

Pozos de potencial poco profundos para la ecuación discreta de Schrödinger

Rubén D. Ortiz

Universidad de Cartagena

Joel A. Rodríguez-Ceballos

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Peter N. Zhevandrov

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Recibido Mar. 22, 2007

Aceptado May. 3, 2007

Abstract

We obtain the asymptotics of a small negative eigenvalue for the discrete Schrödinger equation in the presence of a shallow potential well.

Keywords: Schrödinger equation, asymptotics, eigenfunctions.

MSC(2000): Primary: 81Q15, Secondary: 39A11.

Resumen

Obtenemos las asintóticas de un valor propio negativo y pequeño para la ecuación de Schrödinger en la presencia de un pozo de potencial poco profundo.

Palabras y frases claves: Ecuación de Schrödinger, asintóticas, funciones propias.

1 Introducción

Es bien conocido que la ecuación de Schrödinger

$$(-\Delta + U)\Psi = E\Psi \quad (1)$$

en el caso cuando U describe un pozo de potencial poco profundo (i.e., $U = \varepsilon V(x)$, $V(x) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, y $\varepsilon \rightarrow 0$) tiene exactamente un valor propio $E_0 = -\beta^2$, $\beta \in \mathbb{R}$ bajo el espectro esencial $[0, \infty)$ en el caso cuando $\int_{\mathbb{R}^n} V(x) dx \leq 0$ y la dimensión n del espacio de configuración es 1 o 2. Esto fue determinado para $n = 1$ y en el caso radialmente simétrico para $n = 2$ ya en el famoso libro de Landau y Lifshitz [4] y después fue demostrado en el caso general en dimensión 2 por Simon [6]. Resultados cercanos al comportamiento límite de la resolvente pueden ser encontrados en [1], [3]. En [7] un método diferente fue usado para obtener las asintóticas de las funciones propias (que no aparecen del todo en la aproximación de Simon). Esta es basada en una construcción explícita de funciones propias aproximadas. Sucede que esta construcción es completamente elemental cuando uno pasa a la representación de momentos. Además este método es igualmente eficiente para la ecuación de Schrödinger y el problema de ondas de agua atrapadas por una sierra submarina, que, como es conocido en el folklore, es análogo a la ecuación de Schrödinger con un pozo de potencial poco profundo. Nuestra

meta aquí es aplicar este método a la ecuación discreta de Schrödinger. Las condiciones heurísticas que presentamos abajo muestran que el éxito del método está determinado no por la escogencia del Hamiltoniano $H(x, -i\partial/\partial x)$, sino más bien por el comportamiento de $H(x, p)$ para p pequeño. Dado que el Hamiltoniano de la ecuación discreta de Schrödinger es $4\sin^2(p/2) + U(x)$, y que el de la continua es $p^2 + U(x)$, su comportamiento para p pequeño es idéntico. La formulación matemática del problema bajo consideración es como sigue. Buscamos soluciones no triviales $\psi = \{\psi_j\}, j \in \mathbb{Z}, \psi \in l_2$, del problema

$$-(\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}) + \varepsilon V_j \psi_j = E \psi_j, \quad (2)$$

donde $\varepsilon \rightarrow 0$ y $V = \{V_j\}$ es tal que $\sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j \leq 0$ y, por sencillez, V tiene soporte compacto, i.e., $V_j = 0$ para $|j| > R$ con R suficientemente grande. Dado que el operador de multiplicación por una sucesión finita es compacto en l_2 , el espectro continuo de (2) coincide con ese de la ecuación libre ($V_j \equiv 0$) y el del último es el segmento $[0, 4]$. Demostraremos el siguiente teorema.

Teorema 1.1. 1) Si $\sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j < 0$. Entonces el problema (2) tiene un valor propio negativo

$$E = -\varepsilon^2 \beta_0^2 + O(\varepsilon^3), \quad \text{donde} \quad \beta_0 = -\frac{1}{2} \sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j. \quad (3)$$

El vector propio correspondiente a este valor propio es dado por

$$\psi_j = -\frac{\beta^{3/2}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ipj} \frac{A(p)}{4\sin^2 \frac{p}{2} + \beta^2} dp, \quad (4)$$

donde

$$\begin{aligned} A(p) &= a_0(p) + \varepsilon a_1(p) + \varepsilon^2 a_2(p) + \dots, \quad \beta = \varepsilon(\beta_0 + \varepsilon \beta_1 + \varepsilon^2 \beta_2 + \dots), \\ a_0(p) &= \frac{\chi_{(-\pi; \pi)}(p)}{\sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j} \sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j e^{-ipj}, \end{aligned} \quad (5)$$

$\chi_{(-\pi; \pi)}$ es la función característica de $(-\pi, \pi)$; $\tilde{V}(p) = (KotV)(p)$ (dada por una fórmula análoga a (8)), y el resto de valores $\beta_1, \beta_2, \dots$ y las funciones $a_1, a_2, \dots$ son determinadas de un sistema recurrente de ecuaciones.

2) Si $\sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j = 0$. Entonces el problema (2) tiene un valor propio negativo

$$E = -\varepsilon^4 \beta_0^2 + O(\varepsilon^5), \quad \beta_0 = -\frac{1}{16\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{j,k=-\infty}^{\infty} \frac{V_j V_k e^{-it(j-k)}}{\sin^2(p/2)} dp. \quad (6)$$

El vector propio correspondiente a este valor propio es dado por (4) donde

$$\beta = \varepsilon^2(\beta_0 + \varepsilon\beta_1 + \varepsilon^2\beta_2 + \dots), a_0(p) = \frac{1}{2}\chi_{(-\pi;\pi)}(p) \sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j e^{-ipj}, \quad (7)$$

y los valores restantes $\beta_1, \beta_2, \dots$ y las funciones $a_1(p), a_2(p), \dots$ son determinados de un sistema recurrente de ecuaciones.

Observe que el integrando en (6) no tiene ninguna singularidad en $t = 0$ dado que la expresión $\sum V_j V_k \exp(-it(j-k))$ tiene un cero de orden 2 en el origen por la condición $\sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j = 0$. Nos gustaría observar que en el caso $\sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j \leq 0$ ahí aparece un valor propio a la derecha del espectro continuo.

2 Consideraciones heurísticas

Como en [7], las fórmulas que aparecen en el Teorema 1 están basadas en el siguiente razonamiento heurístico. Para un negativo pequeño E , $E = -\beta^2$, digamos, la solución de (2) para $|j| > R$ es dada por (salvo términos de orden $O(\beta^2)$) $\psi_j \sim (1 \pm \beta)^j, j > 0$. Interpolando esta sucesión, obtenemos (para β pequeño) una función que es “casi constante”, cuando $\beta \rightarrow 0$. Interpolemos el problema (2) a todo el eje. Usemos las fórmulas de interpolación de Kotelnikov:

$$\Psi(x) = (Kot\psi)(x) \doteq \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j \frac{\sin \pi(x-j)}{\pi(x-j)}$$

y análogamente para $V(x)$. Observe que $\Psi(x) \in L_2(-\infty, \infty)$ si $\psi \in l_2$ y

$$(\widetilde{Kot\psi})(p) = \frac{\chi_{(-\pi,\pi)}(p)}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j e^{-ipj}. \quad (8)$$

Así (2) se lee como

$$-(\Psi(x+1) - 2\Psi(x) + \Psi(x-1)) + \varepsilon V(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (9)$$

Pasando a la transformada de Fourier $\tilde{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ipx} \Psi(x) dx$ obtenemos

$$\tilde{\Psi}(p)(4 \sin^2 \frac{p}{2} + \beta^2) = \frac{-\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}(p-p') \tilde{\Psi}(p') dp', \quad (10)$$

aquí la integración es de $-\pi$ a π porque el soporte de la transformada de Fourier de $\frac{\sin \pi(x-j)}{\pi(x-j)}$ pertenece a este intervalo. Dado que Ψ es “casi constante”, su transformada de Fourier es una sucesión de tipo δ cuando $\beta \rightarrow 0$. Por lo tanto, $\tilde{\Psi}(p) \sim \tilde{V}(p)/(4 \sin^2 \frac{p}{2} + \beta^2)$. Así es natural buscar la transformada de Fourier de Ψ en la forma

$$\tilde{\Psi}(p) = \beta^{3/2} \frac{a_0(p) + \varepsilon a_1(p) + \varepsilon^2 a_2(p) + \dots}{4 \sin^2 \frac{p}{2} + \beta^2}, \quad \beta = \beta_0 + \varepsilon\beta_1 + \varepsilon^2\beta_2 + \dots \quad (11)$$

3 Esquema de la demostración

Damos aquí una demostración del primer punto del teorema 1; la idea de la demostración de la segunda es similar. De acuerdo al esquema descrito arriba, buscamos la solución aproximada de la ecuación (10) en la forma

$$\tilde{\Psi}_n(p) = \varepsilon B_n c(\varepsilon) \frac{A_n(p)}{4 \sin^2 \frac{p}{2} + \varepsilon^2 B_n^2}, \quad A_n(p) = a_0 + \cdots + \varepsilon^n a_n(p), \quad (12)$$

donde $c(\varepsilon)$ es una constante de normalización. Suponemos que $a_0(p) \neq 0$ y

$$B_n = \beta_0 + \varepsilon \beta_1 + \cdots + \varepsilon^n \beta_n, \quad (13)$$

El nivel de energía aproximado es $E_n = -\varepsilon^2 B_n^2$. Buscamos la solución que satisface las condiciones de normalización

$$a_0(0) = 1, \quad a_k(0) = 0, \quad k = 2, \dots, n. \quad (14)$$

Nuestra meta es construir los valores de $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$ y las funciones $a_0(p), \dots, a_n(p)$ tales que $\tilde{\Psi}_n(p)$ satisface la ecuación (10) hasta $O(\varepsilon^{n+1})$ donde $\|O(\varepsilon^{n+1})\|_{L_2} \leq C\varepsilon^{n+1}$. Sustituyendo (12) en (10), obtenemos una ecuación equivalente

$$A_n(p) = -\frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\tilde{V}(p-p') A_n(p') dp'}{4 \sin^2 \frac{p'}{2} + \varepsilon^2 B_n^2}. \quad (15)$$

Necesitaremos un lema auxiliar en expansiones asintóticas de las integrales de la forma

$$\int_{[-\pi, \pi]} \frac{\phi(t)}{4 \sin^2 \frac{t}{2} + \mu^2} dt \quad (16)$$

cuando $\mu \rightarrow 0$, donde $\phi(t)$ es una función analítica en t para $|t| \leq \pi$. Hay varios métodos para calcular tales asintóticas (ver [2]); en nuestro caso el método basado en el cálculo de los residuos es más conveniente. Se introduce el contorno en el plano complejo $\mathbb{C}$

$$\gamma_1 := (-\pi, -1] \cup \{x + iy : x^2 + y^2 = 1, |x| \leq 1, y > 0\} \cup [1, \pi).$$

Lema 3.1. *Sea $\phi(t)$ una función analítica en t para $|t| \leq \pi$. Entonces cuando $\mu \rightarrow +0$*

$$\begin{aligned} \mu(1 + \mu^2/4)^{1/2} \int_{[-\pi, \pi]} \frac{\phi(t) dt}{4 \sin^2 \frac{t}{2} + \mu^2} &= \pi \phi(0) + \\ \left(\pi \phi'(0) i + \frac{1}{4} \int_{\gamma_1} \frac{\phi(t) dt}{\sin^2 \frac{t}{2}} \right) \mu - \frac{\pi \phi''}{2} \mu^2 + O(\mu^3). \end{aligned} \quad (17)$$

No damos la demostración de este lema. Continuamos la demostración del Teorema 1. Sustituyendo en el Lema 3 $\mu = \varepsilon B_n$, $\phi(t) = \tilde{V}(p-t)A_n(t)$ y calculando los coeficientes de $\varepsilon^0, \varepsilon^1, \varepsilon^2, \dots$, obtenemos la expansión de la integral en el lado derecho de la ecuación (15):

$$\begin{aligned} & \varepsilon B_n (1 + \varepsilon^2 B_n^2 / 4)^{1/2} \int_{[-\pi, \pi]} \frac{\tilde{V}(p-t)A_n(t) dt}{4 \sin^2 \frac{t}{2} + \varepsilon^2 B_n^2} = \pi a_0(0) \tilde{V}(p) \\ & - \varepsilon \pi \left\{ \beta_0 \left[i a_0(0) \tilde{V}'(p) - i a_0'(0) \tilde{V}(p) - \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{1}{4\pi} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t)}{\sin^2 \frac{t}{2}} a_0(t) dt \right] - a_1(0) \tilde{V}(p) \right\} + \dots \end{aligned}$$

Multiplicando la expresión obtenida por $-\varepsilon/\sqrt{2\pi}$ e igualando en (15) los coeficientes de ε^k , $k = 1, \dots$, a cero, obtenemos el sistema para β_k, a_k , $k = 0, 1, \dots$:

$$\beta_0 a_0(p) = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} a_0(0) \tilde{V}(p), \quad (18)$$

$$\begin{aligned} & \beta_0 a_1(p) + \beta_1 a_0(p) \\ & = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left\{ \beta_0 \left[i a_0(0) \tilde{V}'(p) - i a_0'(0) \tilde{V}(p) - \frac{1}{4\pi} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(p-t)}{\sin^2 \frac{t}{2}} a_0(t) dt \right] \right. \\ & \quad \left. - a_1(0) \tilde{V}(p) \right\} + \dots \end{aligned} \quad (19)$$

Obtengamos los primeros valores de $\beta_0, \beta_1, \dots, a_0(p), a_1(p), \dots$. Tomando $p = 0$ en (18) y tomando en cuenta que $a_0(0) = 1$, obtenemos $\beta_0 = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \tilde{V}(0)$. Por la condición $a_0(0) = 1$, obtenemos de (19) $a_0(p) = \frac{\tilde{V}(p)}{\tilde{V}(0)}$. Tomando $p = 0$ en (19). Por la formula $a_0(p)$ y la condición $a_1(0) = 0$, obtenemos

$$\beta_1 = \frac{1}{8} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(t) \tilde{V}(-t)}{\sin^2 \frac{t}{2}} dt. \quad (20)$$

Ahora encontramos $a_1(p)$ de (19). Sustituyendo las fórmulas a_0, β_0 y β_1 en (19) y tomando en cuenta el hecho que $a_0(0) = 1$, obtenemos

$$\begin{aligned} a_1(p) &= \frac{i}{\tilde{V}(0)} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[\tilde{V}'(p) \tilde{V}(0) - \tilde{V}'(0) \tilde{V}(p) \right] \\ & - \frac{1}{4\sqrt{2\pi} \tilde{V}(0)} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(t) \tilde{V}(p-t)}{\sin^2 \frac{t}{2}} dt \\ & + \frac{\tilde{V}(p)}{4\sqrt{2\pi} \tilde{V}(0)^2} \int_{\gamma_1} \frac{\tilde{V}(t) \tilde{V}(-t)}{\sin^2 \frac{t}{2}} dt. \end{aligned} \quad (21)$$

Vemos que en efecto $a_1(0) = 0$. Procediendo análogamente, obtenemos β_n y a_n suponiendo que $\beta_0, \beta_1, \dots, a_0, a_1, \dots$ son conocidos y $a_k(0) = 0, k = 2, \dots$, y buscamos $a_n(p)$ tal que $a_n(0) = 0$. Por un lema bien conocido (ver, por ejemplo Lema 1.3 de [5]), el par propio aproximado que hemos construido esta cerca al exacto, y esto finaliza la demostración.

Agradecimientos Los autores expresan su gratitud a CONACYT, SEE-Michoacán, CIC-UMSNH y CICTE-UC por su apoyo financiero.

Referencias

- [1] Albeverio, S., Gesztesy, F., Høegh-Krohn, R., and Holden, H.: Solvable Models in Quantum Mechanics, Springer, New York, 1988.
- [2] Fedoryuk, M.V.: Asymptotics: Integrals and Series, Nauka, Moscow, 1987.
- [3] Gadyl'shin, R.: Local perturbations of the Schrödinger operator on the axis, Theor. Math. Phys., 132 (2002), pp. 976–982.
- [4] Landau, L.D., and Lifschitz, E.M.: Quantum Mechanics, Pergamon, London, 1958.
- [5] Maslov, V.P.: Asymptotic Methods and Theory of Perturbations, Nauka, Moscow, 1988.
- [6] Simon, B.: The bound state of weakly coupled Schrödinger operators in one and two-dimensions, Ann. Phys. (NY), 97 (1976), pp. 279–288.
- [7] Zhevandrov, P., and Merzon, A.: Asymptotics of eigenfunctions in shallow potential wells and related problems, Amer. Math. Soc. Translations (2) 208 (2003), pp. 235–284.

Dirección de los autores

Rubén D. Ortiz — Universidad de Cartagena, Instituto de Matemáticas Aplicadas, Piedra de Bolívar Cartagena de Indias, Bolívar, Colombia
e-mail: rortizo@unicartagena.edu.co

Joel A. Rodríguez-Ceballos — Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Instituto de Física y Matemáticas, Ciudad Universitaria Morelia, Mich., C.P. 58060, México
e-mail: joel@ifm.umich.mx

Peter N. Zhevandrov — Universidad Michoacana, Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Edificio B, Ciudad Universitaria, 58060 Morelia, Michoacán, México. Facultad de Ingeniería, Universidad de la Sabana, Campus Puente del Común, km. 21 Autopista Norte, Chía, Cundinamarca, Colombia
e-mail: pzhevand@zeus.umich.mx