

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA  
Facultad de Ciencias y Humanidades



**Solución a la Ecuación de Schrödinger para un potencial  
hiperbólico cuasi-exactamente soluble**

Trabajo de graduación presentado por Juan Diego Robles Guillén para  
optar al grado académico de Licenciado en Física

Guatemala,

2019







UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA  
Facultad de Ciencias y Humanidades



**Solución a la Ecuación de Schrödinger para un potencial  
hiperbólico cuasi-exactamente soluble**

Trabajo de graduación presentado por Juan Diego Robles Guillén para  
optar al grado académico de Licenciado en Física

Guatemala,

2019



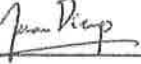
Vo.Bo.:

(f)   
Dr. Ranferi Gutiérrez

Tribunal Examinador:

(f)   
Dr. Ranferi Gutiérrez

(f)   
MSc. Zaida del Rosario Urrutia

(f)   
Msc. Juan Diego Chang

Fecha de aprobación: Guatemala, 10 de Mayo de 2019.





*" I would rather have questions that can't be answered than answers than can't be questioned" -Richard Feynman*

Pensando qué es lo que debía escribir en este espacio, me puse a considerar todas las posibles cosas que quisiera que los lectores de mi tesis supieran del camino que hay detrás de ella. Sin embargo, se volvió tan extensa la lista que tendré que tratar de darles una pequeña idea nada más. Comencé este camino pensando que al llegar al final, iba a tener las respuestas de muchas preguntas que me hice siempre acerca de mi vida. A pesar de haber encontrado algunas, hoy puedo asegurarles que tengo muchas más preguntas y que tendré que buscar nuevos caminos y aventuras que me permitan responderlas.

Entre los detalles de cómo llegué hasta acá, pues es necesario que sepan que llegué con unas cuantas libras de más, algunas metidas de pata, varios regaños, una que otra frustración, una buena y necesaria cantidad de desvelos, carreras a última hora, y una infinita (no estoy exagerando) cantidad de veces que me pregunté a mí mismo alguna de todas estas cosas: ¿En qué estabas pensando?, ¿Para qué me va a servir esto?, ¿Será que vale la pena?, ¿Por qué ya no sirve si no hice nada?, ¿Cómo construyo una lightsaber?

Ahora, dejenme decirles que a pesar de que tristemente sigo sin mi lightsaber, entre las pocas respuestas que logré encontrar puedo asegurarles que definitivamente todo sí valió la pena, las cosas a veces simplemente dejan de funcionar, no es necesario encontrarle respuesta a todo, siempre se tiene que disfrutar el momento, hay que pensar antes de actuar y que la física es lo máximo.

Luego de eso, quiero que sepan que este trabajo recopila el esfuerzo y dedicación de cuatro años universitarios en los que logré vivir una experiencia completamente diferente, inesperada e indudablemente inolvidable. Sé que el camino hasta acá no ha sido para nada fácil y es por eso que quiero dedicarles unas palabras a todas las personas que de alguna forma u otra estuvieron siempre a mi lado.

Para empezar, quiero agradecerle a Dios por haberme permitido llegar a este punto de

mi vida y culminar un sueño y una meta más. A mis padres, por todo su apoyo a lo largo de estos años y por creer en mí de manera incondicional. A mis hermanos, que a pesar de siempre molestarme con ser el raro de la familia (por haber estudiado algo que nadie entiende) fueron y serán siendo mis ejemplos a seguir y unas personas a las que admiro mucho. De manera especial, también le quiero agradecer a mi abuelo ya que sin él nada de esto hubiera sido posible.

De igual forma quiero agradecerle al Doctor Ranferí Gutiérrez por todo su apoyo en la realización de este trabajo, por su paciencia y toda su buena disposición hacia mi persona. A mis catedráticos del departamento de Física por transmitirme su conocimiento, su pasión por la ciencia. De igual forma, gracias por las pláticas y consejos que llevaré conmigo el resto de mi vida. De forma especial quiero agradecerle a Msc. Zaida Urrutia por su constante apoyo y preocupación para que siempre todo marchara lo mejor posible. A mis profesores del departamento de Matemáticas que permitieron que lograra encontrarle pasión a otra ciencia.

Por último, pero no menos importante, quiero agradecerles a Olguita y a Byron porque gracias a ellos mi estancia en la universidad fue sumamente agradable. A todos mis compañeros y amigos por las risas, alegrías, enojos, proyectos a última hora (los cuales puedo decir que fueron la mayoría), cervezas, salidas, consejos, abrazos, conversaciones sin sentido, chistes, memes y cada uno de los momentos que siempre voy a recordar y me van a sacar una sonrisa donde sea que esté. A todas las personas que, con un pequeño gesto o saludo, siempre alegraron mis días en la universidad e hicieron esta experiencia algo extraordinario. Y claro, a mi novia, por todo su apoyo y por siempre creer en mí.

Gracias a todos.

*"We keep moving forward, opening new doors, and doing new things, because we're curious and curiosity keeps leading us down new paths." -Walt Disney*

<b>Prefacio</b>	<b>VI</b>
<b>Lista de figuras</b>	<b>X</b>
<b>Lista de cuadros</b>	<b>XI</b>
<b>Resumen</b>	<b>XIII</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Generalidades sobre los potenciales cuasi-exactamente solubles y la solución polinomial de la ecuación diferencial de Heun</b>	<b>3</b>
2.1. Ecuación Diferencial de Heun . . . . .	4
2.2. Ansatz de Bethe . . . . .	6
<b>3. Solución analítica del potencial cuasi-exactamente soluble <math>V(x) = V_1 sech^2(x) + V_2 sinh^4(x)</math></b>	<b>9</b>
3.1. Reducción de la Ecuación de Schrödinger a la Ecuación Confluente de Heun . . . . .	9
3.2. Soluciones simétricas y antisimétricas . . . . .	11
3.2.1. Soluciones simétricas . . . . .	12
3.2.2. Soluciones antisimétricas . . . . .	16
<b>4. Solución numérica de la ecuación de Schrödinger correspondiente al potencial <math>V(x) = V_1 sech^2(x) + V_2 sinh^4(x)</math> aplicando el método de Numerov</b>	<b>19</b>
4.1. Método de Numerov . . . . .	19
4.2. Implementación Matricial del Método de Numerov . . . . .	20
4.3. Estados de energía simétricos . . . . .	22
4.4. Estados de energía antisimétricos . . . . .	22
<b>5. Comparación entre las soluciones analítica y numérica de la ecuación de Schrödinger aplicada al potencial <math>V(x) = V_1 sech^2(x) + V_2 sinh^4(x)</math></b>	<b>23</b>
5.1. Estados simétricos . . . . .	23
5.2. Estados antisimétricos . . . . .	25

<b>6. Conclusiones</b>	<b>29</b>
<b>7. Bibliografía</b>	<b>31</b>
<b>8. Anexos</b>	<b>33</b>
8.1. Algoritmo del método de Numerov . . . . .	33

---

Lista de figuras

---

1.	Potencial hiperbólico $V(x) = \frac{1}{10} \operatorname{sech}^2(x) + 21.4695048315 \sinh^4(x)$ y sus correspondientes eigenvalores $E_{1,0}$ y $E_{1,2}$ . . . . .	14
2.	Función de Onda para el primer estado simétrico $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 21.4695048315, n=1, E_{1,0} \approx 2.1156916143$ . . . . .	14
3.	Función de Onda para el primer estado simétrico $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 21.4695048315, n=1, E_{1,2} \approx 14.91348799$ . . . . .	14
4.	Potencial hiperbólico $V(x) = \frac{1}{10} \operatorname{sech}^2(x) + 27.730495168 \sinh^4(x)$ y sus correspondientes eigenvalores $E_{2,0}$ y $E_{2,2}$ . . . . .	15
5.	Función de Onda para el segundo estado simétrico $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 27.730495168, n=1, E_{2,0} \approx 2.2822151417$ . . . . .	15
6.	Función de Onda para el segundo estado simétrico $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 27.730495168, n=1, E_{2,2} \approx 16.088605251$ . . . . .	15
7.	Potencial hiperbólico $V(x) = \frac{1}{10} \operatorname{sech}^2(x) + 36.5750776405 \sinh^4(x)$ y eigenvalores $E_{1,1}$ y $E_{1,3}$ . . . . .	16
8.	Función de Onda para el primer estado antisimétrico $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 36.5750776405, n=1, E_{1,1} \approx 8.7668121726$ . . . . .	17
9.	Función de Onda para el primer estado antisimétrico $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 36.5750776405, n=1, E_{1,3} \approx 27.8151538386$ . . . . .	17
10.	Potencial hiperbólico $V(x) = \frac{1}{10} \operatorname{sech}^2(x) + 44.6249223595 \sinh^4(x)$ y eigenvalores $E_{2,1}$ y $E_{2,3}$ . . . . .	17
11.	Función de Onda para el segundo estado antisimétrico $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 44.6249223595, n=1, E_{2,1} \approx 9.3149509185$ . . . . .	18
12.	Función de Onda para el segundo estado antisimétrico $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 44.6249223595, n=1, E_{2,3} \approx 29.5030830702$ . . . . .	18
13.	Comparación entre las Funciones de Onda simétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor $E_{1,0}$ . . . . .	24
14.	Comparación entre las Funciones de Onda simétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor $E_{1,2}$ . . . . .	24
15.	Comparación entre las Funciones de Onda simétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor $E_{2,0}$ . . . . .	25
16.	Comparación entre las Funciones de Onda simétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor $E_{2,2}$ . . . . .	25

17. Comparación entre las Funciones de Onda antisimétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{1,1}$  . . . . . 26
18. Comparación entre las Funciones de Onda antisimétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{1,3}$  . . . . . 26
19. Comparación entre las Funciones de Onda antisimétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{2,1}$  . . . . . 27
20. Comparación entre las Funciones de Onda antisimétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{2,3}$  . . . . . 27

1.	Resultados de los parámetros correspondientes al primer estado antisimétrico del potencial $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ . . . . .	16
2.	Valores numéricos del espectro de energía correspondientes al primer estado simétrico del potencial $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ . . . . .	22
3.	Valores numéricos del espectro de energía correspondientes al primer estado antisimétrico del potencial $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ . . . . .	22
4.	Valores analíticos y numéricos del espectro de energía correspondientes al primer estado simétrico del potencial $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ . . . .	24
5.	Valores analíticos y numéricos del espectro de energía correspondientes al primer estado antisimétrico del potencial $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ . .	26





La ecuación de Schrödinger con un potencial cuasi-exactamente soluble que tiene la forma  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$  es estudiada y resuelta a través de la aplicación de dos métodos. Como primer método, se utilizó una aproximación algebraica en la cual se transforma la ecuación de Schrödinger en una ecuación confluyente de Heun. Con esto, se obtienen soluciones en forma polinomial, las cuales al aplicarles posteriormente el Ansatz de Bethe, logran ser unificadas en su parte simétrica como antisimétrica. Las soluciones obtenidas solamente representan una parte del espectro de energía del potencial.

Posteriormente, se resuelve de nuevo la ecuación de Schrödinger en el mismo potencial con un método numérico conocido como Método de Numerov. En este caso, las soluciones de nuevo corresponden a estados ligados y se lograron predecir estados de energía que no logran ser determinados con el método analítico.

Finalmente, se genera una comparación entre las soluciones obtenidas al crear una superposición de las gráficas de las funciones de onda que representan cada uno de los valores de energía obtenidos. A través de esta comparación se concluye la validez de los métodos utilizados.



Desde los comienzos de la Mecánica Cuántica ha existido un interés particular en obtener soluciones exactas de la Ecuación de Schrödinger. Esto se debe a que dichas soluciones permiten generar modelos y ser la base teórica de aplicaciones prácticas posteriores. De igual forma, estas soluciones proveen la información necesaria para conocer el estado del sistema cuántico completo. Sin embargo, es limitada la cantidad de sistemas que se pueden resolver exactamente.

Hace algunos años se descubrieron dos clases nuevas de potenciales: unos que pueden ser resueltos únicamente cuando sus parámetros guardan ciertas relaciones entre sí, y otros en los que únicamente es posible conocer parte de su espectro de energía. A los primeros se les conoce con el nombre de potenciales condicionalmente solubles [1], mientras que a los segundos, con el nombre de potenciales cuasi-exactamente solubles [2].

En los potenciales condicionalmente solubles es posible calcular exactamente sus niveles de energía cuando los parámetros que describen el potencial cumplen con ciertas relaciones entre sí. En los potenciales cuasi-exactamente solubles, el resto del espectro de energía que no se puede determinar analíticamente, debe ser completado a través de métodos numéricos [3].

Algunos potenciales cuasi-exactamente solubles pueden ser resueltos al transformar la ecuación de Schrödinger en la Ecuación de Heun [4], [5]. Posteriormente se puede aplicar el método del Ansatz de Bethe [6] para obtener soluciones polinomiales de esa ecuación. Este procedimiento permite encontrar parte del espectro de energía del correspondiente potencial.

En este trabajo de tesis se estudia el potencial hiperbólico  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ , el cual resulta ser un potencial cuasi-exactamente soluble. Los potenciales hiperbólicos, como el que se estudia en esta tesis, han llamado la atención recientemente debido a su gran cantidad de aplicaciones en la física. Por ejemplo, Oyewumi et al. estudiaron el potencial Dirac-Rosen-Morse [7]; el potencial Razavy [8] ha sido estudiado por Reyes et al [9]; Kurniawan et al estudiaron la ecuación de Dirac para una partícula de espín 1/2 bajo la influencia del potencial Pöschl-Teller [10]. Aplicaciones adicionales pueden ser encontradas en [4].

El procedimiento que se va a llevar a cabo en este trabajo para resolver el potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$  consiste, primero, en la reducción de la Ecuación de Schrödinger, mediante una transformación adecuada, a la ecuación diferencial de Heun. Posteriormente se aplicará el Ansatz de Bethe para obtener parte del espectro de energía correspondiente a ese potencial. Finalmente, se aplicará un método numérico para comparar los resultados teóricos y predecir otros niveles de energía.

Se encontró concordancia entre los resultados teóricos y los numéricos, lo que asegura la validez de la implementación de ambos métodos, al igual que la validez de los resultados y las predicciones realizadas.

---

## Generalidades sobre los potenciales cuasi-exactamente solubles y la solución polinomial de la ecuación diferencial de Heun

---

En la Mecánica Cuántica es fundamental resolver la Ecuación de Schrödinger debido a que sus soluciones, conocidas con el nombre de funciones de onda, cuentan con toda la información necesaria para describir un sistema cuántico. A pesar de esto, solo es posible resolver exactamente dicha ecuación para unos cuantos potenciales, tales como el oscilador armónico, el átomo de hidrógeno, la partícula en una caja, entre otros. Como consecuencia a esta limitante, en los últimos años ha sido un área importante de investigación el buscar nuevos métodos que permitan resolver, en forma exacta o aproximada la Ecuación de Schrödinger.

Históricamente se creía que los sistemas se podían clasificar únicamente en sistemas exactamente solubles o no solubles. Los sistemas exactamente solubles son aquellos para los cuales se puede determinar completamente el espectro de energía, mientras que, para los sistemas no solubles, es imposible lograr determinar este espectro de forma analítica, por lo que se requieren métodos de aproximación, como el WKB [11], métodos numéricos [12] y la teoría perturbativa[13], entre otros.

Hoy en día, como se explicó en el capítulo anterior, existen dos clases intermedias de potenciales entre los potenciales exactamente solubles y los no solubles. Una corresponde a los sistemas condicionalmente solubles, los cuales se caracterizan por tener soluciones exactas de su espectro de energía solamente si sus parámetros cumplen con ciertas restricciones [1], y la otra, correspondiente a los sistemas cuasi-exactamente solubles, los cuales se caracterizan porque es posible solo la obtención parcial de su espectro de energía, mediante procedimientos analíticos; estos últimos fueron estudiados por primera vez por Alexander Turbiner[2].

Estas nuevas clases de sistemas contribuyeron al desarrollo de nuevos métodos de solución de la Ecuación de Schrödinger ya que algunos métodos conocidos no eran adecuados para

resolverlos. En esta tesis se aplica uno de los métodos desarrollados para resolver sistemas cuasi-exactamente solubles.

Se descubrió que se podían resolver algunos de los sistemas cuasi-exactamente solubles transformando la correspondiente Ecuación de Schrödinger en una ecuación hipergeométrica [4], [5] y aplicando posteriormente, en algunos casos, el método del Ansatz de Bethe [3] para encontrar algunas de sus soluciones polinomiales y sus eigenvalores de energía.

En esta tesis se transformó la Ecuación de Schrödinger, aplicada al potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ , en una ecuación tipo Heun y posteriormente se aplicó el Ansatz de Bethe, lo que permitió encontrar únicamente parte de su espectro de energía. Finalmente, se aplicó el método de Numerov para obtener una solución numérica y así poder comparar con los eigenvalores teóricos y luego predecir otros eigenvalores.

## 2.1. Ecuación Diferencial de Heun

Muchas de las leyes de la física pueden ser expresadas en forma de ecuaciones diferenciales, por lo que el estudio de tales ecuaciones es de gran importancia.

Las ecuaciones diferenciales pueden ser clasificadas de acuerdo a la presencia de singularidades en ella. Una singularidad en una ecuación diferencial se refiere a un punto en el cual, cualquiera de la funciones presentes en la ecuación, diverge cuando se le asigna un valor [14]. Debido a esto, se pueden tener ecuaciones diferenciales con una cantidad variable de singularidades.

Sin importar la cantidad de singularidades que una ecuación diferencial tenga, estas se clasifican en singularidades regulares o irregulares. Por ejemplo, si la ecuación diferencial tiene la forma

$$f''(x) + p_1(x)f'(x) + p_0(x)f(x) = 0$$

se considera que  $p_1(x)$  y  $p_0(x)$  presentan una singularidad regular en  $x = a$  si  $\lim_{x \rightarrow a} (x - a)p_1(x)$  y  $\lim_{x \rightarrow a} (x - a)^2 p_0(x)$  son finitos. Para cualquier otro caso se dice que la singularidad es irregular.

Dentro de las ecuaciones diferenciales con singularidades se encuentra, por ejemplo, la ecuación hipergeométrica, la cual se aplica en muchos problemas en física.

La ecuación hipergeométrica tiene la forma general

$$z(z-1) \frac{d^2 w}{dz^2} + [c - (1+a+b)z] \frac{dw}{dz} - abw = 0$$

y tiene tres puntos singulares regulares: uno en  $z = 0$ , otro en  $z = 1$  y el último en el infinito [15]. Las ecuaciones de Jacobi, Legendre, Gegenbauer y Tchebycheff son formas especiales de la ecuación hipergeométrica.

Es posible encontrar soluciones en forma de series finitas, alrededor de puntos regulares,

tanto de la ecuación hipergeométrica como de sus casos especiales. Este hecho permite llegar a conocer las propiedades de sus soluciones.

Otro ejemplo de ecuación diferencial con singularidades es la ecuación de Heun, la cual fue introducida por Karl Heun en 1889 [16] y es una ecuación diferencial de segundo orden.

La ecuación de Heun es del tipo Fuchsiano, lo que implica que contiene solamente singularidades regulares. La cantidad de singularidades de dicha ecuación es de cuatro y algunas de sus formas especiales o confluentes toman el nombre de ecuaciones de Lamé, Mathieu, Coulomb, entre otras.

La ecuación de Heun tiene la forma general

$$\frac{d^2w}{dz^2} + \left[ \frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z-1} + \frac{\epsilon}{z-a} \right] \frac{dw}{dz} + \frac{\alpha\beta(z-h)}{z(z-1)(z-a)} w = 0 \quad (1)$$

y debe cumplir con la condición  $\alpha + \beta + 1 = \gamma + \delta + \epsilon$ . En la ecuación (1)  $h$  es un parámetro accesorio, es decir, un parámetro que puede tomar varios valores según la forma en la que la ecuación se trabaja.

Partiendo de (1) se puede encontrar la forma confluyente, la cual tiene la forma[17]

$$\frac{d^2w}{dz^2} + \left[ \alpha + \frac{\gamma+1}{z} + \frac{\beta+1}{z-1} \right] \frac{dw}{dz} + \left( \frac{\nu}{z} + \frac{\mu}{z-1} \right) w = 0 \quad (2)$$

La ecuación (2) es de gran importancia en la física ya que ha permitido encontrar soluciones a algunos problemas, tales como:

- Dos electrones en una esfera que se repelen [6]
- Perturbaciones estáticas de la solución no extremal Reissner-Nordström[6]
- Potenciales de Coulomb desplazados [18]
- Perturbaciones en la métrica de Kerr [17]
- Potenciales cuasi-exactamente solubles con doble pozo [4]

Para conocer aún más la importancia de esta ecuación y algunas otras aplicaciones pueden consultarse las referencias [6], [17], [18].

Como se indicó anteriormente, la Ecuación de Schrödinger aplicada al potencial  $V(x) = V_1 \text{sech}^2(x) + V_2 \text{sinh}^4(x)$  se puede reducir, mediante transformaciones adecuadas, a una ecuación diferencial de la forma (2) y posteriormente ser resuelta mediante el método del Ansatz de Bethe.

## 2.2. Ansatz de Bethe

El Ansatz de Bethe es un método que se derivó a partir de las investigaciones de Hans Bethe para resolver el Hamiltoniano antiferromagnético del modelo de Heisenberg. Este método permite resolver ecuaciones diferenciales de segundo orden cuando los coeficientes que acompañan a las derivadas son polinomios y los coeficientes de dichos polinomios cumplen con ciertas condiciones que se describen mas adelante. La ecuación de Heun es una ecuación diferencial de segundo orden y los coeficientes que acompañan a sus derivadas tienen forma polinomial, por lo que, en principio, se puede aplicar el Ansatz de Bethe.

En el método del ansatz de Bethe se supone que la ecuación diferencial tiene la siguiente forma:

$$\{X(\beta)\frac{d^2}{d\beta^2} + Y(\beta)\frac{d}{d\beta} + Z(\beta)\}S(\beta) = 0 \quad (3)$$

donde  $X(\beta), Y(\beta)$  y  $Z(\beta)$  son polinomios, a lo sumo, de grado 4, 3 y 2 respectivamente:

$$X(\beta) = \sum_{i=0}^4 a_i \beta^i \quad Y(\beta) = \sum_{i=0}^3 b_i \beta^i \quad Z(\beta) = \sum_{i=0}^2 c_i \beta^i$$

A partir de dichos polinomios, se puede notar que la ecuación (3) cuenta con un máximo de 12 parámetros, procedentes de los valores que puedan tomar  $a_i, b_i, c_i$ . Entre los casos especiales de la ecuación (3) se encuentra la Ecuación de Heun, de la cual se puede derivar la ecuación confluyente de Heun (2).

La aplicación del método del ansatz de Bethe a la ecuación (2) permite obtener sus soluciones en la forma polinomial [6]

$$S(\beta) = \prod_{i=1}^n (\beta - \beta_i). \quad (4)$$

Sin importar cuales sean los coeficientes en los polinomios  $X(\beta)$  y  $Y(\beta)$  en (3), los valores de los coeficientes  $c_n$  del polinomio  $Z(\beta)$  deben cumplir con las siguientes relaciones:

$$c_2 = -n(n-1)a_4 - nb_3 \quad (5)$$

$$c_1 = -[2(n-1)a_4 + b_3] \sum_{i=1}^n z_i - n(n-1)a_3 - nb_2 \quad (6)$$

$$c_0 = -[2(n-1)a_4 + b_3] \sum_{i=1}^n z_i^2 - 2a_4 \sum_{i<j}^n z_i z_j - [2(n-1)a_3 + b_2] \sum_{i=1}^n z_i - n(n-1)a_2 - nb_1 \quad (7)$$

Los sistemas cuasi-exactamente solubles se caracterizan porque las relaciones de recursión que se logran determinar cuentan con la particularidad de que siempre van a involucrar



tres o más coeficientes consecutivos. Esta es una propiedad que se encuentra solamente en sistemas cuasi-exactamente solubles ya que, por lo general, los sistemas exactamente solubles presentan relaciones recursivas que involucran únicamente dos coeficientes consecutivos [19].

Partiendo de las relaciones (5)-(7) y determinando los valores necesarios de los coeficientes de los cuales estas dependen  $(a_n, b_n)$ , las raíces de  $S(\beta)$  cumplen con las ecuaciones del Ansatz de Bethe, las cuales son

$$\sum_{j \neq i}^n \frac{2}{\beta_i - \beta_j} + \frac{b_3 \beta_i^3 + b_2 \beta_i^2 + b_1 \beta_i + b_0}{a_4 \beta_i^4 + a_3 \beta_i^3 + a_2 \beta_i^2 + a_1 \beta_i + a_0} = 0, i = 1, 2, \dots, n \quad (8)$$

Los resultados que se obtienen al utilizar las relaciones de recursión y las ecuaciones del Ansatz de Bethe son todos los polinomios necesarios  $Z(\beta)$  para que la ecuación diferencial (3) tenga soluciones polinomiales con la forma de (4) [6].

Si bien este procedimiento es válido para resolver el problema del potencial  $V(x) = V_1 \text{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ , muchos otros autores han logrado aplicarlo para resolver algunos otros sistemas cuasi-exactamente solubles, entre los cuales se pueden mencionar:

- Potenciales de Manning modificados
- Potencial Anarmónico singular
- Ecuaciones del tipo Meixner-Pollaczek
- Sistemas de bosones
- Electrones en campos magnéticos

Para conocer más sobre las aplicaciones anteriores, pueden consultarse las referencias [3], [19]-[22].

En conclusión, el procedimiento que se va a realizar tiene como objetivo la determinación de los coeficientes  $c_n$  a través de las relaciones (5)-(7) y la determinación de los coeficientes  $\beta_i$ , los cuales permiten obtener los eigenvalores por medio las ecuaciones del Ansatz de Bethe (8) aplicadas al potencial  $V(x) = V_1 \text{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ .



---

Solución analítica del potencial cuasi-exactamente soluble  
 $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$

---

En este capítulo se presenta el procedimiento a través del cual se resuelve analíticamente la ecuación de Schrödinger aplicada al potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ ; el procedimiento inicia con la transformación de esa ecuación a una ecuación tipo Heun. Posteriormente se aplica el método del Ansatz de Bethe para obtener una solución general.

Finalmente, a manera de ejemplo se presenta una aplicación de los resultados obtenidos, la cual permite visualizar el comportamiento de los primeros estados simétricos como antisimétricos del potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ .

### 3.1. Reducción de la Ecuación de Schrödinger a la Ecuación Confluente de Heun

El estudio de los eigenvalores del potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$  se inicia escribiendo la ecuación de Schrödinger en 1D:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(\mathbf{x})\right]\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}). \quad (9)$$

Para simplificar, se escoge trabajar en unidades  $\hbar = m = 1$ , con lo que (9) se reduce a

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (10)$$

Al sustituir en (10) el potencial

$$V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x) \quad (11)$$

se obtiene

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [\epsilon - (A \operatorname{sech}^2(x) + B \sinh^4(x))] \psi = 0 \quad (12)$$

donde  $\epsilon = 2E, A = 2V_1$  y  $B = 2V_2$ .

A continuación se propone el ansatz  $\beta = \cosh^2(x)$ , y se encuentra que el operador segunda derivada es de la forma

$$\frac{d^2}{dx^2} = 4\beta(\beta - 1) \frac{d^2}{d\beta^2} + 2(2\beta - 1) \frac{d}{d\beta}. \quad (13)$$

Cuando (13) se reemplaza en (12) se obtiene

$$\beta(\beta - 1) \frac{d^2\psi}{d\beta^2} + (\beta - \frac{1}{2}) \frac{d\psi}{d\beta} + \frac{1}{4} [\epsilon - \frac{A}{\beta} - B\beta^2 + 2B\beta - B] \psi = 0. \quad (14)$$

Ahora se realiza un nuevo ansatz de la forma  $\psi = e^{\alpha\beta} f(\beta)$  con  $\alpha = -\frac{\sqrt{B}}{2}$ , de donde se obtienen los operadores derivada

$$\frac{d\psi}{d\beta} = \alpha e^{\alpha\beta} f + e^{\alpha\beta} \frac{df}{d\beta} \quad (15)$$

y

$$\frac{d^2\psi}{d\beta^2} = \alpha^2 e^{\alpha\beta} f + 2\alpha e^{\alpha\beta} \frac{df}{d\beta} + e^{\alpha\beta} \frac{d^2f}{d\beta^2}. \quad (16)$$

Sustituyendo (15) y (16) en (14) se obtiene

$$\frac{d^2f}{d\beta^2} + [2\alpha + \frac{1/2}{\beta} + \frac{1/2}{\beta - 1}] \frac{df}{d\beta} + [\alpha^2 - \frac{B}{4} + \frac{\alpha/2 - \epsilon/4 + A/4 + B/4}{\beta} + \frac{\alpha/2 + \epsilon/4 - A/4}{\beta - 1} + \frac{A/4}{\beta^2}] f = 0 \quad (17)$$

La ecuación (17) se reduce a

$$\frac{d^2f}{d\beta^2} + [2\alpha + \frac{1/2}{\beta} + \frac{1/2}{\beta - 1}] \frac{df}{d\beta} + [\frac{\mu}{\beta} + \frac{\nu}{\beta - 1} + \frac{A/4}{\beta^2}] f = 0. \quad (18)$$

donde  $\nu = \alpha/2 + \epsilon/4 - A/4$  y  $\mu = \alpha/2 - \epsilon/4 + A/4 + B/4$ .

La ecuación (18) aún no tiene la forma de la ecuación diferencial confluyente de Heun debido al término  $\frac{A/4}{\beta^2}$ , por lo tanto, se realiza un nuevo ansatz de la forma  $f(\beta) = \beta^{\frac{\lambda}{2}} g(\beta)$ .

Con este nuevo ansatz, los operadores derivada son

$$\frac{df}{d\beta} = \frac{\lambda}{2} \beta^{\lambda/2-1} g + \beta^{\lambda/2} \frac{dg}{d\beta} \quad (19)$$

y

$$\frac{d^2 f}{d\beta^2} = \frac{\lambda}{2} \left( \frac{\lambda}{2} - 1 \right) \beta^{\lambda/2-2} g + \lambda \beta^{\lambda/2-1} \frac{dg}{d\beta} + \beta^{\lambda/2} \frac{d^2 g}{d\beta^2} \quad (20)$$

al sustituir (19) y (20) en (18) se obtiene

$$\frac{d^2 g}{d\beta^2} + \left[ 2\alpha + \frac{\lambda + 1/2}{\beta} + \frac{1/2}{\beta - 1} \right] \frac{dg}{d\beta} + \left[ \frac{\mu + \alpha\lambda - \lambda/4}{\beta} + \frac{\nu + \lambda/4}{\beta - 1} + \frac{\lambda^2/4 - \lambda/4 + A/4}{\beta^2} \right] g = 0 \quad (21)$$

o de forma equivalente

$$\frac{d^2 g}{d\beta^2} + \left[ 2\alpha + \frac{\lambda + 1/2}{\beta} + \frac{1/2}{\beta - 1} \right] \frac{dg}{d\beta} + \left[ \frac{\rho}{\beta} + \frac{\delta}{\beta - 1} + \frac{\sigma}{\beta^2} \right] g = 0. \quad (22)$$

donde  $\rho = \mu + \alpha\lambda - \lambda/4$ ,  $\delta = \nu + \lambda/4$  y  $\sigma = \lambda^2/4 - \lambda/4 + A/4$ .

A continuación se impone la condición  $\sigma = 0$  en (22), con lo cual se obtiene

$$\frac{d^2 g}{d\beta^2} + \left[ 2\alpha + \frac{\lambda + 1/2}{\beta} + \frac{1/2}{\beta - 1} \right] \frac{dg}{d\beta} + \left[ \frac{\rho}{\beta} + \frac{\delta}{\beta - 1} \right] g = 0. \quad (23)$$

El resultado final de esta restricción conlleva a que (23) tenga la forma de la ecuación diferencial confluyente de Heun, es decir, la ecuación (2) del capítulo anterior [23].

### 3.2. Soluciones simétricas y antisimétricas

Dentro del estudio de la Mecánica Cuántica se pueden esperar y obtener soluciones tanto simétricas como antisimétricas a la ecuación de Schrödinger cuando el hamiltoniano conmuta con el operador de paridad.

En este caso en particular, para obtener la forma unificada de ambos tipos de soluciones se propone una nueva transformación de la forma  $g(\beta) = (\beta - 1)^{\frac{l}{2}} h(\beta)$ .

La transformación propuesta restringe el valor que puede obtener el parámetro  $l$ ; para las soluciones simétricas se tiene que  $l = 0$  mientras que para las soluciones antisimétricas,  $l = 1$ .

La aplicación de  $g(\beta) = (\beta - 1)^{\frac{l}{2}} h(\beta)$  en la ecuación (23) la transforma en

$$\begin{aligned} & \beta(\beta - 1) \frac{d^2 h}{d\beta^2} + [-\sqrt{B}\beta^2 + (l + \sqrt{B} + \lambda + 1)\beta - (\lambda + \frac{1}{2})] \frac{dh}{d\beta} \\ & + \left[ -\frac{\sqrt{B}l}{2} + \rho + \delta \right] \beta - \rho + \frac{l}{4} + \frac{l}{2} \left( \lambda + \frac{l}{2} - \frac{1}{2} \right) h = 0. \end{aligned} \quad (24)$$

Posteriormente, tomando la ecuación (24) se puede aplicar el método del Ansatz de Bethe tal como se propone en [6].

Al aplicar este método, el caso específico del potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$  resulta en una ecuación que cumple con

$$\sum_{j \neq i}^n \frac{2}{\beta_i - \beta_j} + \frac{-\sqrt{B}\beta_i^2 + (l + \sqrt{B} + \lambda + 1)\beta_i - (\lambda + \frac{1}{2})}{\beta_i^2 - \beta_i} = 0, i = 1, 2, \dots, n. \quad (25)$$

La ecuación (25) es equivalente a la ecuación (8) del capítulo anterior. De igual forma, se logran obtener las relaciones entre coeficientes, las cuales son

$$\lambda = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4A}}{2}, A < \frac{1}{4} \quad (26)$$

$$B = (4n + 2 + 2\lambda + 2l)^2 \quad (27)$$

$$\epsilon = 4\sqrt{B}\beta_1 - 5\sqrt{B} - 5\lambda - 4 + A + B - 2\sqrt{B}\lambda - 5l - 2l(\lambda + \frac{l}{2} - \frac{1}{2}) \quad (28)$$

Las relaciones (26)-(28) son equivalentes a las relaciones (5)-(7) del capítulo anterior.

Es importante notar que al utilizar la relación (27) el valor de B queda fijo dado A, ya que B depende de  $\lambda$ , y  $\lambda$  depende de A.

Asimismo, debido a que  $B > 0$  la forma de las soluciones que se obtienen son únicamente potenciales cóncavos hacia arriba. Además, los eigenvalores pueden ser obtenidos con la relación (28).

Por último, la solución general de

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [\epsilon - (A \operatorname{sech}^2(x) + B \sinh^4(x))] \psi = 0$$

es de la forma

$$\psi = e^{\alpha\beta} \beta^{\lambda/2} (\beta - 1)^{l/2} \prod_{i=1}^n (\beta - \beta_i), l = 0, 1. \quad (29)$$

### 3.2.1. Soluciones simétricas

#### Primer estado simétrico

En esta sección se ilustra la aplicación de los resultados obtenidos anteriormente.

De acuerdo a (26),  $A < 1/4$ , por lo que, a manera de ejemplo, se va a considerar un valor de  $A = 1/5$ .

Sustituyendo  $A = 1/5$  en (26), se obtienen dos valores de  $\lambda$ :

$$\begin{aligned} \lambda_1 &\approx 0.2763932023 \\ \lambda_2 &\approx 0.7236067977 \end{aligned} \quad (30)$$

El procedimiento continúa con la asignación de valores para  $n$  y  $l$ . Al estar ilustrando el primer estado simétrico, se eligen  $n = 1$  y  $l = 0$ .

A continuación, el valor de  $\lambda_1$  se sustituye en (27) y se obtiene un valor  $B_1 \approx 42.9390096630$ . Y este valor de  $B_1$  sustituido en (25) resulta en dos valores para  $\beta$ :

$$\begin{aligned}\beta_{1,0} &\approx 0.1091353609 \\ \beta_{1,2} &\approx 1.0856509672\end{aligned}\tag{31}$$

Finalmente, de (28) y la relación  $E = \epsilon/2$ , se obtienen los eigenvalores siguientes

$$\begin{aligned}E_{1,0} &\approx 2.1156916143 \\ E_{1,2} &\approx 14.9134879924\end{aligned}\tag{32}$$

En (31) y (32) se han escrito  $E$  y  $\beta$  en la forma  $E_{j,k}$  y  $\beta_{j,k}$ : el primer subíndice  $j$  hace referencia al valor de  $\lambda$  al que pertenece el correspondiente valor de  $E$  y  $\beta$ , mientras que el segundo subíndice,  $k$ , hace referencia a la cantidad de nodos que presentan las eigenfunciones.

Al repetirse el procedimiento explicado anteriormente para  $\lambda_2$ , utilizando los mismos valores para  $A$ ,  $n$  y  $l$  se obtiene un valor de  $B_2 \approx 55.4609903370$ .

La sustitución de  $B_2$  en (25) resulta en los siguientes valores para  $\beta$ :

$$\begin{aligned}\beta_{2,0} &\approx 0.1522465624 \\ \beta_{2,2} &\approx 1.0791966178\end{aligned}\tag{33}$$

con los cuales se obtienen los eigenvalores

$$\begin{aligned}E_{2,0} &\approx 2.2822151417 \\ E_{2,2} &\approx 16.0886052515\end{aligned}\tag{34}$$

Para finalizar, utilizando los valores obtenidos anteriormente, se grafica en las figuras 1 y 4 la forma que tiene el potencial  $V(x) = V_1 \text{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$  y los eigenvalores calculados.

De igual forma, se presentan en las figuras 2, 3, 5 y 6 las eigenfunciones correspondientes a cada valor de energía encontrado.

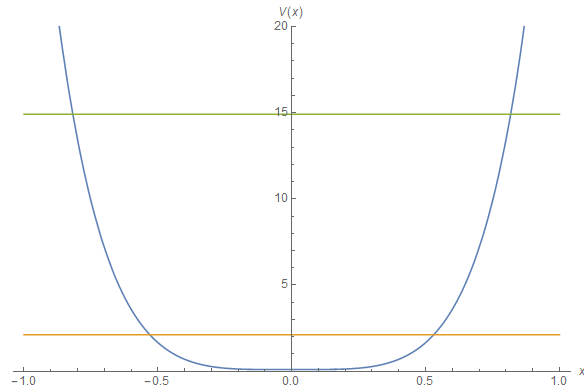


Figura 1: Potencial hiperbólico  $V(x) = \frac{1}{10} \operatorname{sech}^2(x) + 21.4695048315 \sinh^4(x)$  y sus correspondientes eigenvalores  $E_{1,0}$  y  $E_{1,2}$

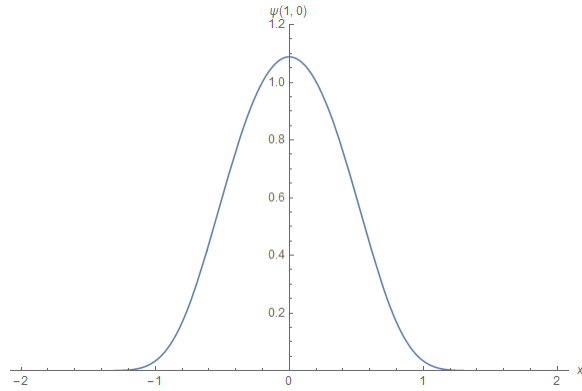


Figura 2: Función de Onda para el primer estado simétrico  $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 21.4695048315, n=1, E_{1,0} \approx 2.1156916143$

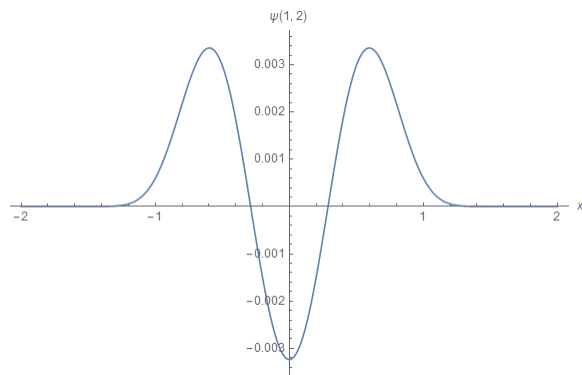


Figura 3: Función de Onda para el primer estado simétrico  $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 21.4695048315, n=1, E_{1,2} \approx 14.91348799$



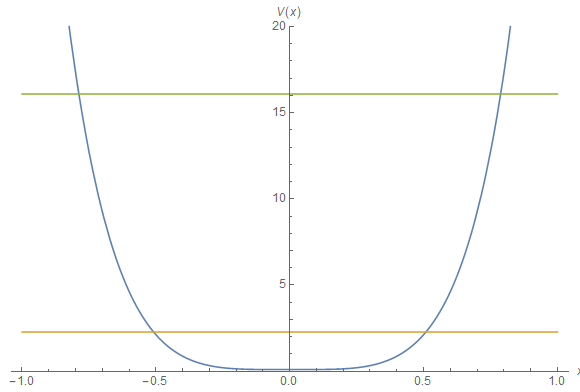


Figura 4: Potencial hiperbólico  $V(x) = \frac{1}{10} \operatorname{sech}^2(x) + 27.730495168 \sinh^4(x)$  y sus correspondientes eigenvalores  $E_{2,0}$  y  $E_{2,2}$

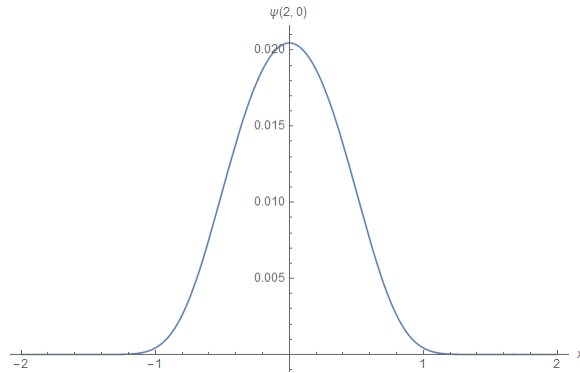


Figura 5: Función de Onda para el segundo estado simétrico  $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 27.730495168, n=1, E_{2,0} \approx 2.2822151417$

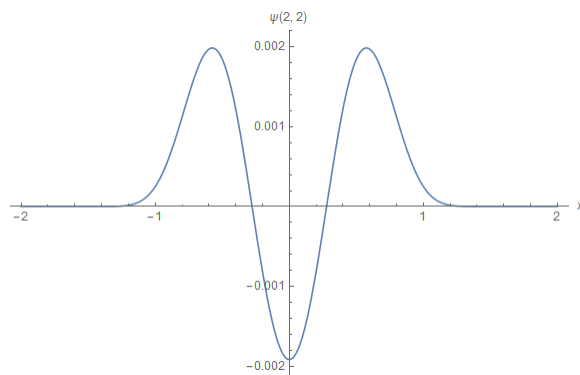


Figura 6: Función de Onda para el segundo estado simétrico  $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 27.730495168, n=1, E_{2,2} \approx 16.088605251$

### 3.2.2. Soluciones antisimétricas

#### Primer estado antisimétrico

A continuación se repite el proceso de la sección anterior para encontrar los estados antisimétricos correspondientes al potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ .

Se inicia el procedimiento escogiendo nuevamente  $A = 1/5$  y  $n = 1$ ; para obtener los estados antisimétricos se hace  $l = 1$  en  $g(\beta) = (\beta - 1)^{\frac{1}{2}} h(\beta)$ . A partir de esos coeficientes y realizando las mismas sustituciones que en el caso simétrico, los parámetros que se obtienen para el caso antisimétrico son

Valores de los parámetros de los primeros estados antisimétricos	
$\lambda_1 \approx 0.2763932023$	$\lambda_2 \approx 0.7236067977$
$B_1 \approx 73.1501552810$	$B_2 \approx 89.2498447190$
$\beta_{1,1} \approx 0.0762914395$	$\beta_{2,1} \approx 0.1099135896$
$\beta_{1,3} \approx 1.1898666397$	$\beta_{2,3} \approx 1.1783837765$
$E_{1,1} \approx 8.7668121726$	$E_{2,1} \approx 9.3149509185$
$E_{1,3} \approx 27.8151538386$	$E_{2,3} \approx 29.5030830702$

Cuadro 1: Resultados de los parámetros correspondientes al primer estado antisimétrico del potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$

Con los valores mostrados en el Cuadro 1, se muestra en las figuras 7 y 10 el potencial y los eigenvalores correspondientes al estado antisimétrico. Asimismo, en las figuras 8, 9, 11 y 12 se muestran las eigenfunciones correspondientes a ese mismo estado.

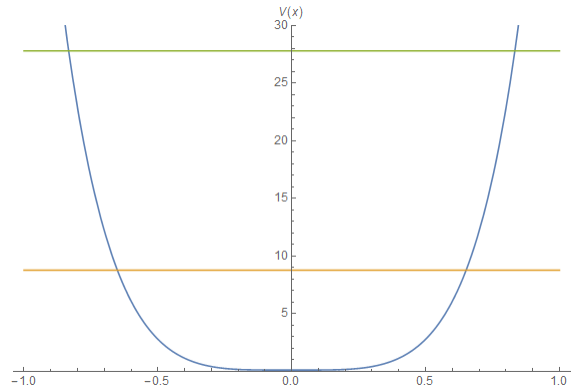


Figura 7: Potencial hiperbólico  $V(x) = \frac{1}{10} \operatorname{sech}^2(x) + 36.5750776405 \sinh^4(x)$  y eigenvalores  $E_{1,1}$  y  $E_{1,3}$

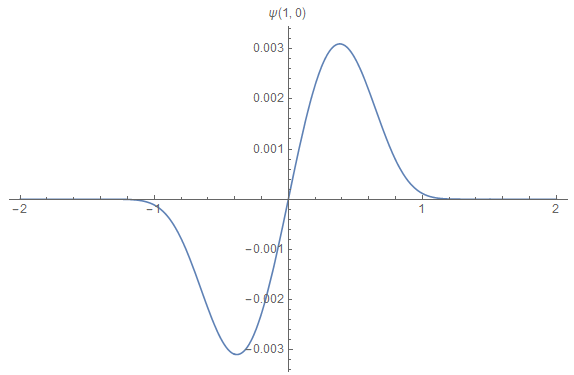


Figura 8: Función de Onda para el primer estado antisimétrico  $V_1 = \frac{1}{10}$ ,  $V_2 \approx 36.5750776405$ ,  $n=1$ ,  $E_{1,1} \approx 8.7668121726$

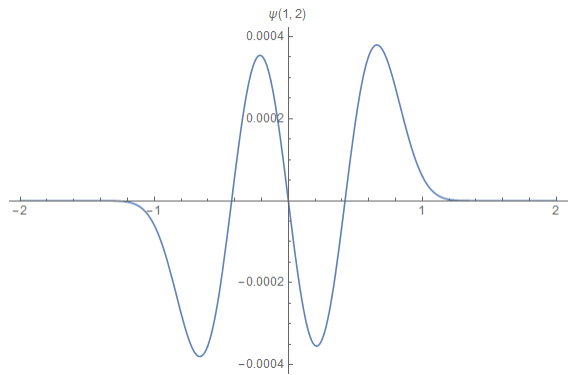


Figura 9: Función de Onda para el primer estado antisimétrico  $V_1 = \frac{1}{10}$ ,  $V_2 \approx 36.5750776405$ ,  $n=1$ ,  $E_{1,3} \approx 27.8151538386$

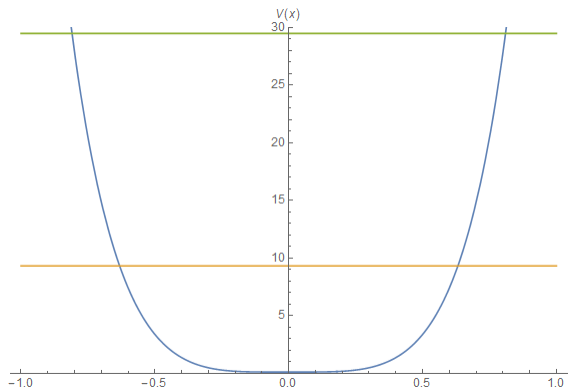


Figura 10: Potencial hiperbólico  $V(x) = \frac{1}{10} \operatorname{sech}^2(x) + 44.6249223595 \sinh^4(x)$  y eigenvalores  $E_{2,1}$  y  $E_{2,3}$

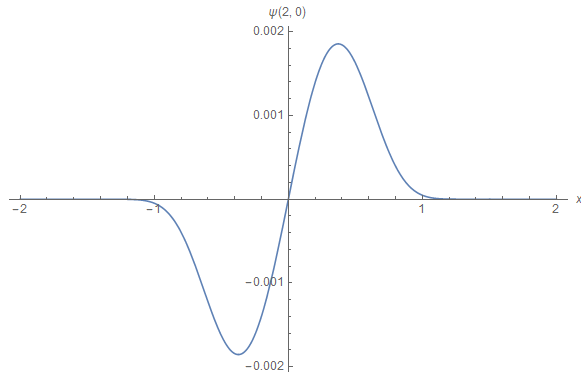


Figura 11: Función de Onda para el segundo estado antisimétrico  $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 44.6249223595, n=1, E_{2,1} \approx 9.3149509185$

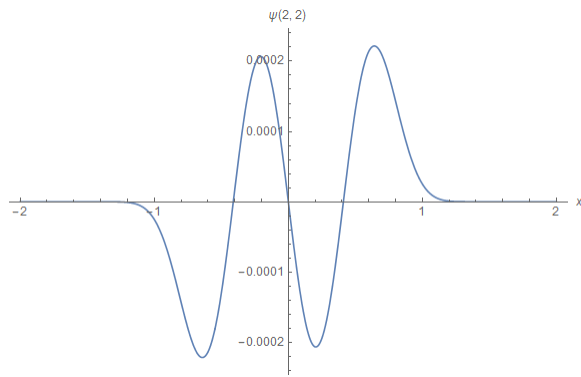


Figura 12: Función de Onda para el segundo estado antisimétrico  $V_1 = \frac{1}{10}, V_2 \approx 44.6249223595, n=1, E_{2,3} \approx 29.5030830702$

---

Solución numérica de la ecuación de Schrödinger correspondiente al potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$  aplicando el método de Numerov

---

En este capítulo se describe, a grandes rasgos, el método de Numerov, el cual es el método numérico utilizado en esta tesis para resolver la ecuación de Schrödinger, aplicada al potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ . También se discute su implementación en forma matricial.

En el siguiente capítulo se realiza una comparación entre los resultados obtenidos en este con aquellos obtenidos en el anterior.

## 4.1. Método de Numerov

El método de Numerov, desarrollado por el astrónomo ruso Boris Vasilyevich Numerov [24], es un método numérico que permite resolver ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden de la forma

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + h(x)\right)y(x) = 0$$

Una de las ecuaciones que pueden ser resueltas mediante este método es la Ecuación de Schrödinger unidimensional. A través del uso de este método se van a corroborar los valores obtenidos en el capítulo anterior.

A continuación se delinea el método de Numerov. Para mayores detalles pueden consultarse las referencias [25], [24] y [12].

Inicialmente, se debe considerar una ecuación diferencial que tiene la siguiente forma

$$\psi^{(2)}(x) = -f(x)\psi(x) + s(x) \quad (35)$$

La Ecuación de Schrödinger tiene la forma de (35) con  $f(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]$  y  $s(x) = 0$ , lo que resulta en

$$\psi^{(2)}(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) \quad (36)$$

Ahora se considera la expansión de Taylor de la función  $\psi(x)$ ,

$$\psi(x \pm d) = \psi(x) \pm d\psi^{(1)}(x) + \frac{1}{2!}d^2\psi^{(2)}(x) \pm \frac{1}{3!}d^3\psi^{(3)}(x) + \frac{1}{4!}d^4\psi^{(4)}(x) \pm \dots \quad (37)$$

A continuación, se toman  $\psi(x + d)$  y  $\psi(x - d)$  y se suman para obtener

$$\psi(x + d) + \psi(x - d) = 2\psi(x) + d^2\psi^{(2)}(x) + \frac{1}{12}d^4\psi^{(4)}(x) + O(d^6) \quad (38)$$

Reordenando (38) se obtiene

$$\psi^{(2)}(x) = \frac{\psi(x + d) + \psi(x - d) - 2\psi(x)}{d^2} - \frac{1}{12}d^2\psi^{(4)}(x) + O(d^4) \quad (39)$$

Sustituyendo (39) en (36) se obtiene

$$\psi^{(4)}(x) = \frac{f(x + d)\psi(x + d) + f(x - d)\psi(x - d) - 2f(x)\psi(x)}{d^2} + O(d^2) \quad (40)$$

Finalmente, sustituyendo (40) en (39) se obtiene el resultado deseado

$$f_i\psi_i = \frac{\psi_{i+1} + \psi_{i-1} - 2\psi_i}{d^2} - \frac{1}{12}(f_{i+1}\psi_{i+1} + f_{i-1}\psi_{i-1} - 2f_i\psi_i) \quad (41)$$

donde los subíndices se definen como

$$\begin{aligned} f_{i-1} &\equiv f(x - d) & f_i &\equiv f(x) & f_{i+1} &\equiv f(x + d) \\ \psi_{i-1} &\equiv \psi(x - d) & \psi_i &\equiv \psi(x) & \psi_{i+1} &\equiv \psi(x + d) \end{aligned}$$

Con la ecuación (41) Mohandas et al [26] han logrado desarrollar un método matricial para lograr obtener los valores de energía del potencial de interés [27].

## 4.2. Implementación Matricial del Método de Numerov

Como se ha mencionado anteriormente, el Método de Numerov logra resolver la Ecuación de Schrödinger unidimensional. En la actualidad, con los lenguajes de alto nivel, como Mathematica, es posible implementarlo en forma matricial, siguiendo el procedimiento descrito en [26].

Para implementar el método de forma matricial, inicialmente se debe suponer que la ecuación diferencial puede ser discretizada. La discretización se logra si se considera una caja finita dentro de la cual se puede introducir el sistema cuántico. Dicha caja debe de ser lo suficientemente grande para poder contener una rejilla con puntos  $x_i$  y espaciados una distancia  $d$ .

Según [26] luego de lograr discretizar la ecuación y sus funciones asociadas  $g(x)$  y  $s(x)$  la fórmula de integración del método resulta en

$$\psi_{i+1} = \frac{\psi_{i-1}(12 - d^2 f_{i-1}) - 2\psi_i(5d^2 f_i + 12)}{d^2 f_{i+1} - 12} + O(d^6) \quad (42)$$

Luego, Pillai *et al.* consideran que  $\psi$  se puede representar como un vector columna  $(\dots, \psi_{i-1}, \psi_i, \psi_{i+1}, \dots)$  y definen las siguientes matrices [26]

$$A = \frac{I_{-1} - 2I_0 + I_1}{d^2}$$

$$B = \frac{I_{-1} + 10I_0 + I_1}{d^2}$$

$$V = \text{diag}(\dots, V_{i-1}, V_i, V_{i+1}, \dots)$$

donde  $I_k$  representa la matriz con entradas con valor de uno en la  $k$ -ésima diagonal y entradas nulas en las demás posiciones.

Debido a que la ecuación que se desea resolver es la ecuación de Schrödinger y se aplican las definiciones matriciales previas, entonces (36) toma la siguiente forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}A\psi + VB\psi = EB\psi \quad (43)$$

Multiplicando (43) por  $B^{-1}$  se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}B^{-1}A\psi + V\psi = E\psi \quad (44)$$

La ecuación (44) tiene forma matricial y es esencial para la resolución del problema ya que, si se tiene una rejilla de  $N$  puntos, entonces las condiciones de frontera se generan tomando  $N \times N$  submatrices de  $A$  y  $B$  provocando así con éxito que el potencial en cuestión sea insertado en una caja infinita y pueda ser resuelto [26].

Para el caso particular del potencial  $V(x) = V_1 \text{sech}^2(x) + V_2 \text{sinh}^4(x)$ , el planteamiento que se va a utilizar es el descrito por [27], el cual generaliza el procedimiento realizado por Mohandas Pillai, Joshua Goglio y Thad G. Walker en 2012 [26].

En esta tesis se modificó el código en Mathematica del programa SHO.nb (ver Anexo A) el cual forma parte de la documentación de la tesis de Tang Dongjiao, el cual es utilizado para resolver el oscilador armónico cuántico.

### 4.3. Estados de energía simétricos

A continuación, en el Cuadro 2, se presenta un resumen de los resultados obtenidos aplicando el método de Numerov descrito anteriormente. Así como los parámetros que se utilizaron para determinar los valores de energía de los estados simétricos.

Parámetros	Eigenvalor numérico
$A = \frac{1}{5}$	2.1156916
$V_1 = \frac{1}{10}$	7.4640928
$B = 42.9390096$	14.91348
$V_2 = 21.4695048315$	23.7998006
n=1	33.91223668
$A = \frac{1}{5}$	2.2822151
$V_1 = \frac{1}{10}$	8.0614002
$B = 55.46099033$	16.08860
$V_2 = 27.730495168$	25.64160335
n=1	36.49368302

Cuadro 2: Valores numéricos del espectro de energía correspondientes al primer estado simétrico del potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$

### 4.4. Estados de energía antisimétricos

A continuación, en el Cuadro 3, se presenta un resumen de los resultados obtenidos para los estados antisimétricos, aplicando nuevamente el método de Numerov descrito con anterioridad.

Parámetros	Eigenvalor numérico
$A = \frac{1}{5}$	2.478898906
$V_1 = \frac{1}{10}$	8.766811
$B = 73.1501552$	17.47594882
$V_2 = 36.5750776405$	27.81512
n=1	39.5387701
$A = \frac{1}{5}$	2.631745689
$V_1 = \frac{1}{10}$	9.31494994
$B = 89.24984471$	18.55370693
$V_2 = 44.6249223595$	29.503046
n=1	41.902733

Cuadro 3: Valores numéricos del espectro de energía correspondientes al primer estado antisimétrico del potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ .



---

Comparación entre las soluciones analítica y numérica de la ecuación de Schrödinger aplicada al potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$

---

En este capítulo se realiza una comparación entre las soluciones analítica y numérica para la ecuación de Schrödinger aplicada al potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ .

La comparación entre las soluciones analítica y numérica muestra concordancia entre sí, por lo que se puede asegurar que los eigenvalores predichos numéricamente corresponden al potencial que se estudió en esta tesis.

### 5.1. Estados simétricos

A continuación, en el Cuadro 4 se presenta un resumen de los resultados obtenidos aplicando tanto el método analítico como el método numérico para los estados simétricos del potencial estudiado.

Posteriormente, se muestran las Figuras 13, 14, 15 y 16 las cuales representan superposición de gráficas de las cuatro funciones de onda correspondientes a los eigenvalores simétricos. En cada figura la gráfica en color rojo representa la parte analítica mientras que la gráfica punteada representa los valores obtenidos por el Método de Numerov.

Parámetros	Eigenvalor analítico	Eigenvalor numérico
$V_1 = \frac{1}{10}$	$E_{1,0} = 2.1156916143$	2.1156916
	-	7.4640928
$V_2 = 21.4695048315$	$E_{1,2} = 14.9134879924$	14.91348
	-	23.7998006
n=1	-	33.91223668
$V_1 = \frac{1}{10}$	$E_{2,0} = 2.2822151417$	2.2822151
	-	8.0614002
$V_2 = 27.730495168$	$E_{2,2} = 16.088605251$	16.08860
	-	25.64160335
n=1	-	36.49368302

Cuadro 4: Valores analíticos y numéricos del espectro de energía correspondientes al primer estado simétrico del potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$

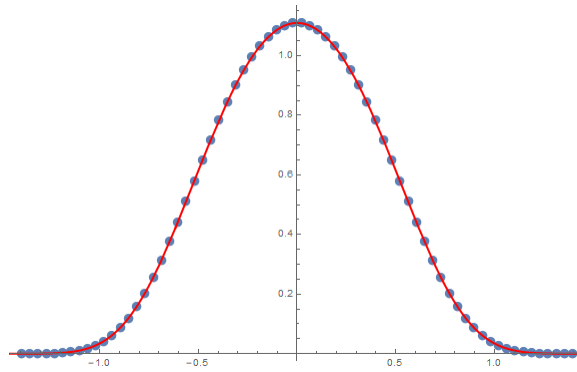


Figura 13: Comparación entre las Funciones de Onda simétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{1,0}$

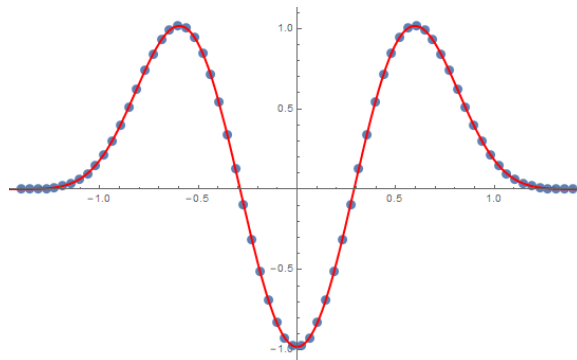


Figura 14: Comparación entre las Funciones de Onda simétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{1,2}$

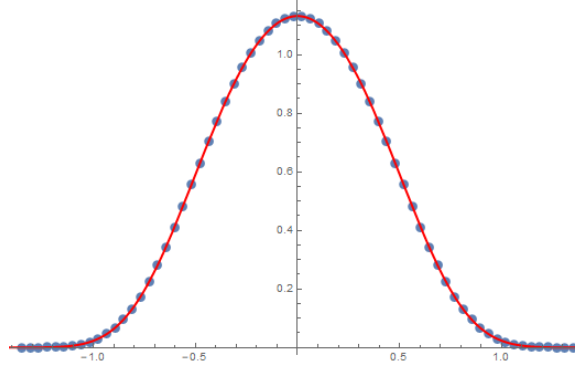


Figura 15: Comparación entre las Funciones de Onda simétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{2,0}$

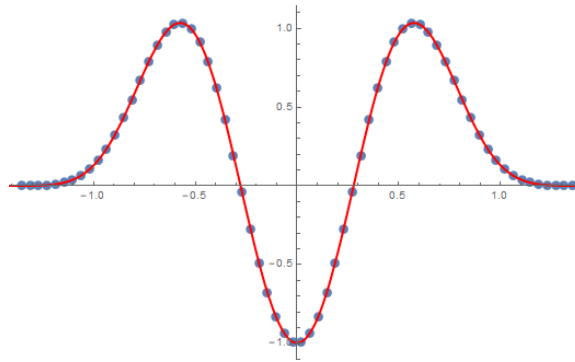


Figura 16: Comparación entre las Funciones de Onda simétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{2,2}$

Como se logra observar, cada una de las comparaciones realizadas para las funciones de los estados simétricos, presenta concordancia, con lo cual se puede confiar en que las predicciones numéricas realizadas para los eigenvalores son adecuadas.

## 5.2. Estados antisimétricos

Al igual que en la sección anterior, en el Cuadro 5 se presenta un resumen de los resultados obtenidos aplicando tanto el método analítico como el método numérico para los estados antisimétricos del potencial estudiado.

Posteriormente, se muestran las Figuras 17, 18, 19 y 20 las cuales representan superposición de gráficas de las cuatro funciones de onda correspondientes a los eigenvalores antisimétricos. De igual forma que en las figuras anteriores, el color rojo representa la parte analítica mientras que la gráfica punteada representa los valores obtenidos por el Método de Numerov.

Parámetros	Eigenvalor analítico	Eigenvalor numérico
$V_1 = \frac{1}{10}$	-	2.478898906
	$E_{1,1} = 8.7668121726$	8.766811
$V_2 = 36.5750776405$	-	17.47594882
	$E_{1,3} = 27.8151538386$	27.81512
n=1	-	39.5387701
$V_1 = \frac{1}{10}$	-	2.631745689
	$E_{2,1} = 9.3149509185$	9.31494994
$V_2 = 44.6249223595$	-	18.55370693
	$E_{2,3} = 29.5030830702$	29.503046
n=1	-	41.902733

Cuadro 5: Valores analíticos y numéricos del espectro de energía correspondientes al primer estado antisimétrico del potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$

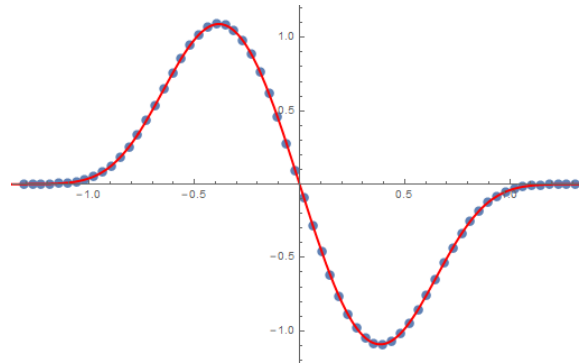


Figura 17: Comparación entre las Funciones de Onda antisimétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{1,1}$

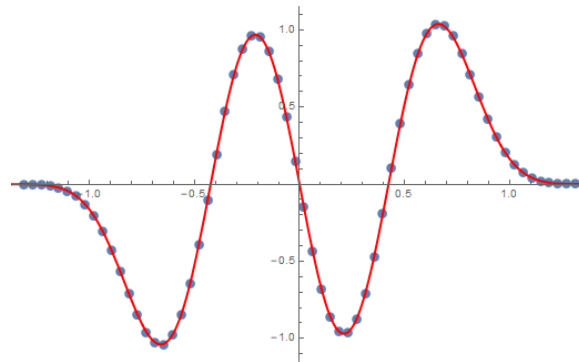


Figura 18: Comparación entre las Funciones de Onda antisimétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{1,3}$

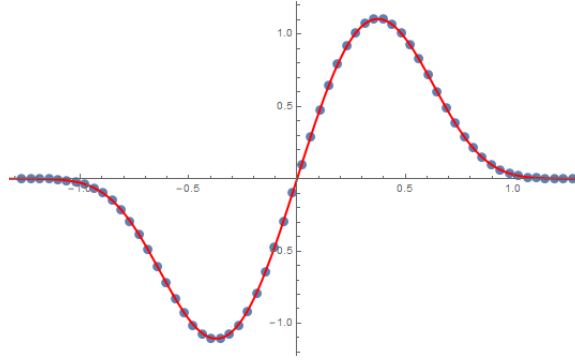


Figura 19: Comparación entre las Funciones de Onda antisimétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{2,1}$

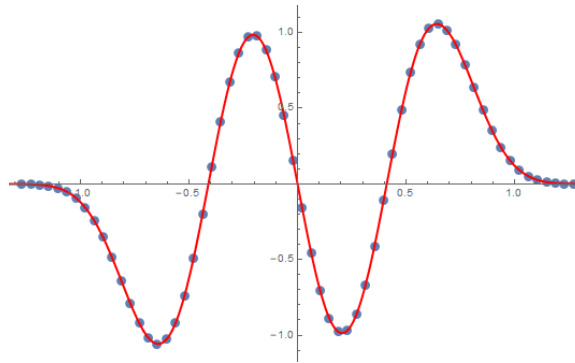


Figura 20: Comparación entre las Funciones de Onda antisimétricas numérica (línea punteada azul) y analítica (línea continua roja) para el Eigenvalor  $E_{2,3}$

Al igual que en el caso de los estados simétricos, cada una de las comparaciones realizadas para las funciones de los estados antisimétricos, presenta concordancia, con lo cual se puede confiar en que las predicciones numéricas realizadas para los eigenvalores son adecuadas.



En este trabajo de tesis se resolvió la ecuación de Schrödinger aplicada al potencial hiperbólico  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$ .

La ecuación de Schrödinger se resolvió por medio de dos métodos: un método analítico y un método numérico. En el método analítico se aplicaron transformaciones adecuadas que permitieron la reducción de la Ecuación de Schrödinger a una ecuación tipo Confluente de Heun. Al resolver esta ecuación, mediante el ansatz de Bethe se obtuvo únicamente una parte del espectro de energía, por lo que el potencial estudiado corresponde al tipo denominado cuasi-exactamente soluble.

En el caso del método numérico, se logró obtener una mayor cantidad de eigenvalores, comparada con la que se obtuvo aplicando el método analítico, lo cual permitió verificar la validez de los resultados obtenidos por este último método. La concordancia entre los valores analíticos y numéricos permite realizar una predicción numérica de otros eigenvalores de energía.

De igual forma, se observó una concordancia entre las funciones de onda obtenidas de forma analítica con aquellas predichas numéricamente.

Las funciones de onda correspondientes a la solución de la ecuación de Schrödinger aplicada al potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$  son de la forma

$$\psi = e^{\alpha\beta} \beta^{\lambda/2} (\beta - 1)^{l/2} \prod_{i=1}^n (\beta - \beta_i), l = 0, 1.$$

donde los estados simétricos se obtienen al hacer  $l = 0$  y los estados antisimétricos al hacer  $l = 1$ .

Los correspondientes eigenestados de energía  $E = \epsilon/2$  se obtienen a partir de

$$\epsilon = 4\sqrt{B}\beta_1 - 5\sqrt{B} - 5\lambda - 4 + A + B - 2\sqrt{B}\lambda - 5l - 2l\left(\lambda + \frac{l}{2} - \frac{1}{2}\right)$$

Finalmente, la familia de soluciones correspondientes al potencial  $V(x) = V_1 \operatorname{sech}^2(x) + V_2 \sinh^4(x)$  y que pueden ser resueltas siguiendo el procedimiento delineado en esta tesis tienen una forma cóncava hacia arriba.



- [1] A. de Souza, “Conditionally exactly soluble class of quantum potentials”, *Physical Review A*, vol. 47, n.º 4, mayo de 1993. DOI: 10.1103/PhysRevA.47.R2435.
- [2] A. Turbiner, “Quantum mechanics: Problems intermediate between exactly solvable and completely unsolvable”, *Soviet Physics-Journal of Experimental and Theoretical Physics*, vol. 67, n.º 2, págs. 230-236, feb. de 1988.
- [3] N. Hatami y M. Setare, “Exact solutions for a class of quasi-exactly solvable models: A unified treatment”, *The European Physical Journal Plus*, vol. 132, n.º 7, jul. de 2017. DOI: 10.1140/epjp/i2017-11569-6.
- [4] B.-H. Chen y *et al*, “Heun functions and quasi-exactly solvable double-well potentials”, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 46, n.º 3, 2013. DOI: 10.1088/1751-8113/46/3/035301.
- [5] C. Downing, “On a solution of the Schrödinger equation with a hyperbolic duple-well potential”, *Journal of Mathematical Physics*, vol. 54, n.º 072101, jul. de 2013. DOI: 10.1063/1.4811855.
- [6] Y.-Z. Zhang, “Exact polynomial solutions of second order differential equations and their applications”, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 80, n.º 45, jul. de 2011. DOI: 10.1088/1751-8113/45/6/065206.
- [7] K. Oyewumi y C. Akoshile, “Bound-state solutions of the Dirac-Rosen-Morse potential with spin and pseudospin symmetry”, *The European Physical Journal A*, vol. 45, n.º 3, págs. 311-318, jul. de 2010. DOI: 10.1140/epja/i2010-11007-0.
- [8] M. Razavy, “An exactly soluble Schrödinger equation with a bistable potential”, *American Journal of Physics*, vol. 48, n.º 4, Abr de 1980. DOI: 10.1119/1.12141.
- [9] M. Reyes y *et al*, “On the analytical solutions of the quasi-exactly solvable Razavy type potential  $V(x) = V_0(\sinh^4(x) - k\sinh^2(x))$ ”, págs. 311-318, mayo de 2018. DOI: arXiv:1806.03388.

- [10] A. Kurniawan y *et al*, “Approximate analytical solution of the Dirac equation with  $q$ -deformed hyperbolic Pöschl–Teller potential and trigonometric Scarf II non-central potential”, *American Journal of Physics*, vol. 24, n.º 3, Ene de 2015. DOI: 10.1088/1674-1056/24/3/030302.
- [11] D. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, 2da. Pearson, 2005.
- [12] M. Hjorth-Jensen, *Computational Physics:Lecture Notes Fall 2015*, 1ra. University of Oslo, 2015.
- [13] J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, 1ra. Addison-Wesley, 1994.
- [14] H. Arfken G.B.; Weber y F. Harris, *Mathematical Methods for Physicists*, 7ma. Elsevier, 2013.
- [15] G. Kristensson, *Second Order Differential Equations-Special Functions and Their Classification*, 1ra. Springer, 2010.
- [16] K. Heun, “Zur Theorie der Riemann’schen Functionen zweiter Ordnung mit vier Verzweigungspunkten”, *Mathematische Annalen*, págs. 161-179, 1889.
- [17] M. Hortaçsu, “Heun Functions and their uses in Physics”, *Proceedings of the 13th Regional Conference on Mathematical Physics*, Dic de 2015. DOI: 10.1155/2018/8621573.
- [18] H. Ciftci y *et al*, “Physical applications of second-order linear differential equations that admit polynomial solutions”, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 43, n.º 41, 2010. DOI: 10.1088/1751-8113/43/41/415206.
- [19] D. Agboola e Y.-Z. Zhang, “Unified derivation of exact solutions for a class of quasi-exactly solvable models”, *Journal of Mathematical Physics*, vol. 53, n.º 4, 2012. DOI: 10.1063/1.3701833.
- [20] R. Sasaki y *et al*, “Bethe Ansatz Solutions to Quasi Exactly Solvable Difference Equations”, *Symmetry Integrability and Geometry Methods and Applications* 5, n.º 104, pág. 16, 2009. DOI: 10.3842/SIGMA.2009.104.
- [21] P. Wiegmann y A. Zabrodin, “Bethe-Ansatz for the Bloch Electron in Magnetic Field”, *Physical Review Letters*, vol. 72, n.º 12, 1994. DOI: 10.1103/PhysRevLett.72.1890.
- [22] Y.-H. Lee y *et al*, “Polynomial algebras and exact solutions of general quantum nonlinear optical models: II. Multi-mode boson systems”, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 43, n.º 18, pág. 12, 2010. DOI: 10.3842/SIGMA.2009.104.
- [23] F.-K. Wen y *et al*, “Exact Polynomial Solutions of Schrödinger Equation with Various Hyperbolic Potentials”, *Communications in Theoretical Physics*, vol. 61, n.º 2, págs. 153-159, feb. de 2014. DOI: 10.1088/0253-6102/61/2/02.
- [24] B. Numerov, “Method of Extrapolation of Perturbations”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 84, n.º 8, págs. 592-602, jun. de 1924.
- [25] S. Hairer E; Norsett y G. Wanner, *Solving ordinary differential equations I: Nonstiff problems*, 2da. Springer-Verlag, 1993.
- [26] M. Pillai y *et al*, “Matrix Numerov Method for Solving Schrödinger’s Equation”, *American Journal of Physics*, vol. 80, n.º 11, págs. 1017-1019, Ago de 2012. DOI: 10.1119/1.4748813.
- [27] T. Dongjiao, “Generalized Matrix Numerov Solutions to Schrödinger Equation”, *National University of Singapore, Department of Physics*, pág. 36, 2014.

### 8.1. Algoritmo del método de Numerov

(\* Potential, desired max energy \*)  
 $V[s] := .5^2; \epsilon m = 50.;$

(Con  $V[s]$  se define el potencial y  $\epsilon$  define la cantidad de energía que se desea manejar para tener la exactitud deseada\*)

(\* Determine grid \*)  
 $rturn = \text{FindRoot}[V[s] == \epsilon m, \{s, \epsilon m\}] [[1, 2]]; d = \frac{1}{\sqrt{2\epsilon m}};$   
 $n = \text{Round} \left[ 2 \left( \frac{rturn}{d} + 4\pi \right) \right]; s = \text{Table} \left[ -\frac{d(n+1)}{2} + di, \{i, n\} \right];$

(\* Con estos valores se logra determinar el tamaño y la distancia dentro de la rejilla necesaria para introducir el sistema cuántico discretizado. La función  $d$  es la distancia entre puntos;  $n$  es la cantidad máxima de nodos;  $s$  es la tabla de valores de la rejilla. \*)

(\* Calculate KE matrix \*)  
 $\mathbb{I}[n\_ , d\_ ] := \text{DiagonalMatrix}[1 + 0\text{Range}[n - \text{Abs}[d]], d];$

$$B = \frac{1}{12}(\mathbb{I}[n, -1] + 10\mathbb{I}[n, 0] + \mathbb{I}[n, 1]);$$

$$A = \frac{1}{d^2}(\mathbb{I}[n, -1] - 2\mathbb{I}[n, 0] + \mathbb{I}[n, 1]);$$

$$KE = \frac{-1}{2} \text{Inverse}[B].A;$$

(\*Las definiciones anteriores son las matrices para que el método tenga forma matricial. Aquí se deben modificar los coeficientes de A y B para utilizarlas con mayor precisión\*)

```
(* Hamiltonian *)  
H= KE+ DiagonalMatrix[V[s]];
```

```
(*Se diagonaliza el sistema cuántico*)
```

```
(* Energies, wavefunctions *)  
{eval,vec}=Eigensystem[H];
```

```
(*Se resuelve el sistema cuántico*)
```

```
(* Swap list ordering and show first 20 eigenvalues *)  
in=Ordering[eval];
```

```
(*Se ordenan los eigenvalores del sistema*)
```

```
eval= eval[[in]]; vec= vec[[in]];  
eval[;;20]
```

```
(*Se despliega la lista de eigenvalores correspondientes al sistema*)
```