BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO-MATEMÁTICAS

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICA APLICADA

TÍTULO DE LA TESIS

Solución Algebraica de la Ecuación de Schrödinger

TESIS PRESENTADA PARA OBTENER EL TÍTULO DE
Maestro en Ciencias Física Aplicada

PRESENTA
Miriam Arenas Alvarez

DIRECTORES DE TESIS
Dr. Mario Alberto Maya Mendieta y Dr. Arturo Fernández Téllez

PUEBLA, PUEBLA. 2022

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO-MATEMÁTICAS

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICA APLICADA

TÍTULO DE LA TESIS

Solución Algebraica de la Ecuación de Schrödinger

TESIS PRESENTADA PARA OBTENER EL TÍTULO DE
Maestro en Ciencias Física Aplicada

PRESENTA
Miriam Arenas Alvarez

DIRECTORES DE TESIS
Dr. Mario Alberto Maya Mendieta y Dr. Arturo Fernández Téllez

PUEBLA, PUEBLA. 2022

Dedicatoria
A mi hijo Stephan, a mis padres Benigno y Esther.

Agradecimientos

En el proceso de mi formación académica tuve la gran dicha de contar con grandes personas que me acompañaron y brindaron su apoyo para poder lograr mis metas y seguir adelante. Agradezco infinitamente al Dr. Mario Alberto Maya Mendieta y al Dr. Arturo Fernández Téllez por sus enseñanzas, tiempo, dedicación y motivación, que ayudaron a encaminar mi gusto por la ciencia y por ello son mi guía en este trabajo.

A mis padres Ma. Esther Alvarez y Benigno Arenas por su apoyo incondicional, amor, entrega y entusiasmo. Les agradezco por la gran labor que hicieron por estar siempre a mi lado y aconsejar en los momentos más difíciles de mi vida, por ser mis amigos y cómplices, los amo. A mis hermanos Ariana, Arturo y Areli por llenar de alegría mi vida, por su cariño y amor.

A mi hijo por que es la persona más importante de mí, por su amor, esfuerzo, compañía y por esa gran felicidad que me genera. A José Luis por todo su apoyo incondicional.

A mis amigos por esa gran amistad y apoyo que me han brindado.

A los académicos de la Facultad de Ciencias Físico - Matemáticas, quienes han participado con su entrega y compromiso compartiendo sus conocimientos. Gracias a mis sinodales por su tiempo y orientación en este trabajo.

A CONACYT por el apoyo y ese gran trabajo que realiza.

A todas las personas que participaron de alguna manera en este camino y proyecto, a todas ellas Gracias.

Introducción

Desde el inicio de la mecánica cuántica, encontrar soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger ha sido un objetivo permanente como una línea de investigación. Conocer exactamente la función de onda de un sistema cuántico dado significa conocer todo acerca de ese sistema [1], pero además significa tener un punto de partida para resolver otros sistemas cuánticos con características similares, ya sea también exactamente, por el método de perturbaciones o numéricamente.

Tradicionalmente el método de solución de la ecuación de Schrödinger, la cual es una ecuación de segundo orden, lineal y homogénea, ha sido el de series de potencias [2], basado en los polinomios ortogonales de Hermite [3], Laguerre, y otros. Parece que este método ya no es muy fructífero. Otro mecanismo de solución conocido desde hace muchos años es el de factorización [4–6], muy apreciado por su simplicidad y por su elegancia, y que ha servido mas recientemente para desarrollar otras formas de solución para sistemas cuánticos similares, como por ejemplo, la transformada de Darboux [7], y además para el moderno desarrollo de la mecánica cuántica supersimétrica. Recientemente se descubrió que más sistemas cuánticos tienen solución exacta en términos de los llamados polinomios ortogonales excepcionales [8], que son generalizaciones de los polinomios de Hermite, Laguerre, Jacobi, y otros.

Como se puede ver por lo anterior, en los últimos años se ha realizado un esfuerzo enorme para encontrar soluciones exactas para la ecuación de Schrödinger, sobre todo por las implicaciones sobre la teletransportación cuántica, la computación cuántica y la criptografía cuántica, entre otras posibles aplicaciones que tendrán lugar en un futuro cercano que seguramente tendrán un impacto relevante en la sociedad.

En este trabajo hacemos una aportación a esta línea de investigación en la mecánica cuántica que no ha aparecido en la literatura. Es un método de solución de la ecuación estacionaria de Schrödinger en forma exacta, que consiste en usar álgebra ordinaria para un problema de eigenvalor para un operador diferencial de segundo orden, pero hacemos la aclaración de que el álgebra que usamos no es álgebra lineal, que es la base del método de factorización mencionado arriba. Aquí no usamos operadores, sino que planteamos la ecuación de Schrödinger en términos de sistemas de ecuaciones algebraicas, cuya solución son los coeficientes de polinomios que a final de cuentas son polinomios ortogonales, y también hacemos la aclaración de que tampoco se usa el método de series de potencias. Los polinomios ortogonales son necesarios para la normalización de las funciones

de onda y a final de cuentas para lo correcta interpretación probabilística de la mecánica cuántica.

Aplicamos el método a un caso muy conocido, el oscilador armónico. Luego lo hacemos con otro sistema no muy conocido, el potencial isotónico [9]. Estos sistemas ya han sido resueltos exactamente por alguno de los métodos descritos arriba, por lo que comparamos dichos procedimientos con nuestro método para resaltar las ventajas, prácticas y del uso de los fundamentos de la mecánica cuántica.

Finalmente a un sistema nuevo que no aparece en la literatura. Veremos que en todo momento las bases de la mecánica cuántica en general y de la física del sistema cuántico en particular no se pierdan por cálculos largos y difíciles.

Índice general

Introducción I

1. Fundamentos de la mecánica cuántica **1**
1.1. Introducción 1
1.2. Los postulados 1
1.3. Ecuación de Schrödinger y su papel dentro de la mecánica cuántica 2
1.4. Interpretación Probabilística de la función de onda 3

2. Algunos métodos de solución exacta **5**
2.1. Introducción 5
2.2. Solución por series de potencias 6
2.3. Por factorización de Dirac 10
2.4. Transformación de sistemas ya resueltos 15

3. El método algebraico de solución **21**
3.1. Introducción 21
3.2. La ecuación de eigenvalor 21
3.3. La función $\psi_0(x)$ 22
3.4. El polinomio de Sturm-Liouville $P_n(x)$ 25
3.5. La función $S_n(x)$ 26
3.6. La ecuación principal 29

4. Aplicaciones del método a sistemas cuánticos **31**
4.1. Introducción 31
4.2. Aplicación a un sistema muy conocido 31
4.3. Un sistema no muy conocido 36
4.4. Aplicación a un sistema nuevo 44

5. Resultados y Conclusiones **51**
5.1. Introducción 51

5.2. El método algebraico de solución 51
5.3. Ejemplos y sus soluciones 53
5.4. Conclusiones 56

Bibliografía **58**

Solución Algebraica de la Ecuación de Schrödinger

Miriam Arenas Alvarez

Junio 2022

Capítulo 1

Fundamentos de la mecánica cuántica

1.1. Introducción

Desde los inicios de la mecánica cuántica, encontrar soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger ha sido un objetivo permanente como una línea de investigación. En este capítulo se hace una revisión de los postulados [1], la ecuación de Schrödinger y su papel dentro de la mecánica cuántica, las soluciones de la ecuación de Schrödinger y su interpretación probabilística [2, 3]. Revisión de los métodos de solución exacta de la ecuación de Schrödinger. Tradicionalmente ha sido el de serie de potencias, basado en los polinomios de Hermite, Laguerre y otros. Otro mecanismo de solución conocido desde hace muchos años es el de factorización de Dirac [6] y a soluciones de sistemas generados por transformaciones de sistemas ya resueltos.

1.2. Los postulados

En la Ref. [1] aparecen los postulados con la nota: la mecánica cuántica está basada en el siguiente conjunto de postulados, que son confortablemente elegantes y cuya justificación final es dada solo por el acuerdo con el experimento:

a) La función de onda y la probabilidad. La descripción mas detallada que permite la naturaleza está dada por una función compleja, la función de onda Ψ , la cual da predicciones probabilísticas de cantidades físicas.

b) Observables y operadores. A cada cantidad física u observable a se le asocia un operador hermítico $\widehat{A}$, de manera que el promedio

$$\langle \widehat{a} \rangle = \int \psi^* \widehat{A} \psi d^3 r \tag{1.1}$$

está relacionado con las mediciones de la observable a.

c) El hamiltoniano $\widehat{H}$ y la ecuación diferencial de Schrödinger. El hamiltoniano es el operador asociado a la energía E, por medio de la ecuación de Schrödinger

$$\widehat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \tag{1.2}$$

Las soluciones Ψ de esta ecuación son el objetivo central de esta tesis.

d) Los operadores de posición $\widehat{x}$ y de momento $\widehat{p}$. Estos operadores son

$$\widehat{x} = x \tag{1.3}$$

$$\widehat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \tag{1.4}$$

e) El principio de correspondencia. Establece que en el límite en el cual los efectos cuánticos son insignificantes, la mecánica cuántica se reduce a la mecánica clásica.

1.3. Ecuación de Schrödinger y su papel dentro de la mecánica cuántica

Partiendo del postulado c) hemos establecido la forma explícita del operador hamiltoniano $\widehat{H}$ para un sistema de n partículas [2,3]:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{a=1}^{N} \frac{1}{m_a} \nabla_a^2 + V\left(r_1, r_2 \ldots, r_N\right) \tag{1.5}$$

siendo el primer término el operador de energía cinética y el segundo el de energía potencial, el cual contiene todas las fuerzas a las que la partícula $a = 1, \ldots, N$ está sujeta. Así la ecuación de Schrödinger más general

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{a=1}^{N} \frac{1}{m_a} \nabla_a^2 \Psi\left(r_a, t\right) + V\left(r_a\right) \Psi\left(r_a, t\right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi\left(r_a, t\right) \tag{1.6}$$

Sólo nos interesa el caso en que las interacciones no dependen del tiempo t, lo cual se refleja en que $V(r_a)$ no contiene a t. Se demuestra que en este caso la función de onda es

$$\Psi(r_a, t) = \psi(r_a) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{1.7}$$

siendo $\psi(r_a)$ la solución de la ecuación estacionaria de Schrödinger,

$$\widehat{H}\psi(r_a) = E\psi(r_a) \tag{1.8}$$

y se dice que $\psi(r_a)$ representa a los estados estacionarios del sistema.

1.4. Interpretación Probabilística de la función de onda

La ecuación estacionaria de Schrödinger es [3]

$$-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{a=1}^{N}\frac{1}{m_a}\nabla_a^2\psi(r_a) + V(r_a)\psi(r_a) = E\psi(r_a) \tag{1.9}$$

Para simplificar lo que sigue, escribimos esta ecuación en una dimensión y para una sola partícula,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1.10}$$

De acuerdo con el postulado a), la función de onda $\Psi(r_a, t)$ debe cumplir la condición

$$\int |\Psi(r_a, t)|^2 d^3 r_a = 1 \tag{1.11}$$

que para los estados estacionarios se reduce a

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \tag{1.12}$$

La región de integración se puede reducir a $a \leq x \leq b$, la región física a la que la partícula está confinada por el potencial, y esto lleva a una cuestión fundamental para este trabajo. El confinamiento a una región determinada tiene dos consecuencias: 1) la cuantización de la energía, 2) la existencia de condiciones de frontera. En los ejemplos que presentamos más adelante veremos este punto con detalle.

Capítulo 2

Algunos métodos de solución exacta

2.1. Introducción

En este Capítulo hacemos una revisión breve de los métodos de solución de la ecuación diferencial de Schrödinger, la cual tiene las siguientes características matemáticas [3]:

1) Es de segundo orden en la derivada.

2) Es una ecuación lineal.

3) Es homogénea.

Podemos establecer un esquema de solución de la ecuación estacionaria de Schrödinger en dos pasos:

- Establecer las condiciones de frontera que impone el potencial y hallar funciones elementales $\phi_0(x)$ que las cumplan.

- Proponer la solución general en la forma

$$\psi(x) = \phi_0(x) P(x)$$

y hallar y resolver la ecuación diferencial que satisfaga la función $P(x)$.

En general esta ecuación diferencial no tiene solución en términos de funciones sencillas, y en la mayoría de los casos de interés la solución tiene una parte que consiste de polinomios de tipo Sturm-Liouville, es decir, de polinomios ortogonales que dan lugar a espacios vectoriales cuyas bases son esos polinomios, y esto tiene una consecuencia fundamental, las soluciones de la ecuación de Schrödinger representan estados dinámicos que forman un espacio vectorial de Hilbert.

Se deben desarrollar métodos matemáticos para encontrar esos polinomios ortogonales. Es aquí donde hacemos una revisión de esos métodos, algunos pocos que aparecen en los libros, y otros que han sido reportados en artículos de investigación sobre el tema.

Podemos situar en este punto el objetivo principal de la tesis: la propuesta de un método alternativo para encontrar esos polinomios, que no hemos visto en la literatura conocida.

Ahora hacemos una revisión de tres métodos de solución, aunque existen mas en la literatura.

a) Por serie de potencias

Ejemplo 1. Oscilador armónico.

Ejemplo 2. Átomo de hidrógeno

b) Por factorización de Dirac

Ejemplo 3. Oscilador armónico.

Ejemplo 4 Oscilador isotónico.

c) Por transformación de sistemas ya resueltos

Ejemplo 5. Transformación de Darboux.

Ejemplo 6. Por mecánica cuántica supersimétrica.

2.2. Solución por series de potencias

Es el método tradicional para resolver cierto tipo de ecuaciones diferenciales de segundo orden. Las aplicaciones en física son muy amplias [4], y surgen de la separación de variables en ecuaciones diferenciales parciales, ejemplos son: la ecuación de Laplace, la ecuación de onda, la de la propagación del calor, etc, y en particular la de Schrödinger. Por ello las soluciones de las ecuaciones que quedan después de la separación de variables llevan un nombre: funciones especiales, entre las cuales tenemos la función hipergeométrica, la función de Legendre, de Hermite, de Laguerre, y otras que no llevan nombre.

Esencialmente consiste en proponer la solución como una serie de potencias

$$P(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k$$

alrededor del punto singular regular $x = 0$. Entonces el problema se reduce a encontrar los coeficientes c_k por medio de la misma ecuación diferencial. Ilustramos el método con dos ejemplos: el oscilador armónico y el átomo de hidrógeno, los cuales se encuentran en todos los libros de texto de mecánica cuántica.

Ejemplo 1. Oscilador armónico

Presentamos el método de series de potencia para el oscilador armónico [5] con cierto detalle para resaltar algunos puntos que serán muy útiles para el objetivo de la tesis.

La ecuación de Schrödinger es

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2\psi = E\psi \tag{2.1}$$

El potencial

$$V_{OA}(x) = \frac{1}{2}x^2 \tag{2.2}$$

es parabólico por lo que las condiciones de frontera que debe cumplir la función $\phi_0(x)$ son

$$\lim_{x\to\pm\infty} \phi_0(x) = 0$$

y la función que cumple dichas condiciones es

$$\phi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

El factor $\frac{1}{2}$ del exponente lo establece la ecuación de Schrödinger (2.1). De acuerdo al esquema de solución la función de onda es (salvo un factor de normalización C que no es importante aquí)

$$\psi(x) = \phi_0(x)\,P(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}P(x) \tag{2.3}$$

que al ser sustituida en (2.1) da lugar a la llamada ecuación diferencial de Hermite para la función $P(x)$:

$$\frac{d^2P}{dx^2} - 2x\frac{dP}{dx} + (2E-1)\,P = 0 \tag{2.4}$$

Esta ecuación no tiene solución en términos de funciones elementales, por lo que se propone una serie de potencias

$$P(x) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k x^k \tag{2.5}$$

que al ser sustituida en (2.4) da lugar a la ecuación de recurrencia para los coeficientes c_k:

$$c_{k+2} = \frac{2k - 2E + 1}{(k+1)(k+2)} c_k \tag{2.6}$$

Aquí es donde la física del problema debe entrar. Antes dijimos que la constante de normalización no es importante en este contexto, pero si lo es que la función de onda sea de cuadrado integrable, es decir, normalizable. Esto obliga a cortar la serie (2.5) para que se convierta en un polinomio, el cual es dominado por la exponencial $\phi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}$ de manera que la función de onda cumpla con la condición

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 = \text{constante finita}$$

El corte de la serie se efectúa haciendo que para $k = n$, $c_n \neq 0$ y $c_{n+2} = 0$. Para que esto ocurra debemos tener la condición

$$2n - 2E + 1 = 0 \Longrightarrow E = n + \frac{1}{2}$$

Entonces la exigencia de la normalización da lugar a la cuantización de la energía. Lo que sigue es utilizar a relación de recurrencia (2.6) para construir los polinomios $P_n(x)$ que resultan ser los polinomios ortogonales de Hermite $H_n(x)$ y entonces la solución completa para el oscilador armónico es

$$\psi_n(x) = C_n H_n(x) e^{-\frac{1}{2}x^2}, \qquad E_n = n + \frac{1}{2}.$$

Ejemplo 2. Átomo de hidrógeno

Presentamos los principales pasos [5] de forma más resumida. El potencial es de tipo Coulomb

$$V(r) = -\frac{1}{r} \tag{2.7}$$

Como el potencial es central se usan coordenadas esféricas. La ecuación de Schrödinger

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\psi - \frac{1}{r}\psi = E\psi \tag{2.8}$$

permite la separación de variables

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi) = R(r)\,Y(\theta, \varphi) \tag{2.9}$$

donde la función $Y(\theta,\varphi)$ sólo depende de los ángulos y es llamada de armónicos esféricos. Tiene que ver con el momento angular y tiene dos números cuánticos l y m. Su forma explícita es

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}(-1)^m P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

No es esencial para nuestro objetivo, pues el potencial (2.7) sólo depende de la variable r, por lo que queda en la ecuación diferencial para la función $R(r)$:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left(2E-2V-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R=0$$

Las condiciones de frontera son

$$\begin{aligned}\lim_{r\to 0}R(r) &= 0\\ \lim_{r\to\infty}R(r) &= 0\end{aligned}$$

y se puede comprobar que la función adecuada es

$$\phi_0(r)=r^l e^{-\sqrt{-2E}r},\quad E<0.$$

Siguiendo el esquema de solución, proponemos la función de onda radial

$$R(r)=r^l e^{-\sqrt{-2E}r}P(r) \tag{2.10}$$

y se encuentra que la ecuación diferencial para la función $P(r)$ es

$$\rho\frac{d^2P}{d\rho^2}+(2l+2-\rho)\frac{dP}{d\rho}+(\lambda-l-1)P=0 \tag{2.11}$$

con $\rho=2\sqrt{-2E}r$ y λ es una constante que contiene a la energía. (2.11) es la ecuación de Laguerre. Resolviendo por series encontramos

$$P(\rho)=\sum_{k=1}^{\infty}c_k\rho^k$$

$$c_{k+1}=\frac{-\lambda+l+1}{2(k+1)(l+1)+k(k+1)}c_k. \tag{2.12}$$

Por las mismas razones para el oscilador armónico, la serie debe cortarse para tener un polinomio. El corte da lugar a la cuantización de la energía

$$E_n = -\frac{E_1}{n^2} = -\frac{13{,}6eV}{n^2}$$

y la iteración de la relación de recurrencia (2.12) produce el polinomio asociado de Laguerre $L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$. La solución de la ecuación de Schrödinger es finalmente

$$\begin{aligned} \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) &= C_{nlm} Y_{lm}(\theta,\varphi)\, r^l e^{-\sqrt{-2E_n}r} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(2\sqrt{-2E}r\right) \\ E_n &= -\frac{E_1}{n^2} \end{aligned}$$

Con estos Ejemplos 1 y 2 terminamos de exponer el método de solución por series.

Hemos expuesto sólo los resultados que da el método de series. En general los pasos intermedios son engorrosos y largos, y a menudo se pierde el sentido físico de la matemática. En su favor se puede decir que este método es aplicable a todos los problemas cuánticos que tienen solución exacta, aunque a veces el camino no es claro.

2.3. Por factorización de Dirac

El método de factorización de Dirac [6] utiliza conceptos del álgebra lineal: operadores $\widehat{A}$ actuando sobre kets $|a\rangle$ de un espacio vectorial. Los valores propios, los cuales son observables, son independientes de la representación utilizada para resolver el problema. La representación de Dirac proporciona un método matemático para el cálculo de las propiedades asociadas con el sistema cuántico. La representacin de Dirac en el problema del oscilador armónico sirve por ejemplo, como base para la teoría cuántica de la radiación.

Existe una diferencia fundamental entre variables dinámicas de mecánica clásica y mecánica cuántica. En teoría cuántica, los operadores lineales, los cuales representan las variables dinámicas, de acuerdo con el postulado b), están sujetos a un álgebra en el cual la ley conmutativa de multiplicación no es válida en general.

Una propiedad del álgebra lineal dice que los eigenvalores de los operadores hermíticos son números reales. Estos son las cantidades físicas medibles.

Ya que las observables medidas en el laboratorio son siempre números reales, los operadores que representan a esos observables deben ser hermíticos (postulado b).

El método de factorización de Dirac consiste en introducir dos operadores $\widehat{a}$ y $\widehat{a}^+$ llamados operadores de escalera, que factorizan al hamiltoniano en las formas

$$\widehat{a}\widehat{a}^+ = \widehat{H}_{OA} + C$$
$$\widehat{a}^+\widehat{a} = \widehat{H}_{OA} - C$$

con las propiedades

$$\widehat{a}\psi_n \sim \psi_{n-1}$$
$$\widehat{a}^+\psi_n \sim \psi_{n+1}.$$

El álgebra de estos operadores no es conmutativa, ya su su conmutador es

$$\left[\widehat{a}, \widehat{a}^+\right] = 1.$$

Ejemplo 3. Oscilador armónico

Con el método de factorización, el hamiltoniano del oscilador armónico es (Ejemplo 1)

$$\widehat{H}_{OA} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2 \tag{2.13}$$

se introducen los operadores [5]

$$\widehat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dx} + x\right) \tag{2.14}$$

$$\widehat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{dx} + x\right) \tag{2.15}$$

siendo $\widehat{a}^+$ el adjunto de $\widehat{a}$. Estos operadores $\widehat{a}$ y $\widehat{a}^+$ factorizan al hamiltoniano.

$$\widehat{H}_{OA} = \widehat{a}^+\widehat{a} + \frac{1}{2} \tag{2.16}$$

$$\widehat{H}_{OA} = \widehat{a}\widehat{a}^+ - \frac{1}{2} \tag{2.17}$$

El estado propio $|E\rangle$ normalizado del hamiltoniano $\widehat{H}_{OA}$ es

$$\widehat{H}_{OA}\,|E\rangle = E\,|E\rangle \tag{2.18}$$

Ahora aplicamos el operador $\widehat{a}$ sobre $|E\rangle$. Llamamos $|Q\rangle$ al vector resultante:

$$|Q\rangle = \widehat{a}\,|E\rangle$$

cuya norma es

$$\langle Q|Q\rangle = \left\langle E|\widehat{a}\widehat{a}^{+}|E\right\rangle = E - \frac{1}{2} \geq 0$$

Hay un límite inferior para la energía, E_0 tal que

$$E \geq E_0 = \frac{1}{2}.$$

Aplicando el operador $\widehat{a}$ a (2.13)

$$\widehat{a}\widehat{H}_{OA}\left|E\right\rangle = \widehat{a}E\left|E\right\rangle = E\widehat{a}\left|E\right\rangle$$

puesto que $\widehat{a}$ es lineal. Así que

$$\widehat{H}_{OA}\left(\widehat{a}\left|E\right\rangle\right) = \left(E-1\right)\widehat{a}\left|E\right\rangle.$$

Por lo tanto la ecuación de Schrödinger para este estado con energía $E-1$ es

$$\widehat{H}_{OA}\left|E-1\right\rangle = \left(E-1\right)\left|E-1\right\rangle$$

Esto es, si $\left|E\right\rangle$ es un estado propio del hamiltoniano, también lo es $\widehat{a}\left|E\right\rangle = \left|E-1\right\rangle$. Aplicando sucesivamente el operador $\widehat{a}$ tenemos

$$\widehat{a}^{n}\left|E\right\rangle = \left|E-n\right\rangle.$$

como hay un límite inferior en la energía, si el estado de mínima energía es $\left|E_0\right\rangle$, entonces

$$\widehat{a}\left|E_0\right\rangle = 0$$

ya que no hay un estado de energía menor. Tiene como solución

$$\left|E_0\right\rangle \Longrightarrow \psi_0\left(x\right) = e^{-\frac{1}{2}x^2} \tag{2.19}$$

donde $\psi_0\left(x\right)$ representa el estado base del oscilador armónico. Es la función $\phi_0\left(x\right)$ del Ejemplo 1, encontrada mediante las condiciones de frontera.

Aplicando el operador de ascenso $\widehat{a}^{+}$ al estado base obtenemos la función de onda para el estado n

$$\psi_n\left(x\right) = \left(\widehat{a}^{+}\right)^{n}\psi_0\left(x\right).$$

La solución general es

$$\psi_n\left(x\right) = C_n H_n\left(x\right)e^{-\frac{1}{2}x^2} \tag{2.20}$$

donde C_n es una constante de normalización y $H_n\left(x\right)$ es el polinomio de Hermite de grado $n = 0, 1, 2, ...$

Finalmente para determinar el espectro de energía con el valor mínimo

$$E_0 = \frac{1}{2}$$

y los incrementos son por unidad, es decir

$$\begin{aligned} E_1 &= E_0 + 1, \\ E_2 &= E_1 + 1 = E_0 + 2, \\ E_3 &= E_2 + 1 = E_0 + 3, \\ &\cdots \end{aligned}$$

así al estado n le corresponde la energía

$$E_n = n + \frac{1}{2} \tag{2.21}$$

La solución exacta para el potencial del oscilador armónico es dada por (2.20) y (2.21). Por supuesto que coincide con el Ejemplo 1. Hemos resuelto el problema del oscilador armónico por el método de Dirac que es puramente algebraico, sin tener la necesidad de resolver directamente de la ecuación de Schrödinger, como se hizo en el Ejemplo 1.

Ejemplo 4. Oscilador isotónico

El hamiltoniano del oscilador isotónico es [7]

$$\widehat{H}_{OI}(x) = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2 + \frac{l(l+1)}{2x^2} \tag{2.22}$$

con $l > 0$. Este hamiltoniano es factorizado por los operadores

$$\widehat{a}_l = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dx} + x - \frac{l}{x}\right) \tag{2.23}$$

$$\widehat{a}_l^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{dx} + x - \frac{l}{x}\right) \tag{2.24}$$

en la forma

$$\widehat{H}_{OI}(x) = \widehat{a}_l\widehat{a}_l^+ + l - \frac{1}{2} \tag{2.25}$$

Pero ahora los operadores $\widehat{a}_l$ y $\widehat{a}_l^+$ no son operadores de escalera, pero $\widehat{a}_l$ sirve para generar la función del estado base $\psi_0(x)$ por medio de

$$\widehat{a}_l\psi_0(x) = 0,$$

que es equivalente a la ecuación diferencial

$$\frac{d\psi_0(x)}{dx} + \left(x - \frac{l}{x}\right)\psi_0(x) = 0$$

dando como resultado

$$\psi_0(x) = x^{l+1}e^{-x^2/2} \tag{2.26}$$

Introducimos los operadores de segundo orden

$$\widehat{A} = \left(\widehat{a}_l - \frac{l+1}{\sqrt{2}x}\right)\left(\widehat{a}_l - \frac{l+1}{\sqrt{2}x}\right)$$

$$\widehat{A}^+ = \left(\widehat{a}_l^+ - \frac{l+1}{\sqrt{2}x}\right)\left(\widehat{a}_l^+ - \frac{l+1}{\sqrt{2}x}\right)$$

Estos son operadores si son de escalera pero no factorizan al hamiltoniano. Se demuestra que

$$\widehat{H}_{OI}\left(\widehat{A}^+|n\rangle\right) = (E_n + 2)\left(\widehat{A}^+|n\rangle\right).$$

Este resultado se interpreta: si $|n\rangle$ es un eigenvector propio del hamiltoniano $\widehat{H}_{OI}(x)$ con eigenvalor E_n entonces $\widehat{A}^+|n\rangle$ es también un eigenvector de $\widehat{H}_{OI}(x)$ pero con eigenvalor $E_n + 2$, entonces los niveles de energía del oscilador isotónico están igualmente separados pero por una distancia 2, en lugar de 1 como en el caso del oscilador armónico.

Empezando con la mínima energía E_0 todos los demás niveles de energía están separados por 2.

Las función de onda para el estado n es

$$\psi_n(x) \sim \left(\widehat{A}^+\right)^n \psi_0(x).$$

sustituyendo los operadores $\widehat{a}_l$ y $\widehat{a}_l^+$ en el operador de ascenso y haciendo un cambio de variable $\xi = x$, tenemos que el operador $\widehat{A}^+$ tiene la forma

$$\widehat{A}^+ = \frac{1}{2}\left[\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi\frac{d}{d\xi} + \left(\xi^2 - 1\right) - \frac{l(l+1)}{\xi^2}\right],$$

también hacemos el cambio de variable $\xi = x$ en el estado

$$\psi_0(\xi) \sim \xi^{l+1}e^{-\xi^2/2}.$$

Haciendo las primeras derivadas de $\psi_0(\xi)$ se obtiene el primer estado exitado

$$\psi_1(\xi) \sim \left(-\xi^2 + l + \frac{1}{2} + 1\right)\psi_0(\xi)$$

comparando con el polinomio asociado de Laguerre de primer grado

$$L_1^{\alpha}(u) = -u + \alpha + 1$$

donde $u = \xi^2$, $\alpha = l + \frac{1}{2}$. Por lo tanto la función de onda del primer estado exitado es

$$\psi_1(\xi) = C_1 L_1^{l+\frac{1}{2}}\left(\xi^2\right)\psi_0(\xi)$$

donde C_1 es una constante de normalización, independiente de x.

Así la forma general es

$$\psi_n(\xi) = C_n L_n^{l+\frac{1}{2}}\left(\xi^2\right)\psi_0(\xi) \tag{2.27}$$

con un procedimiento análogo al del oscilador armónico, se encentra el espectro de energía

$$E_n = l + \frac{3}{2} + 2n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.28}$$

La solución (2.27) y (2.28) se ha encontrado con la factorización de Dirac. Este problema de oscilador isotónico no es muy conocido y sólo ha aparecido en artículos de investigación [7]. Se ha usado en teoría de muchos cuerpos y en otros campos de la estadística cuántica.

El método de factorización que hemos presentado es sencillo y muy elegante, pero tiene la desventaja de que no se puede aplicar a todos los problemas.

2.4. Transformación de sistemas ya resueltos

La idea general es partir de un problema cuya solución se conoce, hacer una transformación matemática de esa solución para encontrar una nueva función que es solución exacta de la ecuación de Schrödinger con un nuevo potencial, que también se construye con la transformación. Primero presentamos la transformación de Darboux, la cual ha tenido mucho éxito en los últimos años por su relación con la mecánica cuántica supersimétrica.

Ejemplo 5. Potencial de Gold'man Krivchenckov [8] y la transformada de Darboux [9].

Presentamos los hechos esenciales de la transformación de Darboux y luego la aplicamos al potencial de Gold'man-Krivchenkov (GK). Tenemos la ecuación de Schrödinger

$$\widehat{H}_0\psi_p = E_p\psi_p \tag{2.29}$$

cuyo operador hamiltoniano es

$$\widehat{H}_0 = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x). \tag{2.30}$$

La hipótesis es que tanto la función de onda $\psi_p(x)$ como el espectro de energía E_p son conocidos.

Definimos la función generadora de la transformación de Darboux a la función

$$\beta_p(x) = \frac{\psi_p'}{\psi_p} \tag{2.31}$$

y definimos la nueva función

$$\phi_{np}(x) = \psi_n' - \beta_p\psi_n \tag{2.32}$$

generada con la función de onda conocida $\psi_n(x)$ y con la función generadora (2.31) $\beta_p(x)$.

Ahora construimos la expresión

$$S(x) = -\frac{1}{2}\phi_{np}'' + [V(x) - E]\,\phi_{np}$$

siendo $V(x)$ una función indeterminada hasta este momento. Pero si imponemos la condición $S(x) = 0$ entonces se cumple

$$-\frac{1}{2}\phi_{np}'' + V(x)\,\phi_{np} = E\phi_{np} \tag{2.33}$$

la cual es una ecuación de Schrödinger con un potencial $V(x)$. La solución es la función $\phi_{np}(x)$, la cual, de acuerdo con (2.32), puede ser calculada exactamente. La función potencial $V(x)$ es determinada también por la condición $S(x) = 0$. Sin hacer la demostración damos el resultado

$$V(x) = V_0(x) - \beta_p'(x). \tag{2.34}$$

El potencial nuevo tiene su origen en el potencial original $V_0(x)$ con la derivada de la función generadora de la transformación de Darboux (2.31). Un hecho relevante es que la energía del nuevo sistema cuántico es la misma que la del sistema original. Un esquema de lo anterior es

Sistema original → con solución exacta	Transformación → de Darboux	Sistema nuevo tambien con solución exacta	La misma energía

Potencial de Gold'man-Krivchenkov (GK)

Ahora aplicamos los resultados anteriores al potencial (GK), el cual es

$$V_0(x) = \frac{1}{2}\left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a}\right)^2. \tag{2.35}$$

Este problema tiene solución exacta. La función de onda del estado n y su energía son

$$\psi_n(x) = C_n e^{-x^2/2b} x^\nu L_n^{\gamma-1}\left(\frac{x^2}{b}\right) \tag{2.36}$$

$$E_n = \frac{2}{b}\left(n + \frac{1}{2} + C\right) \tag{2.37}$$

donde C es una constante que depende del parámetro de entrada a de (2.35), lo mismo que la constante ν, y $L_n^{\gamma-1}(x^2/b)$ es un polinomio asociado de Laguerre.

Ahora hacemos la transformación de Darboux a este sistema. Después de hacer los cálculo pertinentes, la función generadora, Ec. (2.31) queda así

$$\beta_p(x) = g(x) + \frac{2x}{a} G_p(x). \tag{2.38}$$

El potencial del nuevo sistema cuántico que se deriva de (2.34) es

$$V(x) = \frac{1}{2}\left(\frac{A}{x} - \frac{x}{b}\right)^2 + H_p(x) \tag{2.39}$$

mientras que la nueva función de onda es

$$\phi_{np}(x) = D_n e^{-x^2/2b} x^{\nu-1} L_n^{\gamma-1}\left(\frac{L_n^{\gamma-1\prime}}{L_n^{\gamma-1}} - \frac{L_p^{\gamma-1\prime}}{L_p^{\gamma-1}}\right), \qquad n \neq p \tag{2.40}$$

Se puede decir que $\phi_{np}(x)$ es la función de onda de la familia p que se encuentra en el estado cuántico n. Se puede comprobar, con bastante álgebra, que $\phi_{np}(x)$ es solución exacta de la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\phi_{np}}{dx^2} + \left[\frac{1}{2}\left(\frac{A}{x} - \frac{x}{a}\right)^2 + H_p(x)\right]\phi_{np} = E\phi_{np}.$$

La interpretación física del nuevo sistema cuántico generado por la transformación de Darboux no es directa, pero para nosotros lo importante es que tiene solución exacta.

Aunque no es importante para nuestro objetivo, damos las expresiones de los elementos que aparecen en (2.38), (2.39) y (2.40):

$$G_p(x) = \frac{\overset{\cdot}{L}{}_p^{\alpha}}{L_p^{\alpha}}, \qquad \alpha = \frac{1}{2}\sqrt{1+4a^2}, \quad g(x) = \frac{\nu}{x} - \frac{x}{a}, \quad \nu = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1+4a^2}$$

$$H_p(x) = \frac{4x^2}{a^2}G_p^2 + \left(\frac{B}{a} - \frac{4x^2}{a^2}\right)G_p + \frac{C}{a} + \frac{4p}{a}$$

Ejemplo 6. Potenciales de Mielnik

Tomamos la Ref [9] para mostrar un caso típico del uso de un sistema cuántico con solución exacta para construir un nuevo sistema, también con solución exacta y con el mismo espectro de energía que el sistema original. De nuevo recurrimos al oscilador armónico, cuyas solución tenemos en los Ejemplos 1 y 3. Pero ahora los operadores de escalera son de la forma

$$\widehat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dx} + \beta(x)\right) \tag{2.41}$$

$$\widehat{b}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{dx} + \beta(x)\right). \tag{2.42}$$

Comparamos con (2.14) y (2.15), y encontramos que los operadores son muy semejantes, pero ahora en lugar de x tenemos una función $\beta(x)$, la cual vamos a determinar. Se puede comprobar que estos operadores tienen las propiedades

$$\left[\widehat{b}, \widehat{b}^{+}\right] = \beta'(x) \tag{2.43}$$

$$\widehat{H}_{OA} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2 = \widehat{b}\widehat{b}^{+} - \frac{1}{2} \tag{2.44}$$

la cual es la misma que (2.17) $\widehat{H}_{OA} = \widehat{a}^{+}\widehat{a} - \frac{1}{2}$ para el oscilador armónico. Sin embargo la propiedad (2.16): $\widehat{H}_{OA} = \widehat{a}\widehat{a}^{+} + \frac{1}{2}$ ya no se cumple, pues ahora

$$\widehat{H}_{OA} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\left(\beta' + \beta^2\right) - \frac{1}{2} \tag{2.45}$$

Entonces necesariamente

$$\beta' + \beta^2 - 1 = x^2 \tag{2.46}$$

En (2.46) tenemos una ecuación no lineal en β, llamada ecuación de Ricatti. Se demuestra que la solución tiene la forma

$$\beta(x) = x + \frac{e^{-x^2}}{\gamma + \int_0^x e^{-t^2} dt} \tag{2.47}$$

donde aparece una constante de integración γ. Con la relación de conmutación (2.43) tenemos $\widehat{b}\widehat{b}^+ - \widehat{b}^+\widehat{b} = \beta'(x)$, de donde

$$\widehat{b}^+\widehat{b} = \widehat{b}\widehat{b}^+ - \beta'(x) = \widehat{H}_{OA} + \frac{1}{2} - \beta'(x) = \widehat{H}_{OA} + 1 - \beta'(x) - \frac{1}{2} = \widehat{H} - \frac{1}{2}$$

Se ha introducido un nuevo hamiltoniano $\widehat{H}$ definido por

$$\widehat{H} = \widehat{H}_{OA} + 1 - \beta'(x) = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2 + 1 - \beta'(x) = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{2.48}$$

que contiene al potencial nuevo

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + 1 - \beta'(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{d}{dx}\left(\frac{e^{-x^2}}{\gamma + \int_0^x e^{-t^2} dt}\right) \tag{2.49}$$

Con la ecuación $\widehat{b}\phi_0 = 0$ se encuentra la función de estado base

$$\phi_0(x) = C_0 e^{-\frac{x^2}{2}} \exp\left(1 + \int_0^x \beta(x)\, dt\right)$$

y todas las demás funciones

$$\phi_n(x) = \left(\widehat{b}^+\right)^n \phi_0(x) \tag{2.50}$$

Entonces, en resumen, partiendo del oscilador armónico y con una transformación de Darboux, hemos resuelto de manera exacta la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\phi_n}{dx^2} + V(x)\,\phi_n = E_n\phi_n$$

con el potencial

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{d}{dx}\left(\frac{e^{-x^2}}{\gamma + \int_0^x e^{-t^2} dt}\right) \tag{2.51}$$

y las funciones de onda

$$\phi_n(x) = C_n\left(-\frac{d}{dx} + \beta(x)\right)^n \left[e^{\frac{x^2}{2}} \exp\left(1 + \int_0^x \beta(x)\, dt\right)\right] \tag{2.52}$$

con el mismo espectro de energía $E_n = n + \frac{1}{2}$.

De nuevo, las expresiones (2.51) y (2.52) tiene formas complicadas, pero lo importante es que tenemos resuelto de manera exacta un sistema cuántico nuevo.

En este primer capítulo hemos hablado de algunos métodos de solución exacta de la ecuación de Schrödinger. Existen otros mecanismos [10], de los que no hablamos, con el mismo objetivo, como la mecánica cuántica supersimétrica, y la existencia de los llamados polinomios excepcionales [11], que se han descubierto recientemente.

Capítulo 3

El método algebraico de solución

3.1. Introducción

En este Capítulo presentamos el método basado en álgebra ordinaria para resolver la ecuación estacionaria de Schrödinger. De entrada, como todo problema semejante, se requiere conocer el potencial $V(x)$ que mantiene confinada a la partícula. Este sistema ligado tiene condiciones de frontera para la función de onda. Con las condiciones de que la función de onda contiene a un polinomio de Sturm-Liouville y de que la energía es una cantidad constante, se establece un sistema homogéneo de ecuaciones que es completamente equivalente a la ecuación de Schrödinger. La solución de ese sistema conduce automáticamente a la cuantización de la energía y a la función de onda.

3.2. La ecuación de eigenvalor

El propósito es proponer y aplicar un método para resolver exactamente la ecuación de eigenvalor

$$\widehat{H}\psi = E\psi$$

donde $\widehat{H}$ es un operador hermítico de segundo orden en la derivada y por lo tanto el eigenvalor E es una constante real.

Luego aplicar al caso cuántico donde $\widehat{H}$ es el hamiltoniano

$$\widehat{H} = \widehat{T} + \widehat{V}$$

El potencial $V(x)$ es tal que acota a la partícula en una región $a \leq x \leq b$ de tal manera que surja la cuantización de la energía E_n.

El objetivo central es encontrar primero una función $\psi_0(x)$ que cumpla con las condiciones de frontera del problema. Luego se propone que la solución general exacta de la ecuación de eigenvalor de Schrödinger sea

$$\psi_n(x) = P_n(x)\,\psi_0(x) \tag{3.1}$$

donde $P_n(x)$ es un polinomio de grado n de tipo Sturm-Liouville

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_n x^n \tag{3.2}$$

de grado igual al número cuántico n.

El hecho más importante de esta Sección es que el eigenvalor $\lambda = E$ de la ecuación de Schrödinger

$$\widehat{H}\psi = E\psi \tag{3.3}$$

es un número real. De la literatura tomamos las soluciones de la ecuación de eigenvalor (3.3) para

Oscilador armónico

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2, \quad \psi_n(x) = H_n(x)\,e^{\frac{x^2}{2}}, \quad E_n = n + \frac{1}{2} \tag{3.4}$$

Oscilador isotónico

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{l(l+1)}{2x^2}, \quad \psi_n(x) = L_n^{l+\frac{1}{2}}\left(x^2\right)x^{l+1}e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad E_n = 2n + l + \frac{3}{2} \tag{3.5}$$

Potencial de Gold'man-Krivchenkov

$$V(x) = \frac{1}{2}\left(ax + \frac{b}{x}\right)^2, \quad \psi_n(x) = x^{\nu}\exp\left(-\frac{x^2}{2b}\right)F\left(\alpha;\gamma,\frac{x^2}{b}\right), \quad E_n = \frac{1}{b}(2n + \gamma - a) \tag{3.6}$$

3.3. La función $\psi_0(x)$

La función $\psi_0(x)$ de (3.1) normalmente es la función de onda del estado base o estado de la mínima energía, pues el polinomio de grado cero $P_0(x)$ es igual a 1. No es una regla general pues en el átomo de hidrógeno el estado con $n = 0$ no existe.

Así que en cada sistema se busca una función simple que cumpla con las condiciones de frontera. Es oportuno mencionar que en la solución

$$\psi_n(x) = P_n(x)\,\psi_0(x) \qquad (3.1)$$

la función $\psi_0(x)$ debe predominar sobre $P_n(x)$ en las fronteras.

Para ilustrar todo lo mencionado calculamos $\psi_0(x)$ para el oscilador armónico, el oscilador isotónico y el potencial de Gold'man-Krivchenkov modificado, la cual ya aparece en (3.4), (3.5) y (3.6) respectivamente.

Oscilador armónico

Vamos a encontrar $\psi_0(x)$. Las condiciones de frontera que debe de cumplir la función del estado base son

$$\lim_{x\to\pm\infty} \psi_0(x) = 0$$

La función más simple que cumple esas condiciones es

$$\psi_0(x) = e^{-ax^2}$$

con la constante $a > 0$ determinada por la ecuación asinótica $x \rightharpoonup \pm\infty$ de Schrödinger:

$$-\frac{d^2\psi_0}{dx^2} + x^2\psi_0 = 0$$

de donde se obtienen los posibles valores matemáticos de a:

$$a = \pm\frac{1}{2}$$

Descartamos $a = -\frac{1}{2}$, por tanto $a = \frac{1}{2}$, así tenemos que

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \qquad (3.7)$$

Oscilador isotónico

El potencial de este oscilador es

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{l(l+1)}{x^2} \qquad x > 0$$

y nos indica que las fronteras son $x = 0$ y $x \longrightarrow \infty$. Buscamos la funciones más sencillas para cada frontera:

La función más simple que se anula en $x = 0$ es una potencia de x:

$$\varphi_0 = x^a, \qquad a > 0$$

que debe satisfacer la ecuación de Schrödinger asintótica cuando $x \to 0$:

$$-\frac{d^2\varphi_0}{dx^2} + \frac{l\,(l+1)}{x^2}\varphi_0 = 0$$

Sustituimos φ_0 y sus derivadas

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}\varphi_0 &= ax^{a-1} \\ \frac{d^2}{dx^2}\varphi_0 &= ax^{a-2}\,(a-1) \end{aligned}$$

en la ecuación asintótica:

$$-\frac{d^2\varphi_\infty}{dx^2} + \frac{l\,(l+1)}{x^2}\varphi_\infty = 0 \Longrightarrow -ax^{a-2}\,(a-1) + \frac{l\,(l+1)}{x^2}x^a = 0 \Longrightarrow a = l+1,\ -l$$

Descartamos $a = -l$. La función que se anula en la frontera $x = 0$ es

$$\varphi_0\,(x) = x^{l+1}$$

En $x \longrightarrow \infty$ la ecuación de Schrödinger asintótica es

$$-\frac{d^2\varphi_\infty}{dx^2} + x^2\varphi_\infty = 0$$

que es la misma que en el oscilador armónico, por lo que $\varphi_\infty\,(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$. Así, la función de onda $\psi_0\,(x)$ para el oscilador isotónico es

$$\psi_0\,(x) = x^{l+1}e^{-\frac{x^2}{2}} \tag{3.8}$$

Potencial de Gold'man-Krivchenkov modificado

Este potencial es

$$V\,(x) = \frac{1}{2}\left(\frac{x}{b} - \frac{a}{x}\right)^2\ , \qquad x > 0$$

Haciendo el mismo análisis que en los casos anteriores, se encuentra

$$\psi_0\,(x) = x^\nu e^{-\frac{1}{2b}x^2} \tag{3.9}$$

3.4. El polinomio de Sturm-Liouville $P_n(x)$

La ecuación diferencial de segundo orden

$$s(x)\frac{d^2y}{dx^2}+\frac{ds}{dx}\frac{dy}{dx}-t(x)y=-\lambda u(x)y \tag{3.10}$$

es llamada de Sturm-Liouville y tiene la forma de ecuación de eigenvalor. Si el operador diferencial

$$\widehat{L}=s(x)\frac{d^2}{dx^2}+\frac{ds}{dx}\frac{d}{dx}-t(x) \tag{3.11}$$

es hermítico, entonces, como ya se dijo el eigenvalor λ es un número real. Suponemos que las funciones $s(x)$, $t(x)$ y $u(x)$ son funciones reales. Por las reglas de derivación del cálculo, (3.10) se escribe también así:

$$\frac{d}{dx}\left[s(x)\frac{dy}{dx}\right]-t(x)y=-\lambda u(x)y \tag{3.12}$$

Nos interesa una de las propiedades básicas de la ecuación de Sturm-Liouville: la ortogonalidad de las soluciones. Con el operador (3.11) la ecuación de Sturm-Liouville (3.10) se escribe

$$\widehat{L}y(x)=-\lambda u(x)y(x) \tag{3.13}$$

La ecuación de Schrödinger (3.3) para un sistema cuántico dado es de la forma (3.13). Si no lo es directamente, se pueden hacer transformaciones adecuadas para ponerla en dicha forma.

Ortogonalidad de las soluciones

Tomamos dos soluciones linealmente independientes $y_1(x)$ y $y_2(x)$, es decir,

$$\begin{aligned}\widehat{L}y_1 &= \lambda_1 u(x)y_1\\ \widehat{L}y_2 &= \lambda_2 u(x)y_2\end{aligned}$$

Se puede demostrar [12], mediante operaciones algebraicas y de cálculo, además de las condiciones de frontera en $x=a$ y en $x=b$, que

$$(\lambda_1^*-\lambda_2)\int_a^b u(x)y_1^*(x)y_2(x)\,dx=0 \tag{3.14}$$

Es importante que $\lambda_1^*=\lambda_2$ o que $\lambda_1^*\neq\lambda_2$. Si los eigenvalores son diferentes entonces tenemos el siguiente caso:

Definición
Si las soluciones $y_1(x)$ y $y_2(x)$ cumplen la condición

$$\int_a^b u(x)\, y_1^*(x)\, y_2(x)\, dx = 0 \tag{3.15}$$

entonces esas funciones son ortogonales. La función $u(x)$ es llamada función de peso.

Como se sabe de álgebra lineal, las funciones $y_1(x)$ y $y_2(x)$ generan un espacio vectorial de funciones, llamado espacio de Hilbert. Esto es fundamental para la mecánica cuántica, como se desprende se los postulados, pues da lugar al principio se superposición.

Para este trabajo de tesis es importante pues el polinomio $P_n(x)$ de la solución (3.1) debe ser del tipo Sturm-Liouville.

Para ilustrar este hecho escribimos las relaciones de ortogonalidad

$$\int_0^\infty e^{-x^2} H_n(x)\, H_m(x)\, dx = 0, \quad n \pm m$$

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha L_n^\alpha(x)\, L_m^\alpha(x)\, dx = 0, \quad n \pm m$$

para los polinomios de Hermite y de Laguerre respectivamente, los cuales aparecen en (3.4) y (3.5).

3.5. La función $S_n(x)$

La ecuación de Schrödinger para un sistema cuántico que consiste de una partícula de masa m sujeta a un potencial unidimensional $V(x)$ es

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + V(x)\,\psi_n = E_n\psi_n \tag{3.16}$$

Suponemos que el potencial mantiene a la partícula en una región $a < x < b$ que se puede extender a infinito en uno o en ambos lados. Hablamos entonces de un sistema ligado, en el que la energía está cuantizada [2]. Escribimos la ecuación de Schrödinger en la forma

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = [2V(x) - 2E]\,\psi \tag{3.17}$$

se define la función $S(x)$:

$$S(x) = \frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} \tag{3.18}$$

por lo que

$$S(x) = 2[V(x) - E] \tag{3.19}$$

Si es conocida la función de onda $\psi(x)$, por medio de (3.18) se puede encontrar la función $S(x)$. Inversamente, si se conoce $S(x)$ se puede encontrar $\psi(x)$ también con (3.18) y la energía con (3.19), pero ésto es totalmente equivalente a resolver la ecuación diferencial de Schrödinger (3.16). En este trabajo utilizamos las expresiones (3.18) y (3.19) para calcular $\psi(x)$ y la energía E, pero por un camino diferente y con álgebra ordinaria, para sistemas cuánticos que tienen las siguientes características:

1. Es un sistema ligado, es decir, el potencial $V(x)$ mantiene a la partícula en una región definida, como se mencionó antes. Esto significa que la energía está cuantizada, y que existen estados propios del hamiltoniano, denominados $\psi_n(x)$. También debe existir una función $\psi_0(x)$ que a) sea solución de la ecuación de Schrödinger, y b) que cumpla las condiciones de frontera que impone el potencial.

2. La función de onda $\psi(x)$ tiene la forma

$$\psi(x) = P(x)\psi_0(x)$$

donde $\psi_0(x)$ es una función que cumple con las condiciones de frontera impuestas por el potencial $V(x)$.

Lo anterior da lugar a dos condiciones, muy importantes para el desarrollo de este trabajo:

Primera condición: La función $P(x)$ es un polinomio de Sturm-Liouville de grado n, que llamamos $P_n(x)$ tal que podemos escribir

$$\psi_n(x) = P_n(x)\psi_0(x). \tag{3.20}$$

Segunda condición: La energía E_n correspondiente al estado $\psi_n(x)$ es una cantidad física constante, es decir, independiente de la variable de posición x.

Como puede verse, estas condiciones no son adicionales. Son consecuencias naturales de las características 1 y 2 del sistema físico.

Las numeramos como primera y segunda para resaltar el importante papel que juegan en este trabajo. Ahora establecemos la relación fundamental que nos

permite alcanzar el objetivo. Derivando dos veces (3.20) obtenemos

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} = \psi_0 \frac{d^2P_n}{dx^2} + 2\frac{dP_n}{dx}\frac{d\psi_0}{dx} + P_n\frac{d^2\psi_0}{dx^2}$$

con la cual podemos escribir (3.18) así

$$S_n(x) = \frac{1}{P_n\psi_0}\left[\psi_0 \frac{d^2P_n}{dx^2} + 2\frac{dP_n}{dx}\frac{d\psi_0}{dx} + P_n\frac{d^2\psi_0}{dx^2}\right] \tag{3.21}$$

En (3.21) ya está evidenciado que hay una función $S(x)$ para cada estado n. Ahora, por la misma razón escribimos (3.19) en la forma

$$S_n(x) = 2V(x) - 2E_n. \tag{3.22}$$

La combinación de (3.21) y (3.22) nos permite establecer la igualdad clave para nuestro objetivo:

$$E_n = -\frac{1}{2P_n\psi_0}\left(\psi_0 \frac{d^2P_n}{dx^2} + 2\frac{dP_n}{dx}\frac{d\psi_0}{dx}\right) - \frac{1}{2\psi_0}\frac{d^2\psi_0}{dx^2} + V(x). \tag{3.23}$$

La ecuación (3.23) y las dos condiciones nos permiten encontrar $\psi_n(x)$ y E_n, es decir, resolver el problema para el potencial $V(x)$.

En (3.23) aparecen términos de dos clases: una que depende del grado n del polinomio P_n, que llamaremos λ_n, y otra que es independiente de n, que llamaremos α_0. Se ve que

$$\lambda_n = -\frac{1}{2P_n\psi_0}\left(\psi_0 \frac{d^2P_n}{dx^2} + 2\frac{dP_n}{dx}\frac{d\psi_0}{dx}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{3.24}$$

$$\alpha_0 = -\frac{1}{2\psi_0}\frac{d^2\psi_0}{dx^2} + V(x). \tag{3.25}$$

Ambas deben ser constantes reales, de acuerdo con la segunda condición.

La energía es entonces

$$E_n = \lambda_n + \alpha_0, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{3.26}$$

Es claro de (3.25) que el primer término $-\frac{1}{2\psi_0}\frac{d^2\psi_0}{dx^2}$ debe contener al potencial $V(x)$ con signo negativo, es decir, debe necesariamente ser de la forma

$$-\frac{1}{2\psi_0}\frac{d^2\psi_0}{dx^2} = -V(x) + \text{constante} \tag{3.27}$$

Así que la función $\psi_0(x)$ juega un papel fundamental doble: a) debe cumplir con las condiciones de frontera que impone el potencial y b) cumplir con (3.27), que es la ecuación de Schrödinger para el estado base.

3.6. La ecuación principal

Se deduce de (3.24) que

$$\psi_0 \frac{d^2 P_n}{dx^2} + 2\frac{d\psi_0}{dx}\frac{dP_n}{dx} + 2\lambda_n \psi_0 P_n = 0 \tag{3.28}$$

Vamos a llamar a (3.28) la ecuación principal del método algebraico que estamos proponiendo para resolver la ecuación de Schrödinger. Es importante resaltar que (2.28) es completamente equivalente a la ecuación de Schrödinger. La derivada de $\psi_0(x)$ debe ser de la forma

$$\frac{d\psi_0(x)}{dx} = f(x)\psi_0(x)$$

donde $f(x)$ debe estar formada por potencias enteras de x, positivas o negativas y define completamente al sistema cuántico en cuestión, de acuerdo a (3.27).

Definiendo

$$\Lambda_n(x) = \psi_0 \frac{d^2 P_n}{dx^2} + 2\frac{d\psi_0}{dx}\frac{dP_n}{dx} + 2\lambda_n \psi_0 P_n \tag{3.29}$$

la ecuación principal se escribe

$$\Lambda_n(x) = 0 \tag{3.30}$$

e introduciendo la forma del polinomio de grado n

$$\begin{aligned} P_n &= \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} x^k, \quad c_n^{(n)} \neq 0, \\ \frac{dP_n}{dx} &= \sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)} x^{k-1} \\ \frac{d^2 P_n}{dx^2} &= \sum_{k=2}^{n} k(k-1) c_k^{(n)} x^{k-2} \end{aligned}$$

obtenemos una forma más explícita de la ecuación principal del método

$$\Lambda_n = \psi_0 \sum_{k=2}^{n} k\left(k-1\right) c_k^{(n)} x^{k-2} + 2\frac{d\psi_0}{dx} \sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)} x^{k-1} + 2\lambda_n \psi_0 \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} x^k$$

$$= \psi_0 \sum_{k=0}^{n} D_k^{(n)} x^k = 0 \tag{3.31}$$

$$D_k^{(n)} = 0, \qquad k = 0, 1, 2, ..., n \tag{3.32}$$

La ecuación principal (3.28) es completamente equivalente a la ecuación estacionaria de Schrödinger, pues en $\psi_0\left(x\right)$ está implícito el potencial $V\left(x\right)$ y por lo tanto las condiciones de frontera. La ecuación principal en la forma (3.31)consiste en un polinomio de grado n igualado a cero. En el lenguaje del álgebra lineal (3.31) es una combinación lineal de potencias de la variable x, las cuales son linealmente independientes, por lo que los coeficientes deben ser cero. La ecuación principal (3.28) es en realidad un sistema algebraico (3.32) de $n+1$ ecuaciones pero con $n+2$ incógnitas; los $n+1$ coeficientes c_k, $k = 0, 1, 2, ..., n$ y la constante λ_n. Esto no es sorprendente, pues es un hecho que la ecuación diferencial de Schrödinger siempre deja un parámetro indeterminado, y es la condición de normalización de la función de onda la que fija a ese parámetro.

El método de solución que presentamos en este trabajo consiste en: a) Establecer el sistema algebraico de $n+1$ ecuaciones (3.32) a partir de $V(x)$ y $\psi_0(x)$. b) Resolver el sistema (3.32) para encontrar n de los $n+1$ coeficientes c_k del polinomio de Sturm-Liouville $P_n(x)$, quedando uno de ellos para la normalización, y además para hallar λ_n, lo que da lugar a la cuantización de la energía, de acuerdo con (3.26).

Aplicamos el método a algunos ejemplos particulares en el siguiente capítulo.

Capítulo 4

Aplicaciones del método a sistemas cuánticos

4.1. Introducción

Después de haber expuesto nuestro método en el capítulo anterior, lo aplicaremos a tres tipos de problemas, 1) un problema muy conocido, de la mayor importancia por su alcance teórico y por su contenido didáctico: el oscilador armónico, que habitualmente aparece en los textos de mecánica cuántica, para verificar directamente la validez del método propuesto. 2) luego resolvemos la ecuación de Schrödinger para el oscilador isotónico, problema que solo aparece en revistas especializadas, 3) finalmente proponemos un sistema nuevo, el cual es una generalización del potencial de Gol´dman-Krivchenkov (GK), el cual ya hemos tratado antes. Este problema no lo hemos encontrado en la literatura que conocemos.

En los casos conocidos 1) y 2) las soluciones que resultan de nuestro método coinciden completamente con los resultados también conocidos, por lo que podemos tener mayor confianza en sus predicciones, lo cual se da en el potencial de Goldman-Krivchenkov Modificado (GKM).

4.2. Aplicación a un sistema muy conocido

Oscilador Armónico

El oscilador armónico es un sistema muy conocido, que aparece en todos los libros de texto de mecánica cuántica.

Definimos al oscilador armónico por el potencial

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 \tag{4.1}$$

siendo la ecuación de Schrödinger

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (2V - 2E)\,\psi = \left(x^2 - 2E\right)\psi \tag{4.2}$$

Ya demostramos que la función de estado base es

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2} \tag{4.3}$$

Calculamos sus derivadas

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_0}{dx} &= -x\psi_0 \\ \frac{d^2\psi_0}{dx^2} &= \left(x^2 - 1\right)\psi_0 \end{aligned}$$

La constante α_0, Ec. (1.10)

$$\alpha_0 = -\frac{1}{2\psi_0}\frac{d^2\psi_0}{dx^2} + V(x) = -\frac{1}{2}\left(x^2 - 1\right) + \frac{1}{2}x^2 = \frac{1}{2}$$

por lo que la energía es

$$E_n = \lambda_n + \alpha_0 = \lambda_n + \frac{1}{2}$$

La ecuación principal para el oscilador armónico queda

$$\Lambda_n = \sum_{k=0}^{n} D_k^{(n)} x^k = \frac{1}{2}\frac{d^2P_n}{dx^2} - x\frac{dP_n}{dx} + \lambda_n P_n = 0 \tag{4.4}$$

El polinomio $P_n(x)$ es

$$P_n(x) = c_0^{(n)} + c_1^{(n)}x + c_2^{(n)}x^2 + \ldots + c_n^{(n)}x^n = \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} x^k$$

Tenemos entonces $n+1$ coeficientes $c_k^{(n)}$ desconocidos, mas la λ_n. En total $n+2$ incógnitas, pero en (4.4) hay sólo $n+1$ ecuaciones. La expresión (4.4) es un sistema de $n+1$ ecuaciones algebraicas y es completamente equivalente a la ecuación diferencial de Schrödinger

Calculamos los primeros polinomios, las energías y las funciones de onda

Estado $n = 0$

$$\begin{aligned} P_0(x) &= c_0^{(0)} \neq 0 \\ \frac{dP_0}{dx} &= 0 \\ \frac{d^2P_0}{dx^2} &= 0 \end{aligned}$$

$$\Lambda_0 = \frac{1}{2}\frac{d^2P_0}{dx^2} - x\frac{dP_0}{dx} + \lambda_0 P_0 = 0$$

Para este estado la única condición es

$$\boxed{D_0^{(0)} = \lambda_0 c_0^{(0)} = 0}$$

por lo cual debemos tener

$$\lambda_0 = 0$$

y la solución es

$$E_0 = \frac{1}{2}$$

$$\psi_0(x) = c_0^{(0)} e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

Para $n = 1$

$$\begin{aligned} P_1(x) &= c_0^{(1)} + c_1^{(1)}x, \quad c_1^{(1)} \neq 0 \\ \frac{dP_1}{dx} &= c_1^{(1)} \\ \frac{d^2P_1}{dx^2} &= 0 \end{aligned}$$

$$\Lambda_1 = \frac{1}{2}\frac{d^2P_1}{dx^2} - x\frac{dP_1}{dx} + \lambda_1 P_1 = 0 \Longrightarrow -c_1^{(1)}x + \lambda_1\left(c_0^{(1)} + c_1^{(1)}x\right) = 0$$

$$(\lambda_1 - 1)\, c_1^{(1)}x + \lambda_1 c_0^{(1)} = 0$$

Se tiene el sistema algebraico de dos ecuaciones con tres incógnitas $c_0^{(1)}$, $c_1^{(1)}$ y λ_1

$$\boxed{\begin{array}{c} D_0^{(1)} = (\lambda_1 - 1)\, c_1^{(1)} = 0 \\ D_1^{(1)} = \lambda_1 c_0^{(1)} = 0 \end{array}}$$

Como $c_1^{(1)} \neq 0$ entonces $\lambda_1 = 1$ y $c_0^{(1)} = 0$. Entonces la solución es:

$$E_1 = \lambda_1 + \frac{1}{2} = 1 + \frac{1}{2}$$

$$\psi_1(x) = c_1^{(1)} x e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

Para $n = 2$

$$\begin{aligned} P_2(x) &= c_0^{(2)} + c_1^{(2)} x + c_2^{(2)} x^2, \quad c_2^{(2)} \neq 0 \\ \frac{dP_2}{dx} &= c_1^{(2)} + 2c_2^{(2)} x \\ \frac{d^2 P_1}{dx^2} &= 2c_2^{(2)} \end{aligned}$$

$$\Lambda_2 = \frac{1}{2}\frac{d^2 P_2}{dx^2} - x\frac{dP_2}{dx} + \lambda_2 P_2 = (\lambda_2 - 2)\, c_2^{(2)} x^2 + (\lambda_2 - 1)\, c_1^{(2)} x + c_2^{(2)} + \lambda_2 c_0^{(2)} = 0$$

Sistema algebraico de tres ecuaciones

$$\boxed{\begin{array}{c} D_2^{(2)} = (\lambda_2 - 2)\, c_2^{(2)} = 0 \\ D_1^{(2)} = (\lambda_2 - 1)\, c_1^{(2)} = 0 \\ D_0^{(2)} = c_2^{(2)} + \lambda_2 c_0^{(2)} = 0 \end{array}}$$

Como $c_2^{(2)} \neq 0$ entonces $\lambda_2 = 2$ y $c_1^{(2)} = 0$, ademas $c_2^{(2)} = -\lambda_2 c_0^{(2)} = -2c_0^{(2)}$. Hemos encontrado que

$$E_2 = \lambda_2 + \frac{1}{2} = 2 + \frac{1}{2}$$

$$\psi_2(x) = c_0^{(2)} \left(1 - 2x^2\right) e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

Caso general n
Polinomio de grado n

$$\begin{aligned} P_n &= \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} x^k, \quad c_n^{(n)} \neq 0, \\ \frac{dP_n}{dx} &= \sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)} x^{k-1} \\ \frac{d^2P_n}{dx^2} &= \sum_{k=2}^{n} k\left(k-1\right) c_k^{(n)} x^{k-2} \end{aligned}$$

La ecuación principal

$$\Lambda_n = \sum_{k=0}^{n} D_k^{(n)} x^k = \frac{d^2P_n}{dx^2} - 2x\frac{dP_n}{dx} + 2\lambda_n P_n = 0, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

se convierte en

$$\begin{aligned} \Lambda_n &= 2\lambda_n \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} x^k - 2\sum_{k=0}^{n} k c_k^{(n)} x^k + \sum_{k=0}^{n} \left(k+2\right)\left(k+1\right) c_{k+2}^{(n)} x^k \\ &= \sum_{k=0}^{n} \left[2\lambda_n c_k^{(n)} - 2k c_k^{(n)} + \left(k+2\right)\left(k+1\right) c_{k+2}^{(n)}\right] x^k \\ &= \sum_{k=0}^{n} D_k^{(n)} x^k = 0 \end{aligned}$$

Término con $k = n$

$$D_n^{(n)} = 2\left(\lambda_n - n\right) c_n^{(n)} + \left(n+2\right)\left(n+1\right) c_{n+2}^{(n)} = 0$$

Como el polinomio es de grado n, entonces $c_{n+2}^{(n)} = 0$, por lo que

$$2\left(\lambda_n - n\right) c_n^{(n)} = 0$$

Pero por la misma razón, $c_n^{(n)} \neq 0$, por lo tanto

$$\lambda_n = n$$

La relación de recurrencia general es

$$c_{k+2}^{(n)} = -\frac{2\left(n-k\right)}{\left(k+2\right)\left(k+1\right)} c_k^{(n)} \tag{4.5}$$

En el caso general, con la relación (4.5) se calculan todos los coeficientes del polinomio $P_n(x)$. Se encuentra que el polinomio resultante $P_n(x)$ es proporcional al conocido polinomio de Hermite, por lo que la solución es

$$E_n = n + \frac{1}{2}$$
$$\psi_n(x) = C_n H_n(x) e^{-\frac{1}{2}x^2} \tag{4.6}$$

En esta aplicación de nuestro método se nota la simplicidad de cálculo, pero basado en los conceptos básicos de la mecánica cuántica para sistemas ligados.

4.3. Un sistema no muy conocido

Potencial Isotónico

Sólo aparece resuelto en revistas de investigación. Como hemos visto antes, el potencial llamado isotónico

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{l(l+1)}{2x^2}$$

tiene como función que cumple las condiciones de frontera en $x = 0$ y $x \to \infty$ a

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2} x^{l+1} \tag{4.7}$$

$$\frac{d\psi_0}{dx} = \psi_0 \left(-x + \frac{l+1}{x} \right) \tag{4.8}$$

$$\frac{d^2\psi_0}{dx^2} = 2\psi_0 \left(\frac{1}{2}x^2 + \frac{l(l+1)}{2x^2} - \frac{2l+3}{2} \right) \tag{4.9}$$

Con la segunda derivada (4.9) la constante α_0 de (1.10) queda así:

$$\alpha_0 = -\frac{1}{2\psi_0}\frac{d^2\psi_0}{dx^2} + V(x) = l + \frac{3}{2} \tag{4.10}$$

La función de onda es

$$\psi_n(x) = P_n(x)\,\psi_0(x) = P_n(x)\, e^{-\frac{1}{2}x^2} x^{l+1}$$

y ahora procedemos a calcular el polinomio $P_n(x)$ de grado n. Con la derivada (4.8) de $\psi_0(x)$ la ecuación principal (2.13) queda

$$\Lambda_n = \psi_0 \frac{d^2 P_n}{dx^2} + 2\psi_0 \left(-x + \frac{l+1}{x} \right) \frac{dP_n}{dx} + 2\lambda_n \psi_0 P_n = 0$$

La ecuación principal se convierte en

$$\frac{1}{\psi_0}\Lambda_n = \frac{d^2 P_n}{dx^2} + 2\left(-x + \frac{l+1}{x} \right) \frac{dP_n}{dx} + 2\lambda_n P_n = 0 \tag{4.11}$$

Hacemos el cambio de variable

$$\xi = x^2 \Rightarrow x = \xi^{\frac{1}{2}} \tag{4.12}$$

La razón de este cambio de variable es que los cálculos resultan mas sencillos. Se cambian las derivadas:

$$\frac{d}{dx} = 2\xi^{\frac{1}{2}} \frac{d}{d\xi} \tag{4.13}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = 4\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + 2\frac{d}{d\xi} \tag{4.14}$$

Sustituimos (4.12), (4.13), (4.14) en (4.11) quedando la ecuación diferencial

$$\frac{1}{\psi_0}\Lambda_n = \xi \frac{d^2 P_n}{d\xi^2} + \left(l - \xi + \frac{3}{2} \right) \frac{dP_n}{d\xi} + \frac{1}{2}\lambda_n P_n = 0 \tag{4.15}$$

Como se explicó antes, normalmente se usa el método de series de potencias para este tipo de ecuaciones, pero en nuestro método algebraico la solución es un polinomio de grado n:

$$P_n(\xi) = \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} \xi^k \tag{4.16}$$

$$\frac{dP_n}{d\xi} = \sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)} \xi^{k-1} \tag{4.17}$$

$$\frac{d^2 P_n}{d\xi^2} = \sum_{k=2}^{n} k(k-1) c_k^{(n)} \xi^{k-2} \tag{4.18}$$

Sustituyendo (4.16), (4.17), (4.18) en (4.15)

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\psi_0}\Lambda_n &= \xi\frac{d^2P_n}{d\xi^2}+\left(l-\xi+\frac{3}{2}\right)\frac{dP_n}{d\xi}+\frac{1}{2}\lambda_n P_n \\
&= \sum_{k=2}^{n} k\left(k-1\right)c_k^{(n)}\xi^{k-1}+\left(l+\frac{3}{2}\right)\sum_{k=1}^{n} kc_k^{(n)}\xi^{k-1}-\sum_{k=1}^{n} kc_k^{(n)}\xi^{k}+\frac{1}{2}\lambda_n\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)}\xi^{k} \\
&= \sum_{k=1}^{n} D_k^{(n)}\xi^k=0\Longrightarrow D_k^{(n)}=0, \quad k=0,1,2,\ldots,n
\end{aligned}$$

El sistema algebraico homogéneo de ecuaciones se encuentra construyendo los coeficientes de la potencias de x e igualando cero:

$$\begin{aligned}
D_0 &= \left(l+\frac{3}{2}\right)(1)\,c_1+\frac{\lambda_n}{2}c_0=0 \\
D_1 &= \left[2\,(1)+\left(l+\frac{3}{2}\right)(2)\right]c_2+\left(-\,(1)+\frac{\lambda_n}{2}\right)c_1=0 \\
D_2 &= \left[3\,(2)+\left(l+\frac{3}{2}\right)(3)\right]c_3+\left(-\,(2)+\frac{\lambda_n}{2}\right)c_2=0 \\
D_3 &= \left[4\,(3)+\left(l+\frac{3}{2}\right)(4)\right]c_4+\left(-3+\frac{\lambda_n}{2}\right)c_3=0 \\
&\cdots \\
D_r &= \left[(r+1)\,(r)+\left(l+\frac{3}{2}\right)(r+1)\right]c_{r+1}+\left(-r+\frac{\lambda_n}{2}\right)c_r=0
\end{aligned}$$

Como se mencionó antes, es un sistema de $n+1$ ecuaciones, para las las $n+1$ incógnitas λ_n, c_1, c_2,..., c_n, quedando c_0 como constante de normalización.

Resolviendo este sistema encontramos

$$c_1^{(n)}=-\frac{\lambda_n}{2\left(l+\frac{3}{2}\right)(1)}c_0^{(n)} \tag{4.19}$$

$$c_2^{(n)}=-\frac{\left[-2\,(1)+\lambda_n\right]}{2\left[2\,(1)+\left(l+\frac{3}{2}\right)(2)\right]}c_1^{(n)} \tag{4.20}$$

$$c_3^{(n)}=-\frac{\left[-2\,(2)+\lambda_n\right]}{2\left[3\,(2)+\left(l+\frac{3}{2}\right)(3)\right]}c_2^{(n)} \tag{4.21}$$

$$c_4^{(n)}=-\frac{\left[-3\,(2)+\lambda_n\right]}{2\left[4\,(3)+\left(l+\frac{3}{2}\right)(4)\right]}c_3^{(n)} \tag{4.22}$$

$$\cdots$$

$$c_{r+1}^{(n)} = -\frac{-2r+\lambda_n}{2\left[(r+1)(r)+\left(l+\frac{3}{2}\right)(r+1)\right]}c_r^{(n)} \tag{4.23}$$

FUNCIÓN DE ONDA

Construimos algunos polinomio de menor grado, las funciones de onda correspondiente y sus energías

Estado $n=0$

$$\begin{aligned} P_0 &= c_0^{(0)} \neq 0 \\ \frac{dP_0}{dx} &= 0 \\ \frac{d^2P_0}{dx^2} &= 0 \end{aligned}$$

La ecuación principal (4.15) da lugar a una sola ecuación algebraica

$$\boxed{\lambda_0 c_0^{(0)} = 0}$$

cuya solución es

$$\lambda_0 = 0$$

Solución

$$\begin{aligned} E_0 &= \lambda_0 + l + \frac{3}{2} = l + \frac{3}{2} \\ \psi_0(\xi) &= c_0^{(0)} e^{-\frac{1}{2}x^2} \xi^{l+1} \end{aligned}$$

Primer estado $n=1$

$$P_1 = a + b\xi$$

$$\begin{aligned} P_1(\xi) &= c_0^{(1)} + c_1^{(1)}\xi \\ \frac{dP_1}{d\xi} &= c_1^{(1)} \\ \frac{d^2P_1}{d\xi^2} &= 0 \end{aligned}$$

Ecuación principal

$$2\xi\frac{d^2P_1}{d\xi^2}+(2l-2\xi+3)\frac{dP_1}{d\xi}+\lambda_1 P_1=0$$

$$(2l-2\xi+3)\,c_1^{(1)}+\lambda_1\left(c_0^{(1)}+c_1^{(1)}\xi\right)=0$$

Se tiene el sistema de ecuaciones

$$\boxed{\begin{array}{c} c_1^{(1)}(\lambda_1-2)=0 \\ c_0^{(1)}\lambda_1+c_1^{(1)}(2l+3)=0 \end{array}}$$

con la condición $c_1^{(1)}\neq 0$. Entonces

$$\lambda_1=2$$

$$c_1^{(1)}=-\frac{2}{2l+3}c_0^{(1)}$$

Así que la solución es

$$P_1(\xi)=\frac{2}{2l+3}\left(l+\frac{3}{2}-\xi\right)c_0^{(1)}$$

El polinomio de Laguerre de grado uno es (Gradshtein)

$$L_1^{\alpha}(\xi)=\alpha+1-\xi$$

Identificamos

$$\alpha+1=l+\frac{3}{2}\Longrightarrow\alpha=l+\frac{1}{2}$$

entonces

$$P_1(\xi)=L_1^{l+\frac{1}{2}}(\xi)=L_1^{l+\frac{1}{2}}\left(x^2\right)$$

La solución para el primer estado excitado $n=1$ es

$$E_1=\lambda_1+l+\frac{3}{2}=2+l+\frac{3}{2}$$

$$\psi_1(x)=C_0^{(1)}L_1^{l+\frac{1}{2}}\left(x^2\right)e^{-\frac{1}{2}x^2}x^{l+1}.$$

Para el segundo estado excitado $n=2$ el polinomio es de segundo grado. $P_2=a+b\xi+c\xi^2$

$$P_2 = c_0^{(2)} + c_1^{(2)}\xi + c_2^{(2)}\xi^2, \quad c \neq 0$$

La ecuación principal

$$2\xi\frac{d^2P_2}{d\xi^2} + (2l - 2\xi + 3)\frac{dP_2}{d\xi} - \lambda_2 P_2 = 0$$

se convierte en

$$\left(c_2^{(2)}\lambda_2 - 4c_2^{(2)}\right)\xi^2 + \left(4c_2^{(2)} - 2c_1^{(2)} + c_1^{(2)}\lambda_2 + 2c\,(2l+3)\right)\xi + \left(c_0^{(2)}\lambda_2 + c_1^{(2)}\,(2l+3)\right) = 0$$

que da lugar al sistema algebraico de ecuaciones

$$\boxed{\begin{array}{c} c_2^{(2)}\,(\lambda_2 - 4) = 0 \\ 4c_2^{(2)} - 2c_1^{(2)} + c_1^{(2)}\lambda_2 + 2c_2^{(2)}\,(2l+3) = 0 \\ c_0^{(2)}\lambda_2 + c_1^{(2)}\,(2l+3) = 0 \end{array}}$$

Un análisis cuidadoso da la solución aceptable físicamente:

$$\lambda_2 = 4$$

$$\begin{aligned} c_1^{(2)} &= -\frac{4}{2l+3}c_0^{(2)} \\ c_1^{(2)} &= \frac{4}{(2l+5)\,(2l+3)}c_0^{(2)} \end{aligned}$$

y el polinomio es

$$P_2\,(\xi) = 8c_0^{(2)}\frac{1}{2}\left[\xi^2 - (2l+5)\,\xi + \frac{1}{4}\,(2l+5)\,(2l+3)\right]$$

el cual se identifica con el polinomio de Laguerre de segundo grado y parámetro $l + \frac{1}{2}$

$$P_2\,(\xi) = 8L_2^{l+\frac{1}{2}}\,(\xi)\,.$$

La solución para el estado $n = 2$ es

$$E_2 = \lambda_2 + l + \frac{3}{2} = 4 + l + \frac{3}{2}$$

$$\psi_2(x) = C_0^{(2)} L_2^{l+\frac{1}{2}}\left(x^2\right) e^{-\frac{1}{2}x^2} x^{l+1}.$$

Estado general n

Se propone la forma del polinomio $P_n(x)$

$$\begin{aligned} P_n(\xi) &= \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} \xi^k, \quad c_n^{(n)} \neq 0 \\ \frac{dP_n}{d\xi} &= \sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)} \xi^{k-1} \\ \frac{d^2P_n}{d\xi^2} &= \sum_{k=2}^{n} k(k-1) c_k^{(n)} \xi^{k-2} \end{aligned}$$

y se sustituye en la ecuación principal

$$\frac{1}{\psi_0}\Lambda_n = \xi \frac{d^2P_n}{d\xi^2} + \left(l - \xi + \frac{3}{2}\right)\frac{dP_n}{d\xi} + \frac{1}{2}\lambda_n P_n = 0 \qquad (4.15)$$

y entonces (4.15) es ahora

$$\sum_{k=2}^{n} k(k-1) c_k^{(n)} \xi^{k-1} + \left(l + \frac{3}{2}\right)\sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)} \xi^{k-1} - \sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)} \xi^k + \frac{1}{2}\lambda_n \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} \xi^k = 0.$$

El sistema homogéneo de ecuaciones es

$$\boxed{\begin{array}{c} \left(l+\frac{3}{2}\right)(1) c_1^{(n)} + \frac{1}{2}\lambda_n c_0^{(n)} = 0 \\ \left[(2)(1) + \left(l+\frac{3}{2}\right)(2)\right] c_2^{(n)} + \left[-(1) + \frac{1}{2}\lambda_n\right] c_1^{(n)} = 0 \\ \cdots \\ \left[(n+1)(n) + \left(n+\frac{3}{2}\right)(n+1)\right] c_{n+1}^{(n)} + \left[-(n) + \frac{1}{2}\lambda_n\right] c_n^{(n)} = 0 \end{array}}$$

La última ecuación da lugar a

$$c_{n+1}^{(n)} = \frac{n - \frac{1}{2}\lambda_n}{(n+1)\left[2n+\frac{3}{2}\right]} c_n^{(n)}$$

como el polinomio es de grado n entonces $c_n^{(n)} \neq 0$ y $c_{n+1}^{(n)} = 0$, por lo que

$$\lambda_n = 2n.$$

La relación general

$$c_{k+1}^{(n)} = \frac{k - \frac{1}{2}\lambda_n}{(k+1)\left[2k + \frac{3}{2}\right]} c_k^{(n)}$$

es una relación de recurrencia. Con ella se construyen todos los coeficientes del polinomio

$$P_n(\xi) = \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} \xi^k.$$

El resultado final es el polinomio asociado de Laguerre

$$P_n(\xi) = L_n^{l+\frac{1}{2}}\left(x^2\right).$$

Finalmente ponemos la solución que hemos encontrado

$$\boxed{\begin{array}{c} \psi_n(x) = C_n L_n^{l+\frac{1}{2}}\left(x^2\right) e^{-\frac{1}{2}x^2} x^{l+1} \\ E_n = 2n + l + \frac{3}{2} \end{array}}$$

Este es el resultado reportado en [7].

OBSERVACIÓN

Un mecanismo mas directo para encontrar la función de onda y el espectro de energía es buscar si la ecuación principal de muestro método coincide con alguna ecuación diferencial de la Física Matemática. En este caso del potencial isotónico la ecuación principal

$$\xi \frac{d^2 P_n}{d\xi^2} + \left(l - \xi + \frac{3}{2}\right) \frac{dP_n}{d\xi} + \frac{1}{2}\lambda_n P_n = 0 \qquad (4.15)$$

es precisamente la ecuación de Laguerre (Gradshtein)

$$\xi \frac{d^2 L_n^\alpha}{d\xi^2} + (\alpha - \xi + 1) \frac{dL_n^\alpha}{d\xi} + n L_n^\alpha = 0$$

y se identifica inmediatamente

$$\begin{aligned} \lambda_n &= 2n \\ \alpha &= l + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

y se encuentra la solución

$$E_n = 2n + l + \frac{3}{2}$$

$$\psi_n(x) = C_n L_n^{l+\frac{1}{2}}\left(x^2\right) e^{-\frac{1}{2}x^2} x^{l+1}$$

Pero si nuestra ecuación principal no corresponde a alguna ecuación diferencial conocida, entonces debemos hacer lo que hicimos con el oscilador armónico y con el oscilador isotónico, es decir, calcular directamente los coeficientes del polinomio $P_n(x)$.

En los libros de texto de mecánica cuántica normalmente se hace un estudio preliminar de los polinomios de Hermite y de Laguerre al ver los temas de oscilador armónico y átomo de hidrógeno, respectivamente.

4.4. Aplicación a un sistema nuevo

Llamamos al sistema nuevo potencial de Gol´dman-Krivchenkov Modificado(GKM). La modificación fundamental es que se propone que los parámetros del potencial sean diferentes, este es un potencial generalizado que no existe en la literatura, tiene como caso particular al oscilador armónico cuando $a = 0$ y $b = 1$, y al potencial isotónico cuando $a = \sqrt{l(l+1)}$ y $b = 1$.

Con nuestro método vamos a encontrar las soluciones a este sistema nuevo.

Potencial de Gol´dman-Krivchenkov Modificado(GKM)

$$V(x) = \frac{1}{2}\left(\frac{x}{b} - \frac{a}{x}\right)^2, \quad x > 0. \tag{4.24}$$

La función de estado base se encontró antes

$$\psi_0(x) = x^{\nu} e^{-\frac{1}{2b}x^2}, \quad \nu = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{4a^2+1} \tag{4.25}$$

las derivadas de $\psi_0(x)$

$$\frac{d\psi_0}{dx} = \frac{b\nu - x^2}{bx}\psi_0 \tag{4.26}$$

$$\frac{d^2\psi_0}{dx^2} = \left(2V(x) - \frac{1}{b}(2\nu - 2a + 1)\right)\psi_0 \tag{4.27}$$

calculamos la constante α_0 Ec. (2.10):

$$\alpha_0 = -\frac{1}{2\psi_0}\frac{d^2\psi_0}{dx^2} + V(x) = \frac{2\nu - 2a + 1}{2b}. \tag{4.28}$$

La ecuación principal para este potencial es, con (2.8) y (4.26),

$$\frac{\Lambda_n}{\psi_0} = 2\frac{d^2P_n}{dx^2} + 4\frac{b\nu - x^2}{bx}\frac{dP_n}{dx} + \lambda_n P_n = 0$$

Como en el caso del potencial isotónico, también hacemos el cambio de variable $\zeta = x^2$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx} &= 2\zeta^{\frac{1}{2}}\frac{d}{d\zeta}\\ \frac{d^2}{dx^2} &= 4\zeta\frac{d^2}{d\zeta^2} + 2\frac{d}{d\zeta}\end{aligned}$$

después de sustituir y hacer alguno arreglos obtenemos

$$\frac{\Lambda_n}{\psi_0} = 2\zeta\frac{d^2P_n}{d\zeta^2} + \frac{dP_n}{d\zeta} + 2\frac{b\nu - \zeta}{b}\frac{dP_n}{d\zeta} + \lambda_n P_n = 0$$

para simplificar mas aún cambiamos

$$\xi = \frac{\zeta}{b} \Longrightarrow \zeta = b\xi$$

para encontrar la ecuación diferencial

$$\frac{\Lambda_n}{\psi_0} = \xi\frac{d^2P_n}{d\xi^2} + \left(\frac{1}{2} + \nu - \xi\right)\frac{dP_n}{d\xi} + \frac{b}{2}\lambda_n P_n = 0. \tag{4.29}$$

Proponemos el polinomio de grado n

$$P_n(\xi) = \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)}\xi^k \tag{4.30}$$

$$\frac{dP_n}{d\xi} = \sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)}\xi^{k-1} \tag{4.31}$$

$$\frac{d^2P_n}{d\xi^2} = \sum_{k=2}^{n} k(k-1)c_k^{(n)}\xi^{k-2} \tag{4.32}$$

y la ecuación (4.29) es ahora

$$\frac{\Lambda_n}{\psi_0} = \sum_{k=2}^{n} k\left(k-1\right) c_k^{(n)} \xi^{k-1} + \left(\frac{1}{2}+\nu\right) \sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)} \xi^{k-1} - \sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)} \xi^{k} + \frac{b}{2}\lambda_n \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} \xi^{k} = 0. \tag{4.33}$$

Como hemos mencionado varias veces la ecuación principal es un polinomio de grado n igual a cero, lo que implica que sus coeficientes deben ser cero:

$$\frac{\Lambda_n}{\psi_0} = \sum_{k=2}^{n} D_k^{(n)} \xi^k = 0 \Rightarrow D_k^{(n)} = 0$$

Como en los casos anteriores, calculamos los coeficientes $D_k^{(n)}$ de las potencias menores de ξ y luego el de la mayor potencia n.

$$D_0 = \left(\frac{1}{2}+\nu\right)(1)\, c_1^{(n)} + \frac{b}{2}\lambda_n c_0^{(n)} = 0 \tag{4.34}$$

$$D_1 = \left[2\,(1) + \left(\frac{1}{2}+\nu\right)(2)\right] c_2^{(n)} + \left[-\,(1) + \frac{b}{2}\lambda_n\right] c_1^{(n)} = 0 \tag{4.35}$$

$$D_2 = \left[3\,(2) + \left(\frac{1}{2}+\nu\right)(3)\right] c_3^{(n)} + \left[-\,(2) + \frac{b}{2}\lambda_n\right] c_2^{(n)} = 0 \tag{4.36}$$

$$\cdots$$

$$D_n = \left[(n+1)\,(n) + \left(\frac{1}{2}+\nu\right)(n+1)\right] c_{n+1}^{(n)} + \left[-n + \frac{b}{2}\lambda_n\right] c_n^{(n)} = 0 \tag{4.37}$$

Este es un sistema algebraico homogéneo de $n+1$ ecuaciones para $n+1$ incógnitas $c_1^{(n)}$, $c_2^{(n)}$, ..., $c_n^{(n)}$ y λ_n, quedando $c_0^{(n)}$ libre para normalización.

FUNCIONES DE ONDA Y ENERGÍA

Estado base $n = 0$. El polinomio $P_0\left(x\right) = c_0^{(0)} \neq 0$ en la ecuación principal da la única ecuación

$$\boxed{\tfrac{b}{2}\lambda_0 c_0^{(0)} = 0}$$

cuya solución físicamente aceptable es

$$\lambda_0 = 0$$

por lo que la energía del estado base es

$$\begin{aligned} E_0 &= \lambda_0 + \alpha_0 = \alpha_0 = \frac{2\nu - 2a + 1}{2b} \\ \psi_0(x) &= c_0^{(0)} x^\nu e^{-\frac{1}{2b}x^2} \end{aligned}$$

Primer estado excitado $n = 1$

$$\begin{aligned} P_1(\xi) &= c_0^{(1)} + c_1^{(1)}\xi \\ \frac{dP_1}{d\xi} &= c_1^{(1)} \\ \frac{d^2P_1}{d\xi^2} &= 0 \end{aligned}$$

La ecuación principal para $n = 1$

$$\frac{\Lambda_1}{\psi_0} = \xi\frac{d^2P_1}{d\xi^2} + \left(\frac{1}{2} + \nu - \xi\right)\frac{dP_1}{d\xi} + \frac{b}{2}\lambda_1 P_1 = 0$$

es ahora

$$\frac{\Lambda_1}{\psi_0} = 0 + \left(\frac{1}{2} + \nu - \xi\right)c_1^{(1)} + \frac{b}{2}\lambda_1\left(c_0^{(1)} + c_1^{(1)}\xi\right) = 0$$

que es equivalente al sistema homogéneo de ecuaciones

$$\boxed{\begin{array}{c} \left(-1 + \frac{b}{2}\lambda_1\right)c_1^{(1)} = 0 \\ \left(\frac{1}{2} + \nu\right)c_1^{(1)} + \frac{b}{2}\lambda_1 c_0^{(1)} = 0 \end{array}}$$

Como $c_1^{(1)} \neq 0$ entonces $-1 + \frac{b}{2}\lambda_1 = 0$. La solución de este sistema es

$$\lambda_1 = \frac{2}{b}$$

$$c_1^{(1)} = -\frac{2}{2\nu + 1}c_0^{(1)}$$

Entonces este estado $n = 1$ es

$$\begin{aligned} E_1 &= \lambda_1 + \alpha_0 = \frac{2}{b} + \frac{2\nu - 2a + 1}{2b} \\ \psi_1(x) &= c_0^{(1)}\left(1 - \frac{2}{2\nu + 1}\xi\right)x^\nu e^{-\frac{1}{2b}x^2} \end{aligned}$$

Segundo estado excitado $n = 2$

$$\begin{aligned} P_2(\xi) &= c_0^{(2)} + c_1^{(2)}\xi + c_2^{(2)}\xi^2 \\ \frac{dP_1}{d\xi} &= c_1^{(2)} + 2c_2^{(2)}\xi \\ \frac{d^2P_1}{d\xi^2} &= 2c_2^{(2)} \end{aligned}$$

La ecuación principal

$$\frac{\Lambda_2}{\psi_0} = \xi\frac{d^2P_2}{d\xi^2} + \left(\frac{1}{2} + \nu - \xi\right)\frac{dP_2}{d\xi} + \frac{b}{2}\lambda_2 P_2 = 0$$

da lugar al sistema de tres ecuaciones

$$\boxed{\begin{array}{c} D_2 = \left(-2 + \frac{b}{2}\lambda_2\right)c_2^{(2)} = 0 \\ D_1 = (3+2\nu)\,c_2^{(2)} + \left(-1 + \frac{b}{2}\lambda_2\right)c_1^{(2)} = 0 \\ D_0 = \left(\frac{1}{2} + \nu\right)c_1^{(2)} + \frac{b}{2}\lambda_2 c_0^{(2)} = 0 \end{array}}$$

cuya solución es, con $c_2^{(2)} \neq 0$

$$\lambda_2 = \frac{4}{b}$$

$$c_1^{(2)} = -\frac{4}{2\nu+1}c_0^{(2)}$$

$$c_2^{(2)} = -\frac{1}{2\nu+3}c_1^{(2)} = (-1)^2\,\frac{1}{2\nu+3}\frac{4}{2\nu+1}c_0^{(2)}$$

entonces tenemos la solución para $n = 2$:

$$E_2 = \lambda_2 + \alpha_0 = \frac{4}{b} + \frac{2\nu - 2a + 1}{2b}$$

$$\psi_2(x) = c_0^{(2)}\left(1 - \frac{4}{2\nu+1}\xi + \frac{4}{(2\nu+3)(2\nu+1)}\xi^2\right)x^\nu e^{-\frac{1}{2b}x^2}$$

Caso general n

Como lo hemos hecho para el oscilador armónico y para el isotónico, se propone la forma del polinomio

$$\begin{aligned} P_n(\xi) &= \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} \xi^k, \quad c_n^{(n)} \neq 0 \\ \frac{dP_n}{d\xi} &= \sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)} \xi^{k-1} \\ \frac{d^2P_n}{d\xi^2} &= \sum_{k=2}^{n} k(k-1) c_k^{(n)} \xi^{k-2} \end{aligned}$$

Al sustituir en la ecuación principal obtenemos el resultado

$$D_k = \left[(k+1)(k) + \left(\frac{1}{2}+\nu\right)(k+1)\right] c_{k+1}^{(n)} + \left[-k + \frac{b}{2}\lambda_n\right] c_k^{(n)} = 0 \tag{4.37}$$

que da lugar a la relación de recurrencia entre los coeficientes de $P_n(\xi)$:

$$c_{k+1}^{(n)} = \frac{k - \frac{b}{2}\lambda_n}{(k+1)\left[(k) + \left(\frac{1}{2}+\nu\right)\right]} c_k^{(n)}. \tag{4.38}$$

En particular, para $k = n$

$$c_{n+1}^{(n)} = \frac{n - \frac{b}{2}\lambda_n}{(n+1)\left[(n) + \left(\frac{1}{2}+\nu\right)\right]} c_n^{(n)}$$

y como $P_n(\xi)$ es de grado n, debemos tener $c_n^{(n)} \neq 0$ y $c_{n+1}^{(n)} = 0$, lo cual tiene como consecuencia que

$$\lambda_n = \frac{2}{b} n$$

y que la energía sea

$$E_n = \lambda_n + \alpha_0 = \frac{2}{b} n + \frac{2\nu - 2a + 1}{2b}. \tag{4.39}$$

La función de onda para el estado n simbólicamente es

$$\psi_n(x) = C_n x^{\nu} e^{-\frac{1}{2b}x^2} \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} \xi^k \tag{4.40}$$

donde los coeficientes $c_k^{(n)}$ se determinan con la relación de recurrencia (4.38).

NOTA. Solución de Goldman-Krivchenkov [5]

El resultado de Goldman-Krivchenkov es, para la energía

$$E_n = \frac{2}{b}n + \frac{2\nu - 2a + 1}{2b}$$

que coincide completamente con nuestro resultado (4.39). La ecuación diferencial que esos autores manejan es la ecuación hipergeométrica confluente

$$\xi \frac{d^2y}{d\xi^2} + (\gamma - \xi)\frac{dy}{d\xi} + ny = 0$$

que coincide con nuestra ecuación principal

$$\frac{\Lambda_n}{\psi_0} = \xi \frac{d^2P_n}{d\xi^2} + \left(\frac{1}{2} + \nu - \xi\right)\frac{dP_n}{d\xi} + \frac{b}{2}\lambda_n P_n = 0 \qquad (4.29)$$

si se hacen las analogías

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{1}{2} + \nu \\ n &= \frac{b}{2}\lambda_n \end{aligned}$$

que por supuesto están de acuerdo con nuestros resultados. La solución de la ecuación (5.12) es la función hipergeométrica confluente

$$y = F\left(-n, \frac{1}{2} + \nu; \frac{x^2}{b}\right)$$

por lo que podemos concluir que

$$P_n(x) = F\left(-n, \frac{1}{2} + \nu; \frac{x^2}{b}\right)$$

NOTA

En la [5] se esboza el método de solución que utilizaron Gol'dman y Krivchenkov, basado en series de potencias. Nosotros hemos repetido esos cálculos y encontramos que son muy largos, comparados con los que hemos presentado aquí. En este ejemplo se aprecia mas la ventaja de nuestro método sobre el tradicional de series de potencias.

Capítulo 5

Resultados y Conclusiones

5.1. Introducción

Presentamos un método de solución exacta $\psi_n(x) = P_n(x)\psi_0(x)$ de la ecuación de Schrödinger para sistemas ligados, basado en dos propiedades físicas del sistema: 1) $P_n(x)$ es un polinomio de grado n, 2) la energía E_n es una constante. Con estas condiciones se construye un sistema algebraico homogéneo de $n+1$ ecuaciones, cuya solución es el conjunto de n coeficientes de $P_n(x)$ mas la energía E_n. Este sistema algebraico es completamente equivalente a la ecuación de Schrödinger. Se aplica este nuevo método a los casos conocidos del oscilador armónico y del oscilador isotónico, encontrando los mismos resultados que ya han sido reportados. Se resuelve con nuestro método un sistema nuevo que nosotros proponemos, el potencial de Gol´dman-Krivchenkov modificado, obteniendo resultados que no han sido publicados. Este método no usa el cálculo ni técnicas de solución de ecuaciones diferenciales, únicamente álgebra ordinaria, en particular de sistemas homogéneos de ecuaciones. El método es muy sencillo en cuestiones de cálculo y la física del problema está presente en todo momento. Tiene posibles aplicaciones futuras, por ejemplo, puede ser usado como una guía para construir nuevos sistemas cuánticos con solución exacta, contribuyendo así a la línea de investigación actual sobre la teletransportación, la computación cuántica y la criptografía.

5.2. El método algebraico de solución

Hacemos un resumen del método. empezando con la ecuación de schrödinger

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\,\psi = E\psi \qquad (1.10)$$

La función de onda para el estado n es

$$\psi_n(x) = P_n(x)\,\psi_0(x) \qquad (3.1)$$

La ecuación de Schrödinger se convierte en

$$E_n = -\frac{1}{2P_n\psi_0}\left(\psi_0\frac{d^2P_n}{dx^2} + 2\frac{dP_n}{dx}\frac{d\psi_0}{dx}\right) - \frac{1}{2\psi_0}\frac{d^2\psi_0}{dx^2} + V(x) \qquad (3.23)$$

La energía es una constante real. Tiene dos partes

$$E_n = \lambda_n + \alpha_0 \qquad (3.26)$$

$$\lambda_n = -\frac{1}{2P_n\psi_0}\left(\psi_0\frac{d^2P_n}{dx^2} + 2\frac{dP_n}{dx}\frac{d\psi_0}{dx}\right) \qquad (3.24)$$

$$\alpha_0 = -\frac{1}{2\psi_0}\frac{d^2\psi_0}{dx^2} + V(x) \qquad (3.25)$$

Ecuación principal

$$\Lambda_n(x) = \psi_0\frac{d^2P_n}{dx^2} + 2\frac{d\psi_0}{dx}\frac{dP_n}{dx} + 2\lambda_n\psi_0P_n = 0, \qquad (3.30)$$

La derivada de ψ_0 debe ser de la forma

$$\frac{d\psi_0}{dx} = f(x)\,\psi_0$$

donde $f(x)$ debe estar formada por potencias enteras de x, positivas o negativas. La ecuación principal se convierte en

$$\frac{1}{\psi_0}\Lambda_n(x) = \frac{d^2P_n}{dx^2} + 2f(x)\frac{dP_n}{dx} + 2\lambda_nP_n = 0,$$

siendo $P_n(x)$ un polinomio de Sturm-Liouville de grado n:

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)}x^k, \quad c_n^{(n)} \neq 0,$$

Forma explícita de la ecuación principal

$$\begin{aligned}\Lambda_n &= \psi_0 \sum_{k=2}^{n} k\left(k-1\right) c_k^{(n)} x^{k-2} + 2\psi_0 f\left(x\right) \sum_{k=1}^{n} k c_k^{(n)} x^{k-1} + 2\lambda_n \psi_0 \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} x^k \\ &= \psi_0 \sum_{k=0}^{n} D_k^{(n)} x^k = 0 \qquad (3.31)\end{aligned}$$

La única posibilidad para que se cumpla la igualdad para todo valor de x es que los coeficientes sean cero:

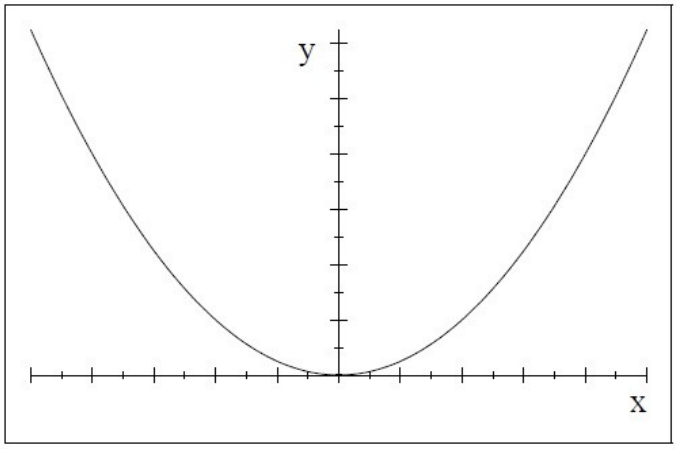
$$\boxed{D_k^{(n)} = 0, \quad k = 0, 1, \ldots, n} \qquad (3.32)$$

el cual es un sistema algebraico homogéneo cuyas soluciones dan lugar a la cuantización de la energía y al polinomio $P_n\left(x\right)$.

5.3. Ejemplos y sus soluciones

1. Oscilador armónico

$$V\left(x\right) = \frac{1}{2}x^2$$



$$\begin{aligned}\psi_0\left(x\right) &= e^{-\frac{1}{2}x^2} \\ \frac{d\psi_0}{dx} &= -x\psi_0 \\ \frac{d^2\psi_0}{dx^2} &= \left(x^2 - 1\right)\psi_0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f(x) &= -x \\ \alpha_0 &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$D_k^{(n)} = 2(\lambda_n - k)\, c_k^{(n)} + (k+2)(k+1)\, c_{k+2}^{(n)} = 0$$

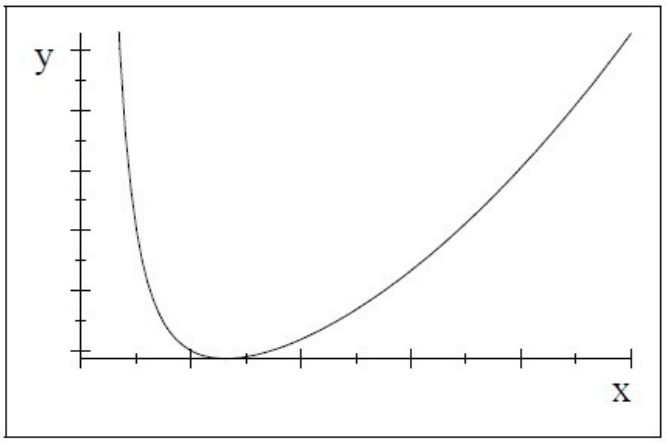
$$\begin{aligned} \lambda_n &= n \\ P_n(x) &\sim H_n(x) \end{aligned}$$

Solución

$$\begin{aligned} E_n &= n + \frac{1}{2} \\ \psi_n(x) &= C_n H_n(x)\, e^{-\frac{1}{2}x^2} \end{aligned}$$

2. Oscilador isotónico

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{l(l+1)}{2x^2}$$



$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= e^{-\frac{1}{2}x^2} x^{l+1} \\ \frac{d\psi_0}{dx} &= \psi_0 \left(-x + \frac{l+1}{x} \right) \\ \frac{d^2\psi_0}{dx^2} &= 2\psi_0 \left(V(x) - \frac{2l+3}{2} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f(x) &= -x + \frac{l+1}{x} \\ \alpha_0 &= -\frac{2l+3}{2} \end{aligned}$$

$$D_k = (k+1)\left(2k+\frac{3}{2}\right)c_{k+1}^{(n)} + \left[-k+\frac{1}{2}\lambda_n\right]c_n^{(n)} = 0$$

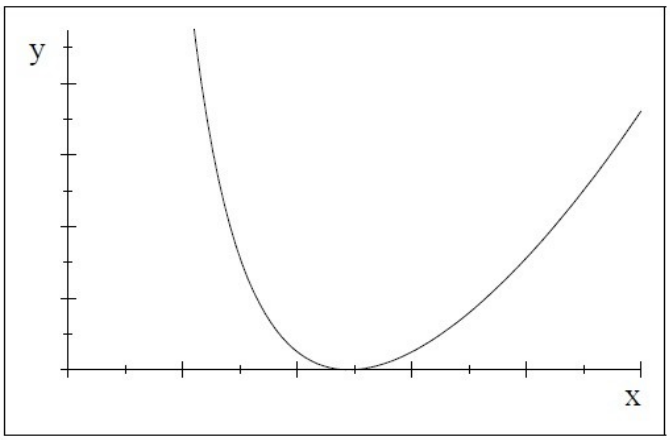
$$\begin{aligned} \lambda_n &= 2n \\ P_n(x) &\sim L_n^{l+\frac{1}{2}}\left(x^2\right) \end{aligned}$$

Solución

$$\begin{aligned} E_n &= 2n + l + \frac{3}{2} \\ \psi_n(x) &= C_n L_n^{l+\frac{1}{2}}\left(x^2\right) e^{-\frac{1}{2}x^2} x^{l+1} \end{aligned}$$

3. Potencial de Gol´dman-Krivchenkov

$$V(x) = \frac{1}{2}\left(\frac{x}{b} - \frac{a}{x}\right)^2$$



$$\begin{aligned}
\psi_0(x) &= x^{\nu} e^{-\frac{1}{2b}x^2}, \quad \nu = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{4a^2+1} \\
\frac{d\psi_0}{dx} &= \psi_0 \frac{b\nu - x^2}{bx} \\
\frac{d^2\psi_0}{dx^2} &= \psi_0 \left(2V(x) - \frac{1}{b}(2\nu - 2a + 1) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f(x) &= \frac{\nu}{x} - \frac{x}{b} \\
\alpha_0 &= \frac{2\nu - 2a + 1}{2b}
\end{aligned}$$

$$D_k = \left[(k+1)(k) + \left(\frac{1}{2} + \nu \right)(k+1) \right] c_{k+1}^{(n)} + \left[-k + \frac{b}{2}\lambda_n \right] c_k^{(n)} = 0$$

$$\begin{aligned}
\lambda_n &= \frac{2}{b} n \\
P_n(x) &= F\left(-n, \frac{1}{2} + \nu; \frac{x^2}{b} \right)
\end{aligned}$$

Solución

$$\begin{aligned}
E_n &= \frac{2}{b} n + \frac{2\nu - 2a + 1}{2b} \\
\psi_n(x) &= C_n e^{-\frac{1}{2b}x^2} x^{\nu} F\left(-n, \frac{1}{2} + \nu; \frac{x^2}{b} \right)
\end{aligned}$$

5.4. Conclusiones

Hemos presentado un método de solución de la ecuación de Schrödinger con un potencial $V(x)$ que confina a la partícula a una región en una dimensión, lo cual lleva a la existencia de condiciones a la frontera para la función de onda para el estado base $\psi_0(x)$ y por lo tanto a la cuantización de la energía E_n, con un polinomio de Sturm-Liouville $P_n(x)$, de tal manera que la solución completa para el estado n es $\psi_n(x) = P_n(x)\psi_0(x)$.

1. Con las condiciones 1) $P_n(x)$ es un polinomio de grado n, 2) la energía E_n es una constante, se construye un sistema algebraico homogéneo de $n+1$ ecuaciones, cuya solución es el conjunto de n coeficientes de $P_n(x)$ mas la energía E_n. Este sistema algebraico es completamente equivalente a la ecuación de Schrödinger.

2. Se aplicó este nuevo método a los casos del oscilador armónico y del oscilador isotónico, encontrando los mismos resultados que ya han sido reportados.

3. Se aplicó a un sistema nuevo que nosotros proponemos, el potencial de Gol´dman-Krivchenkov modificado, obteniendo resultados que no han sido publicados. Estos resultados se reducen al caso del potencial GK ordinario, pero tienen la posibilidad de ser usados en aplicaciones mas amplias, de acuerdo con la literatura sobre este sistema.

El mecanismo de solución propuesto tiene las siguientes características:

Aparte de algunas derivaciones sencillas, no usa el calculo ni técnicas de solución de ecuaciones diferenciales. No se requiere del concepto abstracto de convergencia de series, ni de álgebra lineal, únicamente de técnicas de álgebra ordinaria, en particular de sistemas homogéneos de ecuaciones.

Consideramos que las ventajas de nuestro método son

1. El método es muy sencillo en cuestiones de cálculo.

2. La física del problema en cuestión no se pierde de vista, pues está presente en todo momento.

3. Tiene posibles aplicaciones futuras, y sólo mencionamos una de ellas: puede ser usado como una guía para construir sistemas cuánticos con solución exacta, contribuyendo así a la línea de investigación actual sobre la teletransportación, la computación cuántica y la criptografía.

Bibliografía

[1] K. K. Likharev. *Quantum Mechanics*, IOP Publishing, Bristtol, 2019.

[2] L. D. Landau y E. M Lifshitz, *Mecánica cuántica no relativista*, Reverte. Barcelona, 1983.

[3] L. de la Peña, *Introducción a la mecánica cuántica*, UNAM, Fondo de Cultura Económica, México, 2006.

[4] M. L. Boas, *Mathematical methods in the physical sciences*, Wiley, Hoboken, 2006.

[5] D. J. Griffiths, *Introduction to quantum mechanics*, Pearson, Upper Sadle River, 2005.

[6] S, H, Dong, *Factorization method in quantum mechanics*, Springer, Netherlands, 2007.

[7] Z. Dongpei, *A new potential with the spectrum of an isotonic oscillator*, Journal of Physics **20** (1987) 4331.

[8] I. I. Gol'dman y V. D. Krivchenkov*, Problems in Quantum Mechanics,* Dover Publications, New York, 1993.

[9] B. Mielnik, *Factorization Method and new potentials with the harmonic espectrum*, Journal of Mathematical Physics **25** (1984) 3387.

[10] A. A. Suzco and E. Velicheva*Supersymmetry and Darboux transformations*, Journal of Physics: Conference Series **343** (2012) 012120.

[11] L. I. Marquette and C. Quesne, *New ladder operator for a rational extension of the harmonic oscillator and superintegrability of some two-dimensional systems*, Journal of Mathematical Physics **54** (2013)102102.

[12] L. M. Jones, An introduction to Mathematical Methods of Physics, Cummings.