta} = a$  [85].

$\pm\infty$  y  $\lim_{\alpha \rightarrow -\frac{1}{2} \pm} \beta = \pm\infty$  uno obtiene que las asíntotas son las líneas rectas  $\alpha = -\frac{1}{2a}$  y  $\beta = -\frac{1}{2a}$ , ver Figura A.1. Vamos a argumentar que esta curva cuadrática, que es el lugar donde las tangentes de  $g$  y  $f$  en  $\kappa = 0$  son iguales, es la frontera entre regímenes en el espacio de parámetros caracterizado por un número diferente de estados ligados.

### 1. Cero estados ligados:

- $\kappa_c = -\frac{\alpha+\beta}{4}$  es el punto crítico de la parábola  $f$  el cual es un mínimo si  $\text{sgn}\alpha = \text{sgn}\beta$  y un máximo si  $\text{sgn}\alpha \neq \text{sgn}\beta$ . Ya que  $g(0, a) = f(0; \alpha, \beta) = 1, \forall a, \alpha, \beta$  y  $g$  es una función monótonamente decreciente a lo largo del eje  $\kappa > 0$  no hay otra intersección con  $f$  si  $\alpha + \beta > 0$  y  $\text{sgn}\alpha = \text{sgn}\beta$  (el mínimo de  $f$  está sobre el eje  $\kappa < 0$  tal que  $f$  crece monótonamente sobre el eje  $\kappa > 0$  apartándose así de  $g$ ). Ya que  $f'(0, \alpha, \beta) > g'(0, a)$  obtenemos la desigualdad  $2a > -\frac{1}{\alpha} - \frac{1}{\beta}$  la cual caracteriza la no existencia de estados ligados en este régimen, i.e., en el primer cuadrante del plano  $\alpha$ - $\beta$ , sin tener en cuenta el valor de  $a$ .
- Aún si una de las dos deltas es atractiva, e.g.  $\alpha < 0$ , (un pozo), y la otra repulsiva, e.g.  $\beta > 0$ , (una barrera) tal que  $\alpha + \beta > 0$ , puede no haber estado ligado (no hay intersección de  $g$  y  $f$  con  $\kappa > 0$ ). El máximo de  $f$  está sobre el eje  $\kappa < 0$  y  $f'(0, \alpha, \beta) < g'(0, a)$ , así obtenemos la desigualdad  $2a < \frac{1}{|\alpha|} - \frac{1}{\beta}$  la cual caracteriza la no existencia de estados ligados. Si  $\beta$  se hace infinita solo si  $|\alpha| < \frac{1}{2a}$  no hay estado ligado (para  $a$  muy grande, solo pozos muy débiles no capturan la partícula). En

suma, no hay estados ligados no solo en el primer cuadrante del plano  $(\alpha, \beta)$  sino también en el área encerrada entre la rama superior de la hipérbola (A.36) y los ejes positivos  $\alpha$  y  $\beta$ <sup>10</sup> porque la relación entre las tangentes de  $g$  y  $f$  en  $\kappa = 0$  es tal que no hay otras intersecciones para  $\kappa > 0$ .

## 2. Un estado ligado:

- Si la desigualdad anterior cambia de sentido, e.g.  $2a > \frac{1}{|\alpha|} - \frac{1}{\beta}$ , hay una intersección con  $\kappa > 0$  de las curvas  $g$  y  $f$  y por tanto un estado ligado.
- Si  $\alpha + \beta < 0$  y  $\text{sgn}\alpha \neq \text{sgn}\beta$  hay una intersección con  $\kappa > 0$  de las curvas  $g$  y  $f$  ( $f'(0, \alpha, \beta) > 0$  y el máximo de  $f$  está sobre el eje  $\kappa > 0$ , por tanto para  $\kappa > \kappa_c$  esta función decrece monótonamente aproximándose a cero para intersecar a  $g$  en un punto).
- En el caso cuando las dos deltas son atractivas, i.e.,  $\alpha < 0$ , (un pozo) y  $\beta < 0$ , (otro pozo) hay una intersección con  $\kappa > 0$  si  $f'(0, \alpha, \beta) > g'(0, a)$  la cual da lugar a la desigualdad  $2a < \frac{1}{|\alpha|} + \frac{1}{|\beta|}$ .

## 3. Dos estados ligados:

- Si la desigualdad previa cambia de sentido, i.e.,  $f'(0, \alpha, \beta) < g'(0, a) \Rightarrow 2a > \frac{1}{|\alpha|} + \frac{1}{|\beta|}$ , hay dos intersecciones con  $\kappa > 0$  entre  $g$  y  $f$ . Ambas deltas deben ser atractivas y suficientemente intensas, medidas con respecto a la (inversa) distancia entre ellas, para soportar dos estados ligados de momento imaginario  $\kappa_{B_1}$  y  $\kappa_{B_2}$ .

En resumen, la rama de la hipérbola (A.36) en el cuadrante superior del plano encierra la región de no estados ligados. Nótese que esta área incluye una zona donde o bien  $\alpha$  o  $\beta$  es negativa. La rama de la hipérbola (A.36) en el cuadrante  $\alpha < 0, \beta < 0$  del plano encierra la región de dos estados ligados. La zona que queda entre las dos ramas es una zona de un estado ligado. Para uso en las siguientes Secciones nótese que en la diagonal  $\alpha = \beta$  hay cero estados ligados, si  $\alpha > 0$ , un estado ligado, si  $-\frac{1}{a} < \alpha < 0$ , o dos estados ligados, si  $\alpha < -\frac{1}{a}$ . En la antidiagonal  $\alpha = -\beta$ , no obstante, hay siempre un estado ligado independientemente de la intensidad  $\alpha$ .

Ahora bien, denotando como  $\kappa_j, j = 1, 2$ , las dos (como máximo) raíces positivas de la ecuación secular  $\Delta(i\kappa_j, \alpha, \beta, a) = 0$ , los coeficientes  $B, C, D$  determinando los correspondientes estados

---

<sup>10</sup>Hemos probado estrictamente la mitad de esta afirmación. La otra mitad requiere simplemente cambiar los signos de  $\alpha$  y  $\beta$ .

ligados son obtenidos de las soluciones del sistema lineal

$$\begin{pmatrix} e^{\kappa_j a} \kappa_j & -e^{-\kappa_j a} \kappa_j & 0 \\ -e^{-\kappa_j a} & -e^{\kappa_j a} & e^{-\kappa_j a} \\ -e^{-\kappa_j a} \kappa_j & e^{\kappa_j a} \kappa_j & e^{-\kappa_j a} (\kappa_j + \beta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -Ae^{-\kappa_j a} (\alpha + \kappa_j) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

los cuales son:

$$B(\kappa_j) = -\frac{e^{2\kappa_j a} (\alpha + \kappa_j) (\beta + 2\kappa_j)}{\kappa_j (\beta + \beta e^{4\kappa_j a} + 2e^{4\kappa_j a} \kappa_j)} A(\kappa_j) \quad , \quad C(\kappa_j) = \frac{\beta (\alpha + \kappa_j)}{\kappa_j (\beta + \beta e^{4\kappa_j a} + 2e^{4\kappa_j a} \kappa_j)} A(\kappa_j)$$

$$D(\kappa_j) = -\frac{2e^{2\kappa_j a} (\alpha + \kappa_j)}{\beta + \beta e^{4\kappa_j a} + 2e^{4\kappa_j a} \kappa_j} A(\kappa_j)$$

mientras que  $A(\kappa_j)$  se encuentra haciendo la norma del estado ligado  $\psi_j(x)$  igual a uno. Es fácil comprobar que estas fórmulas implican  $D(\kappa_j) = \mp A(\kappa_j)$  y  $C(\kappa_j) = \mp B(\kappa_j)$  cuando  $\alpha = \beta$ , dando lugar a un estado ligado par de energía  $-\kappa_1^2$  si  $0 < \alpha$  mas un estado ligado impar de energía  $-\kappa_2^2$  si, además,  $-\frac{1}{a} < \alpha$  y  $-\kappa_1^2 < -\kappa_2^2$ .

En la Tabla A.1 las funciones de onda en una región de parámetros de dos estados ligados son mostradas:  $2a > \frac{1}{|\alpha|} + \frac{1}{|\beta|}$ . Eligiendo, e. g.,  $a = 1$ ,  $\alpha = 2$ , y  $\beta = 2.5$  dentro de esta región, las dos intersecciones de las curvas ocurren en los valores de momento imaginario:  $\kappa_0 = \sqrt{-E_0} = 1.277 > \kappa_1 = \sqrt{-E_1} = 0.9027$ . Dados estos valores, las soluciones del sistema homogéneo inducido por las condiciones de empalme proporciona los coeficientes de las dos funciones de onda de estado ligado (normalizadas), en este caso se obtiene

$$\psi(x) = N \begin{cases} \left[ e^{2\kappa a} - \frac{\beta \sinh 2\kappa a}{\kappa} \right] e^{\kappa x} & , \quad x \in \text{II} \\ \left[ \frac{\beta e^{-2a\kappa}}{2\kappa} e^{\kappa x} + \frac{(2\kappa - \beta)}{2\kappa} e^{-\kappa x} \right] & , \quad x \in \text{III} \\ e^{-\kappa x} & , \quad x \in \text{III} \end{cases}$$

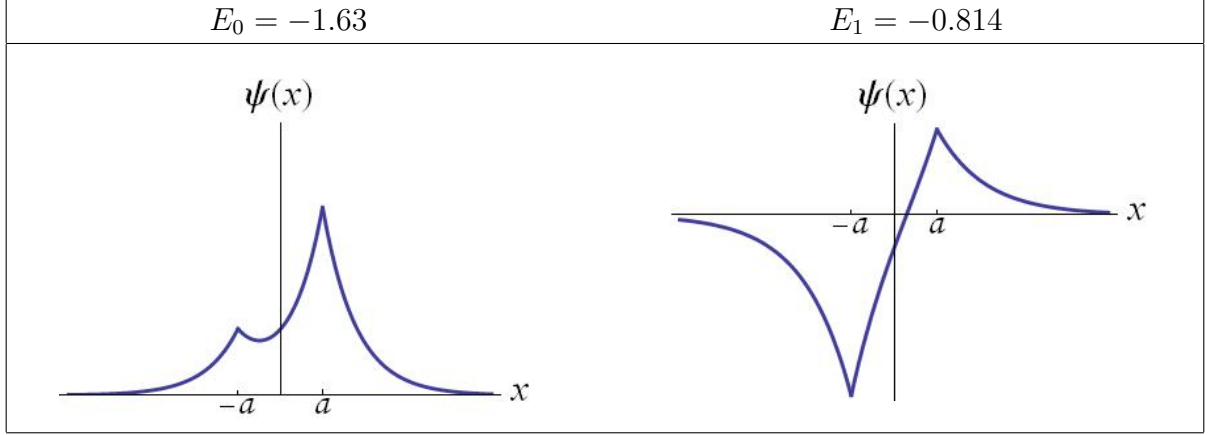
donde

$$N = \sqrt{\frac{2\kappa^3}{(\beta^2 + 2\kappa^2 - 4\beta\kappa) \sinh 2\kappa a + 2\kappa^2 \cosh 2\kappa a + 2a\beta\kappa e^{-2\kappa a} (2\kappa - \beta)}}$$

## A.7. El potencial triple delta de Dirac

El Hamiltoniano autoadjunto es:

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + \alpha\delta(x+a) + \mu\delta(x) + \beta\delta(x-a)$$

Tabla A.1: Funciones de onda del potencial doble delta de Dirac para  $a = 1$ ,  $\alpha = 2$  y  $\beta = 2.5$ 

tal que las funciones propias de estados de scattering y de estados ligados de la ecuación espectral  $\hat{H}\psi(x; E) = E\psi(x; E)$  son posibles si los tres pares de condiciones de empalme

$$\begin{aligned}
 \psi(-a_-; E) &= \psi(-a_+; E) & , & & \psi'(-a_+; E) - \psi'(-a_-; E) &= \alpha\psi(-a_+; E) \\
 \psi(0_-; E) &= \psi(0_+; E) & , & & \psi'(0_+; E) - \psi'(0_-; E) &= \mu\psi(0_+; E) \\
 \psi(a_-; E) &= \psi(a_+; E) & , & & \psi'(a_+; E) - \psi'(a_-; E) &= \beta\psi(a_+; E)
 \end{aligned} \tag{A.37}$$

son satisfechas.

La energía potencial es la distribución  $V(x) = \alpha\delta(x+a) + \mu\delta(x) + \beta\delta(x-a)$  centrada en los puntos  $x = a$ ,  $x = 0$  y  $x = -a$  con intensidades  $\alpha \in \mathbb{R}$ ,  $\mu \in \mathbb{R}$  y  $\beta \in \mathbb{R}$ . Para  $\alpha \in \mathbb{R}^+$ ,  $\mu \in \mathbb{R}^+$  y  $\beta \in \mathbb{R}^+$  el potencial corresponde a tres barreras delta de Dirac mientras que para  $\alpha \in \mathbb{R}^-$ ,  $\mu \in \mathbb{R}^-$  y  $\beta \in \mathbb{R}^-$  el potencial corresponde a tres pozos delta de Dirac. Así, la línea real es dividida en cuatro zonas:

- 1) Zona III :  $x < -a$  , 2) Zona I :  $-a < x < 0$  , 3) Zona II :  $0 < x < a$  , 4) Zona IV :  $x > a$

### A.7.1. Soluciones de scattering

Si  $E > 0$  ondas planas de momento (número de onda)  $k = \sqrt{E}$  se propagan libremente entre los puntos de scattering. Tenemos pues soluciones de scattering de la forma (ondas entrando desde la izquierda  $\psi_k^r$  y ondas entrando desde la derecha  $\psi_k^l$ )

$$\psi_k^r(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho^r(k)e^{-ikx} \\ A^r(k)e^{ikx} + B^r(k)e^{-ikx} \\ C^r(k)e^{ikx} + D^r(k)e^{-ikx} \\ \sigma^r(k)e^{ikx} \end{cases} , \quad \psi_k^l(x) = \begin{cases} \sigma^l(k)e^{-ikx} & , x \in \text{III} \\ A^l(k)e^{ikx} + B^l(k)e^{-ikx} & , x \in \text{I} \\ C^l(k)e^{ikx} + D^l(k)e^{-ikx} & , x \in \text{II} \\ e^{-ikx} + \rho^l(k)e^{ikx} & , x \in \text{IV} \end{cases}$$

Imponiendo las condiciones de empalme (A.37) sobre estas ondas de scattering obtenemos un sistema de seis ecuaciones algebraicas lineales en las seis incógnitas  $\sigma$ ,  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $\rho$ . Solucionando este sistema por la regla de Cramer con la ayuda de Mathematica, las amplitudes de scattering, y los coeficientes en las zonas intermedias son calculados fijando en esta forma las soluciones de onda de scattering para scattering “diestro” y “zurdo”. Para evitar fórmulas aún más engorrosas solo escribimos explícitamente las amplitudes de scattering  $\sigma^r(k) = \sigma^l(k) = \sigma(k)$ ,  $\rho^r(k)$ , y  $\rho^l(k)$  como funciones del número de onda:

$$\sigma(k) = \frac{8k^3}{\Delta(k; \alpha, \beta, \mu, a)} \quad , \quad \Delta(k; \alpha, \beta, \mu) = 2k\beta(e^{2iak} - 1) \left[ \mu + \alpha \left( e^{2iak} + \frac{\mu}{\beta} + 1 \right) \right] - i\alpha\beta\mu(e^{2iak})^2 + 8k^3 + 4ik^2(\alpha + \beta + \mu)$$

$$\rho^r(k) = \frac{2\mu e^{2iak} [k(\beta - \alpha) - 2ik^2 - i\alpha\beta] - i\beta e^{4iak} (2k - i\alpha)(2k - i\mu) + \alpha(\beta - 2ik)(2k + i\mu)}{\alpha\beta e^{6iak} (2k - i\mu) + e^{2iak} (2k + i\alpha)(2k + i\beta)(2k + i\mu) + 2\mu e^{4iak} [k(\alpha + \beta) + i\alpha\beta]}$$

$$\rho^l(k) = \frac{2\mu e^{2iak} [k(\alpha - \beta) - 2ik^2 - i\alpha\beta] - i\alpha e^{4iak} (2k - i\beta)(2k - i\mu) + \beta(\alpha - 2ik)(2k + i\mu)}{\alpha\beta e^{6iak} (2k - i\mu) + e^{2iak} (2k + i\alpha)(2k + i\beta)(2k + i\mu) + 2\mu e^{4iak} [k(\alpha + \beta) + i\alpha\beta]} .$$

Nótese que  $\rho^l$  es obtenido de  $\rho^r$  simplemente intercambiando  $\alpha$  y  $\beta$ . También, las amplitudes anteriores son los elementos de la matriz  $S$ , así que codifica todos los datos de scattering, defasajes, densidades espectrales y cantidades similares.

### A.7.2. Soluciones de estado ligado/antiligado

Si  $E < 0$  funciones propias de estado ligado pueden existir. Los polos de la amplitud de transmisión sobre el eje imaginario del plano complejo  $k$  corresponden a estados ligados (normalizables) si estos se encuentran en el eje imaginario positivo o estados antiligados (no normalizables) si la parte imaginaria del momento es negativa. Estos polos son los ceros del determinante caracterizado como las soluciones de la ecuación espectral trascendente

$$\Delta(i\kappa; \alpha, \beta, \mu, a) = 0 \equiv g(\kappa; \alpha, \beta, \mu, a) = f(\kappa; \alpha, \beta, \mu) \quad , \quad \kappa = \sqrt{-E} \quad , \quad (\text{A.38})$$

donde las familias de curvas en  $\mathbb{R}^3$  figurando en la ecuación (A.38) son:

$$f(\kappa; \alpha, \beta, \mu) = \left( \frac{2}{\alpha}\kappa + 1 \right) \left( \frac{2}{\beta}\kappa + 1 \right) \left( \frac{2}{\mu}\kappa + 1 \right) \mu$$

$$g(\kappa; \alpha, \beta, \mu, a) = e^{-4a\kappa} (2\kappa - \mu) + 2\mu e^{-2a\kappa} \left( \frac{\kappa}{\alpha} + \frac{\kappa}{\beta} + 1 \right)$$

$$f(0; \alpha, \beta, \mu) = g(0; \alpha, \beta, \mu, a) = \mu \quad , \quad \forall \alpha, \beta, \mu, a .$$

Como en el problema de las dos deltas para estudiar las intersecciones de las familias de curvas en la ecuación (A.38) es conveniente analizar sus derivadas en el origen:

$$g'(0; \alpha, \beta, \mu, a) = \left( \frac{2}{\alpha} + \frac{2}{\beta} + \frac{2}{\mu} \right) \mu = f'(0; \alpha, \beta, \mu)$$

$$g''(0; \alpha, \beta, \mu, a) = -8\mu \left[ a^2 + a \left( \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} + \frac{2}{\mu} \right) \right], \quad f''(0; \alpha, \beta, \mu) = \frac{8\mu}{\alpha\beta\mu} (\alpha + \beta + \mu).$$

El número de soluciones de la ecuación espectral (A.38) sobre el eje  $\kappa$  positivo depende de las desigualdades  $g''(0; \alpha, \beta, \mu, a) \geq f''(0; \alpha, \beta, \mu)$  y  $g''(0; \alpha, \beta, \mu, a) \leq f''(0; \alpha, \beta, \mu)$ . Así, la ecuación

$$g''(0; \alpha, \beta, \mu, a) = f''(0; \alpha, \beta, \mu) \equiv a^2 + \frac{\mu(\alpha + \beta) + 2\alpha\beta}{\alpha\beta\mu} a + \frac{\alpha + \beta + \mu}{\alpha\beta\mu} = 0 \quad (\text{A.39})$$

determina una superficie de tres ramas dividiendo el espacio de parámetros  $(\alpha, \beta, \mu)$  de  $\mathbb{R}^3$  en cuatro regiones: no estados ligados, un estado ligado, dos estados ligados, y tres estados ligados, de acuerdo con los signos y las intensidades de las deltas y la distancia entre ellas. En efecto, fijando un valor de  $a$  las dos superficies de dos ramas en  $\mathbb{R}^3$

$$a = - \left( \frac{\alpha + \beta}{2\alpha\beta} + \frac{1}{\mu} \right) + \sqrt{\frac{1}{\mu^2} + \frac{(\alpha - \beta)^2}{4\alpha^2\beta^2}} = a_+ \quad (\text{A.40})$$

$$a = - \left( \frac{\alpha + \beta}{2\alpha\beta} + \frac{1}{\mu} \right) - \sqrt{\frac{1}{\mu^2} + \frac{(\alpha - \beta)^2}{4\alpha^2\beta^2}} = a_- \quad (\text{A.41})$$

procedentes de las raíces de (A.39), son la frontera entre los diferentes regímenes.

### A.7.3. Estados ligados de tres pozos delta de igual intensidad

Una descripción completamente explícita del espectro discreto es posible en el caso de tres pozos delta iguales. Debido a que el Hamiltoniano es invariante bajo la reflexión  $x \rightarrow -x$  y las funciones propias son o bien funciones pares de  $x$  o bien funciones impares de  $x$ . Las funciones de onda de estado ligado

$$\psi_B(x) = \begin{cases} A(\kappa)e^{\kappa x} & , \quad x \in \text{III} \\ B(\kappa)e^{\kappa x} + C(\kappa)e^{-\kappa x} & , \quad x \in \text{I} \\ D(\kappa)e^{\kappa x} + F(\kappa)e^{-\kappa x} & , \quad x \in \text{II} \\ G(\kappa)e^{-\kappa x} & , \quad x \in \text{IV} \end{cases}$$

son así de dos clases.

1. Estados ligados pares:  $A = G$ ,  $B = F$ , and  $C = D$ . El sistema líneal homogéneo implementando las condiciones de empalme es dado por:

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & -e^{-\kappa a} & -e^{\kappa a} \\ (\kappa + \mu)e^{-\kappa a} & -\kappa e^{-\kappa a} & \kappa e^{\kappa a} \\ 0 & 2\kappa + \mu & -2\kappa + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.42})$$

Hay soluciones no triviales de (A.42) solo si el determinante de esta matriz

$$\det\Delta(i\kappa) = \mu e^{-2a\kappa}(\mu - 2\kappa) - (2\kappa + \mu)^2$$

es cero, i.e., para las soluciones de la ecuación trascendente:

$$\mu e^{-2a\kappa}(\mu - 2\kappa) = (2\kappa + \mu)^2.$$

Las soluciones de esta ecuación son las intersecciones de las curvas  $g(\kappa, \mu, a) = \mu(\mu - 2\kappa)e^{-2a\kappa}$  y  $f(\kappa, \mu) = (2\kappa + \mu)^2$  for  $\kappa > 0$ . Ya que  $g'(0, \mu, a) = -2\mu(1 + a\mu)$  y  $f'(0, \mu) = 4\mu$  las tangentes en el origen de estas dos curvas son iguales si y solo si:  $\mu = -\frac{3}{a}$ . Así, no hay intersección con  $\kappa > 0$  si  $\mu > 0$ , hay una intersección con  $\kappa > 0$  si  $\mu > -\frac{3}{a}$ , y dos intersecciones positivas si  $\mu < -\frac{3}{a}$ . En suma, no hay estados ligados pares en la semirrecta  $0 < \mu < +\infty$ , hay un estado ligado par en el intervalo  $-\frac{3}{a} < \mu < 0$ , y dos estados ligados pares en el rango negativo  $-\infty < \mu < -\frac{3}{a}$ .

2. Estados ligados impares:  $A = -G$ ,  $B = -F$  y  $C = -D$ . El sistema líneal homogéneo “impar” es:

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & -e^{-\kappa a} & -e^{\kappa a} \\ (\kappa + \mu)e^{-\kappa a} & -\kappa e^{-\kappa a} & \kappa e^{\kappa a} \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

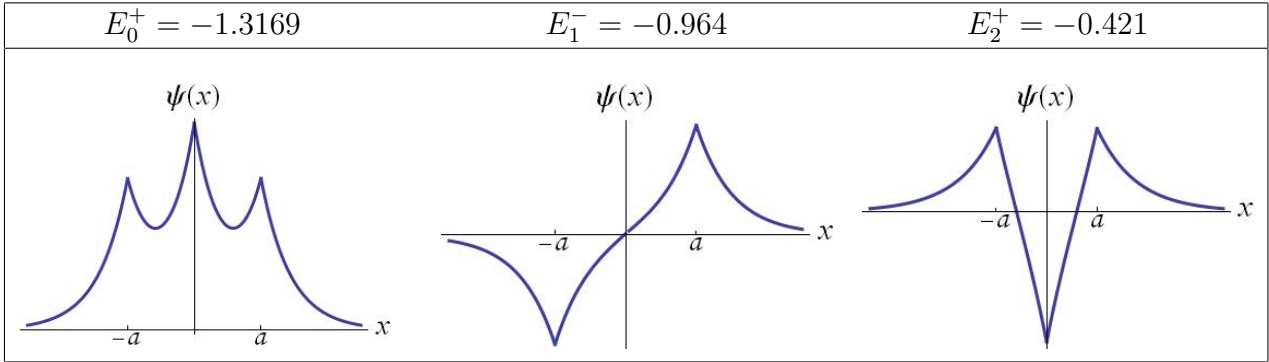
La ecuación espectral es ahora la ecuación trascendente

$$e^{-2a\kappa} = \frac{2}{\mu}\kappa + 1.$$

Es claro que solo si  $\mu < -\frac{1}{a}$  hay una intersección. Así, hay un estado ligado impar si  $-\infty < \mu < -\frac{1}{a}$ . La jerarquía demandada por razones físicas, es la siguiente: si  $-\frac{3}{a} < \mu < -\frac{1}{a}$ ,  $\kappa_1^- < \kappa_1^+$ , el estado ligado impar tiene mas energía que el estado ligado par (siempre el estado fundamental es par sin nodos). Si  $-\infty < \mu < -\frac{3}{a}$ ,  $\kappa_2^+ < \kappa_1^- < \kappa_1^+$ , el segundo estado ligado par es el más energético.

En la Tabla A.2 las funciones de onda de estado ligado de tres pozos delta iguales en una región de tres estados ligados:  $\mu < -\frac{3}{a}$ . Para los valores de  $a = 2$  y  $\mu = -2$  elegidos en esta región los valores de intersección del momento imaginario son:  $\kappa_0^+ = \sqrt{-E_0^+} = 1.147 > \kappa_1^- = \sqrt{-E_1^-} = 0.982 > \kappa_2^+ = \sqrt{-E_2^+} = 0.649$ . A partir de estos valores la solución del sistema homogéneo inducido por las condiciones de empalme nos lleva a obtener las funciones de onda de estado ligado normalizadas.

Tabla A.2: Las tres funciones de onda de estado ligado de  $\hat{H}$ , sucesivamente par, impar, par, para  $\mu = -2 < -\frac{3}{2} = -\frac{3}{a}$ . El número de nodos es respectivamente 0, 1, and 2.



#### A.7.4. Estados ligados si los dos pozos delta externos son iguales: $\alpha = \beta$

En este caso el Hamiltoniano es también invariante bajo la reflexión  $x \rightarrow -x$  y las funciones propias son o bien funciones pares de  $x$  o bien funciones impares de  $x$ .

1. Estados ligados pares:  $A = G$ ,  $B = F$ , and  $C = D$ . El sistema líneal homogéneo implementando las condiciones de empalme son dadas por:

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & -e^{-\kappa a} & -e^{\kappa a} \\ (\kappa + \alpha)e^{-\kappa a} & -\kappa e^{-\kappa a} & \kappa e^{\kappa a} \\ 0 & 2\kappa + \mu & -2\kappa + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

La ecuación espectral es la ecuación trascendente:

$$\alpha e^{-2a\kappa}(\mu - 2\kappa) = (2\kappa + \alpha)(2\kappa + \mu) .$$

Es claro que las soluciones de esta ecuación corresponden a las intersecciones entre las curvas  $g(\kappa, \alpha, \mu, a) = \alpha e^{-2a\kappa}(\mu - 2\kappa)$  y  $f(\kappa, \alpha, \mu) = (2\kappa + \alpha)(2\kappa + \mu)$  con  $\kappa > 0$ . Ya que



$g'(0, \mu, a) = -2\alpha(a\mu + 1)$  y  $f'(0, \mu) = 2(\alpha + \mu)$  las tangentes en el origen de estas dos curvas son iguales sobre la hipérbola:

$$a = -\frac{2\alpha + \mu}{\alpha\mu} \equiv \begin{cases} \mu = -\frac{2\alpha}{1+a\alpha} \\ \alpha = -\frac{\mu}{2+a\mu} \end{cases} \quad (\text{A.43})$$

Las asíntotas de esta curva cuadrada son las líneas rectas:  $\alpha = -\frac{1}{a}$  y  $\mu = -\frac{2}{a}$ , los vértices están en los puntos  $\left(-\frac{1}{a} + \frac{\sqrt{2}}{a}, -\frac{2}{a} + \frac{\sqrt{2}}{a}, -\frac{1}{a} + \frac{\sqrt{2}}{a}\right)$  y  $\left(-\frac{1}{a} - \frac{\sqrt{2}}{a}, -\frac{2}{a} - \frac{\sqrt{2}}{a}, -\frac{1}{a} - \frac{\sqrt{2}}{a}\right)$  mientras que el centro es el punto:  $\left(-\frac{1}{a}, -\frac{2}{a}, -\frac{1}{a}\right)$  en el plano  $\alpha : \mu : \alpha$ .

La identificación de los dominios en el espacio de parámetros  $\mathbb{R}^3$  donde existen 0, 1, 2 o 3 estados ligados requiere el siguiente análisis:

a) Cero estados ligados pares:

- Si  $\alpha + \mu > 0$  y  $\text{sgn}\alpha = \text{sgn}\mu$  todas las parábolas  $f(\kappa, \alpha, \mu)$  tienen un único punto crítico en  $\kappa_{cf} = -\frac{\alpha+\mu}{4} < 0$  que es un mínimo en el semieje  $\kappa$  negativo:  $f''(\kappa_{cf}) = 8 > 0$ . Más aún,  $f(\kappa_{cf}, \alpha, \mu) = -\frac{(\alpha-\mu)^2}{4} < 0$  y ya que  $f(0, \alpha, \mu) = \alpha\mu$  estas parábolas son funciones monótonamente crecientes a lo largo del semieje  $\kappa$  positivo desde su valor en el origen. También las curvas trascendentes  $g(\kappa, \alpha, \beta, a)$  tienen un único punto crítico:  $\kappa_{cg} = \frac{1+a\mu}{2a} > 0$ . Este punto es un mínimo,  $g''(\kappa_{cg}, \alpha, \mu, a) = 4\alpha a e^{-(1+a\mu)} > 0$  y  $g(\kappa_{cg}, \alpha, \mu, a) = -\frac{\alpha}{a} e^{-(1+a\mu)} < 0$ . Así, en el intervalo  $0 < \kappa < \kappa_{cg}$  las funciones  $g$  decrecen desde su máximo valor en el origen  $g(0, \alpha, \mu, a) = \alpha\mu$  hasta sus valores mínimos en  $\kappa_{cg}$ . Después de este punto,  $\kappa > \kappa_{cg}$ , estas funciones crecen monótonamente y se aproximan a 0 en  $\kappa = \infty$  desde valores negativos. Por tanto, no hay intersecciones entre  $f$  y  $g$  si  $\kappa > 0$  en este régimen de parámetros y no existen estados ligados para tres barreras repulsivas de este tipo. Dado que la desigualdad  $a > -\frac{1}{\alpha} - \frac{2}{\mu}$  se cumple en este rango de parámetros la desigualdad  $f'(0, \alpha, \mu) = 2\mu + 2\alpha > g'(0, \alpha, \mu, a) = -2\alpha(\mu a + 1)$  entre las derivadas en el origen caracteriza la no existencia de estados ligados, i.e., en todo el cuadrante positivo del plano  $\alpha:\mu$ , sin tener en cuenta el valor de  $a$ .
- Aún si una de las dos deltas es atractiva, e.g.  $\alpha < 0$ , (un pozo), y la otra repulsiva, e.g.  $\mu > 0$ , (una barrera), puede no haber estado ligado (no hay intersección de  $g$  y  $f$  con  $\kappa > 0$ ). Las tangentes a las curvas  $g$  en el origen  $g'(0, \alpha, \mu, a) = 2|\alpha|(\mu a + 1)$  se hacen positivas pero solo si  $g'(0, a, \alpha, \mu) > f'(0, \alpha, \mu) = 2(\mu - |\alpha|)$  habrá una intersección entre  $f$  y  $g$  con  $\kappa > 0$ . Así, la desigualdad  $a < \frac{1}{|\alpha|} - \frac{2}{\mu}$  caracteriza la no existencia de estados ligados pares en este régimen. Esto requiere  $-\frac{1}{a} < \alpha < 0$  con lo cual estamos en el área comprendida entre la rama

superior de la hipérbola en el segundo cuadrante y el semieje  $\mu$  positivo, ver Figura 3. Si ahora consideramos  $\alpha > 0$  y  $-\frac{2}{a} < \mu < 0$  la desigualdad  $a < \frac{1}{\alpha} - \frac{2}{|\mu|}$  garantiza que  $g'(0, a, \alpha, \mu) < f'(0, \alpha, \mu)$ , no hay intersecciones con  $\kappa > 0$  entre  $f$  y  $g$  y no existen estados ligados pares en el área encerrada por la rama superior de la hipérbola en el tercer cuadrante y el semieje  $\alpha$  positivo.

b) Un estado ligado par:

- Si las desigualdades de arriba cambian de sentido, i.e.  $a > \frac{1}{|\alpha|} - \frac{2}{\mu}$  o  $a > -\frac{1}{\alpha} + \frac{2}{|\mu|}$ , hay una intersección con  $\kappa > 0$  entre las curvas  $g$  y  $f$  y por tanto existe un estado ligado par. Esta situación ocurre en el área encerrada por la rama superior de la hipérbola y la asíntota en el segundo y cuarto cuadrantes, ver Figura 3.
- Cuando  $\text{sgn}\alpha \neq \text{sgn}\mu$  y o bien  $\alpha < -\frac{1}{a}$  o  $\mu < -\frac{2}{a}$  las desigualdades  $a > \frac{1}{|\alpha|} - \frac{2}{\mu}$  o  $a > -\frac{1}{\alpha} + \frac{2}{|\mu|}$  se satisfacen respectivamente. Por tanto  $f'(0, \alpha, \mu) < g'(0, a, \alpha, \mu)$ , hay una intersección con  $\kappa > 0$  entre las curvas  $g$  y  $f$  y estas son áreas de un estado ligado par.
- En el caso cuando las dos deltas son atractivas, i.e.  $\alpha < 0$ , (un pozo) y  $\beta < 0$ , (otro pozo) hay solo una intersección con  $\kappa > 0$  si la desigualdad  $a < \frac{1}{|\alpha|} + \frac{2}{|\mu|}$  es satisfecha. El área en el tercer cuadrante encerrada por la rama inferior de la hipérbola y los semiejes  $\alpha$  y  $\mu$  negativos es una zona de un estado ligado par.

c) Dos estados ligados pares:

- Hay dos intersecciones con  $\kappa > 0$  si  $\alpha + \mu < 0$ ,  $\text{sgn}\alpha = \text{sgn}\mu$ , y la desigualdad  $a > \frac{1}{|\alpha|} + \frac{2}{|\mu|}$  es satisfecha. Esta área más allá de la rama inferior de la hipérbola en el tercer cuadrante es una zona de dos estados ligados pares.

2. Estados ligados impares:  $A = -G$ ,  $B = -F$  y  $C = -D$ . El sistema líneal homogéneo “impar” es

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & -e^{-\kappa a} & -e^{\kappa a} \\ (\kappa + \alpha)e^{-\kappa a} & -\kappa e^{-\kappa a} & \kappa e^{\kappa a} \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

La ecuación espectral es ahora la ecuación trascendente

$$e^{-2a\kappa} = \frac{2}{\alpha}\kappa + 1.$$

Ahora las soluciones de esta ecuación espectral son las intersecciones de las curvas  $g(\kappa, a) = e^{-2a\kappa}$  y  $f(\kappa, \alpha) = \frac{2\kappa}{\alpha} + 1$  con  $\kappa > 0$ . Ahora  $g'(0, a) = -2a$  y  $f'(0, \alpha) = \frac{2}{\alpha}$  las tangentes en el origen son iguales sobre la línea recta:  $\alpha = -\frac{1}{a}$ .

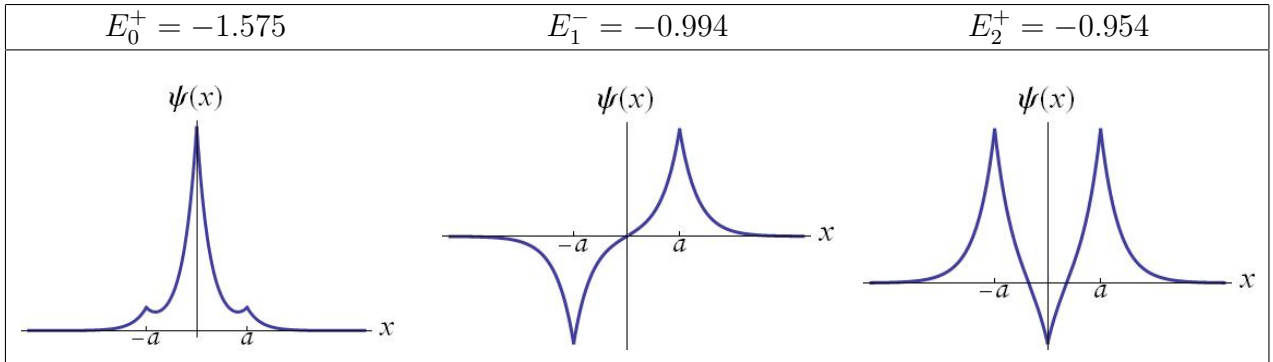
a) Cero estados ligados impares:

- Si  $\alpha > 0$  entonces  $f'(0, \alpha) > g'(0, a)$ , o  $a > -\frac{2}{\alpha}$ . En este caso no hay intersección con  $\kappa > 0$  de las curvas  $g$  y  $f$  y por tanto no hay estado ligado impar.
- Si  $\alpha < 0$  y  $a < \frac{1}{|\alpha|}$  tal que  $f'(0, \alpha) < g'(0, a)$ , no hay intersección con  $\kappa > 0$  entre las curvas  $g$  y  $f$ .

b) Un estado ligado impar:

- Si la desigualdad cambia de sentido, i.e.,  $a > \frac{1}{|\alpha|}$ , hay una intersección con  $\kappa > 0$  entre las curvas  $g$  y  $f$  y por tanto hay un estado ligado impar.

Tabla A.3: Las tres funciones de onda de estado ligado de  $\hat{H}$ , sucesivamente par, impar, par, para  $\alpha = \beta = -2$ ,  $\mu = -2.5$  y  $a = 3 > 1.3 = \frac{1}{|\alpha|} + \frac{2}{|\mu|}$ . El número de nodos es respectivamente 0, 1, y 2.



En suma, en esta visión “tomografía”  $\alpha = \beta$  (los dos potenciales externos tienen la misma intensidad), donde nos restringimos al plano  $(\alpha, \mu, \alpha)$  inmerso en  $\mathbb{R}^3$ , las superficies (A.40) y (A.41) son respectivamente proyectadas en la línea recta  $\alpha = -\frac{1}{a}$ , la cual es una separatriz, y la hipérbola (A.43), cuyas ramas son otras separatrices entre regiones de diferente número de estados ligados. La situación es descrita en la Figura A.2: la rama superior de la hipérbola (A.43) es la frontera de la región de no estados ligados. El área encerrada por la asíntota  $\alpha = -\frac{1}{a}$  y la rama inferior de la hipérbola es una región de un estado ligado par. Hay un estado ligado par y un estado ligado impar entre la rama inferior de la hipérbola y esta asíntota. Por debajo de la rama inferior de la hipérbola existen dos estado ligados pares y un estado ligado impar. En la Tabla A.3 las funciones de onda en una región de parámetros de tres estados ligados son mostradas cuando los dos pozos delta externos son de la misma intensidad:  $a > \frac{1}{|\alpha|} + \frac{2}{|\mu|}$ . Eligiendo, e. g.,  $a = 3$ ,  $\alpha = \beta = -2$ , y  $\mu = -2.5$  dentro de esta región, las tres intersecciones de las curvas ocurren en los valores de momento imaginario:  $\kappa_0^+ = \sqrt{-E_0^+} = 1.255 > \kappa_1^- = \sqrt{-E_1^-} = 0.997 > \kappa_2^+ = \sqrt{-E_2^+} = 0.976$ . Dados estos valores,

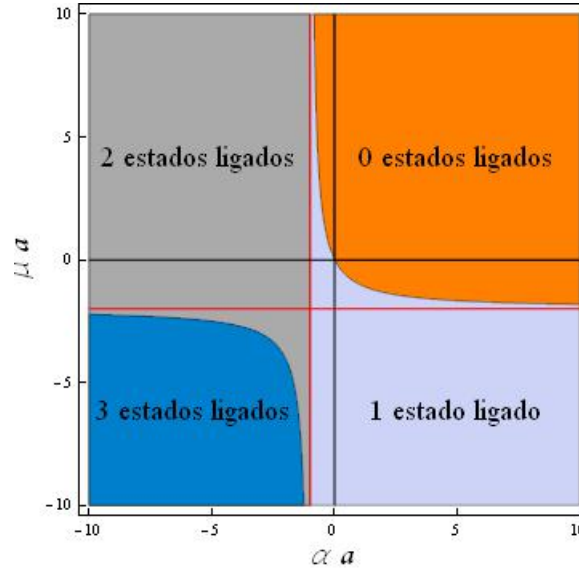


Figura A.2: La distribución de estados ligados en el espacio de parámetros del potencial triple delta de Dirac con igual intensidad de los potenciales delta externos:  $\alpha = \beta$ .

las soluciones del sistema homogéneo inducido por las condiciones de empalme proporciona los coeficientes de las tres funciones de onda de estado ligado (normalizadas).

### A.7.5. Estados ligados en el caso en que $\beta = \mu$

Si  $\beta = \mu$ , el potencial delta situado en  $x = 0$  y el potencial delta situado en  $x = a$  tienen la misma intensidad. La variedad triparámetrica del sistema es restringida al plano  $(\alpha, \mu, \mu)$  encerrado dentro del 3D-espacio  $(\alpha, \mu, \beta)$  homeomorfo a  $\mathbb{R}^3$ . El Hamiltoniano no es invariante (a menos que haya una restricción adicional a la línea real  $\alpha = \mu$ ) bajo la reflexión  $x \rightarrow -x$ . Así, lejos de la diagonal  $\alpha = \mu$ , las funciones propias no son ni funciones pares de  $x$  ni funciones impares de  $x$ .

La ecuación espectral es la ecuación trascendente:

$$\alpha\mu e^{-4a\kappa}(2\kappa - \mu) + 2\mu e^{-2a\kappa}[\alpha\mu + \kappa(\alpha + \mu)] = (2\kappa + \alpha)(2\kappa + \mu)^2,$$

y las superficies (A.40) y (A.41) son respectivamente proyectadas en las curvas:

$$a = -\frac{3}{2\mu} - \frac{1}{2\alpha} - \frac{\sqrt{5\alpha^2 - 2\alpha\mu + \mu^2}}{2\alpha\mu} = a_- \quad (\text{A.44})$$

$$a = -\frac{3}{2\mu} - \frac{1}{2\alpha} + \frac{\sqrt{5\alpha^2 - 2\alpha\mu + \mu^2}}{2\alpha\mu} = a_+ \quad (\text{A.45})$$

Estas curvas son trazadas en la Figura A.3, para el caso particular de  $a = 1$  (la curva (A.44) es la frontera entre las áreas de uno y dos estados ligados, mientras que las dos ramas de (A.45) respectivamente dividen las áreas de cero y un estado ligado y las áreas de dos y tres estados ligados). Las áreas de un número fijo de estados ligados están distribuidas conforme al siguiente patrón, ver Figura A.3 :

1. Cero estados ligados: Hay tres zonas de no estados ligados encerradas entre la rama superior de la curva  $a = a_+$  (A.45) e infinito.
  - Los dos acoplamientos son positivos,  $\alpha > 0$ ,  $\mu > 0$ , y la desigualdad  $a > a_+$  es satisfecha.
  - La delta situada a la izquierda es atractiva,  $\alpha < 0$ , y las otras dos son repulsivas:  $\mu < 0$ . No hay estados ligados si la desigualdad  $a < a_-$  se satisface.
  - En la configuración opuesta,  $\alpha > 0$ ,  $\mu < 0$ , no hay estados ligados cuando la desigualdad  $a < a_+$  is satisfecha.
2. Un estado ligado: El área de un estado ligado es dividida tambien en tres zonas.
  - La primera es caracterizada por los signos de los acoplamientos  $\alpha < 0$ ,  $\mu > 0$ , y la desigualdad:  $a > a_-$ .
  - En la segunda zona los signos de los acoplamientos se intercambian,  $\alpha > 0$ ,  $\mu < 0$ , y la doble desigualdad  $a_- < a < a_+$  se satisface.
  - Aún cuando las tres deltas son atractivas,  $\alpha < 0$ ,  $\mu < 0$ , solo hay un estado ligado si la desigualdad  $a < a_-$  is satisfecha.
3. Dos estados ligados: El área de dos estados ligados solo se compone de dos zonas.
  - La primera zona de dos estados ligados surge cuando  $\alpha > 0$ ,  $\mu < 0$ , y  $a < a_-$ .
  - Hay también dos estados ligados si las tres deltas son atractivas,  $\alpha < 0$ ,  $\mu < 0$ , pero la doble desigualdad  $a_- < a < a_+$  se satisface.
4. Tres estados ligados: Finalmente, solo hay una zona de tres estados ligados encerrada entre la rama inferior de la curva  $a = a_+$  (A.45) e infinito.
  - Las tres deltas son atractivas,  $\alpha < 0$ ,  $\mu < 0$ , y la desigualdad  $a < a_-$  es satisfecha.

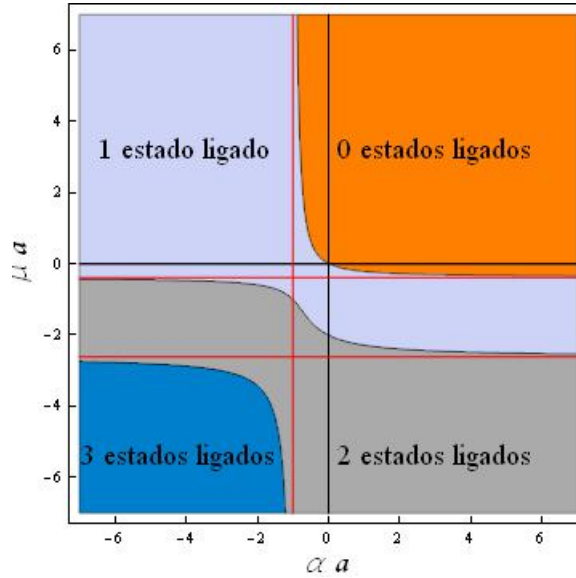


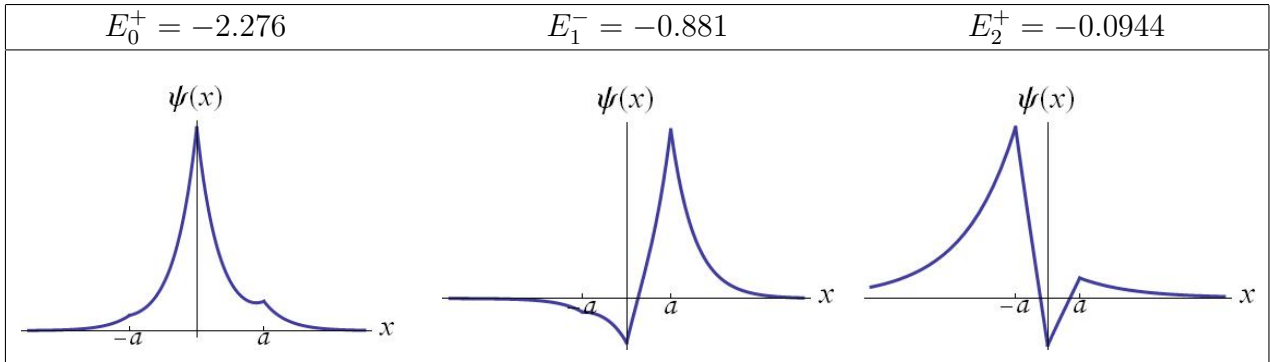
Figura A.3: La distribución de estados ligados del potencial triple delta de Dirac. Tomografía  $\mu = \beta$ .

### A.7.6. Estados ligados de tres pozos delta de diferente intensidad

Una descripción bastante explícita del espectro discreto también es posible en el caso de tres potenciales delta de diferente intensidad. Debido a que el Hamiltoniano no es invariante bajo la reflexión  $x \rightarrow -x$  las funciones propias no son ni funciones pares de  $x$  ni funciones impares de  $x$ . En la Tabla A.4 trazamos las funciones de onda de estado ligado de tres pozos delta de diferente intensidad. Los acoplamientos negativos son elegidos en una región de tres estados ligados:  $a > -\left(\frac{\alpha+\beta}{2\alpha\beta} + \frac{1}{\mu}\right) - \sqrt{\frac{1}{\mu^2} + \frac{(\alpha-\beta)^2}{4\alpha^2\beta^2}}$ . Específicamente,  $a = 2$ ,  $\alpha = -1$ ,  $\beta = -2$  y  $\mu = -3$ , **tuned to this region**, las tres intersecciones de las curvas espectrales  $g$  y  $f$  ocurren en los valores de momento imaginario:  $\kappa_0^+ = \sqrt{-E_0^+} = 1.508 > \kappa_1^- = \sqrt{-E_1^-} = 0.939 > \kappa_2^+ = \sqrt{-E_2^+} = 0.307$ . A partir de estos valores, las soluciones no triviales del sistema lineal homogéneo en seis incógnitas, inducidas por las condiciones de empalme, nos proporciona las funciones de onda de estado ligado normalizadas. Terminamos esta sección con un breve resumen del espectro de un arreglo de tres potenciales delta.

- Si el potencial situado en el centro se desconecta,  $\mu = 0$ , la superficie (A.40) reduce a la hipérbola  $a = -\frac{\alpha+\beta}{2\alpha\beta}$ , mientras que la superficie (A.41) desaparece en el infinito. El problema del potencial con dos deltas es recuperado en el plano  $(\alpha, 0, \beta)$ . Las zonas planas de 0,1 y dos estados ligados separados por las dos ramas de la hipérbola reaparecen.
- Esta tomografía, junto con las otras dos hechas antes en los planos  $(\alpha, \mu, \alpha)$  y  $\alpha, \mu, \mu$ , ilumina el problema tridimensional. Las ramas de las superficies separatriz dividen el

Tabla A.4: Las tres funciones de onda de estado ligado de  $\hat{H}$  para  $\alpha = -1$ ,  $\beta = -2$  y  $\mu = -3$ . El número de nodos es respectivamente 0, 1, and 2.



espacio de parámetros en cuatro subespacios tridimensionales con cero, uno, dos y tres estados ligados. Por ejemplo, la existencia de tres estados ligados requiere no solo que los tres potenciales delta sean atractivos sino también que la distancia entre ellos sea adecuada a sus intensidades relativas.

# Apéndice B

## Mecánica Cuántica Supersimétrica $\mathcal{N} = 2$ : sistemas separables en coordenadas curvilíneas

### B.1. Mecánica clásica supersimétrica

En esta sección vamos a considerar la extensión supersimétrica clásica de un sistema clásico descrito por  $N$  grados de libertad bosónicos  $x_j$  con  $j = 1, \dots, N$ . Para hacer esto introducimos  $2N$  grados de libertad fermiónicos  $\theta_1^j, \theta_2^j$  que son las componentes de los  $N$  espinores de Grassmann-Majorana

$$\theta = \begin{pmatrix} \theta_1^j \\ \theta_2^j \end{pmatrix},$$

y que satisfacen las relaciones  $\theta_\alpha^j \theta_\beta^k + \theta_\beta^k \theta_\alpha^j = 0$ ,  $\forall \alpha, \beta = 1, 2$ , de tal forma que el superespacio de fase estará caracterizado por las coordenadas  $x_j, p_j, \theta_1^j, \theta_2^j$  [51].

Dadas dos superfunciones  $F$  y  $G$  sobre el superespacio de fase, se define el supercorchete de Poisson

$$\{F, G\}_P = \frac{\partial F}{\partial p_j} \frac{\partial G}{\partial x_j} - \frac{\partial F}{\partial x_j} \frac{\partial G}{\partial p_j} + i \sum_{\alpha=1}^2 F \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial \theta_\alpha^j}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial \theta_\alpha^j}} G,$$

el cual se evalúa utilizando los supercorchetes de Poisson básicos

$$\{p_j, x_k\}_P = 1, \quad \{x_j, x_k\}_P = 0, \quad \{p_j, p_k\}_P = 0, \quad \{\theta_\alpha^j, \theta_\beta^k\}_P = i \delta_{jk} \delta_{\alpha\beta}, \quad \forall \alpha, \beta = 1, 2$$

Las supercargas clásicas

$$Q_1 = \sum_{j=1}^N \left( p_j \theta_1^j - \frac{\partial W}{\partial x_j} \theta_2^j \right), \quad Q_2 = \sum_{j=1}^N \left( p_j \theta_2^j + \frac{\partial W}{\partial x_j} \theta_1^j \right),$$



definen el álgebra supersimétrica clásica dada por las relaciones [51]:

$$\{Q_1, Q_1\}_P = \{Q_2, Q_2\}_P = 2iH_S, \quad \{Q_\alpha, H_S\}_P = 0, \quad \{Q_1, Q_2\}_P = -ip_j \frac{\partial W}{\partial x_j}.$$

El Hamiltoniano supersimétrico clásico está dado por la expresión [51]:

$$H_S = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N p_j p_j + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\partial W}{\partial x_j} \frac{\partial W}{\partial x_j} - i \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N W_{jk} \theta_2^j \theta_1^k, \quad W_{jk} = \frac{\partial^2 W}{\partial x_j \partial x_k}, \quad (\text{B.1})$$

el cual es invariante bajo las transformaciones generadas por las supercargas  $Q_1$  y  $Q_2$ . Como se puede ver por simple inspección, en este Hamiltoniano existen dos términos de interacción proporcionales al cuadrado de la derivada de la función  $W(x_1, x_2, \dots, x_N)$  y a la segunda derivada de la misma función  $W(x_1, x_2, \dots, x_N)$ , la cual es denominada superpotencial.

Por tanto, un Hamiltoniano clásico dado por

$$H_S = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N p_j p_j + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\partial W}{\partial x_j} \frac{\partial W}{\partial x_j},$$

admite una extensión supersimétrica  $\mathcal{N} = 2$  si y solo si la función  $W(x_1, x_2, \dots, x_N)$  satisface la ecuación

$$\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\partial W}{\partial x_j} \frac{\partial W}{\partial x_j} = V(x_1, x_2, \dots, x_N), \quad (\text{B.2})$$

donde se ha tenido en cuenta que el término  $\sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N W_{jk} \theta_2^j \theta_1^k$  en la ecuación (B.1) desaparece para el caso bosónico.

Ahora bien, si llevamos las variables de Grassmann  $\theta_\alpha^j$  a cero, se obtiene el sistema dinámico descrito por el Hamiltoniano y la ecuación de Hamilton-Jacobi [51]

$$H_S = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N p_j p_j + V(x_1, x_2, \dots, x_N),$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H_S \left( \frac{\partial S}{\partial x_1}, \frac{\partial S}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial S}{\partial x_N}, x_1, x_2, \dots, x_N \right) = 0.$$

Si el Hamiltoniano  $H_S$  no depende explícitamente del tiempo, se suponen soluciones de la forma  $S(x_1, x_2, \dots, x_N, t) = \tilde{S}(x_1, x_2, \dots, x_N) - i_1 t$ , lo que lleva a la ecuación de Hamilton-Jacobi reducida

$$i_1 = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\partial \tilde{S}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial x_j} + V(x_1, x_2, \dots, x_N), \quad (\text{B.3})$$

donde  $\tilde{S}(x_1, x_2, \dots, x_N)$ , es la función característica de Hamilton.

A la vista de (B.2) y (B.3) y asumiendo una energía potencial tal que  $U(x_1, x_2, \dots, x_N) \geq 0$ , podemos afirmar que el superpotencial de un sistema dinámico supersimétrico de  $N$  grados de libertad  $\mathcal{N} = 2$  es una solución de la ecuación de Hamilton-Jacobi independiente del tiempo (B.3) para  $i_1 = 0$  y  $V(x_1, x_2, \dots, x_N) = -U(x_1, x_2, \dots, x_N)$  [51].

Por tanto, para un sistema Hamiltoniano con energía potencial  $U(x_1, x_2, \dots, x_N)$  existen tantas extensiones supersimétricas  $\mathcal{N} = 2$  como soluciones de energía cero de la ecuación de Hamilton-Jacobi (B.3) para  $V(x_1, x_2, \dots, x_N) = -U(x_1, x_2, \dots, x_N)$ . En el caso en que  $U(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{j=1}^N U_j(x_j)$ , existen pues  $2^N$  soluciones de dicha ecuación [51].

Si no existen coordenadas cíclicas, se verifica [51]

$$W^{a_1, a_2, \dots, a_N}(x_1, x_2, \dots, x_N) = (-1)^{a_1} W(x_1) + (-1)^{a_2} W(x_2) + \dots + (-1)^{a_N} W(x_N),$$

donde  $a_1, a_2, \dots, a_N = 0, 1$ .

La cuantización del sistema clásico supersimétrico según el esquema de cuantización canónica, implica reemplazar los supercorchetes de Poisson por conmutadores para las variables bosónicas y por anticonmutadores para las variables fermiónicas

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}, \quad \{\hat{\theta}_\alpha^j, \hat{\theta}_\beta^k\} = -\frac{1}{m}\delta_{jk}\delta_{\alpha\beta} \quad \forall \quad j, k = 1, 2, \dots, N$$

La representación de esta superálgebra de Heisenberg mediante  $\hat{x}_j = x_j$ ,  $\hat{p}_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}$ ,  $\hat{\theta}_1^j = \psi_1^j$  y  $\hat{\theta}_2^j = \psi_2^j$ , donde  $\psi_1^j$  y  $\psi_2^j$  son las  $\gamma$ -matrices de Majorana, conducen a las supercargas cuánticas y al superálgebra cuántica verificada por el sistema cuántico.

## B.2. Formalismo de Cartan

Sea  $(M, g)$  una variedad Riemanniana de dimensión real  $n$  y  $(q^\mu)$  un sistema de coordenadas locales definido en una vecindad  $U$ . Una base del espacio tangente a  $M$  en un punto  $\mathbf{x} \in M$ ,  $T_{\mathbf{x}}M$  esta dada por:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial q^1}, \dots, \frac{\partial}{\partial q^n} \right\},$$

mientras que la base dual en el espacio cotangente  $T_{\mathbf{x}}^*M$  está dada por:

$$\{ dq^1, \dots, dq^n \}.$$

El elemento de línea asociado al tensor métrico  $g$  en esta base coordenada es:

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dq^\mu \otimes dq^\nu = g_{\mu\nu} dq^\mu dq^\nu$$

donde la convención de Einstein es usada.

La inversa de la métrica es denotada por  $g^{-1} \equiv (g^{\mu\nu})$ , con lo cual

$$g_{\mu\eta} g^{\eta\nu} = \delta_{\mu}^{\nu}$$

donde  $\delta$  representa la matriz identidad  $n \times n$ .

### B.2.1. Vielbeins

Se denomina un “vielbein”<sup>1</sup> (o marco de referencia) a la colección de  $n^2$  funciones  $e_a^\mu = e_a^\mu(q^1, \dots, q^n)$  dadas por  $e_a^\mu : M \rightarrow \mathbb{R}$ , tales que<sup>2</sup>

$$e_a^\mu e_b^\nu \delta^{ab} = g^{\mu\nu} \quad , \quad e_a^\mu e_b^\nu g_{\mu\nu} = \delta_{ab} . \quad (\text{B.4})$$

A la vista de las expresiones (B.4) los vielbein pueden ser interpretados como una colección de  $n$  vectores tangente

$$\vec{e}_a = e_a^\mu \frac{\partial}{\partial q^\mu}, \quad , \quad a = 1, \dots, n$$

que determinan una base ortonormal de  $T_{\mathbf{x}}M$

$$e_a^\mu e_b^\nu g_{\mu\nu} = \delta_{ab} \quad \Leftrightarrow \quad \vec{e}_a \cdot \vec{e}_b = \delta_{ab}$$

La base dual en  $T_{\mathbf{x}}^*M$ , i.e. el “co-marco de referencia” está dada por  $\sigma^a = \sigma_\mu^a dq^\mu$  con lo cual tenemos las siguientes identidades

$$\begin{aligned} \sigma_\mu^a e_b^\mu &= \delta_b^a , \\ \sigma_\mu^a = \delta^{ab} g_{\mu\nu} e_b^\nu &\Leftrightarrow e_a^\mu = \delta_{ab} g^{\mu\nu} \sigma_\nu^b \quad , \quad \delta_{ab} \sigma_\mu^a \sigma_\nu^b = g_{\mu\nu} \quad \Leftrightarrow \quad \delta_{ab} \sigma^a \otimes \sigma^b = g . \end{aligned}$$

### B.2.2. Caso de sistemas ortogonales

Para el caso particular de coordenadas ortogonales, i.e. cuando  $g_{\mu\nu}(q) = 0, \forall \mu \neq \nu$ , es posible definir un vielbein “natural” en la forma

$$\begin{aligned} e_a^\mu &= 0 \quad , \quad \forall \mu \neq a \\ \vec{e}_a &= e_1^1 \frac{\partial}{\partial q^1}, \dots, \vec{e}_n = e_n^n \frac{\partial}{\partial q^n} \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Para  $n = 2$  el vielbein es llamado “zweibein”; para  $n = 3$ : “dreibein” o “triad”; para  $n = 4$ : “vierbein” o “tetrad”, etc.

<sup>2</sup>La siguiente convención, usada en (B.4), se adoptara en adelante: índices latinos se reservaran a la convención de Einstein con respecto a la métrica “plana”  $\delta$ , mientras que los índices Griegos se referiran a la métrica riemanniana  $g$ .

Así las componentes no nulas del comarco dual coinciden con los “factores de escala”  $h_a$ :

$$\sigma_1^1 = h_1 = \sqrt{g_{11}}, \dots, \sigma_n^n = h_n = \sqrt{g_{nn}}$$

En este caso la relacion entre el marco y el comarco es directa

$$\sigma_\mu^a = \frac{1}{e_a^\mu} = h_a \delta_\mu^a$$

### B.2.3. Cambios de coordenadas

Sea  $(x^\mu) \equiv (x^1, \dots, x^n)$  otro sistema de coordenadas definidas sobre  $U$  y supongamos que las ecuaciones del cambio de coordenadas, y sus inveras, estan dadas por

$$q^\mu = q^\mu(x^1, \dots, x^n) \quad , \quad x^\mu = x^\mu(q^1, \dots, q^n) \quad , \quad \mu = 1, \dots, n$$

Así los cambios inducidos en los espacios tangente y cotangente estan dados por

$$\frac{\partial}{\partial q^\mu} = \frac{\partial x^\nu}{\partial q^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \quad , \quad dq^\mu = \frac{\partial q^\mu}{\partial x^\nu} dx^\nu$$

y la métrica es reescrita en el nuevo sistema como

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dq^\mu dq^\nu = \tilde{g}_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad , \quad \tilde{g}_{\mu\nu} = \frac{\partial q^\alpha}{\partial x^\mu} \frac{\partial q^\beta}{\partial x^\nu} g_{\alpha\beta}$$

Sea  $\vec{e}_a$  un vielbein asociado a  $\tilde{g}$  y  $\tau^a$  su comarco dual, i.e.

$$\vec{e}_a = e_a^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad , \quad e_a^\mu e_b^\nu \delta^{ab} = \tilde{g}^{\mu\nu} \quad , \quad \tau^a = \tau_\mu^a dx^\mu \quad , \quad \tau_\mu^a \tau_\nu^b \delta_{ab} = \tilde{g}_{\mu\nu} \quad (B.5)$$

El vielbein  $\vec{e}_a$  asociado a la métrica  $g$  puede ser escrito como una combinación líneal de la base  $\left\{ \frac{\partial}{\partial x^\mu} \right\}$ ,

$$\vec{e}_a = e_a^\mu \frac{\partial}{\partial q^\mu} = e_a^\mu \frac{\partial x^\nu}{\partial q^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\nu}$$

Usando (B.5) podemos escribir

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \tau_\mu^a \vec{e}_a$$

Así finalmente obtenemos el cambio de vielbeins  $\vec{e}_a = \tilde{e}_a^b \vec{e}_b$ ,

$$\tilde{e}_a^b = e_a^\mu \frac{\partial x^\nu}{\partial q^\mu} \tau_\nu^b \quad (B.6)$$

### B.2.4. Caso especial: cambio a coordenadas cartesianas

Si  $(x^\mu)$  es un sistema de coordenadas cartesianas en  $U$

$$\tilde{g}_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} , \quad e_a^\mu = \delta_a^\mu , \quad \tau_\mu^a = \delta_\mu^a$$

y el cambio (B.6) reduce a

$$\tilde{e}_a^\mu = e_a^\nu \frac{\partial x^\mu}{\partial q^\nu} \quad (\text{B.7})$$

## B.3. Mecánica clásica supersimétrica

En este apéndice describimos sistemas clásicos SUSY  $\mathcal{N} = 2$  tales que el espacio de configuración es una variedad Riemanniana bidimensional  $(\mathbb{M}^2, g_{\mu\nu})$ . Sean  $q^\mu$ ,  $\mu = 1, 2$ , un sistema de coordenadas locales en  $\mathbb{M}^2$  y  $\vartheta_\alpha^\mu$ ,  $\alpha, \mu = 1, 2$ , un conjunto de variables de Grassmann.

Un superpunto en el superspacio de configuración  $\mathcal{C} \cong \mathbb{M}^{2|4}$  está dado por:

$$(q^1, q^2, \vartheta_1^1, \vartheta_1^2, \vartheta_2^1, \vartheta_2^2) \equiv (q^\mu, \vartheta_\alpha^\mu) \quad , \quad \mu = 1, 2, \alpha = 1, 2$$

y las siguientes reglas de conmutación/anticonmutación se satisfacen:

$$q^\mu \vartheta_\alpha^\nu - \vartheta_\alpha^\nu q^\mu = 0 \quad , \quad \vartheta_\alpha^\mu \vartheta_\beta^\nu + \vartheta_\alpha^\nu \vartheta_\beta^\mu = 0 .$$

La acción supersimétrica puede ser expresada en la forma<sup>3</sup>:

$$S = \int dt \left[ \frac{1}{2} g_{\mu\nu} \dot{q}^\mu \dot{q}^\nu + \frac{i}{2} g_{\mu\nu} \vartheta_\alpha^\mu D_t \vartheta_\alpha^\nu + \frac{1}{4} R_{\mu\nu\rho\eta} \vartheta_1^\mu \vartheta_2^\nu \vartheta_1^\rho \vartheta_2^\eta - \frac{1}{2} g^{\mu\nu} \frac{\partial W}{\partial q^\mu} \frac{\partial W}{\partial q^\nu} + i \frac{\partial^2 W}{\partial q^\mu \partial q^\nu} \vartheta_1^\mu \vartheta_2^\nu \right]$$

donde  $W(q^1, q^2) : \mathbb{M}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $[W] = ML^2T^{-1}$ , es el superpotencial que caracteriza las interacciones compatibles con supersimetría en el sistema,  $D_t \vartheta_\alpha^\mu$  es la derivada covariante para las variables de Grassman dada por  $D_t \vartheta_\alpha^\mu = \dot{\vartheta}_\alpha^\mu + \Gamma_{\nu\rho}^\mu \dot{q}^\rho \vartheta_\alpha^\nu$  mientras que  $\Gamma_{\nu\rho}^\mu$  y  $R_{\mu\nu\rho\eta}$  son los símbolos de Christoffel estándar y el tensor de curvatura asociado a la métrica  $g$  respectivamente. Eligiendo un zweibein  $e_a^\mu$  en orden a descomponer el tensor métrico  $g^{\mu\nu}$ , i.e.,  $g^{\mu\nu} = e_a^\mu e_b^\nu \delta^{ab}$ , las variables de Grassmann curvas y planas pueden ser relacionadas de una manera sencilla:  $\vartheta_\alpha^\mu = e_a^\mu \theta_\alpha^a$ .

La acción funcional es invariante bajo las transformaciones SUSY

$$\begin{aligned} \delta_1 q^\mu &= \varepsilon \vartheta_1^\mu \quad , \quad \delta_1 \vartheta_1^\mu = i\varepsilon \dot{q}^\mu \quad , \quad \delta_1 \vartheta_2^\mu = i\varepsilon \left( g^{\mu\nu} \frac{\partial W}{\partial q^\nu} + i\Gamma_{\nu\rho}^\mu \vartheta_1^\nu \vartheta_2^\rho \right) , \\ \delta_2 q^\mu &= \varepsilon \vartheta_2^\mu \quad , \quad \delta_2 \vartheta_1^\mu = -i\varepsilon \left( g^{\mu\nu} \frac{\partial W}{\partial q^\nu} + i\Gamma_{\nu\rho}^\mu \vartheta_1^\nu \vartheta_2^\rho \right) \quad , \quad \delta_2 \vartheta_2^\mu = i\varepsilon \dot{q}^\mu , \end{aligned}$$

<sup>3</sup>La convención de sumación de Einstein será usada de aquí en adelante.

donde  $\varepsilon$  es un parámetro de Grassmann y el teorema de Nöther provee las supercargas conservadas:

$$Q_1 = g_{\mu\nu} \dot{q}^\mu \vartheta_1^\nu + \frac{\partial W}{\partial q^\mu} \vartheta_2^\mu \quad , \quad Q_2 = g_{\mu\nu} \dot{q}^\mu \vartheta_2^\nu - \frac{\partial W}{\partial q^\mu} \vartheta_1^\mu \quad .$$

Como paso previo a la cuantificación pasamos al formalismo Hamiltoniano. Un punto en el superespacio de fases reducido es dado por  $(q^\mu, p_\nu, \vartheta_1^\mu, \vartheta_2^\mu)$ . En este espacio una superestructura de Poisson es definida en la forma:

$$\{p_\mu, q^\nu\}_P = \delta_\mu^\nu \quad , \quad \{p_\mu, p_\nu\}_P = \{q^\mu, q^\nu\}_P = 0 \quad , \quad \{\vartheta_\alpha^\mu, \vartheta_\beta^\nu\}_P = i g^{\mu\nu} \delta_{\alpha\beta} \quad ,$$

donde

$$\{F, G\}_P = \left( \frac{\partial F}{\partial p_\mu} \frac{\partial G}{\partial q^\mu} - \frac{\partial F}{\partial q^\mu} \frac{\partial G}{\partial p_\nu} \right) + i g^{\mu\nu} \delta^{\alpha\beta} F \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial \vartheta_\alpha^\mu} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial \vartheta_\beta^\nu} G \quad .$$

El momento canónico está dado por:

$$p_\mu = g_{\mu\nu} \dot{q}^\nu + \frac{i}{2} g_{\nu\rho} \vartheta_\alpha^\nu \Gamma_{\tau\mu}^\rho \vartheta_\alpha^\tau \quad ,$$

y las supercargas clásicas en el espacio de fase son:

$$Q_1 = \vartheta_1^\mu p_\mu + \vartheta_2^\mu \frac{\partial W}{\partial x^\mu} - \frac{i}{2} g_{\nu\rho} \vartheta_\alpha^\nu \Gamma_{\tau\mu}^\rho \vartheta_\alpha^\tau \vartheta_1^\mu \quad , \quad Q_2 = \vartheta_2^\mu p_\mu - \vartheta_1^\mu \frac{\partial W}{\partial x^\mu} - \frac{i}{2} g_{\nu\rho} \vartheta_\alpha^\nu \Gamma_{\tau\mu}^\rho \vartheta_\alpha^\tau \vartheta_2^\mu \quad .$$

Es fácil verificar que las supercargas  $Q_1$  y  $Q_2$  satisfacen el álgebra clásica SUSY:

$$\{Q_1, Q_1\}_P = \{Q_2, Q_2\}_P = 2iH \quad , \quad \{Q_\alpha, H\}_P = \{Q_1, Q_2\}_P = 0 \quad ,$$

donde  $H$  denota la función Hamiltoniana clásica SUSY del sistema.

Las variables de Grassmann complejas se definen en la forma  $\vartheta_\pm^\mu = \frac{\pm 1}{\sqrt{2}}(\vartheta_2^\mu \mp i \vartheta_1^\mu)$  y las correspondientes supercargas complejas son escritas como:

$$Q_+ = \frac{i}{\sqrt{2}}(Q_1 - iQ_2) \quad , \quad Q_- = \frac{i}{\sqrt{2}}(Q_1 + iQ_2) \quad ,$$

$$Q_+ = -\vartheta_-^\mu p_\mu - i \vartheta_-^\mu \frac{\partial W}{\partial x^\mu} + \frac{i}{2} (g_{\mu\mu} \Gamma_{\nu\mu}^\mu \vartheta_+^\mu \vartheta_-^\mu \vartheta_-^\nu - g_{\nu\nu} \Gamma_{\mu\nu}^\nu \vartheta_-^\mu \vartheta_-^\nu \vartheta_+^\mu) \quad ,$$

$$Q_- = -\vartheta_+^\mu p_\mu + i \vartheta_+^\mu \frac{\partial W}{\partial x^\mu} + \frac{i}{2} (g_{\mu\mu} \Gamma_{\nu\mu}^\mu \vartheta_+^\mu \vartheta_+^\nu \vartheta_-^\mu - g_{\nu\nu} \Gamma_{\nu\mu}^\mu \vartheta_+^\nu \vartheta_+^\mu \vartheta_-^\mu) \quad .$$

## B.4. Mecánica cuántica supersimétrica: cuantización

La cuantización canónica en la representación de coordenadas se lleva a cabo haciendo las sustituciones  $(q^\mu, p_\nu) \rightarrow (\hat{q}^\mu, \hat{p}_\nu)$  y  $(\vartheta_+^\mu, \vartheta_-^\mu) \rightarrow (\hat{\psi}^{\mu\dagger}, \hat{\psi}^\mu)$  donde  $\hat{q}^\mu$  y  $\hat{p}^\nu$  son los operadores

$$\hat{q}^\mu = q^\mu, \quad \hat{p}_\nu = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q^\nu},$$

mientras que  $\hat{\psi}^\mu$  y  $\hat{\psi}^{\mu\dagger}$  son los operadores definidos en términos del zweibein y los operadores de Fermi “planos”  $\hat{\psi}^a$  y  $\hat{\psi}^{a\dagger}$

$$\hat{\psi}^\mu = e_a^\mu \hat{\psi}^a, \quad \hat{\psi}^{\mu\dagger} = e_a^\mu \hat{\psi}^{a\dagger}.$$

Los operadores  $\hat{q}^\mu$  and  $\hat{p}_\nu$  satisfacen las relaciones de conmutación

$$[\hat{q}^\mu, \hat{p}_\nu] = i\hbar \delta_\nu^\mu, \quad [\hat{p}_\mu, \hat{p}_\nu] = 0 = [\hat{q}^\mu, \hat{q}^\nu], \quad \mu, \nu = 1, 2$$

y los operadores  $\hat{\psi}^\mu$  y  $\hat{\psi}^{\mu\dagger}$  satisfacen las relaciones de anticonmutación <sup>4</sup>

$$\{\hat{\psi}^\mu, \hat{\psi}^\nu\} = 0 = \{\hat{\psi}^{\mu\dagger}, \hat{\psi}^{\nu\dagger}\}, \quad \{\hat{\psi}^\mu, \hat{\psi}^{\nu\dagger}\} = \frac{1}{m} g^{\mu\nu}.$$

Los operadores de Fermi se representan por medio de los generadores del álgebra de Clifford de  $\mathbb{R}^4$  y están dados explícitamente por (1.10).

Las supercargas clásicas son reemplazadas por operadores de supercarga, esto es:

$$Q_+ \rightarrow \hat{Q}_+ = \frac{i}{\sqrt{2}} \left( \hat{Q}_1 - i\hat{Q}_2 \right)^T, \quad Q_- \rightarrow \hat{Q}_- = \frac{i}{\sqrt{2}} \left( \hat{Q}_1 + i\hat{Q}_2 \right)^T$$

donde  $T$  significa transposición matricial.

En esta forma la cuantización canónica provee las supercargas cuánticas que son operadores diferenciales matriciales  $4 \times 4$ :

$$\hat{Q} = \frac{i}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 & D_1 - \hbar\omega_1 & D_2 + \hbar\omega_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -D_2 \\ 0 & 0 & 0 & D_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Q}^\dagger = \frac{i}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \bar{D}_1 & 0 & 0 & 0 \\ \bar{D}_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\bar{D}_2 - \hbar\omega_2 & \bar{D}_1 + \hbar\omega_1 & 0 \end{pmatrix},$$

donde

$$D_\alpha = e_\alpha^\mu \left( \hbar \frac{\partial}{\partial q^\mu} + \frac{\partial W}{\partial q^\mu} \right), \quad \bar{D}_\alpha = e_\alpha^\mu \left( \hbar \frac{\partial}{\partial q^\mu} - \frac{\partial W}{\partial q^\mu} \right)$$

mientras que  $\omega_1$  y  $\omega_2$  denotan la contribución de “conexión de espín” a las supercargas.

Para métricas ortogonales, estas están dadas por:

$$\omega_1(q^1, q^2) = \frac{1}{2} (g_{11}\Gamma_{22}^1 - g_{22}\Gamma_{12}^2) g^{22} e_1^1, \quad \omega_2(q^1, q^2) = \frac{1}{2} (g_{11}\Gamma_{21}^1 - g_{22}\Gamma_{11}^2) g^{11} e_2^2.$$

---

<sup>4</sup> $[\hat{\psi}_k] = M^{-\frac{1}{2}}$

## B.5. Sistemas separables en mecánica cuántica supersimétrica

Estudiaremos aquí sistemas supersimétricos  $\mathcal{N} = 2$  con modelos de Liouville como sector bosónico. La propiedad clave que disfruta esta clase de sistemas es que estos son separables usando sistemas de coordenadas elípticos, polares, parabólicos o cartesianos bidimensionales. Así el espacio base para estos sistemas es la variedad Riemanniana  $\mathbb{M}^2$  equipada con la métrica inducida por el cambio a coordenadas elípticas, polares, y parabólicas bidimensionales, y la métrica euclídea para los cartesianos. Todas estas coordenadas son ortogonales, i.e.:  $g_{\mu\nu} = 0$ ,  $\forall \mu \neq \nu$ , por lo tanto existe una elección “natural” del zweibein

$$e_1^1 = \sqrt{g^{11}}, \quad e_2^1 = 0, \quad e_1^2 = 0, \quad e_2^2 = \sqrt{g^{22}} \quad (\text{B.8})$$

Obviamente en todos los casos  $R_{\mu\nu\tau\rho} = 0$ .

El Hamiltoniano SUSY  $\hat{H} = \frac{1}{2}\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\}$  es tal que en los sectores bosónicos actúa por medio de los operadores de Schrödinger escalares

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \left[ -\hbar^2 \Delta + \frac{\partial W}{\partial q^\mu} g^{\mu\mu} \frac{\partial W}{\partial q^\mu} + \hbar \Delta W \right], \quad \hat{H}_2 = \frac{1}{2m} \left[ -\hbar^2 \Delta + \frac{\partial W}{\partial q^\mu} g^{\mu\mu} \frac{\partial W}{\partial q^\mu} - \hbar \Delta W \right]$$

mientras que en el sector Fermiónico se reduce al operador matricial de Schrödinger  $2 \times 2$  con componentes diagonales

$$\begin{aligned} \hat{H}_1^{(11)} &= \frac{1}{2m} \left[ -\hbar^2 \Delta + \frac{\partial W}{\partial q^\mu} g^{\mu\mu} \frac{\partial W}{\partial q^\mu} + \hbar^2 \left( e_1^1 \frac{\partial \omega_1}{\partial q^1} - e_2^2 \frac{\partial \omega_2}{\partial q^2} \right) - \hbar \square W \right], \\ \hat{H}_1^{(22)} &= \frac{1}{2m} \left[ -\hbar^2 \Delta + \frac{\partial W}{\partial q^\mu} g^{\mu\mu} \frac{\partial W}{\partial q^\mu} + \hbar^2 \left( e_1^1 \frac{\partial \omega_1}{\partial q^1} - e_2^2 \frac{\partial \omega_2}{\partial q^2} \right) + \hbar \square W \right], \end{aligned}$$

y componentes antidiagonales

$$\begin{aligned} \hat{H}_1^{(12)} &= \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \left( e_1^1 \omega_2 - e_2^2 \frac{\partial e_1^1}{\partial q^2} \right) \frac{\partial}{\partial q^1} - \hbar^2 \left( e_2^2 \omega_1 + e_1^1 \frac{\partial e_2^2}{\partial q^1} \right) \frac{\partial}{\partial q^2} - \hbar^2 \left( e_2^2 \frac{\partial \omega_1}{\partial q^2} + e_1^1 \frac{\partial \omega_2}{\partial q^1} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \hbar \left[ \left( e_1^1 \omega_2 - e_2^2 \frac{\partial e_1^1}{\partial q^2} \right) \frac{\partial W}{\partial q^1} - \left( e_2^2 \omega_1 + e_1^1 \frac{\partial e_2^2}{\partial q^1} \right) \frac{\partial W}{\partial q^2} - e_1^1 e_2^2 \frac{\partial^2 W}{\partial q^1 \partial q^2} \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1^{(21)} &= \frac{1}{2m} \left\{ \hbar^2 \left( e_1^1 \omega_2 - e_2^2 \frac{\partial e_1^1}{\partial q^2} \right) \frac{\partial}{\partial q^1} + \hbar^2 \left( e_2^2 \omega_1 + e_1^1 \frac{\partial e_2^2}{\partial q^1} \right) \frac{\partial}{\partial q^2} + \hbar^2 \left( e_2^2 \frac{\partial \omega_1}{\partial q^2} + e_1^1 \frac{\partial \omega_2}{\partial q^1} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \hbar \left[ \left( e_1^1 \omega_2 - e_2^2 \frac{\partial e_1^1}{\partial q^2} \right) \frac{\partial W}{\partial q^1} - \left( e_2^2 \omega_1 + e_1^1 \frac{\partial e_2^2}{\partial q^1} \right) \frac{\partial W}{\partial q^2} - e_1^1 e_2^2 \frac{\partial^2 W}{\partial q^1 \partial q^2} \right] \right\}, \end{aligned}$$



donde

$$\begin{aligned}\Delta &= g^{11} \frac{\partial^2}{\partial(q^1)^2} + g^{22} \frac{\partial^2}{\partial(q^2)^2} + \left( e_1^1 \frac{\partial e_1^1}{\partial q^1} - e_1^1 \omega_1 \right) \frac{\partial}{\partial q^1} + \left( e_2^2 \frac{\partial e_2^2}{\partial q^2} + e_2^2 \omega_2 \right) \frac{\partial}{\partial q^2}, \\ \square &= g^{11} \frac{\partial^2}{\partial(q^1)^2} - g^{22} \frac{\partial^2}{\partial(q^2)^2} + \left( e_1^1 \frac{\partial e_1^1}{\partial q^1} + e_1^1 \omega_1 \right) \frac{\partial}{\partial q^1} - \left( e_2^2 \frac{\partial e_2^2}{\partial q^2} - e_2^2 \omega_2 \right) \frac{\partial}{\partial q^2}.\end{aligned}$$

Debido al carácter espinorial de los operadores de Fermi la relación entre las supercargas en coordenadas cartesianas y curvilíneas es complicada.

Existe una transformación de semejanza  $\mathcal{O} = S\mathcal{O}_C S^{-1}$  que conecta operadores en el sistema de coordenadas cartesianas  $\mathcal{O}$  con operadores en el sistema de coordenadas curvilíneo  $\mathcal{O}_C$ . La evaluación de esta matriz  $S$  es como sigue: Considere las supercargas en coordenadas cartesianas, ver ecuación (1.11). Cambie de coordenadas (preservando la orientación) de cartesianas a unas curvilíneas

$$x^1 = x^1(q^1, q^2) \quad , \quad x^2 = x^2(q^1, q^2) \quad ,$$

tales que

$$\frac{\partial}{\partial x^1} = \frac{\partial q^1}{\partial x^1} \frac{\partial}{\partial q^1} + \frac{\partial q^2}{\partial x^1} \frac{\partial}{\partial q^2} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial x^2} = \frac{\partial q^1}{\partial x^2} \frac{\partial}{\partial q^1} + \frac{\partial q^2}{\partial x^2} \frac{\partial}{\partial q^2} \quad .$$

La cuantización canónica de las supercargas clásicas lleva a las supercargas cuánticas (B.4). Entonces, definimos la matriz  $S$  tal que

$$\begin{aligned}\Psi(x^1, x^2) &= S\Psi_C(q^1, q^2) \quad , \\ \hat{Q}^\dagger(S\Psi_C) &= S(\hat{Q}_C^\dagger\Psi_C) \quad \Rightarrow \quad (S^{-1}\hat{Q}^\dagger S)\Psi_C = \hat{Q}_C^\dagger\Psi_C \quad , \quad \forall \Psi_C(q^1, q^2) \quad .\end{aligned}$$

La matriz  $S$  que satisface estos requerimientos es la matriz ortogonal

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial q^1}{\partial x^1} (e_1^1)^{-1} & \frac{\partial q^2}{\partial x^1} (e_2^2)^{-1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial q^1}{\partial x^2} (e_1^1)^{-1} & \frac{\partial q^2}{\partial x^2} (e_2^2)^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

actuando trivialmente en los sectores escalares -pero no así en los sectores fermiónicos- como: acting trivially in the scalar sectors but in the Fermi sectors:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial q^1}{\partial x^1} (e_1^1)^{-1} & \frac{\partial q^2}{\partial x^1} (e_2^2)^{-1} \\ \frac{\partial q^1}{\partial x^2} (e_1^1)^{-1} & \frac{\partial q^2}{\partial x^2} (e_2^2)^{-1} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial q^1}{\partial x^1} & \frac{\partial q^2}{\partial x^1} \\ \frac{\partial q^1}{\partial x^2} & \frac{\partial q^2}{\partial x^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (e_1^1)^{-1} & 0 \\ 0 & (e_2^2)^{-1} \end{pmatrix} \quad ,$$

con  $S^{-1} = S^T$ .

### B.5.1. Sistemas separables en coordenadas elípticas

La clasificación de Hamiltonianos cuánticos para los cuales la ecuación de Schrödinger es separable en coordenadas curvilíneas es bien conocida.

Las coordenadas elípticas en la versión de Euler son definidas por:

$$u = \frac{1}{2}(r_1 + r_2) \in (d, \infty) \quad , \quad v = \frac{1}{2}(r_2 - r_1) \in (-d, d) \quad , \quad (\text{B.9})$$

Las coordenadas cartesianas se obtienen mediante las relaciones

$$x_1 = \frac{uv}{d} \in (-\infty, \infty) \quad , \quad x_2 = \pm \frac{1}{d} \sqrt{(u^2 - d^2)(d^2 - v^2)} \in (-\infty, \infty) \quad , \quad (\text{B.10})$$

las cuales definen una transformación dos a uno del plano  $\mathbb{R}^2 \equiv (-\infty, \infty) \times (-\infty, \infty)$  a la franja bidimensional infinita  $\mathbb{E}^2 \equiv (-1, 1) \times (1, \infty)$ , excepto en el eje  $x_2$  donde es uno a uno desde  $\mathbb{R}^2$  a la frontera de  $\mathbb{E}^2$  definida por  $\partial\mathbb{E}^2 = \{(u = d, v), (u, v = \pm d)\}$ .

Si ahora definimos

$$u = d \cosh \xi \quad , \quad v = d \cos \eta \quad , \quad (\text{B.11})$$

$$\begin{cases} d < u < \infty \\ -d < v < d \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 0 < \xi < \infty \\ 0 \leq \eta < 2\pi \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

la versión trigonométrica de estas coordenadas en  $\mathbb{R}^2$  puede escribirse como

$$x_1 = d \cosh \xi \cos \eta \quad , \quad x_2 = d \sinh \xi \sin \eta \quad , \quad (\text{B.13})$$

$$q^1 \equiv \xi = \text{arc cosh} \left[ \frac{r_2 + r_1}{2d} \right] \quad , \quad (\text{B.14})$$

$$q^2 \equiv \eta = \begin{cases} 0 \leq \text{arc cos} \left[ \frac{r_2 - r_1}{2d} \right] \leq \frac{\pi}{2} \quad , & x_1 \geq 0 \quad , \quad x_2 \geq 0 \\ \frac{\pi}{2} < \text{arc cos} \left[ \frac{r_2 - r_1}{2d} \right] \leq \pi \quad , & x_1 < 0 \quad , \quad x_2 \geq 0 \\ \pi \leq 2\pi - \text{arc cos} \left[ \frac{r_2 - r_1}{2d} \right] < \frac{3\pi}{2} \quad , & x_1 < 0 \quad , \quad x_2 < 0 \\ \frac{3\pi}{2} \leq 2\pi - \text{arc cos} \left[ \frac{r_2 - r_1}{2d} \right] \leq 2\pi \quad , & x_1 \geq 0 \quad , \quad x_2 < 0 \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

El tensor métrico está dado por:

$$g(\xi, \eta) = \begin{pmatrix} g_{\xi\xi} = d^2 (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta) & g_{\xi\eta} = 0 \\ g_{\eta\xi} = 0 & g_{\eta\eta} = d^2 (\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta) \end{pmatrix} \quad ,$$

$$g^{-1}(\xi, \eta) = \begin{pmatrix} g^{\xi\xi} = \frac{1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} & g^{\xi\eta} = 0 \\ g^{\eta\xi} = 0 & g^{\eta\eta} = \frac{1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \end{pmatrix},$$

mientras que los símbolos de Christoffel son:

$$\Gamma_{\xi\xi}^{\xi} = -\Gamma_{\eta\eta}^{\xi} = \Gamma_{\xi\eta}^{\eta} = \Gamma_{\eta\xi}^{\eta} = \frac{\cosh \xi \sinh \xi}{\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta}, \quad \Gamma_{\xi\eta}^{\xi} = \Gamma_{\eta\xi}^{\xi} = -\Gamma_{\xi\xi}^{\eta} = \Gamma_{\eta\eta}^{\eta} = \frac{\cos \eta \sin \eta}{\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta}.$$

La elección “natural” del zweibein corresponde a:

$$g^{\xi\xi} = \sum_{j=1}^2 e_j^{\xi}(\xi, \eta) e_j^{\xi}(\xi, \eta), \quad g^{\eta\eta} = \sum_{j=1}^2 e_j^{\eta}(\xi, \eta) e_j^{\eta}(\xi, \eta),$$

$$e_1^{\xi} = \frac{1}{d\sqrt{\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta}}, \quad e_2^{\xi} = 0, \quad e_1^{\eta} = 0, \quad e_2^{\eta} = \frac{1}{d\sqrt{\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta}}. \quad (\text{B.16})$$

En estas coordenadas elípticas los operadores bosónicos toman la forma

$$\hat{p}_{\xi} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad \hat{\xi} = \xi, \quad \hat{p}_{\eta} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad \hat{\eta} = \eta,$$

y satisfacen las reglas de conmutación

$$[\hat{\xi}, \hat{p}_{\xi}] = [\hat{\eta}, \hat{p}_{\eta}] = i\hbar,$$

mientras que los operadores de Fermi son:

$$\hat{\psi}^{\xi} = e_1^{\xi} \hat{\psi}^1, \quad \hat{\psi}^{\xi\dagger} = e_1^{\xi} \hat{\psi}^{1\dagger}, \quad \hat{\psi}^{\eta} = e_2^{\eta} \hat{\psi}^2, \quad \hat{\psi}^{\eta\dagger} = e_2^{\eta} \hat{\psi}^{2\dagger},$$

y satisfacen las reglas de anticonmutación

$$\{\hat{\psi}^{\xi}, \hat{\psi}^{\xi\dagger}\} = \frac{1}{m} g^{\xi\xi}, \quad \{\hat{\psi}^{\eta}, \hat{\psi}^{\eta\dagger}\} = \frac{1}{m} g^{\eta\eta}.$$

Las supercargas están dadas por:

$$\hat{Q}_T = \frac{i}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 & D_{\xi} + \frac{\hbar \cosh \xi \sinh \xi}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} e_1^{\xi} & D_{\eta} + \frac{\hbar \cos \eta \sin \eta}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} e_2^{\eta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -D_{\eta} \\ 0 & 0 & 0 & D_{\xi} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.17})$$

$$\hat{Q}_T^{\dagger} = \frac{i}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \bar{D}_{\xi} & 0 & 0 & 0 \\ \bar{D}_{\eta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\bar{D}_{\eta} - \frac{\hbar \cos \eta \sin \eta}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} e_2^{\eta} & \bar{D}_{\xi} + \frac{\hbar \cosh \xi \sinh \xi}{(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} e_1^{\xi} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.18})$$

donde

$$D_\xi = e_1^\xi \left( \hbar \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial W}{\partial \xi} \right) \quad , \quad D_\eta = e_2^\eta \left( \hbar \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\partial W}{\partial \eta} \right) \quad , \quad (\text{B.19})$$

$$\bar{D}_\xi = e_1^\xi \left( \hbar \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial W}{\partial \xi} \right) \quad , \quad \bar{D}_\eta = e_2^\eta \left( \hbar \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{\partial W}{\partial \eta} \right) \quad , \quad (\text{B.20})$$

y  $W(\xi, \eta) : \mathbb{E}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $[W] = ML^2T^{-1}$ , es el superpotencial.

El Hamiltoniano supersimétrico en coordenadas elípticas  $\hat{H}_T = \frac{1}{2} \{ \hat{Q}_T, \hat{Q}_T^\dagger \}$  actúa en los sectores bosónicos por medio de los operadores de Schrödinger escalares

$$\hat{H}_{T0} = \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \Delta_T + \frac{1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left[ \left( \frac{\partial W}{\partial \xi} \right)^2 + \left( \frac{\partial W}{\partial \eta} \right)^2 \right] + \hbar \Delta_T W \right\} \quad , \quad (\text{B.21})$$

$$\hat{H}_{T2} = \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \Delta_T + \frac{1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left[ \left( \frac{\partial W}{\partial \xi} \right)^2 + \left( \frac{\partial W}{\partial \eta} \right)^2 \right] - \hbar \Delta_T W \right\} \quad , \quad (\text{B.22})$$

donde

$$\Delta_T = \frac{1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left( \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right) \quad . \quad (\text{B.23})$$

En el sector fermiónico el Hamiltoniano supersimétrico se reduce al operador de Schrödinger matricial  $2 \times 2$  con componentes diagonales

$$\begin{aligned} \hat{H}_T^{(11)} &= \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \Delta_T + \frac{1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left[ \left( \frac{\partial W}{\partial \xi} \right)^2 + \left( \frac{\partial W}{\partial \eta} \right)^2 \right] \right. \\ &\quad \left. + \hbar^2 \frac{\cosh^2 \xi + \cos^2 \eta - 1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} - \hbar \square_T W \right\} \quad , \quad (\text{B.24}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_T^{(22)} &= \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \Delta_T + \frac{1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left[ \left( \frac{\partial W}{\partial \xi} \right)^2 + \left( \frac{\partial W}{\partial \eta} \right)^2 \right] \right. \\ &\quad \left. + \hbar^2 \frac{\cosh^2 \xi + \cos^2 \eta - 1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} + \hbar \square_T W \right\} \quad , \quad (\text{B.25}) \end{aligned}$$

y componentes antidiagonales

$$\begin{aligned} \hat{H}_T^{(12)} &= \frac{\hbar^2}{m} \left[ \frac{2 \cosh \xi \sinh \xi}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{2 \cos \eta \sin \eta}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \\ &\quad + \frac{\hbar}{m} \left[ \frac{2 \cos \eta \sin \eta}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \frac{\partial W}{\partial \xi} + \frac{2 \cosh \xi \sinh \xi}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \frac{\partial W}{\partial \eta} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \frac{\partial^2 W}{\partial \xi \partial \eta} \right] \quad , \quad (\text{B.26}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_T^{(21)} = & -\frac{\hbar^2}{m} \left[ \frac{2 \cosh \xi \sinh \xi}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{2 \cos \eta \sin \eta}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \\
& + \frac{\hbar}{m} \left[ \frac{2 \cos \eta \sin \eta}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \frac{\partial W}{\partial \xi} + \frac{2 \cosh \xi \sinh \xi}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \frac{\partial W}{\partial \eta} \right. \\
& \left. - \frac{1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \frac{\partial^2 W}{\partial \xi \partial \eta} \right], \tag{B.27}
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
\Box_T = & \frac{1}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \left( \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right) + \frac{2 \cos \eta \sin \eta}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \\
& - \frac{2 \cosh \xi \sinh \xi}{d^2(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)^2} \frac{\partial}{\partial \xi}.
\end{aligned}$$

Ahora bien, dado que las coordenadas elípticas trigonométricas preservan la orientación, la relación entre los operadores matriciales y los espinores en coordenadas cartesianas y elípticas trigonométricas esta dada por:

$$\mathcal{O} = S \mathcal{O}_T S^{-1}, \quad \Psi(x_1, x_2) = S \Psi_T(\xi, \eta),$$

donde  $S$  es la matriz ortogonal

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sinh \xi \cos \eta}{\sqrt{\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta}} & -\frac{\cosh \xi \sin \eta}{\sqrt{\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta}} & 0 \\ 0 & \frac{\cosh \xi \sin \eta}{\sqrt{\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta}} & \frac{\sinh \xi \cos \eta}{\sqrt{\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

con  $S^{-1} = S^T$ .

Aqui se ha usado

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sinh \xi \cos \eta}{d(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} & -\frac{\cosh \xi \sin \eta}{d(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \\ \frac{\cosh \xi \sin \eta}{d(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} & \frac{\sinh \xi \cos \eta}{d(\cosh^2 \xi - \cos^2 \eta)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{pmatrix}$$

y las ecuaciones (B.16).

# Bibliografía

- [1] R. de L. Kronig, W. G. Penney, *Quantum mechanics of electrons in crystal lattices*, Proc. Roy. Soc. **A130** (1930) 499-513.
- [2] A. G. Ushveridze, *Analytic properties of energy levels in models with delta-function potentials*, J. Phys. A: Math. Gen. **21** (1988) 955-970.
- [3] E. Lieb, W. Liniger, *Exact analysis of an interacting Bose gas I: The general solution and the ground state*, Phys. Rev. **130** No. 4 (1963) 1605-1616.
- [4] C. N. Yang, *Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction*, Phys. Rev. Lett. **19** No. 23 (1967) 1312-1314.
- [5] W. Pauli, *Über das modell des wasserstoffmolekülions*, Ann. Phys. **68** (1922) 177-240.
- [6] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, y H. Holder, *Solvable models in quantum mechanics*, Springer Verlag, Berlin, 1988.
- [7] P. Kurasov, *Distribution theory for discontinuous test functions and differential operators with generalized coefficients*, J. Math. Anal. App. **201**, No. 1 (1996) 297-323.
- [8] A. Galindo, P. Pascual, *Mecánica Cuántica*, Eudema, Madrid, 1989.
- [9] J. M. Cerveró, A. Rodríguez, *Infinite chain of N different deltas: a simple model for a quantum wire*, Eur. Phys. Jour. **B30** (2002) 239-251.
- [10] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*, Dover, New York, 2007.
- [11] P. Tempesta, P. Winternitz, J. Harnad, W. Miller, C. Pogosyan, M. A. Rodriguez, *Superintegrability in classical and quantum systems*, CRM Proceedings, Lecture Notes AMS **37** 2004.
- [12] A. Gonzalez Lopez, N. Kamran, P. Olver, *Normalizability of one-dimensional quasi-exactly solvable Schrödinger operators*, Comm. Math. Phys. **153** (1993) 117-146.

- [13] A. Wipf, *Nonperturbative methods in supersymmetric theories*, [arXiv:hep-th/0504180].
- [14] P. G. O. Freund, *Introduction to supersymmetry*, Cambridge University Press, Cambridge, U. K., 1986.
- [15] L. J. Boya, *Supersymmetric quantum mechanics: two simple examples*, Eur. J. Phys. **9** (1988) 139-144.
- [16] L. J. Boya, *Quantum-mechanical scattering in one dimension*, Riv. Nuovo Cimento, **31** (2008) 75-139.
- [17] F. Marques, O. Negrini, A. J. da Silva, *A new simple class of superpotentials in SUSY quantum mechanics*, Jour. Phys. **A45** (2012) 115307.
- [18] E. Witten, *Dynamical breaking of supersymmetry*, Nucl. Phys. **B185** (1981) 513-554.
- [19] E. Witten, *Constraints on supersymmetry breaking*, Nucl. Phys. **B202** (1982) 253-316.
- [20] N. Manton, R. Heumann, *Classical supersymmetric mechanics*, Ann. Phys. **284** (2000) 52-88.
- [21] R. Heumann, *The classical supersymmetric Coulomb problem*, Jour. Phys. **A35** (2002) 7437-7460.
- [22] A. A. Andrianov, N. V. Borisov, M. V. Ioffe, M. I. Eides, *Supersymmetric mechanics: A new look at the equivalence of quantum systems*, Teoret. Mat. Fiz. **61**, No. 1 (1984) 17-28, English version: Theor. Math. Phys. **61**:1 (1984) 965-972.
- [23] A. Kirchberg, J.D. Länge, P. A. G. Pisani, A. Wipf, *Algebraic solution of the supersymmetric hydrogen atom in  $d$  dimensions*, Ann. Phys. **303** (2003) 359-388.
- [24] M. A. Gonzalez Leon, J. Mateos Guilarte, M. de la Torre Mayado, *Two-dimensional supersymmetric quantum mechanics: two fixed centers of force*, Symmetry, Integrability and Geometry: Methods and Applications SIGMA **3** (2007) 124-145.
- [25] M. A. González León, J. Mateos Guilarte, M. J. Senosiaín, M. de la Torre Mayado, *On the supersymmetric spectra of two planar integrable quantum systems*, Contemporary Mathematics, **563** (2012) 73-113.
- [26] H. B. G. Casimir, *On the attraction between two perfectly conducting plates*, Indagat. Math. **10** (1948) 261-263.

- [27] M. Bordag, G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen, V. M. Mostepanenko, *Advances in the Casimir effect*, Oxford University Press, New York, 2009.
- [28] J. M. Muñoz Castañeda, J. Mateos Guilarte, A. Moreno Mosquera, *Quantum vacuum energies and Casimir forces between partially transparent  $\delta$ -function plates*, Phys. Rev. **D87** (2013) 105020.
- [29] O. Kenneth, I. Klich, *Casimir forces in a  $\mathbf{T}$  operator approach*, Phys. Rev. **B78** (2008) 014103.
- [30] S. Mandelstam, *Soliton operators for the quantized sine-Gordon equation*, Phys. Rev., **D11** (1975) 3026-3030.
- [31] D. V. Vassilevich, *Heat kernel expansion: user's manual*, Phys. Rep. **C388** (2003) 279-360.
- [32] L. D. Faddeev, O. A. Yakubovskii, *Lectures on quantum mechanics for mathematics students*, American Mathematical Society, Providence RI, 2008.
- [33] L. A. Takhtajan, *Quantum mechanics for mathematicians*, American Mathematical Society, Providence RI, 2008.
- [34] S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge UK, 2013
- [35] M. Weissbluth, *Atoms and molecules*, Academic Press, New York, 1978.
- [36] A. Perelomov, *Integrable systems of classical mechanics and Lie algebras*, Birkhäuser, Boston, 1992.
- [37] D. Ó Mathúna, *Integrable systems in celestial mechanics*, Birkhäuser, Boston, 2008.
- [38] F. Cooper, B. Freedman, *Aspects of supersymmetric quantum mechanics*, Ann. Phys. **146**, (1983) 262-288.
- [39] B. Freedman, F. Cooper, *A review of supersymmetric quantum mechanics*, Physica **15D** (1985) 138-146.
- [40] F. Cooper, A. Khare, U. Sukhatme, *Supersymmetry and quantum mechanics*, Phys. Rep. **251** (1995) 267-385.
- [41] B. K. Bagchi, *Supersymmetry in quantum and classical mechanics*, Chapman&Hall/CRC, Boca Raton, Florida 33431, 2001.



- [42] F. Cooper, A. Khare, U. Sukhatme, *Supersymmetry in quantum mechanics*, World Scientific Publishing Co. Re. Ltd. Singapore, 2001.
- [43] H. W. Braden, A. J. Macfarlane, *Supersymmetric quantum mechanical models with continuous spectrum and the Witten index*, J. Phys. A: Math. Gen. **18** (1985) 3151-3156.
- [44] G. Dunne, J. Feinberg, *Self-isospectral periodic potentials and supersymmetric quantum mechanics*, Phys. Rev. **D57** (1998) 1271-1276.
- [45] G. Dunne, J. Mannix, *Supersymmetry breaking with periodic potentials*, Phys. Lett. **B428** (1998) 115-119.
- [46] A. Khare, U. Sukhatme, *Periodic potentials and supersymmetry*, J. Phys. A: Math. Gen. **37** (2004) 10037-10055.
- [47] A. A. Andrianov, N. V. Borisov, M. I. Eides, M. V. Ioffe, *Supersymmetric origin of equivalent quantum systems*, Phys. Lett. **A109** (1985) 143-148.
- [48] A. A. Andrianov, N. V. Borisov, M. V. Ioffe, *Factorization method and Darboux transformation for multidimensional Hamiltonians*, Teoret. Mat. Fiz. **61**, No. 2 (1984) 183-198, English version: Theor. Math. Phys. **61**:2 (1984) 1078-1088.
- [49] A. A. Andrianov, N. V. Borisov, M. V. Ioffe, *The factorization method and quantum systems with equivalent energy spectra. Supersymmetric equivalent quantum systems*, Phys. Lett. **A105** (1984) 19-22.
- [50] A. A. Andrianov, M. V. Ioffe, *Non-linear supersymmetric quantum mechanics: concepts and realizations.*, J. Phys. **A45**(2012) 503001
- [51] A. A. Izquierdo, M. A. Gonzalez Leon, M. de la Torre Mayado, J. Mateos Guilarte, *On two-dimensional superpotentials: from classical Hamilton-Jacobi theory to 2D supersymmetric quantum mechanics*, J. Phys. A: Math. Gen. **37** (2004) 10323-10338.
- [52] A. Wipf, A. Kirchberg, J. D. Lange, *Algebraic solution of the supersymmetric hydrogen atom* in Proceedings of the 4th International Symposium “Quantum Theory and Symmetries” (QTS-4) (August 15-21, 2005, Varna, Bulgaria), Ed. V. K. Dobrev, Bulg. J. Phys. **33** (2006) 206-216.
- [53] M. Abramowitz, I. Stegun, Ed. by, *Handbook of mathematical functions*, Ninth Printing, Dover Publications, Inc., New York, (1970).

- [54] M. Takahashi, *Thermodynamics of one-dimensional solvable models*, Cambridge University Press, Cambridge, (1999).
- [55] L. Šamaj, *Introduction to integrable many-body systems I*, Acta Physica Slovaca **58** No. 6 (2008) 811-946.
- [56] J. B. McGuire, *Study of exactly soluble one-dimensional N-body problems*, J. Math. Phys. **5** No. 5 (1964) 622-636.
- [57] F. Calogero, *Solution of a three-body problem in one dimension*, J. Math. Phys. **10**(1969) 2191-2196
- [58] F. Calogero, *Ground state of a N-body problem in one dimension*, J. Math. Phys. **10**(1969) 2197-2200
- [59] M. Hallnäs, *Quantum many-body systems exactly solved by special functions*, Scientific thesis for the degree of Doctor of Philosophy (PhD) in the subject area of Theoretical Physics, Royal Institute of Technology (KTH) Albanova University Center SE-106 91, Stockholm, Sweden (2007).
- [60] M. Jimbo, ed. by, *Yang-Baxter equations in integrable systems*, Advanced series in mathematical physics, v. 10, World Scientific.
- [61] L. Brink, A. Turbiner, N. Wyllard, *Hidden algebras of the (super) Calogero and Sutherland models*, J. Math. Phys. **39**(1998) 1285-1315.
- [62] I.F. Silvera, J.T.M. Walraven, *Stabilization of atomic hydrogen at low temperature*, Phys. Rev. Lett. **44** (1980) 164-168.
- [63] F. Finkel, A. Gonzalez-Lopez, M. A. Rodriguez, *On the families of orthogonal polynomials associated to the Razavy potential*, J. Phy. A: Math. Gen. **32** (1999) 6821-6835.
- [64] F. Finkel, *Hamiltonianos cuasi-exactamente solubles y superalgebras de Lie de operadores diferenciales*, Ph. D. Thesis, Universidad Complutense de Madrid, (1997).
- [65] Y. N. Demkov, *Elementary solutions of the quantum problem of the motion of a particle in the field of two Coulomb centers*, ZhETF Pis'ma **7** (1968) 101-104.
- [66] Stella M. Sung and Dudley R. Herschbach, *Hidden symmetry and explicit spheroidal eigenfunctions of the hydrogen atom*, J.Chem.Phys.**95**(10),(1991) 7437-7448.

- [67] D. I. Abramov, I.V. Komarov, *Integral equations and relations for Coulomb spheroidal functions*, Theor. Math. Phys. **29** (1976) 235-243.
- [68] H. Hochstadt, *The functions of mathematical physics*, Wiley Interscience, New York, 1971.
- [69] F. Finkel, A. Gonzalez-Lopez, M. A. Rodriguez, *Periodic quasi-exactly solvable potentials*, Publicaciones de la RSME, **2** (2001) 77-92.
- [70] E. T. Whittaker, G. N. Watson, *A course of modern analysis*, Cambridge University Press, Sixth printing, (2006).
- [71] M. Gadella, J. Negro, L.M. Nieto, G. Pronko, *Two-charged particles in the plane under a constant perpendicular magnetic field*, Int. Jour. Theor. Phys. **50** (2011) 2019-2028
- [72] G. Plunien, B. Muller, W. Greiner, *The Casimir effect*, Phys. Rep. **134** (1986) 87-193.
- [73] A. A. Actor, *Casimir effect for soft boundaries*, Phys. Rev. **D52** No.6 (1995) 3581-3590.
- [74] M. Bordag, K. Kirsten, D. Vassilevich, *On the ground state energy for a penetrable sphere and for a dielectric ball*, Phys. Rev. **D59**:085011 (1999).
- [75] P. Parashar, K. A. Milton, K. V. Shajesh and M. Schaden, *Electromagnetic semitransparent  $\delta$ -function plate: Casimir interaction energy between parallel infinitesimally thin plates* Phys. Rev. **D86**:085021 (2012).
- [76] K. A. Milton, *Recent developments in quantum vacuum energy for confined fields*, Int. J. Mod. Phys. **A20** (2005) 4628-4637.
- [77] K. A. Milton, *The Casimir effect: Recent controversies and progress*, J. Phys. **A37**:R209 (2004).
- [78] M. Bordag, D. Hennig, D. Robaschik, *Vacuum energy in quantum field theory with external potentials concentrated on planes*, J. Phys. **A25** (1992) 4483-4498.
- [79] O. Kenneth, I. Klich, *Opposites attract: A theorem about the Casimir force*, Phys. Rev. Lett. **97** 160401 (2006).
- [80] M. Bordag, J. M. Muñoz-Castañeda, *Quantum vacuum interaction between two sine-Gordon kinks*, J. Phys. **A45** 374012 (2012).
- [81] G. Barton, *Levinson's theorem in one-dimension: Heuristics*, J. Phys. **A18** (1985) 479-494.

- [82] R. F. Dashen, B. Hasslacher, A. Neveu, *The particle spectrum in model field theories from semiclassical functional integral techniques*, Phys. Rev. **D11** (1975) 3424-3450.
- [83] R. Rajaraman, *Solitons and Instantons: An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory*, North-Holland Personal Library, North-Holland, 1987.
- [84] M. Bordag, *On the interaction of a charge with a thin plasma sheet*, Phys. Rev. **D76**:065011 (2007).
- [85] J. Mateos Guilarte, J. M. Muñoz-Castañeda, *Double-delta potentials: one dimensional scattering. The Casimir effect and kink fluctuations*, Int. J. Theor. Phys. **50** (2011) 2227-2241.
- [86] C. D. Fosco, E. L. Losada, *Functional approach to the fermionic Casimir effect*, Phys. Rev. **D78**:025017 (2008).
- [87] W. Heisenberg, H. Euler, *Consequences of Dirac's theory of positrons*, Z. Phys. **98** (1936) 714-732.
- [88] J. S. Schwinger, *On gauge invariance and vacuum polarization*, Phys. Rev. **82** (1951) 664-679.
- [89] G. V. Dunne, *New Strong-Field QED Effects at ELI: Nonperturbative Vacuum Pair Production*, Eur. Phys. J. **D55** (2009) 327-340.
- [90] D. J. Toms, *Renormalization and vacuum energy for an interacting scalar field in a  $\delta$ -function potential*, J. Phys. **A45** 374026 (2012).
- [91] M. Bordag, D.V. Vassilevich, *Non-smooth backgrounds in quantum field theory*, Phys. Rev. **D70** 045003 (2004).