

Universidad de Sonora
División de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física



Transformaciones de Darboux
y potenciales isoespectrales

Tesis
que para obtener el título de
Licenciado en Física
presenta

Ivan Rodolfo Ibarra Fernández

Diciembre del 2014

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

Agradecimientos

*La humildad del esfuerzo reside en ser
agradecido y reconocer el apoyo de las personas
que fueron la fuente de inspiración en tu trabajo.*

Autor desconocido

La realización de este trabajo habría sido muy difícil sin el apoyo de las muchas personas que me acompañaron a lo largo de estos último cuatro años de carrera profesional y de formación personal. Cada una de estas personas fue fundamental, a su manera, en mi vida y es por eso que les doy un millón de gracias, ya que este camino fue fácil contando con su apoyo.

Primero quiero agradecer a mis padres que con su ejemplo, amor, sabiduría, dedicación y paciencia me mostraron que es sencillo lograr tus metas teniendo en mente los valores que me han enseñado a lo largo de mi vida. Por supuesto agradezco infinitamente su apoyo el cual me expresaron de diferentes maneras y el haber estado cerca de mí durante todo este camino. Este camino no hubiera sido fácil sin ustedes. Mi éxito es el reflejo de su éxito como padres, el cual es un orgullo para mí el poder demostrarlo. Por esto y mucho más, les estoy eternamente agradecidos. A mis hermanos Alejandro, Marcos y Aranza le agradezco su amor y apoyo durante mi carrera al igual que en los momentos de distracción, por la confianza depositada en mí y por el honor de ser un ejemplo a seguir para ustedes. A mis abuelos ya que son fundamentales en mi formación personal, y al igual que mis padres, su ejemplo de trabajo y dedicación tiene un gran impacto en todos los aspectos de mi persona. Ustedes son mis segundos padres. A mis tíos, tías, primos y primas por ser parte de mi vida, contar con su apoyo en todo momento y demostrar su interés en mi formación profesional. Familia, todos ustedes son mi fuente de inspiración a seguir adelante, y por eso hoy les digo gracias.

Quiero agradecer a Valeria, a mi socio Hurtado y a Arham; mis mejores amigos, no solo por los momentos de distracción, si no por demostrarme que realmente cuento con ustedes en cualquier momento y por el apoyo emocional que me han dado durante mi carrera profesional y mi vida personal. Ustedes son gran parte de mí y de mi vida, la cual no puedo imaginar sin ustedes. De cada uno he aprendido muchas cosas, las cuales tienen un impacto muy profundo en mí, ustedes también son un ejemplo a seguir y el que cumpla con mis metas es un reflejo de su apoyo. Mis mejores amigos, ustedes son también la fuerza que me impulsa a seguir adelante, y por eso les estaré eternamente agradecido. A mis queridos amigos Eddy, Alex, Edgar, Joan, Luis, Ale, Héctor y Christopher les agradezco su apoyo durante toda la carrera. Por las horas de estudio y de distracción con

ustedes, las cuales guardo en mi memoria con mucho cariño, por la confianza que depositaron en mí para formar parte de sus vidas, por el apoyo emocional cuando lo necesitaba y por ser esenciales en mi formación profesional y personal. Sin ustedes, la carrera no hubiera sido lo mismo. A mis amigos y compañeros de otros semestres, ustedes también son parte de mi formación profesional en muchos sentidos, y por eso les estoy agradecido. Amigos, ustedes también son mi inspiración a seguir adelante y por eso, mil gracias.

A mi director de tesis Antonio Jáuregui, estoy infinitamente agradecido por permitirme trabajar con usted, por ser mi guía en la realización de este trabajo y por sus enseñanzas durante este proceso. Le agradezco también la confianza de prestarme su cubículo, por la confianza que me hizo sentir para satisfacer cualquier duda y de poder expresarme con usted sin pena alguna y lo más importante, por formarme como físico. En mi memoria guardo con mucho cariño la experiencia de haber trabajado con usted, en serio que aprendí muchas cosas no solo de nuestra profesión, si no de mi mismo. Quiero agradecerle el haber sido mi maestro en algunas de las materias de la carrera, estoy seguro que el éxito en mi vida profesional futura va a ser en gran parte a usted. Profesor, usted es un modelo a seguir y es una inspiración a seguir adelante, por esto y más le agradezco profundamente.

A los miembros de mi comité de tesis, el profesor Castellanos, el profesor Rosas y el profesor Corella, les agradezco el haber aceptado revisar este trabajo y el haber sido parte de mi formación profesional, al igual que a la planta de profesores del Departamento de Física. Les agradezco el haber sido mis profesores en diferentes materias de la carrera ya que con su ejemplo y con su amor a la ciencia me demostraron que las metas pueden cumplirse si uno se dedica y se esfuerza en su trabajo. Profesores, ustedes son un modelo a seguir y por esto les digo mil gracias. Al Departamento de Física y a la Universidad de Sonora les agradezco el apoyo para los viajes de congreso, los veranos de investigación, las escuelas de verano y el ser las partes más fundamentales de mi preparación profesional.

Una vez más quiero agradecer a todas las personas mencionadas por formar parte de mi vida académica y mi vida personal. Su apoyo fue, y es, esencial en este trabajo y en mi trabajo futuro. Gran parte de mi éxito es gracias a ustedes.

Contenido

Introducción	II
1. Transformación de Darboux en mecánica cuántica.	1
1.1. Deducción de la transformación de Darboux.	1
1.2. Propiedades de la transformación de Darboux.	4
1.2.1. Ortogonalidad de las eigenfunciones transformadas.	4
1.2.2. Linealización de la ecuación de Riccati.	6
1.2.3. Corrimiento del espectro.	7
1.3. Cadenas de transformaciones de Darboux.	8
2. Ejemplos de transformaciones de Darboux.	11
2.1. Pozo de potencial infinito.	11
2.1.1. Eigenfunciones y eigenvalores.	12
2.1.2. Transformación de Darboux.	13
2.2. Potencial de Morse.	16
2.2.1. Eigenfunciones y eigenvalores.	17
2.2.2. Transformación de Darboux.	22
3. Transformaciones isoespectrales.	27
3.1. Transformación Isoespectral.	28
3.2. Aplicaciones de la transformación isoespectral.	31
3.2.1. Potencial de pozo infinito.	31
3.2.2. Potencial de Morse.	35
Conclusiones	40
Apéndice A: Ecuación de Riccati	42
Apéndice B: Identidad entre wronskianos	44
Apéndice C: Eigenfunciones y potencial de Morse transformados.	45
Bibliografía	48

Introducción

En la mecánica cuántica existen pocos modelos de potenciales para los cuales se tiene una solución exacta de la ecuación de Schrödinger; es decir, que se conozcan completamente las eigenfunciones y el espectro de energía. Es por esto que resulta interesante contar con técnicas que nos permitan construir potenciales que generen soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger. Existen varias técnicas para lograrlo, como por ejemplo el método de factorización. Otras técnicas se basan en transformar las eigenfunciones y el potencial original; mediante una regla adecuada, de tal manera que el espectro de energía se preserve. A este tipo de técnicas se les llama transformaciones isoespectrales ya que el potencial original y el transformado generan el mismo espectro de energía. A los nuevos potenciales se les llama potenciales isoespectrales.

Este trabajo consta de dos partes. En la primera parte se utiliza a la transformación de Darboux[1] como técnica de construcción de potenciales isoespectrales, la cual es una técnica desarrollada en el siglo XIX por Jean Gaston Darboux para el estudio de ecuaciones diferenciales ordinarias lineales y luego fue aplicada a la ecuación de Schrödinger cuando la teoría cuántica se había establecido. En la segunda parte se construye otra técnica para encontrar potenciales isoespectrales, a la cual llamamos transformación isoespectral. Ésta es una variante de la transformación de Darboux, originalmente obtenida mediante el método de factorización[2].

En el primer capítulo se presenta la transformación de Darboux y algunas de sus propiedades en el contexto de la mecánica cuántica. En la primera sección se deducen las ecuaciones de transformación a partir de la ecuación unidimensional de Schrödinger y se demuestra la existencia de tal transformación. Además, se muestra que para realizar la transformación es necesario conocer una función, que llamamos $\sigma(x)$, que es solución de una ecuación diferencial ordinaria no lineal, la cual es del tipo de la ecuación de Riccati[3]. En la segunda sección, y primera subsección, buscamos las condiciones para que las eigenfunciones transformadas formen un conjunto ortogonal, partiendo del hecho de que las eigenfunciones originales lo son. En la segunda subsección resolvemos la ecuación de Riccati mediante la técnica de linealización y encontramos la función $\sigma(x)$, después expresamos la transformación de Darboux de manera explícita. En la tercera subsección aprovechamos la solución $\sigma(x)$ y construimos la eigenfunción transformada del estado base e interpretamos el resultado en el contexto de la transformación de Darboux. Por último, en la tercera sección, realizamos la transformación de Darboux a un problema

transformado y buscamos conectar este segundo problema transformado con el problema original. Después generalizamos el resultado obtenido para una sucesión de N transformaciones y concluimos con el teorema de Crum, que permite construir una cadena de transformaciones sucesivas de Darboux.

En el segundo capítulo se estudian dos ejemplos: una partícula en un potencial unidimensional de pozo infinito y el potencial de Morse[4]. Se resuelve la ecuación de Schrödinger para cada caso y se obtienen las eigenfunciones y el espectro de energía correspondientes. A partir de las soluciones de cada problema, se realiza una transformación de Darboux a cada caso, se encuentran las eigenfunciones y potenciales transformados tanto analítica como gráficamente y se comparan con las eigenfunciones y potenciales originales.

En la primera sección del tercer capítulo, se construye la transformación isoespectral a partir del problema transformado de Darboux; se resuelve la ecuación de Riccati correspondiente y se construye su solución general, con ayuda de la solución $\sigma(x)$ del primer capítulo. Con este resultado conectamos el problema transformado con el problema original, lo que da lugar a la transformación isoespectral. En la siguiente sección se aplica la transformación isoespectral a los ejemplos presentados en el segundo capítulo y se obtienen las nuevas eigenfunciones y potenciales transformados, para después compararlos con lo obtenido en el problema original.

Finalmente, se comparan los resultados obtenidos con ambas técnicas de transformación y se resaltan las diferencias y similitudes entre ambas.

Capítulo 1

Transformación de Darboux en mecánica cuántica.

1.1. Deducción de la transformación de Darboux.

Consideremos una partícula de masa m que interactúa con un campo a través del potencial unidimensional $V(x)$ definido en un intervalo \mathcal{I} del eje real. La descripción mecanico-cuántica del sistema se realiza mediante la ecuación de Schrödinger unidimensional para estados estacionarios:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi_\lambda = E_\lambda\psi_\lambda, \quad (1.1)$$

donde:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (1.2)$$

es el hamiltoniano del sistema. E_λ representa la energía del estado del sistema y ψ_λ es la eigenfunción del operador $\hat{\mathcal{H}}$. Consideramos un sistema ligado con niveles de energía discretos, por lo que el parámetro λ toma los valores $0, 1, \dots$, con 0 el valor que caracteriza al estado de mínima energía o estado base del sistema. Así, la ecuación de Schrödinger es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_\lambda}{dx^2} + V(x)\psi_\lambda = E_\lambda\psi_\lambda. \quad (1.3)$$

Supongamos que conocemos completamente la descripción del sistema. Esto es, se conoce el conjunto de las eigenfunciones $\psi_\lambda(x)$ y se conoce el espectro de energía $\{E_\lambda : \lambda = 0, 1, \dots\}$. Existe una transformación de la ecuación (1.3) que mantiene la forma de la ecuación y preserva el espectro de energía. Dicha transformación se conoce como transformación de Darboux. A continuación presentamos una deducción de la misma. Buscamos una ecuación de la forma:

$$\hat{H}\phi_\lambda = E_\lambda\phi_\lambda, \quad (1.4)$$

donde \hat{H} es el hamiltoniano transformado, ϕ_λ son las eigenfunciones transformadas y los valores de la energía E_λ son los mismos que en (1.3). Utilizamos la ecuación (1.3) como punto de partida y denotamos con $\varphi_\lambda(x)$ a la derivada de la función $\psi_\lambda(x)$:

$$\varphi_\lambda \equiv \frac{d\psi_\lambda}{dx}. \quad (1.5)$$

Derivando la ecuación (1.3) y usando la ecuación (1.5) obtenemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi_\lambda}{dx^2} + V(x) \varphi_\lambda = E_\lambda \varphi_\lambda - \frac{dV(x)}{dx} \psi_\lambda. \quad (1.6)$$

Observamos que la forma de la ecuación anterior es similar a la ecuación de Schrödinger para estados estacionarios; serían idénticas de no ser por el término proporcional a ψ_λ . Ahora, supongamos que existe una función $\sigma(x)$ real, continua y derivable en el intervalo de definición del problema de interés. Consideremos el producto $\sigma(x)\psi_\lambda(x)$, y calculemos la segunda derivada de esta función:

$$\frac{d^2(\sigma\psi_\lambda)}{dx^2} = \sigma''\psi_\lambda + 2\sigma'\varphi_\lambda + \sigma\psi_\lambda'', \quad (1.7)$$

donde la prima sobre la función denota la derivada con respecto a x y hemos aprovechado la definición (1.5) para sustituir la derivada de ψ_λ por la función φ_λ . Multiplicando la ecuación anterior por el factor $-\frac{\hbar^2}{2m}$ y utilizando la ecuación (1.3) en el último término, obtenemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2(\sigma\psi_\lambda)}{dx^2} = -\frac{\hbar^2}{m} \sigma'\varphi_\lambda - \frac{\hbar^2}{2m} \sigma''\psi_\lambda + (E_\lambda - V) \sigma\psi_\lambda, \quad (1.8)$$

esta ecuación la escribimos como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2(\sigma\psi_\lambda)}{dx^2} + V(x) (\sigma\psi_\lambda) = E_\lambda (\sigma\psi_\lambda) - \frac{\hbar^2}{m} \sigma'\varphi_\lambda - \frac{\hbar^2}{2m} \sigma''\psi_\lambda. \quad (1.9)$$

Agregando el término $\frac{\hbar^2}{m} \sigma'\sigma\psi_\lambda$ en ambos lados de la ecuación anterior, podemos escribir la ecuación en la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2(\sigma\psi_\lambda)}{dx^2} + \left[V + \frac{\hbar^2}{m} \sigma' \right] (\sigma\psi_\lambda) + \frac{\hbar^2}{m} \sigma'\varphi_\lambda = E_\lambda (\sigma\psi_\lambda) + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sigma'' + \frac{\hbar^2}{m} \sigma'\sigma \right] \psi_\lambda.$$

Finalmente, los dos últimos términos del lado derecho se pueden agrupar en una derivada

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2(\sigma\psi_\lambda)}{dx^2} + \left[V + \frac{\hbar^2}{m} \sigma' \right] (\sigma\psi_\lambda) + \frac{\hbar^2}{m} \sigma'\varphi_\lambda = E_\lambda (\sigma\psi_\lambda) + \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d}{dx} (-\sigma' + \sigma^2) \right] \psi_\lambda. \quad (1.10)$$

Sumando a la expresión anterior la ecuación (1.6) obtenemos:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} (\varphi_\lambda + \sigma\psi_\lambda) + \left(V + \frac{\hbar^2}{m} \sigma' \right) (\varphi_\lambda + \sigma\psi_\lambda) \\ & = E_\lambda (\varphi_\lambda + \sigma\psi_\lambda) - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d}{dx} \left(\sigma' - \sigma^2 + \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \right) \right] \psi_\lambda. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Definimos la función:

$$\phi_\lambda \equiv \varphi_\lambda + \sigma\psi_\lambda \quad (1.12)$$

para tener:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi_\lambda}{dx^2} + \left(V + \frac{\hbar^2}{m}\sigma' \right) \phi_\lambda = E_\lambda\phi_\lambda - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d}{dx} \left(\sigma' - \sigma^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V(x) \right) \right] \psi_\lambda. \quad (1.13)$$

El primer renglón de la ecuación anterior tiene la estructura de la ecuación de Schrödinger para el potencial $V + \frac{\hbar^2}{m}\sigma'$ con eigenvalor E_λ . Entonces, demandamos que la función $\sigma(x)$ sea solución de la siguiente ecuación diferencial:

$$\sigma' - \sigma^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V = c, \quad (1.14)$$

donde c es una constante arbitraria. De esa manera la ecuación (1.13) queda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi_\lambda}{dx^2} + \left(V + \frac{\hbar^2}{m}\sigma' \right) \phi_\lambda = E_\lambda\phi_\lambda. \quad (1.15)$$

Definimos el potencial $U(x)$ como:

$$U(x) \equiv V(x) + \frac{\hbar^2}{m}\sigma' \quad (1.16)$$

de tal forma que la ecuación (1.15) es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi_\lambda}{dx^2} + U(x)\phi_\lambda = E_\lambda\phi_\lambda. \quad (1.17)$$

Hay que notar que en este proceso de modificación de la ecuación de Schrödinger con potencial $V(x)$ para llegar a la ecuación de Schrödinger con potencial $U(x)$, los valores de la energía E_λ no han cambiado por lo que los dos potenciales, $V(x)$ y $U(x)$, tienen el mismo espectro de energía. Es decir, son potenciales isoenergéticos.

Además, la ecuación (1.12) nos proporciona las soluciones $\phi_\lambda(x)$ de la ecuación (1.17) en términos de las soluciones del problema original. Este proceso se conoce como transformación de Darboux.

Ante una transformación de Darboux la ecuación de Schrödinger es covariante. El hamiltoniano transformado \hat{H} está relacionado al hamiltoniano original $\hat{\mathcal{H}}$ por

$$\hat{H} = \hat{\mathcal{H}} + \frac{\hbar^2}{m} \frac{d\sigma}{dx}, \quad (1.18)$$

el potencial transformado es

$$U(x) = V(x) + \frac{\hbar^2}{m} \frac{d\sigma}{dx}, \quad (1.19)$$

y las eigenfunciones del problema transformado son

$$\phi_\lambda(x) = \frac{d\psi_\lambda(x)}{dx} + \sigma(x)\psi_\lambda(x). \quad (1.20)$$

Definimos el operador de Darboux \hat{D} como:

$$\hat{D} \equiv \frac{d}{dx} + \sigma(x)$$

para tener:

$$\phi_\lambda(x) = \hat{D}\psi_\lambda(x). \quad (1.21)$$

La función $\sigma(x)$ determina a la transformación de Darboux y es una solución de la ecuación (1.14), la cual es una ecuación diferencial ordinaria de primer orden, no-lineal, dada por

$$\frac{d\sigma}{dx} - \sigma^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V(x) = \frac{2m}{\hbar^2}C, \quad (1.22)$$

donde $V(x)$ es el potencial del problema original y hemos redefinido la constante $c = \frac{2m}{\hbar^2}C$, con C una constante real arbitraria con dimensiones de energía. La ecuación (1.22) es una forma particular de la ecuación de Riccati, la cual en general tiene la forma siguiente:

$$\frac{dy}{dx} + p(x)y + q(x)y^2 = r(x),$$

vea la ecuación (A-1) del apéndice A.

Por lo tanto, en el caso de la ecuación (1.22) se tiene $p(x) = 0$, $q(x) = -1$ y $r(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(C - V(x))$. Más adelante encontraremos una solución de la ecuación de Riccati (1.22) y estaremos en posibilidades de realizar explícitamente la transformación de Darboux.

1.2. Propiedades de la transformación de Darboux.

1.2.1. Ortogonalidad de las eigenfunciones transformadas.

De acuerdo a la ecuación (1.20) las eigenfunciones transformadas $\phi_\lambda(x)$ se obtienen a partir de las eigenfunciones $\psi_\lambda(x)$ del problema original. La función $\sigma(x)$ es una función continua y derivable en el intervalo de definición del problema; entonces, las eigenfunciones transformadas son funciones suaves. Asumimos, como es de esperarse, que el conjunto de eigenfunciones del problema original es ortonormal, por ejemplo se cumple:

$$\langle \psi_\lambda | \psi_\mu \rangle = \delta_{\lambda,\mu} \quad (1.23)$$

donde $\langle \psi_\lambda | \psi_\mu \rangle$ denota el producto interior de las eigenfunciones $\psi_\lambda(x)$ y $\psi_\mu(x)$, dado por

$$\langle \psi_\lambda | \psi_\mu \rangle = \int_{\mathcal{I}} \psi_\lambda^*(x)\psi_\mu(x) dx, \quad (1.24)$$

en la expresión anterior el asterisco representa el conjugado de la función e \mathcal{I} el intervalo de definición del problema.

Sin embargo, para las eigenfunciones transformadas no es claro que cumplan con esta condición. Para mostrar lo que ocurre usamos la ecuación (1.21) en el cálculo del producto interior de ϕ_λ con ϕ_μ , para tener

$$\langle \phi_\lambda | \phi_\mu \rangle = \langle \hat{D}\psi_\lambda | \hat{D}\psi_\mu \rangle. \quad (1.25)$$

Es pertinente hacer la observación de que el operador de Darboux es un operador real cuyo adjunto, \hat{D}^\dagger , es real y está dado por:

$$\hat{D}^\dagger = -\frac{d}{dx} + \sigma(x). \quad (1.26)$$

Usando el adjunto de \hat{D} en la expresión (1.25) tenemos

$$\langle \phi_\lambda | \phi_\mu \rangle = \langle \hat{D}^\dagger \hat{D}\psi_\lambda | \psi_\mu \rangle. \quad (1.27)$$

Calculando explícitamente el primer factor del lado derecho de la expresión anterior resulta

$$\begin{aligned} \hat{D}^\dagger \hat{D}\psi_\lambda &= \left(-\frac{d}{dx} + \sigma \right) \left(\frac{d}{dx} + \sigma \right) \psi_\lambda \\ &= -\frac{d^2\psi_\lambda}{dx^2} - \frac{d\sigma}{dx}\psi_\lambda + \sigma^2\psi_\lambda. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Usando la ecuación de Schrödinger (1.3) en el primer término, para eliminar la segunda derivada de ψ_λ , obtenemos:

$$\hat{D}^\dagger \hat{D}\psi_\lambda = \frac{2m}{\hbar^2} [E_\lambda - V(x)] \psi_\lambda - \frac{d\sigma}{dx}\psi_\lambda + \sigma^2\psi_\lambda. \quad (1.29)$$

Sustituyendo el resultado anterior en (1.27) y juntando términos semejantes queda:

$$\langle \phi_\lambda | \phi_\mu \rangle = \frac{2m}{\hbar^2} E_\lambda \langle \psi_\lambda | \psi_\mu \rangle - \langle \psi_\lambda | \left[\frac{2m}{\hbar^2} V(x) + \frac{d\sigma}{dx} - \sigma^2 \right] | \psi_\mu \rangle, \quad (1.30)$$

pero la cantidad entre paréntesis cuadrado es el lado izquierdo de la ecuación de Riccati (1.22) sustituyendo y aprovechando que las eigenfunciones ψ_λ forman un conjunto ortonormal, queda finalmente:

$$\langle \phi_\lambda | \phi_\mu \rangle = \frac{2m}{\hbar^2} (E_\lambda - C) \delta_{\lambda,\mu}. \quad (1.31)$$

En el caso particular de $\lambda = \mu$ obtenemos

$$\langle \phi_\lambda | \phi_\lambda \rangle = \frac{2m}{\hbar^2} (E_\lambda - C), \quad (1.32)$$

de este resultado se desprenden dos consecuencias importantes:

1. El conjunto de las eigenfunciones transformadas es ortogonal y se puede normalizar con la constante

$$N_\lambda^2 = \frac{1}{\frac{2m}{\hbar^2}(E_\lambda - C)}.$$

2. Porque el lado izquierdo de (1.32) es positivo, sólo las eigenfunciones transformadas que cumplen con $E_\lambda > C$ son eigenfunciones válidas.

En la siguiente subsección encontraremos una solución a la ecuación de Riccati (1.22).

1.2.2. Linealización de la ecuación de Riccati.

Como se mencionó anteriormente, para llevar a cabo una transformación de Darboux es necesario conocer una solución $\sigma(x)$ de la ecuación de Riccati (1.22). Es decir, buscamos una solución a la ecuación:

$$\frac{d\sigma}{dx} - \sigma^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V(x) = \frac{2m}{\hbar^2}C. \quad (1.33)$$

Para encontrar dicha solución usamos la técnica para linealizar la ecuación de Riccati, que se presenta en el apéndice A. Para ello, sea $\chi(x)$ una función continua y derivable tal que:

$$\sigma(x) = -\frac{1}{\chi(x)} \frac{d\chi(x)}{dx}. \quad (1.34)$$

Sustituimos esta función en la ecuación (1.33) para tener:

$$\frac{d}{dx} \left[-\frac{1}{\chi(x)} \frac{d\chi(x)}{dx} \right] - \frac{1}{\chi^2(x)} \left(\frac{d\chi(x)}{dx} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V(x) = \frac{2m}{\hbar^2}C \quad (1.35)$$

y realizando la derivada del primer término obtenemos:

$$-\frac{1}{\chi(x)} \frac{d^2\chi(x)}{dx^2} + \frac{1}{\chi^2(x)} \left(\frac{d\chi(x)}{dx} \right)^2 - \frac{1}{\chi^2(x)} \left(\frac{d\chi(x)}{dx} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V(x) = \frac{2m}{\hbar^2}C, \quad (1.36)$$

al cancelar los términos intermedios y multiplicar por $\frac{\hbar^2}{2m}\chi(x)$ queda finalmente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi(x)}{dx^2} + V(x)\chi(x) = C\chi(x) \quad (1.37)$$

y ésta es la ecuación de Schrödinger del problema original, ecuación (1.3).

Concluimos que la función $\chi(x)$ corresponde a la eigenfunción del problema original con eigenvalor C . Supongamos que este eigenvalor es λ_0 , entonces la función $\sigma(x)$ se construye con ayuda de la eigenfunción $\psi_{\lambda_0}(x)$, de aquí en adelante llamada función auxiliar, y la transformación de Darboux queda expresada de manera explícita de la siguiente forma:

1. Las eigenfunciones transformadas ϕ_λ son:

$$\phi_\lambda(x) = \frac{d\psi_\lambda(x)}{dx} - \left(\frac{d}{dx} \ln \psi_{\lambda_0} \right) \psi_\lambda(x)$$

2. El potencial transformado es:

$$U(x) = V(x) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln \psi_{\lambda_0}$$

De aquí se sigue que los ceros de la eigenfunción ψ_{λ_0} son polos, tanto de las eigenfunciones transformadas como del potencial transformado. Por ejemplo, el potencial diverge en cada cero de la función auxiliar ψ_{λ_0} . Si queremos evitar estas divergencias, no podemos utilizar como función auxiliar cualquier eigenfunción. Sólo el estado base del sistema garantiza que la función auxiliar $\psi_0(x)$ no contiene ceros en el intervalo de definición del problema y evita las divergencias en las eigenfunciones y en el potencial transformados. Además, tiene como eigenvalor al valor mínimo de la energía E_0 , asegurando que el lado derecho de (1.32) es positivo para toda λ . Entonces, si la transformación se construye a partir de la eigenfunción del estado base del problema original, las eigenfunciones y potencial transformados son:

$$\phi_\lambda(x) = \frac{d\psi_\lambda(x)}{dx} - \left(\frac{d \ln \psi_0}{dx} \right) \psi_\lambda(x) \quad \lambda = 1, 2, \dots \quad (1.38)$$

y

$$U(x) = V(x) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2 \ln \psi_0}{dx^2} \quad (1.39)$$

Por su parte, la ecuación de Riccati queda en la forma:

$$\frac{d\sigma}{dx} - \sigma^2 + \frac{2m}{\hbar^2} V(x) = \frac{2m}{\hbar^2} E_0 \quad (1.40)$$

y la ortogonalidad de las eigenfunciones transformadas es:

$$\langle \phi_\lambda | \phi_\mu \rangle = \frac{2m}{\hbar^2} (E_\lambda - E_0) \delta_{\lambda,\mu}. \quad (1.41)$$

1.2.3. Corrimiento del espectro.

Sabemos que la transformación de Darboux se realiza con la función $\sigma(x)$, que se calcula a partir de la eigenfunción del estado base $\psi_0(x)$ del problema original

$$\sigma(x) = -\frac{1}{\psi_0(x)} \frac{d\psi_0(x)}{dx}, \quad (1.42)$$

entonces la eigenfunción transformada del estado base es

$$\phi_0(x) = \frac{d\psi_0(x)}{dx} + \sigma(x)\psi_0(x)$$

y al sustituir (1.42) obtenemos $\phi_0(x) = 0$. Es decir, en el problema transformado perdemos la eigenfunción y el nivel de energía del estado base del problema original. Las siguientes afirmaciones son todas equivalentes:

1. La energía del estado base del problema original no aparece en el espectro de energía del problema transformado.
2. El espectro de energía en el problema transformado se recorre en una unidad con respecto al estado base del problema original.
3. La transformación de Darboux es válida para estados con $\lambda \geq 1$.

Esto tiene sentido ya que con el estado base se construye la transformación, lo que sugiere que tal estado no aparece en el problema transformado. Entonces la propiedad de isoespectralidad de la transformación radica en que se obtiene la descripción completa del espectro de energía para los estados excitados del problema original. En este contexto, el estado base del problema transformado corresponde al primer estado excitado del problema original y así sucesivamente.

En la subsección anterior se presentaron los argumentos de porqué se tomó al estado base para realizar la transformación de Darboux. Sin embargo, dejando de lado tales problemas, es posible realizar la transformación de Darboux con los estados excitados del problema original. Supongamos que usamos la eigenfunción $\psi_{\lambda_0}(x)$ como función auxiliar, entonces, en virtud del punto número 2 de la página 6 no existen las eigenfunciones transformadas para $\lambda \leq \lambda_0$. El espectro del problema transformado se recorre $\lambda_0 + 1$ unidades con respecto al espectro del problema original. Sin embargo, como sabemos, en este caso el potencial transformado $U(x)$ no es suave como el potencial original sino que posee singularidades en los nodos de $\psi_{\lambda_0}(x)$.

1.3. Cadenas de transformaciones de Darboux.

Ya que conocemos una solución de la ecuación de Riccati, ecuación (1.40), y que conocemos como se transforman las eigenfunciones y el potencial podemos generar una nueva transformación de Darboux a partir del problema transformado.

Primero notemos que las eigenfunciones transformadas (1.38) se escriben como

$$\phi_\lambda(x) = \frac{1}{\psi_0} \left[\psi_0 \frac{d\psi_\lambda}{dx} - \psi_\lambda \frac{d\psi_0}{dx} \right].$$

En términos del wronskiano de las funciones $\psi_0(x)$ y $\psi_\lambda(x)$ queda

$$\phi_\lambda(x) = \frac{W(\psi_0, \psi_\lambda)}{\psi_0} \quad , \quad \lambda \geq 1. \quad (1.43)$$

El potencial transformado es:

$$U(x) = V(x) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln \psi_0. \quad (1.44)$$

Si ahora realizamos una segunda transformación de Darboux utilizando como función auxiliar a $\phi_1(x)$, eigenfunción del estado base del primer problema transformado, y siguiendo las ecuaciones anteriores, las eigenfunciones y el potencial del segundo problema transformado son:

$$\phi_\lambda[2](x) = \frac{W(\phi_1, \phi_\lambda)}{\phi_1} \quad , \quad \lambda \geq 2 \quad (1.45)$$

y

$$U[2](x) = U(x) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln \phi_1. \quad (1.46)$$

De la ecuación (1.44), el potencial $U[2](x)$ puede reescribirse como:

$$U[2](x) = V(x) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln (\psi_0 \phi_1)$$

y utilizando (1.43), con $\lambda = 1$, obtenemos el segundo potencial transformado en términos del potencial y eigenfunciones del problema original:

$$U[2](x) = V(x) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln W(\psi_0, \psi_1). \quad (1.47)$$

Por otra parte, con ayuda de (1.43), las eigenfunciones $\phi_\lambda[2](x)$ dadas por (1.45) pueden escribirse en términos de los wronskianos de las eigenfunciones del problema original de la siguiente manera:

$$\phi_\lambda[2](x) = \psi_0 \frac{W\left(\frac{W(\psi_0, \psi_1)}{\psi_0}, \frac{W(\psi_0, \psi_\lambda)}{\psi_0}\right)}{W(\psi_0, \psi_1)} \quad , \quad \lambda \geq 2.$$

Ahora, usamos la siguiente propiedad del wronskiano que se demuestra en el apéndice B:

$$W\left[\frac{W(f, g)}{f}, \frac{W(f, h)}{f}\right] = \frac{W(f, g, h)}{f}$$

y obtenemos las eigenfunciones de la segunda transformación de Darboux en términos de las eigenfunciones del problema original en la siguiente forma cerrada:

$$\phi_\lambda[2](x) = \frac{W(\psi_0, \psi_1, \psi_\lambda)}{W(\psi_0, \psi_1)} \quad , \quad \lambda \geq 2. \quad (1.48)$$

De las ecuaciones (1.47) y (1.48) concluimos que la segunda transformación de Darboux se realiza a partir de las eigenfunciones $\psi_\lambda(x)$ del problema original, sin necesidad de realizar la primera transformación. Es decir, a partir del problema original se puede realizar la segunda transformación de manera directa, sin pasos intermedios. Las eigenfunciones $\phi_\lambda[2](x)$ dadas por (1.48) satisfacen la ecuación de Schrödinger para el potencial $U[2](x)$, el cual está dado por (1.47). El potencial $U[2](x)$ tiene el mismo espectro de energía que el potencial original $V(x)$, para $\lambda \geq 2$; es decir, son isoenergéticos.

Estos resultados pueden generalizarse para N transformaciones de Darboux sucesivas, formando una cadena de transformaciones. El resultado es conocido como teorema de Crum, el cual se basa en aplicar N veces el operador de Darboux \hat{D} a las eigenfunciones $\psi_\lambda(x)$.

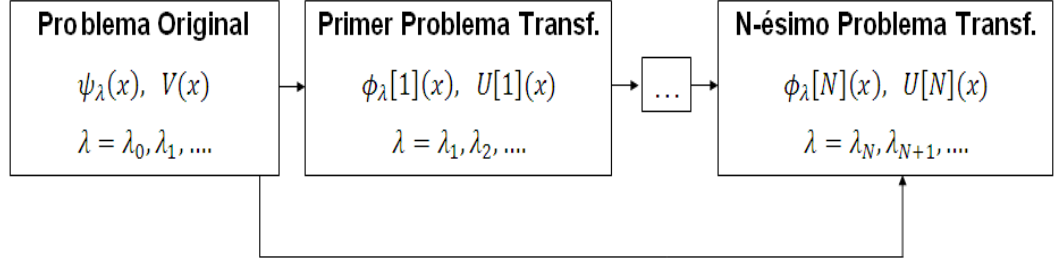


Figura 1.1: Esquema de una cadena de transformaciones de Darboux.

Las eigenfunciones y el potencial transformados de una cadena de N pasos son:

$$\phi[N]_\lambda = \frac{W(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}, \psi_\lambda)}{W(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N-1})}, \quad \lambda \geq N \quad (1.49)$$

y

$$U[N](x) = V(x) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln W(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}) \quad (1.50)$$

donde $N = 1, 2, 3, \dots$. Estas expresiones recuperan las ecuaciones de la primera y segunda transformación para los casos: $N = 1$ y $N = 2$, respectivamente. Por su parte, el espectro de energía de la cadena de N pasos es el mismo del problema original con un corrimiento de N niveles de energía. Es muy interesante notar que las transformaciones sucesivas se determinan a partir del problema original.

Capítulo 2

Ejemplos de transformaciones de Darboux.

En este capítulo desarrollaremos dos ejemplos donde se realiza la transformación de Darboux a problemas que se estudian en cursos introductorios a la Mecánica Cuántica. Haremos la transformación al problema de una partícula en un pozo de potencial infinito y al caso del potencial de Morse.

La transformación de Darboux se realiza a partir de la solución $\sigma(x)$ de la ecuación de Riccati, dada por:

$$\sigma(x) = -\frac{1}{\psi_0(x)} \frac{d\psi_0(x)}{dx}, \quad (2.1)$$

donde $\psi_0(x)$ es la eigenfunción del estado base del problema original. Se obtienen las eigenfunciones transformadas $\phi_\lambda(x)$ y el potencial transformado $U(x)$ mediante las ecuaciones:

$$\phi_\lambda(x) = \frac{d\psi_\lambda(x)}{dx} + \sigma(x)\psi_\lambda(x) \quad (2.2)$$

y

$$U(x) = V(x) + \frac{\hbar^2}{m} \frac{d\sigma(x)}{dx}. \quad (2.3)$$

Presentaremos primero el problema del pozo de potencial infinito.

2.1. Pozo de potencial infinito.

Consideremos una partícula de masa m y energía positiva E , la cual se encuentra encerrada en una caja unidimensional impenetrable de lado L . El potencial es:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ \infty & x \geq L \end{cases} \quad (2.4)$$

La partícula no puede ocupar las regiones $x \leq 0$ y $x \geq L$ ya que es repelida por las paredes de la caja, por lo que sólo puede existir en la región central, $0 < x < L$.

2.1.1. Eigenfunciones y eigenvalores.

Para describir al sistema se utiliza la ecuación de Schrödinger donde las eigenfunciones $\psi(x)$ satisfacen las siguientes condiciones en la frontera:

$$\psi(0) = 0 \quad , \quad \psi(L) = 0. \quad (2.5)$$

Con el potencial (2.4), la ecuación de Schrödinger es:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0. \quad (2.6)$$

Como la energía es positiva, definimos la constante $k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$ y la ecuación de Schrödinger queda:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0. \quad (2.7)$$

La solución de la ecuación anterior es una combinación lineal de las funciones trigonométricas $\sin kx$ y $\cos kx$:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad (2.8)$$

con A y B constantes de integración. Al aplicar las condiciones en la frontera (2.5) obtenemos:

$$\psi(0) = B = 0 \quad (2.9)$$

y

$$\psi(L) = A \sin kL = 0, \quad (2.10)$$

como $A \neq 0$, entonces esto implica que:

$$kL = n\pi \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.11)$$

De aquí, y de la definición de la constante k obtenemos que los valores posibles de la energía son:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.12)$$

y las eigenfunciones son:

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{L} x \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.13)$$

El valor de la constante A se calcula a partir de la condición de normalización y se obtiene $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$. Así, las eigenfunciones normalizadas quedan:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \quad , \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.14)$$

El estado base del sistema corresponde al valor de $n = 1$, entonces la eigenfunción normalizada del estado base es:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi}{L} x, \quad (2.15)$$

con energía:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}. \quad (2.16)$$

Para los siguientes dos estados, las eigenfunciones son:

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi}{L} x,$$

$$\psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{3\pi}{L} x.$$

La Figura 2.1 ilustra las primeras eigenfunciones normalizadas.

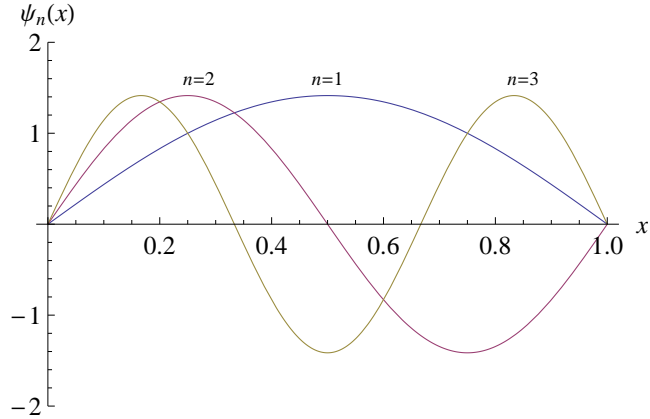


Figura 2.1: Eigenfunción normalizada del estado base del pozo infinito, $n = 1$, junto con los dos primeros estados excitados, $n = 2$ y $n = 3$. Se toma $L = 1$.

2.1.2. Transformación de Darboux.

Conocida la eigenfunción del estado base realizamos la transformación de Darboux, construyendo la función $\sigma(x)$. Utilizando (2.15) en (2.1) obtenemos:

$$\sigma(x) = -\frac{\pi}{L} \cot \frac{\pi}{L} x. \quad (2.17)$$

Sustituyendo las eigenfunciones (2.14) y la función (2.17) en (2.2) obtenemos las eigenfunciones transformadas:

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{n\pi}{L} \cos \frac{n\pi}{L} x - \frac{\pi}{L} \cot \frac{\pi}{L} x \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \\ &= \pi \sqrt{\frac{2}{L^3}} \left[n \cos \frac{n\pi}{L} x - \cot \frac{\pi}{L} x \sin \frac{n\pi}{L} x \right]. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Debemos recordar que las eigenfunciones transformadas $\phi_n(x)$ son válidas para $n \geq 2$, ya que en el caso de $n = 1$ es claro que la eigenfunción transformada es cero. En la Figura 2.2 dibujamos las primeras tres eigenfunciones transformadas normalizadas.

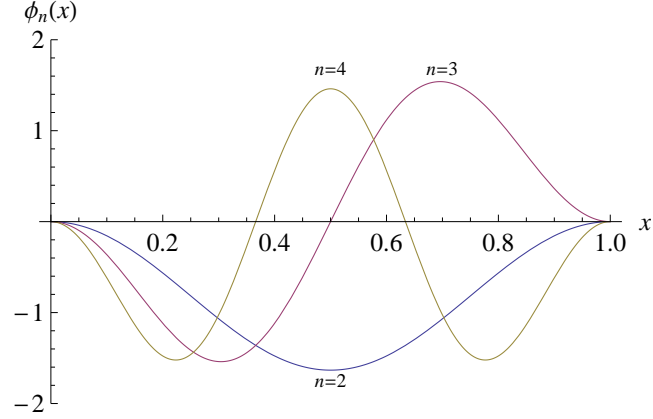


Figura 2.2: Eigenfunción transformada normalizada del estado base, $n = 2$, junto con las eigenfunciones transformadas normalizadas de los dos primeros estados excitados, $n = 3$ y $n = 4$. Se toma $L = 1$.

Derivando la expresión (2.17) obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(x)}{dx} &= -\frac{\pi}{L} \frac{d}{dx} \cot \frac{\pi}{L} x \\ &= \frac{\pi^2}{L^2} \csc^2 \frac{\pi}{L} x \end{aligned}$$

y sustituyendo en (2.3), junto con el potencial original $V(x)$, ecuación (2.4), obtenemos el potencial transformado

$$U(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2} \csc^2 \frac{\pi}{L} x & 0 < x < L \\ \infty & x \geq L \end{cases} \quad (2.19)$$

En la Figura 2.3 se muestra la gráfica de este potencial.

Como consecuencia de la forma del potencial, las eigenfunciones transformadas satisfacen las mismas condiciones en la frontera

$$\phi_n(0) = 0 \quad , \quad \phi_n(L) = 0. \quad (2.20)$$

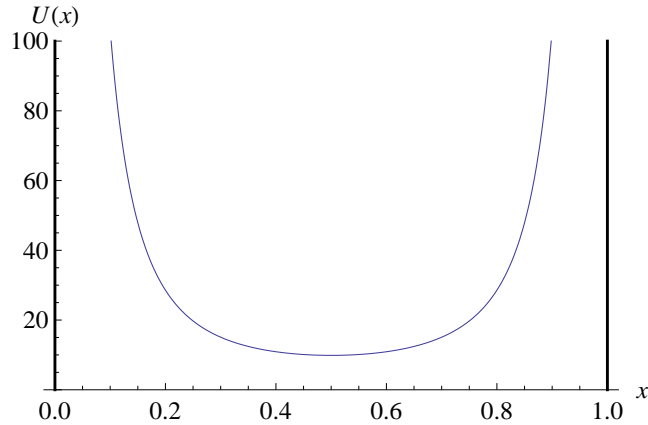


Figura 2.3: Potencial transformado del pozo infinito. Se toma $L = 1$.

De la figura podemos observar que en los extremos el potencial toma valores muy grandes, acercándose a las paredes del pozo infinito, mientras que el fondo deja de ser plano y aparece redondeado en las esquinas. El valor mínimo del potencial transformado ocurre en la mitad de la caja, $x = \frac{L}{2}$, y su valor es:

$$U\left(\frac{L}{2}\right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2} \quad (2.21)$$

Si comparamos este valor con el espectro de energía del problema original, ecuación (2.12), observamos que el valor mínimo del potencial transformado es mayor que el estado base y menor que la energía del primer estado excitado del problema original. Esto es:

$$E_1 < U\left(\frac{L}{2}\right) = 2E_1 < E_2$$

por lo que la energía del estado base no aparece en el problema transformado. Finalmente, en la Figura 2.4 dibujamos el potencial original y el transformado junto con los primeros niveles de energía.

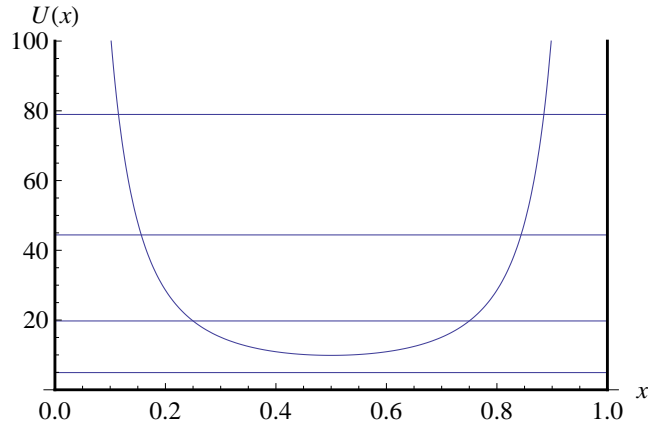


Figura 2.4: Gráfica comparativa del potencial original y el potencial transformado, junto con los primeros cuatro niveles de energía. Se toma $L = 1$.

2.2. Potencial de Morse.

El Potencial de Morse es un modelo de interacción entre dos átomos que forman una molécula diatómica. Este modelo es muy utilizado en estudios vibracionales de moléculas ya que incluye los efectos de disociación, tomando en cuenta los efectos anarmónicos, en contraste con el modelo del oscilador armónico cuántico. El potencial de Morse es:

$$V_M(r) = V_0 \left[e^{-2\left(\frac{r-r_0}{a}\right)} - 2e^{-\frac{r-r_0}{a}} \right], \quad (2.22)$$

donde r es la distancia radial entre los átomos, V_0 es la profundidad del potencial y tiene un valor positivo, r_0 es el punto de equilibrio estable y la distancia entre el cero del potencial y el punto de equilibrio es $\ln 2$ veces el parámetro a ; es decir, a es una medida de la anchura del potencial. El potencial en el origen es finito. Una gráfica del potencial se encuentra en la Figura 2.5.

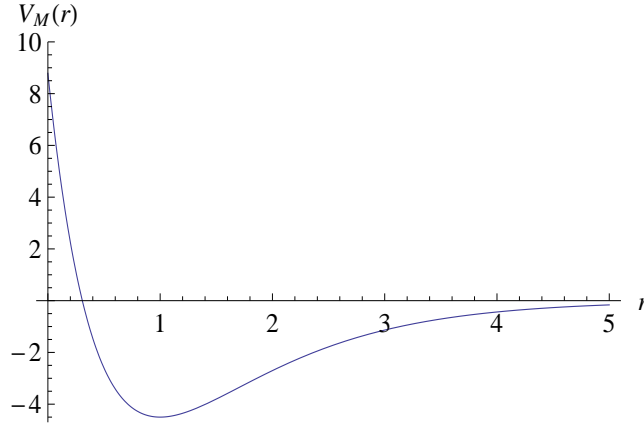


Figura 2.5: Potencial de Morse con los parámetros $V_0 = 4.5$, $r_0 = 1$ y $a = 1$. En el origen el potencial vale $V_M(0) = 8.786$.

2.2.1. Eigenfunciones y eigenvalores.

Dado que el potencial de Morse sólo depende de la distancia relativa entre los átomos que forman la molécula, corresponde a un problema de campo central, entonces, la parte radial de la ecuación de Schrödinger es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + V_{ef}(r) u = E u, \quad (2.23)$$

donde $u(r)$ es la función radial y satisface la siguiente condición en la frontera:

$$u(r) \rightarrow 0 \quad \text{para } r \rightarrow \infty. \quad (2.24)$$

En la ecuación (2.23), m es la masa reducida del sistema, E es la energía y, en el caso general, $V_{ef}(r)$ es el potencial efectivo el cual viene dado por:

$$V_{ef}(r) = V_M(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}, \quad (2.25)$$

donde ℓ es el número cuántico del momento angular. Resolveremos la ecuación (2.23) únicamente para estados s; es decir, con $\ell = 0$, en este caso:

$$V_{ef}(r) = V_M(r). \quad (2.26)$$

Sustituyendo el potencial de Morse en la ecuación (2.23) y multiplicando por $-\frac{2m}{\hbar^2}$ se obtiene:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E - V_0 \left[e^{-2\left(\frac{r-r_0}{a}\right)} - 2e^{-\frac{r-r_0}{a}} \right] \right\} u = 0. \quad (2.27)$$

Conviene hacer el siguiente cambio de variable:

$$z = e^{-\frac{r-r_0}{a}}. \quad (2.28)$$

Para realizarlo usamos:

$$\frac{dz}{dr} = -\frac{z}{a}, \quad (2.29)$$

$$\frac{du}{dr} = -\frac{z}{a} \frac{du}{dz}, \quad (2.30)$$

$$\frac{d^2u}{dr^2} = \frac{z^2}{a^2} \frac{d^2u}{dz^2} + \frac{z}{a^2} \frac{du}{dz}, \quad (2.31)$$

con estas identidades la ecuación (2.27) queda:

$$\frac{d^2u}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{du}{dz} + \frac{2ma^2}{\hbar^2} \left(\frac{E}{z^2} + \frac{2V_0}{z} - V_0 \right) u = 0, \quad (2.32)$$

donde hemos multiplicado por a^2/z^2 .

Buscamos describir la interacción atractiva entre los átomos; es decir, buscamos estados ligados, por lo tanto la energía toma valores negativos, $E < 0$. Definimos el parámetro positivo

$$\epsilon^2 = -\frac{2ma^2}{\hbar^2} E \quad (2.33)$$

para tener la siguiente ecuación:

$$\frac{d^2u}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{du}{dz} + \left(-\frac{\epsilon^2}{z^2} + \frac{2\beta^2}{z} - \beta^2 \right) u = 0, \quad (2.34)$$

donde hemos definido la constante β como:

$$\beta^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0. \quad (2.35)$$

La función $u(r)$ debe satisfacer la condición en la frontera dada por (2.24), dado que cuando $r \rightarrow \infty$ la variable $z \rightarrow 0$, entonces la función $u(z)$ tiende a cero conforme nos acercamos al origen. Denotando con $\tilde{u}(z)$ la función en la vecindad del origen, de la ecuación (2.34) se sigue que esta función satisface la ecuación:

$$\frac{d^2\tilde{u}}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d\tilde{u}}{dz} - \frac{\epsilon^2}{z^2} \tilde{u} = 0, \quad (2.36)$$

la cual podemos escribir como:

$$z^2 \frac{d^2\tilde{u}}{dz^2} + z \frac{d\tilde{u}}{dz} - \epsilon^2 \tilde{u} = 0. \quad (2.37)$$

Recordando que el operador $z^n \frac{d^n}{dz^n}$ no cambia la potencia de z^q entonces es de esperarse que $\tilde{u}(z) = z^q$, donde q es un número real. Sustituyendo en (2.37) obtenemos los valores posibles de q :

$$q = \pm \epsilon \quad (\epsilon > 0). \quad (2.38)$$

Para que la función $u(z)$ satisfaga la condición en el límite $z \rightarrow 0$ se requiere el signo positivo y por lo tanto

$$u(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} 0. \quad (2.39)$$

Con este resultado y reconociendo la ecuación (2.34) como la ecuación radial del átomo de hidrógeno bidimensional, cuya solución exacta es de la forma

$$u(z) = z^\epsilon e^{-\beta z} Q(z), \quad (2.40)$$

donde $Q(z)$ es una función por determinar, asumimos esta forma para la solución de (2.34). Usando las derivadas de $u(z)$:

$$\frac{du(z)}{dz} = \left[\frac{\epsilon}{z} - \beta + \frac{Q'(z)}{Q(z)} \right] u(z) \quad (2.41)$$

y

$$\frac{d^2u(z)}{dz^2} = \left[\frac{Q''}{Q} + \left(\frac{2\epsilon}{z} - 2\beta \right) \frac{Q'}{Q} + \beta^2 + \frac{\epsilon(\epsilon-1)}{z^2} - \frac{2\epsilon\beta}{z} \right] u(z), \quad (2.42)$$

donde la prima sobre la función indica derivada con respecto a z .

Sustituyendo (2.41) y (2.42) en la ecuación (2.34), multiplicando por $zQ(z)$ y reduciendo términos obtenemos la siguiente ecuación diferencial para la función $Q(z)$:

$$zQ''(z) + (2\epsilon + 1 - 2\beta z)Q'(z) + (2\beta^2 - \beta - 2\epsilon\beta)Q(z) = 0. \quad (2.43)$$

Hacemos el siguiente cambio de variable:

$$y = 2\beta z \quad (2.44)$$

y dividimos entre 2β para obtener finalmente:

$$yQ''(y) + (2\epsilon + 1 - y)Q'(y) + \left(\beta - \epsilon - \frac{1}{2} \right) Q(y) = 0. \quad (2.45)$$

Esta ecuación tiene la forma de la ecuación asociada de Laguerre:

$$xL_n^{s''} + (s + 1 - x)L_n^{s'} + nL_n^s = 0, \quad (2.46)$$

cuyas soluciones son los polinomios asociados de Laguerre $L_n^s(x)$, con $n = 0, 1, 2, \dots$, definidos en $0 \leq x < \infty$.

Entonces, es conveniente extender el intervalo de la variable z a la semirecta completa, $0 \leq z < \infty$, ya que esto nos permite tener una solución analítica para el potencial de Morse. La ventaja de contar con esta solución analítica es que la podemos usar para construir el potencial transformado de Darboux.¹

¹En sistemas específicos, como el caso de la molécula Li_2 , se ha probado que la inclusión de la región no-física, $e^{\frac{r_0}{a}} < z < \infty$, no altera significativamente las propiedades espectrales del potencial de Morse y que los eigenvalores obtenidos prácticamente coinciden con los eigenvalores correctos que corresponden al dominio físico de la variable[5].

Por lo tanto, asumimos que el dominio de la variable es $0 \leq z < \infty$ y en consecuencia identificamos la ecuación (2.45) como una ecuación asociada de Laguerre con parámetros:

$$s = 2\epsilon \quad (2.47)$$

y

$$n = \beta - \epsilon_n - \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.48)$$

de aquí se sigue que el parámetro ϵ y la energía del sistema se encuentran cuantizados; es decir, toman valores discretos

$$\epsilon_n = \beta - \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.49)$$

y utilizando la definición (2.33) encontramos que los niveles de energía del sistema son:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \left[\beta - \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.50)$$

Por su parte las eigenfunciones del potencial de Morse quedan:

$$u_n(z) = A_n z^{\epsilon_n} e^{-\beta z} L_n^{2\beta-2n-1}(2\beta z) \quad (2.51)$$

o en términos de la variable r :

$$u_n(r) = A_n e^{-\epsilon_n \left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}} L_n^{2\beta-2n-1}(2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}), \quad (2.52)$$

donde A_n es la constante de normalización que, en general, depende de n y se calcula con la condición:

$$\int_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1. \quad (2.53)$$

Para que los polinomios asociados de Laguerre se encuentren bien definidos, debe cumplirse que:

$$2\beta - 2n - 1 \geq 0 \quad (2.54)$$

ya que $\epsilon_n > 0$. Esto significa que el parámetro n se encuentra acotado,

$$n \leq \beta - \frac{1}{2}, \quad (2.55)$$

lo que a su vez se traduce en un número finito de estados ligados. El valor máximo que puede tomar n es el entero más grande que es menor o igual a $\beta - \frac{1}{2}$, así los valores de n son $0, 1, 2, \dots, n_{max}$. El número de estados ligados es $n_{max} + 1$; este número depende de las características del sistema ya que la constante β depende, a su vez, de la profundidad V_0 del potencial, de la masa reducida del sistema m y del parámetro a . Entre más grande sea el valor de V_0 , más profundo es el potencial y por lo tanto se tiene un mayor número de estados ligados.

Como ejemplo, podemos tomar los siguientes valores para los parámetros

$$V_0 = 4.5, \quad r_0 = 1, \quad a = 1, \quad (2.56)$$

el potencial que corresponde a estos valores se encuentra graficado en la Figura 2.5.

Para estos parámetros, de la ecuación (2.35), obtenemos $\beta = 3$, y, de la ecuación (2.49), $\epsilon_n = \frac{5}{2} - n$; por lo tanto $n_{max} = 2$ y el sistema tiene tres estados ligados con eigenfunciones:

$$u_0(r) = A_0 e^{\frac{5}{2}(1-r)} e^{-3e^{(1-r)}} L_0^5(6e^{(1-r)}), \quad (2.57)$$

$$u_1(r) = A_1 e^{\frac{3}{2}(1-r)} e^{-3e^{(1-r)}} L_1^3(6e^{(1-r)}) \quad (2.58)$$

y

$$u_2(r) = A_2 e^{\frac{1}{2}(1-r)} e^{-3e^{(1-r)}} L_2^1(6e^{(1-r)}), \quad (2.59)$$

donde los polinomios asociados de Laguerre los obtenemos a partir de la siguiente fórmula de Rodrigues

$$L_n^\alpha(x) = \frac{x^{-\alpha} e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^{\alpha+n} e^{-x}), \quad (2.60)$$

la cual da para $n = 0$ y $\alpha = 5$, $n = 1$ y $\alpha = 3$, $n = 2$ y $\alpha = 1$, los siguientes polinomios

$$L_0^5(x) = 1,$$

$$L_1^3(x) = 4 - x$$

y

$$L_2^1(x) = \frac{1}{2} (6 - 6x + x^2).$$

Sustituyendo las expresiones anteriores en (2.57), (2.58) y (2.59), respectivamente, obtenemos las eigenfunciones:

$$u_0(r) = A_0 e^{\frac{5}{2}(1-r)} e^{-3e^{(1-r)}},$$

$$u_1(r) = 2A_1 e^{\frac{3}{2}(1-r)} e^{-3e^{(1-r)}} [2 - 3e^{(1-r)}],$$

y

$$u_2(r) = 3A_2 e^{\frac{1}{2}(1-r)} e^{-3e^{(1-r)}} [1 - 6e^{(1-r)} + 6e^{2(1-r)}],$$

donde A_0 , A_1 y A_2 se calculan numéricamente. En la Figura 2.6 graficamos las eigenfunciones anteriores ya normalizadas.

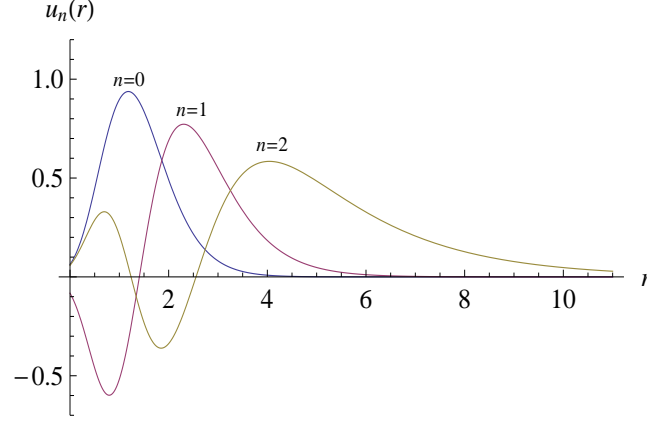


Figura 2.6: Eigenfunción normalizada del estado base del potencial de Morse junto con las eigenfunciones normalizadas de los primeros dos estados excitados. Se usan los parámetros anteriores: $V_0 = 4.5$, $r_0 = 1$ y $a = 1$.

2.2.2. Transformación de Darboux.

La eigenfunción del estado base del potencial de Morse es:

$$u_0(r) = A_0 e^{-\epsilon_0 \left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}. \quad (2.61)$$

La función $\sigma(r)$ la obtenemos a partir de la función anterior, usando la ecuación (2.1). Para facilitar el cálculo de $\sigma(r)$, es conveniente expresarla en términos de la variable z , la cual está dada por (2.28). Con ayuda de la regla de la cadena, la ecuación (2.1) es:

$$\sigma(r) = \tilde{\sigma}(z) \frac{dz}{dr}, \quad (2.62)$$

donde

$$\tilde{\sigma}(z) = -\frac{1}{u_0} \frac{du_0}{dz}. \quad (2.63)$$

La eigenfunción del estado base, ecuación (2.61), en términos de la variable z es

$$u_0 = A_0 z^{\epsilon_0} e^{-\beta z}. \quad (2.64)$$

Sustituimos la eigenfunción anterior en (2.63) y resulta

$$\tilde{\sigma}(z) = \beta - \frac{\epsilon_0}{z}, \quad (2.65)$$

o bien, en términos de la variable r , usando (2.28) y (2.29) en (2.62), tenemos:

$$\sigma(r) = \frac{\epsilon_0 - \beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}{a}. \quad (2.66)$$

Para facilitar el cálculo de las eigenfunciones transformadas expresamos la ecuación (2.2) en términos de la variable z , con ayuda de la regla de la cadena, resulta:

$$\phi_n(z) = \left(\frac{du_n(z)}{dz} + \tilde{\sigma}(z)u_n(z) \right) \frac{dz}{dr}. \quad (2.67)$$

La derivada con respecto a z de la función $u_n(z)$ la obtenemos a partir de la ecuación (2.51), la cual es

$$\frac{du_n}{dz} = \left(\frac{\epsilon_n}{z} - \beta \right) u_n(z) + A_n z^{\epsilon_n} e^{-\beta z} \frac{d}{dz} L_n^{2\beta-2n-1}(2\beta z). \quad (2.68)$$

Utilizando la siguiente relación para la derivada de los polinomios asociados de Laguerre:

$$\frac{dL_p^s(x)}{dx} = -L_{p-1}^{s+1}(x) \quad (2.69)$$

en el último término de (2.68), queda finalmente

$$\frac{du_n(z)}{dz} = \left(\frac{\epsilon_n}{z} - \beta \right) u_n(z) - 2\beta A_n z^{\epsilon_n} e^{-\beta z} L_{n-1}^{2\beta-2n}(2\beta z). \quad (2.70)$$

Sustituyendo las expresiones (2.29), (2.65) y (2.70) en la ecuación (2.67) obtenemos

$$\begin{aligned} \phi_n(z) &= \frac{z}{a} \left[\frac{1}{z} (\epsilon_0 - \epsilon_n) u_n(z) + 2\beta A_n z^{\epsilon_n} e^{-\beta z} L_{n-1}^{2\beta-2n}(2\beta z) \right] \\ &= \frac{1}{a} \left[(\epsilon_0 - \epsilon_n) u_n(z) + 2\beta A_n z^{\epsilon_n+1} e^{-\beta z} L_{n-1}^{2\beta-2n}(2\beta z) \right]. \end{aligned} \quad (2.71)$$

La diferencia $\epsilon_0 - \epsilon_n$ la calculamos con la ecuación (2.49) y resulta igual a n . Sustituyendo la eigenfunción $u_n(z)$, ecuación (2.51), en la expresión anterior resulta:

$$\phi_n(z) = \frac{A_n}{a} z^{\epsilon_n} e^{-\beta z} \left[n L_n^{2\beta-2n-1}(2\beta z) + 2\beta z L_{n-1}^{2\beta-2n}(2\beta z) \right], \quad (2.72)$$

y usando la identidad

$$n L_n^\alpha(x) + x L_{n-1}^{\alpha+1}(x) = (\alpha + n) L_{n-1}^\alpha(x), \quad (2.73)$$

las eigenfunciones transformadas finalmente quedan

$$\phi_n(z) = \frac{A_n}{a} (2\beta - n - 1) z^{\epsilon_n} e^{-\beta z} L_{n-1}^{2\beta-2n-1}(2\beta z), \quad (2.74)$$

o, con ayuda de (2.28), en términos de la variable r :

$$\phi_n(r) = \frac{A_n}{a} (2\beta - n - 1) e^{-\epsilon_n \left(\frac{r-r_0}{a} \right)} e^{-\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}} L_{n-1}^{2\beta-2n-1}(2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}). \quad (2.75)$$

Recordemos que las eigenfunciones anteriores son válidas para $n = 1, 2, \dots, n_{max}$; ya que en el caso $n = 0$ se tiene que $L_{-1}^\alpha(x) = 0$.

Las eigenfunciones de los dos primeros estados son:

$$\phi_1(r) = \frac{2A_1}{a}(\beta - 1)e^{-\epsilon_1\left(\frac{r-r_0}{a}\right)}e^{-\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}L_0^{2\beta-3}(2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}})$$

y

$$\phi_2(r) = \frac{A_2}{a}(2\beta - 3)e^{-\epsilon_2\left(\frac{r-r_0}{a}\right)}e^{-\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}L_1^{2\beta-5}(2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}).$$

Como ejemplo, tomemos los valores de los parámetros dados por (2.56); de los cuales obtenemos $\beta = 3$ y $\epsilon_n = \frac{5}{2} - n$, y los sustituimos en las eigenfunciones anteriores. Estas resultan

$$\phi_1(r) = 4A_1e^{\frac{3}{2}(1-r)}e^{-3e^{(1-r)}}L_0^3(6e^{(1-r)}) \quad (2.76)$$

y

$$\phi_2(r) = 3A_2e^{\frac{1}{2}(1-r)}e^{-3e^{(1-r)}}L_1^1(6e^{(1-r)}). \quad (2.77)$$

donde los polinomios de asociados de Laguerre los obtenemos a partir de la siguiente fórmula de Rodrigues

$$L_{n-1}^\alpha(x) = \frac{x^\alpha e^x}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (x^{\alpha+n-1} e^{-x}),$$

la cual da para $n = 1$ y $\alpha = 3$, $n = 2$ y $\alpha = 1$ los siguientes polinomios

$$L_0^3(x) = 1$$

y

$$L_1^1(x) = 2 - x.$$

Con estas expresiones, las ecuaciones (2.76) y (2.77) quedan:

$$\phi_1(r) = 4A_1e^{\frac{3}{2}(1-r)}e^{-3e^{(1-r)}}$$

y

$$\phi_2(r) = 3A_2e^{\frac{1}{2}(1-r)}e^{-3e^{(1-r)}}(2 - 6e^{(1-r)}),$$

donde las constantes A_1 y A_2 se calculan numéricamente. En la Figura 2.7 graficamos las funciones anteriores.

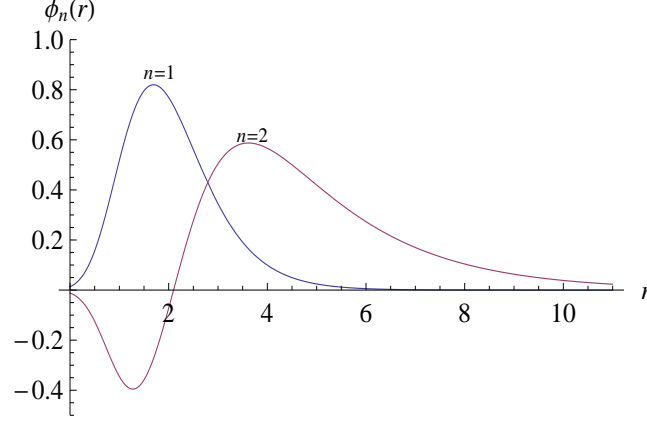


Figura 2.7: Eigenfunción transformada normalizada del estado base, $n = 1$, junto con la eigenfunción transformada normalizada del primer estado excitado, $n = 2$. Se toman los parámetros $V_0 = 4.5$, $r_0 = 1$ y $a = 1$.

Derivando la función $\sigma(r)$, ecuación (2.66), con respecto a r obtenemos

$$\frac{d\sigma(r)}{dr} = \frac{\beta}{a^2} e^{-\frac{r-r_0}{a}}, \quad (2.78)$$

y sustituyendo en (2.3), junto con el potencial de Morse $V_M(r)$, ecuación (2.22), y la constante β , ecuación (2.35), obtenemos el potencial transformado

$$\begin{aligned} U(r) &= V_0 e^{-2\left(\frac{r-r_0}{a}\right)} - 2V_0 e^{-\frac{r-r_0}{a}} + \frac{\hbar^2}{ma^2} \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}} V_0 e^{-\frac{r-r_0}{a}} \\ &= V_0 e^{-2\left(\frac{r-r_0}{a}\right)} - \left(2V_0 - \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{2V_0}{m}}\right) e^{-\frac{r-r_0}{a}}. \end{aligned} \quad (2.79)$$

Como ejemplo, tomemos los valores de los parámetros dados en (2.56), y los sustituimos en el potencial transformado de Morse, resulta:

$$U(r) = \frac{9}{2} e^{2(1-r)} - 6e^{(1-r)}.$$

En la Figura 2.8 graficamos el potencial transformado anterior.

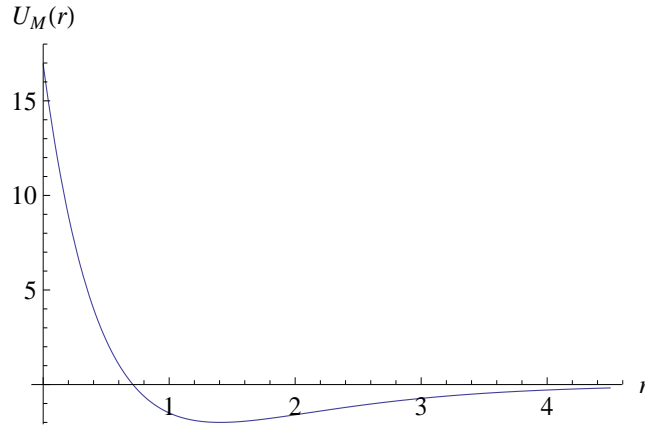


Figura 2.8: Potencial transformado de Morse. Se toman los parámetros $V_0 = 4.5$, $r_0 = 1$ y $a = 1$.

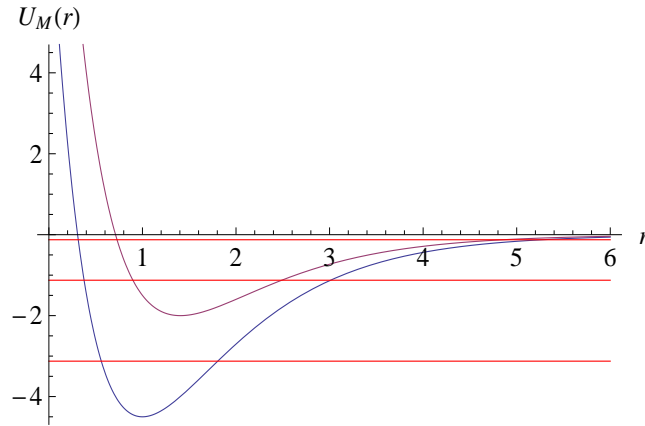


Figura 2.9: Gráfica comparativa del potencial original de Morse junto con el potencial transformado y los niveles de energía que corresponden al estado base y los dos primeros estados excitados. Se toman los parámetros $V_0 = 4.5$, $r_0 = 1$ y $a = 1$.

De la ecuación (2.79) podemos observar que el potencial transformado de Morse no sufrió algún cambio funcional; es decir, mantiene la misma forma que el potencial original, ya que el primer término es el mismo y el coeficiente del segundo se modificó por una constante positiva. Esto puede verse gráficamente en la Figura 2.8. Como consecuencia el potencial transformado es un potencial de Morse y las eigenfunciones transformadas mantienen la misma forma funcional que las eigenfunciones originales, con la diferencia de que los valores de n se recorren una unidad, $n = 1, 2, \dots, n_{max}$, y que en el problema transformado no aparece la energía del estado base del problema original, como puede observarse de la Figura 2.9, la cual muestra una comparación entre el potencial de Morse original y el potencial transformado, junto con los primeros niveles de energía.

Capítulo 3

Transformaciones isoenergéticas.

En el primer capítulo demostramos que la transformación de Darboux queda determinada por una solución $\sigma(x)$ de la siguiente ecuación de Riccati:

$$\frac{d\sigma}{dx} - \sigma^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V(x) = \frac{2m}{\hbar^2}C. \quad (3.1)$$

Encontramos, también, una solución a la ecuación anterior mediante el método de linealización, dicha solución se obtiene para $C = E_0$, energía del estado base del problema original, y está dada por:

$$\sigma_0(x) = -\frac{1}{\psi_0(x)} \frac{d\psi_0(x)}{dx}, \quad (3.2)$$

donde $\psi_0(x)$ es la eigenfunción del estado base; en consecuencia, la función $\sigma_0(x)$ satisface la ecuación

$$\frac{d\sigma_0}{dx} - \sigma_0^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V(x) = \frac{2m}{\hbar^2}E_0. \quad (3.3)$$

Las eigenfunciones $\phi_\lambda(x)$ y el potencial $U(x)$ del problema transformado resultaron:

$$\phi_\lambda(x) = \frac{d\psi_\lambda(x)}{dx} + \sigma_0(x)\psi_\lambda(x) \quad , \quad \lambda \geq 1 \quad (3.4)$$

y

$$U(x) = V(x) + \frac{\hbar^2}{m} \frac{d\sigma_0(x)}{dx}. \quad (3.5)$$

En la siguiente sección aprovecharemos los resultados obtenidos en el problema transformado y con ellos realizaremos una nueva transformación de Darboux, la cual se construirá con la solución de la correspondiente ecuación de Riccati. Encontraremos la solución general de esta ecuación, auxiliados de la función $\sigma_0(x)$, y este resultado nos permitirá construir un nuevo tipo de transformación que conecta al problema original con la nueva transformación de Darboux. A dicha transformación la hemos llamado transformación isoenergética.

3.1. Transformación Isoespectral.

En esta sección partimos de las eigenfunciones y potencial del problema transformado; es decir, las eigenfunciones $\phi_\lambda(x)$ y el potencial $U(x)$, dados por las ecuaciones (3.4) y (3.5), respectivamente. Ahora, haremos uso de estas eigenfunciones para realizar una nueva transformación de Darboux, la cual se lleva a cabo mediante una solución de la correspondiente ecuación de Riccati. Si con $\tilde{\sigma}(x)$ denotamos esta solución, entonces $\tilde{\sigma}(x)$ satisface la ecuación:

$$\frac{d\tilde{\sigma}}{dx} - \tilde{\sigma}^2 + \frac{2m}{\hbar^2}U(x) = \frac{2m}{\hbar^2}C, \quad (3.6)$$

con C una constante arbitraria con dimensiones de energía. Entonces, las eigenfunciones y el potencial del nuevo problema transformado son:

$$\tilde{\phi}_\lambda(x) = \frac{d\phi_\lambda(x)}{dx} + \tilde{\sigma}(x)\phi_\lambda(x) \quad (3.7)$$

y

$$\tilde{U}(x) = U(x) + \frac{\hbar^2}{m} \frac{d\tilde{\sigma}(x)}{dx}. \quad (3.8)$$

Sustituimos la ecuación (3.4) en (3.7) para obtener la eigenfunción transformada $\tilde{\phi}_\lambda(x)$ en términos de las eigenfunciones del problema original:

$$\tilde{\phi}_\lambda = \frac{d^2\psi_\lambda}{dx^2} + \frac{d\sigma_0}{dx}\psi_\lambda + \sigma_0 \frac{d\psi_\lambda}{dx} + \tilde{\sigma} \frac{d\psi_\lambda}{dx} + \tilde{\sigma}\sigma_0\psi_\lambda. \quad (3.9)$$

Utilizando la ecuación de Schrödinger del problema original, en la forma

$$\frac{d^2\psi_\lambda}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E_\lambda] \psi_\lambda,$$

para eliminar la segunda derivada del primer término de la ecuación (3.9), obtenemos:

$$\tilde{\phi}_\lambda = \left(\frac{d\sigma_0}{dx} + \frac{2m}{\hbar^2}V(x) \right) \psi_\lambda - \frac{2m}{\hbar^2}E_\lambda\psi_\lambda + (\tilde{\sigma} + \sigma_0) \frac{d\psi_\lambda}{dx} + \tilde{\sigma}\sigma_0\psi_\lambda \quad (3.10)$$

y con ayuda de la ecuación que satisface $\sigma_0(x)$, ecuación (3.3), tenemos

$$\tilde{\phi}_\lambda = \left(\frac{2m}{\hbar^2}E_0 + \sigma_0^2 \right) \psi_\lambda - \frac{2m}{\hbar^2}E_\lambda\psi_\lambda + (\tilde{\sigma} + \sigma_0) \frac{d\psi_\lambda}{dx} + \tilde{\sigma}\sigma_0\psi_\lambda.$$

Finalmente, después de un pequeño arreglo nos queda

$$\tilde{\phi}_\lambda = -\frac{2m}{\hbar^2}(E_\lambda - E_0)\psi_\lambda + (\tilde{\sigma} + \sigma_0) \left(\frac{d\psi_\lambda}{dx} + \sigma_0\psi_\lambda \right). \quad (3.11)$$

De la misma forma, en la expresión para el potencial $\tilde{U}(x)$, ecuación (3.8), sustituimos el potencial $U(x)$, dado por (3.5), para tener el nuevo potencial transformado en relación con el potencial del problema original

$$\tilde{U}(x) = V(x) + \frac{\hbar^2}{m} \frac{d}{dx}(\tilde{\sigma} + \sigma_0). \quad (3.12)$$

De las dos últimas expresiones, es claro que conviene definir la función:

$$\eta(x) = \tilde{\sigma}(x) + \sigma_0(x), \quad (3.13)$$

para tener las eigenfunciones y el potencial del nuevo problema transformado de la siguiente manera:

$$\tilde{\phi}_\lambda = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_\lambda - E_0) \psi_\lambda + \eta(x) \left(\frac{d\psi_\lambda}{dx} + \sigma_0 \psi_\lambda \right) \quad (3.14)$$

y

$$\tilde{U}(x) = V(x) + \frac{\hbar^2}{m} \frac{d\eta(x)}{dx}. \quad (3.15)$$

Ahora encontraremos la ecuación que satisface la función $\eta(x)$. Para ello, en la ecuación de Riccati (3.6) sustituimos el potencial $U(x)$, ecuación (3.5), y hacemos el cambio de función

$$\tilde{\sigma}(x) = -\sigma_0(x) + \eta(x) \quad (3.16)$$

para tener

$$\frac{d\eta}{dx} - \frac{d\sigma_0}{dx} - (-\sigma_0 + \eta)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} \left(V(x) + \frac{\hbar^2}{m} \frac{d\sigma_0}{dx} \right) = \frac{2m}{\hbar^2} C.$$

Desarrollando el binomio al cuadrado y agrupando, queda la siguiente ecuación:

$$\frac{d\eta}{dx} + 2\sigma_0\eta - \eta^2 + \frac{d\sigma_0}{dx} - \sigma_0^2 + \frac{2m}{\hbar^2} V(x) = \frac{2m}{\hbar^2} C. \quad (3.17)$$

Los últimos tres términos del lado izquierdo de la ecuación anterior corresponden al lado izquierdo de (3.3), y son iguales a $\frac{2m}{\hbar^2} E_0$. Sustituyendo en (3.17) obtenemos:

$$\frac{d\eta}{dx} + 2\sigma_0\eta - \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (C - E_0). \quad (3.18)$$

Como C es una constante arbitraria, escogemos $C = E_0$, entonces la función $\eta(x)$ satisface la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{d\eta}{dx} + 2\sigma_0\eta - \eta^2 = 0. \quad (3.19)$$

Ésta es una ecuación del tipo de Riccati, vea el apéndice A. Sustituyendo σ_0 , ecuación (3.2), en (3.19) obtenemos:

$$\frac{d\eta}{dx} - \frac{2}{\psi_0} \frac{d\psi_0}{dx} \eta - \eta^2 = 0, \quad (3.20)$$

que puede reescribirse como:

$$\frac{d\eta}{dx} - \frac{\eta}{\psi_0^2} \frac{d\psi_0^2}{dx} - \eta^2 = 0. \quad (3.21)$$

Multiplicando por $\frac{\psi_0^2}{\eta^2}$ podemos agrupar los primeros dos términos en una sola derivada para tener

$$\frac{d}{dx} \frac{\psi_0^2}{\eta} + \psi_0^2 = 0. \quad (3.22)$$

La integración de la ecuación anterior nos proporciona la función $\eta(x)$ en la forma:

$$\eta(x) = -\frac{\psi_0^2(x)}{\int \psi_0^2(x) dx + k}, \quad (3.23)$$

donde k es una constante de integración. La función $\eta(x)$ queda en términos del cuadrado de la eigenfunción del estado base del problema original, de su integral indefinida y de la constante arbitraria k .

La solución a la ecuación de Riccati (3.6) la obtenemos sustituyendo la función $\eta(x)$ en la ecuación (3.16), queda

$$\tilde{\sigma}(x) = \frac{d}{dx} \ln \psi_0(x) - \frac{\psi_0^2(x)}{\int \psi_0^2(x) dx + k}, \quad (3.24)$$

que se puede escribir como:

$$\tilde{\sigma}(x) = -\frac{d}{dx} \ln \left[\frac{1}{\psi_0(x)} \left(\int \psi_0^2(x) dx + k \right) \right].$$

Como k es una constante arbitraria, la expresión anterior es la solución general de la ecuación de Riccati (3.6), para $C = E_0$.

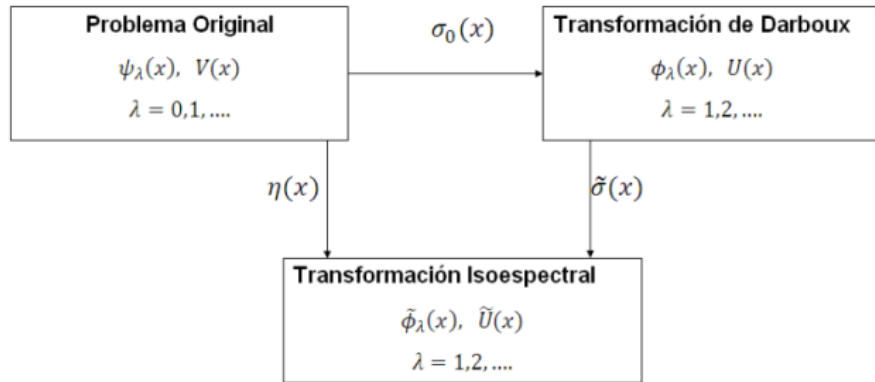


Figura 3.1: Relación entre el problema original con la transformación de Darboux y la transformación isoespectral.

Las eigenfunciones transformadas (3.14) son solución de la ecuación de Schrödinger con potencial $\tilde{U}(x)$, dado por (3.15), con el mismo espectro de energía que el del problema original; con excepción de la energía del estado base, ya que, como puede verse de (3.14),

cuando $\lambda = 0$ obtenemos $\tilde{\phi}_0 = 0$; para ello, basta notar que $\sigma_0(x)$ tiene la forma (3.2). Esto es, los potenciales $\tilde{U}(x)$ y $V(x)$ son potenciales isoespectrales. Por este motivo a la transformación dada por las ecuaciones (3.14) y (3.15) le llamamos transformación isoespectral.

Es importante notar que la transformación isoespectral nos relaciona el problema original con el nuevo problema transformado sin referencia a las eigenfunciones y potencial del problema intermedio y que la función $\eta(x)$ queda determinada por la eigenfunción del estado base del problema original.

La constante k que aparece en la transformación isoespectral juega ahora el papel de un parámetro que, si es necesario, se escoge de tal manera que el denominador de $\eta(x)$ en (3.23) sea diferente de cero, en el intervalo de definición del problema original. Así se evita la presencia de singularidades adicionales en el potencial transformado que no se encuentran en el potencial original.

3.2. Aplicaciones de la transformación isoespectral.

En esta sección aplicaremos la transformación isoespectral a los ejemplos presentados en el capítulo anterior: el potencial de pozo infinito y el potencial de Morse.

3.2.1. Potencial de pozo infinito.

Recordemos que la transformación isoespectral se realiza a partir de la eigenfunción del estado base del problema original. En el segundo capítulo encontramos que la eigenfunción normalizada del estado base del potencial de pozo infinito es, ecuación (2.15):

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi}{L} x. \quad (3.25)$$

Sustituyendo la eigenfunción del estado base en (3.23) para construir la función $\eta(x)$, resulta:

$$\eta(x) = -\frac{\frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi}{L} x}{k + \frac{2}{L} \int \sin^2 \frac{\pi}{L} x dx} \quad (3.26)$$

Integrando con ayuda de la identidad trigonométrica

$$\sin^2 y = \frac{1}{2}(1 - \cos 2y),$$

obtenemos:

$$\eta(x) = -\frac{4\pi \sin^2 \frac{\pi}{L} x}{2\pi(kL + x) - L \sin \frac{2\pi}{L} x} \quad (3.27)$$

Ahora nos preguntamos cuáles son los valores posibles del parámetro k que impiden que el denominador de (3.27) tenga ceros. Para ello, buscamos los valores de k que hacen cero el denominador de (3.27), los cuales están dados por la siguiente función de x :

$$k(x) = \frac{1}{2\pi} \sin \frac{2\pi}{L} x - \frac{x}{L}. \quad (3.28)$$

En la Figura 3.2 graficamos la función anterior y concluimos que si $k > 0$ o $k < -1$ la función $\eta(x)$, dada por (3.27), no diverge en el intervalo de definición $0 < x < L$.

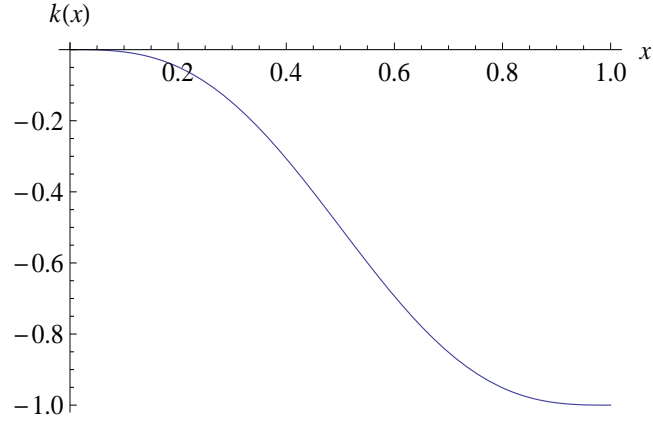


Figura 3.2: Valores del parámetro k como función de la variable x que hacen que el denominador de la función $\eta(x)$ sea cero. Se toma $L = 1$.

Tomando en cuenta lo anterior, de la ecuación (3.14), obtenemos las eigenfunciones transformadas:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_n(x) = & \frac{\sqrt{2}\pi^2}{L^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{1}{L}(1 - n^2) \sin \frac{n\pi}{L}x \right. \\ & \left. - \frac{4 \sin^2 \frac{\pi}{L}x}{2\pi(kL + x) - L \sin \frac{2\pi}{L}x} \left(n \cos \frac{n\pi}{L}x - \cot \frac{\pi}{L}x \sin \frac{n\pi}{L}x \right) \right], \end{aligned} \quad (3.29)$$

donde hemos sustituido los niveles de energía E_n usando la ecuación (2.12).

Debemos recordar que las eigenfunciones transformadas son válidas para $n \geq 2$. Esto se confirma si en la ecuación anterior sustituimos $n = 1$ para obtener $\tilde{\phi}_1(x)$. El primer término es cero y queda

$$\tilde{\phi}_1(x) = -\frac{\sqrt{2}\pi}{L^{\frac{5}{2}}} \frac{4\pi \sin^2 \frac{\pi}{L}x}{2\pi(kL + x) - L \sin \frac{2\pi}{L}x} \left(\cos \frac{\pi}{L}x - \cot \frac{\pi}{L}x \sin \frac{\pi}{L}x \right),$$

pero, el factor entre paréntesis, a su vez, es cero llevando a que $\tilde{\phi}_1(x) = 0$.

Las eigenfunciones que corresponden a los primeros tres niveles de energía, para $n = 2$,

3 y 4, las obtenemos directamente de (3.29), resulta:

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_2(x) &= \frac{\sqrt{2}\pi^2}{L^{\frac{3}{2}}} \left[-\frac{3}{L} \sin \frac{2\pi}{L}x \right. \\ &\quad \left. - \frac{4 \sin^2 \frac{\pi}{L}x}{2\pi(kL+x) - L \sin \frac{2\pi}{L}x} \left(2 \cos \frac{2\pi}{L}x - \cot \frac{\pi}{L}x \sin \frac{2\pi}{L}x \right) \right], \\ \tilde{\phi}_3(x) &= \frac{\sqrt{2}\pi^2}{L^{\frac{3}{2}}} \left[-\frac{8}{L} \sin \frac{3\pi}{L}x \right. \\ &\quad \left. - \frac{4 \sin^2 \frac{\pi}{L}x}{2\pi(kL+x) - L \sin \frac{2\pi}{L}x} \left(3 \cos \frac{3\pi}{L}x - \cot \frac{\pi}{L}x \sin \frac{3\pi}{L}x \right) \right], \\ \tilde{\phi}_4(x) &= \frac{\sqrt{2}\pi^2}{L^{\frac{3}{2}}} \left[-\frac{15}{L} \sin \frac{4\pi}{L}x \right. \\ &\quad \left. - \frac{4 \sin^2 \frac{\pi}{L}x}{2\pi(kL+x) - L \sin \frac{2\pi}{L}x} \left(4 \cos \frac{4\pi}{L}x - \cot \frac{\pi}{L}x \sin \frac{4\pi}{L}x \right) \right].\end{aligned}$$

En la Figura 3.3 graficamos estas funciones para $L = 1$.

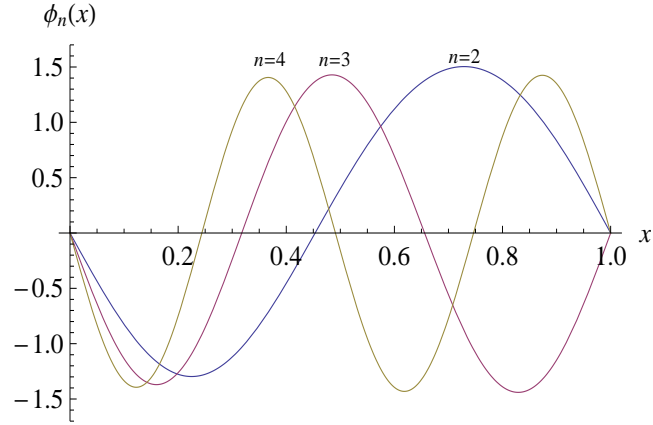


Figura 3.3: Eigenfunción normalizada del estado base, $n = 2$, del pozo infinito transformado, junto con las eigenfunciones normalizadas de los primeros dos estados excitados; $n = 3$ y $n = 4$, con los parámetros $k = 1$ y $L = 1$.

Para calcular el potencial transformado necesitamos conocer la derivada de la función $\eta(x)$, ésta es:

$$\begin{aligned}\frac{d\eta(x)}{dx} &= -\frac{8\pi^2 \sin \frac{\pi x}{L}}{L [2\pi(kL+x) - L \sin \frac{2\pi}{L}x]^2} \\ &\quad \left\{ 2\pi(kL+x) \cos \frac{\pi x}{L} - L \sin \frac{\pi x}{L} + L \left[\sin \frac{\pi x}{L} \cos \frac{2\pi x}{L} - \sin \frac{2\pi x}{L} \cos \frac{\pi x}{L} \right] \right\}.\end{aligned}\tag{3.30}$$

Usando las siguientes identidades trigonométricas :

$$\cos 2\theta = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta$$

y

$$\sin 2\theta = 2 \sin \theta \cos \theta,$$

en el término entre paréntesis cuadrados de la ecuación anterior, y después de unos pequeños arreglos, queda:

$$\frac{d\eta(x)}{dx} = -\frac{16\pi^2}{L} \frac{\pi(kL+x) \cos \frac{\pi x}{L} - L \sin \frac{\pi x}{L}}{[2\pi(kL+x) - L \sin \frac{2\pi x}{L}]^2} \sin \frac{\pi x}{L} . \quad (3.31)$$

Sustituyendo el resultado anterior en la ecuación (3.15), junto con el potencial original $V(x)$; ecuación (2.4), obtenemos el potencial transformado:

$$\tilde{U}(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ -\frac{16\pi^2 \hbar^2}{mL} \frac{\pi(kL+x) \cos \frac{\pi x}{L} - L \sin \frac{\pi x}{L}}{[2\pi(kL+x) - L \sin \frac{2\pi x}{L}]^2} \sin \frac{\pi x}{L} & 0 < x < L \\ \infty & x \geq L \end{cases} \quad (3.32)$$

En la Figura 3.4 graficamos este potencial y en la Figura 3.5 mostramos el potencial transformado junto con el potencial original y los primeros tres niveles de energía.

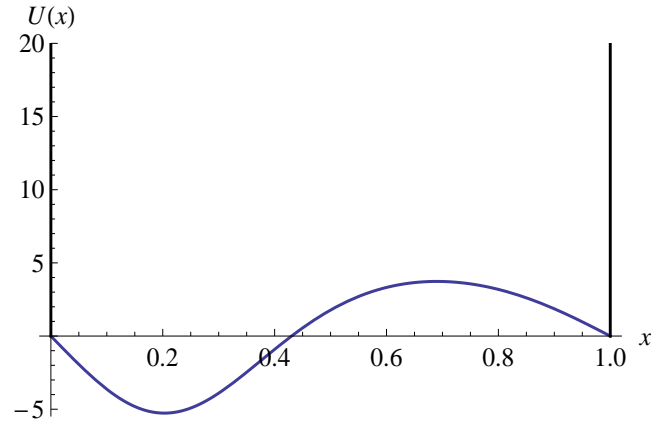


Figura 3.4: Potencial transformado con los parámetros $k = 1$ y $L = 1$. El potencial presenta un fondo ondulatorio y tiene un punto donde se anula.

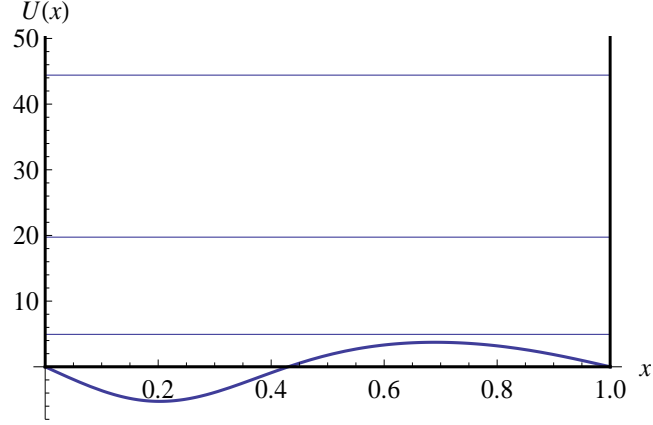


Figura 3.5: Gráfica comparativa del potencial original y el potencial transformado con los primeros tres niveles de energía. Se toma $k = 1$ y $L = 1$.

De la Figura 3.5 puede observarse que la energía del estado base del problema original queda por encima del fondo del potencial transformado. Sin embargo, la eigenfunción transformada para este nivel es nula, $\tilde{\phi}_1(x) = 0$, por lo que el primer nivel no aparece en el problema transformado, tal como se esperaba.

3.2.2. Potencial de Morse.

En el segundo capítulo encontramos que la eigenfunción del estado base del potencial de Morse es, ecuación (2.61):

$$u_0(r) = A_0 e^{-\epsilon_0 \left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}, \quad (3.33)$$

donde A_0 es la constante de normalización. Con esta función realizamos la transformación isoespectral. Sustituyendo la función anterior en (3.23) resulta:

$$\eta(r) = -\frac{A_0^2 e^{-2\epsilon_0 \left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}}{k + A_0^2 \int e^{-2\epsilon_0 \left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}} dr}. \quad (3.34)$$

Llamemos I a la integral de la ecuación anterior

$$I = \int e^{-2\epsilon_0 \left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}} dr \quad (3.35)$$

y realicemos el siguiente cambio de variable:

$$z = 2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}, \quad (3.36)$$

entonces la integral I queda:

$$I = -\frac{a}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \int z^{2\epsilon_0-1} e^{-z} dz. \quad (3.37)$$

Ahora, notamos que la integral anterior tiene la forma de la función gamma incompleta inferior $\gamma(s, x)$, la cual se define como:

$$\gamma(s, x) = \int_0^x t^{s-1} e^{-t} dt, \quad (3.38)$$

donde $s > 0$. Por un lado, la integral I es una integral indefinida, función de z , mientras que $\gamma(s, x)$ introduce una constante adicional al evaluar en el límite inferior. Dicha constante es irrelevante porque se suma a la constante arbitraria k de la expresión (3.23). Con este argumento, reescribimos (3.37) como:

$$I = -\frac{a}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \int_0^z z^{2\epsilon_0-1} e^{-z} dz \quad (3.39)$$

y comparando, entonces, con (3.38) obtenemos:

$$I = -\frac{a}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \gamma(2\epsilon_0, z) \quad (3.40)$$

ya que $\epsilon_0 > 0$. En términos de la variable r , la integral I es

$$I = -\frac{a}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \gamma(2\epsilon_0, 2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}) \quad (3.41)$$

y con esto la función $\eta(r)$ queda finalmente:

$$\eta(r) = \frac{A_0^2 e^{-2\epsilon_0 \left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}}{\frac{aA_0^2}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \gamma(2\epsilon_0, 2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}) - k}. \quad (3.42)$$

Ahora nos preguntamos cuáles son los valores posibles del parámetro k que impiden que el denominador de (3.42) tenga ceros. Para ello, buscamos los valores de k que hacen cero el denominador de (3.42). Están dados por la siguiente función de r :

$$k(r) = \frac{aA_0^2}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \gamma(2\epsilon_0, 2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}). \quad (3.43)$$

En la figura 3.6 graficamos la función anterior para los parámetros: $V_0 = 4.5$, $r_0 = 1$ y $a = 1$. Concluimos que si $k < 0$ o $k > 1$, la función $\eta(r)$ no diverge en el intervalo de definición, $0 \leq r < \infty$.

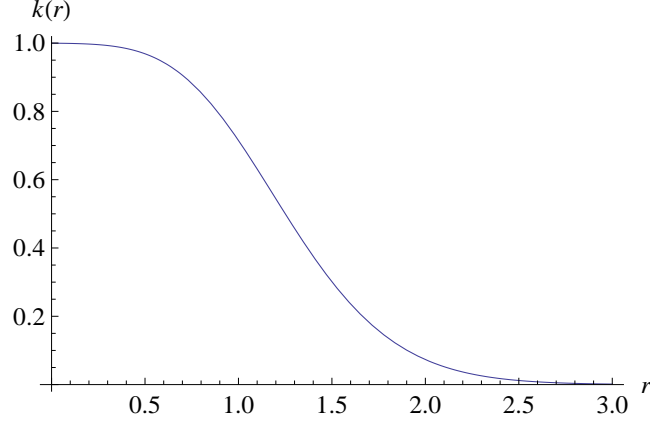


Figura 3.6: Valores del parámetro k como función de r que hacen cero el denominador. Se toma $V_0 = 4.5$, $r_0 = 1$ y $a = 1$.

Tomando en cuenta lo anterior, podemos calcular las eigenfunciones transformadas con la ecuación (3.14). Para ello requerimos la diferencia de niveles de energía la cual calculamos con ayuda de la ecuación (2.50):

$$\begin{aligned}
E_n - E_0 &= -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \left[\beta^2 - 2\beta \left(n + \frac{1}{2} \right) + \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 - \beta^2 + \beta - \frac{1}{4} \right] \\
&= -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \left[-2\beta n + \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right] \\
&= -\frac{\hbar^2}{2ma^2} (-2\beta n + n^2 + n) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2ma^2} n(n + 1 - 2\beta).
\end{aligned} \tag{3.44}$$

Sustituyendo en (3.14), las eigenfunciones transformadas quedan:

$$\tilde{\phi}_n(r) = \frac{n}{a^2} (n + 1 - 2\beta) u_n(r) + \eta(r) \phi_n(r), \tag{3.45}$$

donde $u_n(r)$ son las eigenfunciones del problema original, $\eta(r)$ está dado por (3.42) y $\phi_n(r)$ son las eigenfunciones transformadas de Darboux del potencial de Morse, que obtuvimos en el segundo capítulo. Sustituimos las funciones $u_n(r)$, ecuación (2.52), y $\phi_n(r)$, ecuación (2.75), junto con la función $\eta(r)$, obtenemos:

$$\begin{aligned}
\tilde{\phi}_n(r) &= \frac{nA_n}{a^2} (n + 1 - 2\beta) e^{-\epsilon_n \left(\frac{r-r_0}{a} \right)} e^{-\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}} L_n^{2\beta-2n-1} \left(2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}} \right) + \\
&\quad \frac{A_0^2 e^{-2\epsilon_0 \left(\frac{r-r_0}{a} \right)} e^{-2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}}{\frac{aA_0^2}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \gamma(2\epsilon_0, 2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}) - k} \times \\
&\quad \left[\frac{A_n}{a} (2\beta - n - 1) e^{-\epsilon_n \left(\frac{r-r_0}{a} \right)} e^{-\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}} L_{n-1}^{2\beta-2n-1} \left(2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}} \right) \right].
\end{aligned} \tag{3.46}$$

Acomodando términos, las eigenfunciones transformadas quedan finalmente:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_n(r) = & \frac{A_n}{a} (n+1-2\beta) e^{-\epsilon_n \left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}} \\ & \times \left[\frac{n}{a} L_n^{2\beta-2n-1} \left(2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}} \right) - \frac{A_0^2 e^{-2\epsilon_0 \left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}}{\frac{aA_0^2}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \gamma(2\epsilon_0, 2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}) - k} L_{n-1}^{2\beta-2n-1} \left(2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Recordemos que estas eigenfunciones son válidas para $n \neq 0$. Esto se confirma si sustituimos $n = 0$ en la ecuación anterior. El primer término dentro de los paréntesis cuadrados es claramente cero, dado que lo multiplica el factor n , y el segundo término no aparece en la expresión para $n = 0$ ya que involucra a L_{-1}^α , la cual es cero; por lo tanto, concluimos que $\tilde{\phi}_0(r) = 0$.

En la figura 3.7 se muestra la eigenfunción transformada normalizada del estado base y la eigenfunción transformada normalizada del primer estado excitado.

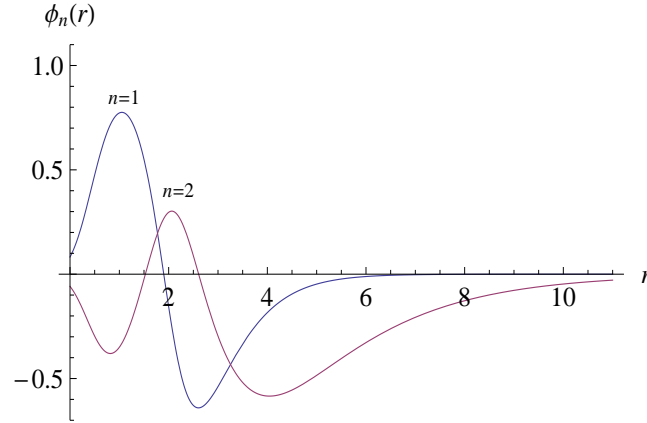


Figura 3.7: Eigenfunción normalizada del estado base del potencial transformado de Morse, $n = 1$, junto con la eigenfunción normalizada del primer estado excitado, $n = 2$. Se toma $V_0 = 4.5$, $r_0 = 1$, $a = 1$ y $k = -0.1$.

Para calcular el potencial transformado necesitamos calcular la derivada con respecto a r de la función $\eta(r)$. En este caso, por facilidad, utilizaremos la ecuación diferencial que satisface $\eta(r)$, ecuación (3.19), en la siguiente forma:

$$\frac{d\eta(r)}{dr} = \eta(r) [-2\sigma_0 + \eta(r)] \quad (3.48)$$

y sustituyendo $\sigma_0(r)$, ecuación (2.66), y $\eta(r)$, ecuación (3.42), en la expresión anterior obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{d\eta(r)}{dr} = & \frac{A_0^2 e^{-2\epsilon_0 \left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}}{\frac{aA_0^2}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \gamma(2\epsilon_0, 2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}) - k} \\ & \times \left[\frac{2}{a} \beta e^{-\left(\frac{r-r_0}{a}\right)} - \frac{2\epsilon_0}{a} + \frac{A_0^2 e^{-2\epsilon_0 \left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}}{\frac{aA_0^2}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \gamma(2\epsilon_0, 2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}) - k} \right]. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Con el resultado anterior y el potencial de Morse $V_M(r)$, ecuación (2.22), obtenemos de la ecuación (3.15) el potencial transformado:

$$\begin{aligned} \tilde{U}(r) = & V_0 \left[e^{-2\left(\frac{r-r_0}{a}\right)} - 2e^{-\frac{r-r_0}{a}} \right] + \frac{\hbar^2}{m} \frac{A_0^2 e^{-2\epsilon_0\left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}}{\frac{aA_0^2}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \gamma(2\epsilon_0, 2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}) - k} \\ & \times \left[\frac{2}{a} \left(\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}} - \epsilon_0 \right) + \frac{A_0^2 e^{-2\epsilon_0\left(\frac{r-r_0}{a}\right)} e^{-2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}}}{\frac{aA_0^2}{(2\beta)^{2\epsilon_0}} \gamma(2\epsilon_0, 2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}) - k} \right]. \end{aligned} \quad (3.50)$$

La Figura 3.8 muestra la gráfica del potencial transformado y la Figura 3.9 muestra una gráfica comparativa entre el potencial transformado y el potencial original de Morse.

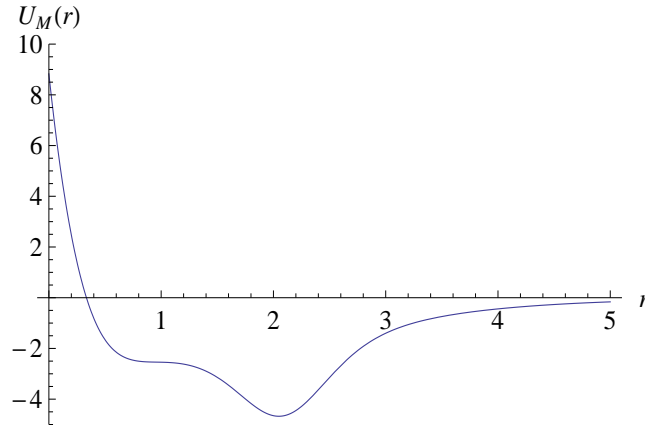


Figura 3.8: Potencial transformado con los parámetros $V_0 = 4.5$, $r_0 = 1$, $a = 1$ y $k = -0.1$.

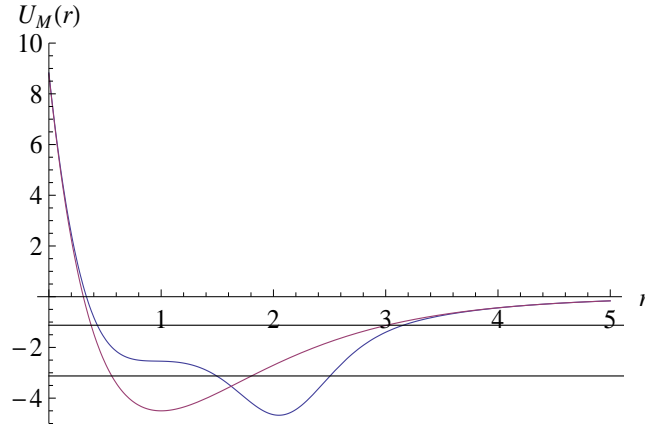


Figura 3.9: Gráfica comparativa del potencial original y el potencial transformado, junto con los primeros dos niveles de energía. Se toma $V_0 = 4.5$, $r_0 = 1$, $a = 1$ y $k = -0.1$.

Hay que notar que el nivel de energía del estado base del potencial de Morse está por encima del valor mínimo del potencial transformado; sin embargo, este nivel no for-

ma parte del espectro del potencial transformado ya que, como vimos anteriormente, la eigenfunción transformada correspondiente es cero.

Conclusiones.

En el primer capítulo desarrollamos la técnica de las transformaciones de Darboux y encontramos las ecuaciones de transformación correspondientes para la ecuación unidimensional de Schrödinger y obtuvimos que la transformación se determina a partir de una solución $\sigma(x)$ de la ecuación de Riccati para la constante C . Demostramos que la ecuación de Schrödinger es covariante bajo una transformación de Darboux y que el potencial transformado es isoespectral al potencial original; es decir, se preserva el espectro de energía. Además, las eigenfunciones transformadas forman un conjunto ortogonal y, concluimos que las eigenfunciones son válidas si cumplen con la condición $E_\lambda > C$.

Encontramos una solución $\sigma(x)$ de la ecuación de Riccati por el método de linealización y concluimos que la transformación de Darboux se construye con la eigenfunción del estado base para evitar singularidades adicionales en el potencial transformado. Una consecuencia importante de lo anterior es que la energía del estado base del problema original no aparece en el espectro del problema transformado.

En la primera sección del segundo capítulo se presentó el problema del potencial de pozo infinito. Resolvimos la ecuación de Schrödinger para este caso y obtuvimos las eigenfunciones y valores de la energía para toda n . Construimos la transformación de Darboux con la eigenfunción del estado base y calculamos las eigenfunciones y potencial transformados. Las eigenfunciones transformadas quedan en términos de funciones elementales, mantienen el comportamiento ondulatorio de las originales y cumplen con las condiciones en la frontera del problema original. Por otro lado, el potencial transformado toma valores muy grandes a medida que se acerca a las paredes del pozo y el fondo aparece redondeado de las esquinas y es suave. La energía del estado base queda por debajo del punto mínimo del potencial transformado, asegurando que tal estado no aparezca en el problema transformado, mientras que los siguientes niveles son generados por este potencial. Es clara la diferencia entre el problema original y el problema transformado.

En la segunda sección del segundo capítulo se presentó el problema del potencial de Morse y obtuvimos las eigenfunciones y el espectro de energía resolviendo la ecuación de Schrödinger para estados s . Las eigenfunciones se expresan como el producto entre una exponencial y los polinomios asociados de Laguerre, y usando la eigenfunción del estado base construimos la transformación de Darboux. El potencial transformado tiene la misma forma que el potencial original, la transformación solo agrega una constante al segundo término del potencial original haciendo que el pozo sea menos profundo. Esto

tiene como consecuencia que el potencial transformado genere las mismas eigenfunciones que el potencial original, con la diferencia de que n se recorra una unidad y que la energía del estado base no sea parte del espectro de energía del potencial transformado.

En la primera sección del tercer capítulo desarrollamos el formalismo de la transformación isoespectral y encontramos las ecuaciones de transformación correspondientes para el potencial y las eigenfunciones. Dicha transformación conecta el problema transformado con el problema original mediante la función $\eta(x)$. Esta función $\eta(x)$ queda en términos del cuadrado de la eigenfunción del estado base del problema original, su integral indefinida y de una constante arbitraria, por lo que una vez conocida tal función, la transformación isoespectral puede efectuarse.

En la segunda sección del tercer capítulo transformamos isoespectralmente el problema del potencial de pozo infinito. La función $\eta(x)$ queda en términos de funciones elementales y las eigenfunciones transformadas son muy diferentes a las originales y a las obtenidas con la transformación de Darboux. Sin embargo mantienen el comportamiento ondulatorio y el espectro de energía es el mismo, exceptuando el estado base. El fondo del potencial transformado se deforma y tiene un comportamiento ondulatorio, las paredes quedan intactas. Claramente este potencial es muy diferente al original y al obtenido con la transformación de Darboux; pero, los tres potenciales son isoespectrales.

En la tercera sección del tercer capítulo transformamos isoespectralmente el problema del potencial de Morse. La función $\eta(r)$ queda en términos de la función gamma incompleta y las eigenfunciones transformadas son muy diferentes a las originales y a las obtenidas con la transformación de Darboux. El potencial transformado resulta más complicado que el original y el pozo aparece bastante deformado. Se estudia el caso $k = -0.1$, el potencial transformado resulta claramente diferente al potencial original. El punto en donde el potencial es mínimo se desplaza hacia la derecha lo que hace que los estados ligados del problema se concentren en tal región, en comparación con el potencial original. A pesar de que el potencial transformado y el potencial original son muy diferentes, son isoespectrales.

Además de que la transformación de Darboux y la transformación isoespectral generan potenciales isoespectrales, es interesante notar que los potenciales transformados se calculan con la misma expresión, salvo por el cambio $\sigma_0(x)$ por $\eta(x)$, y que la transformación isoespectral da lugar a una familia de potenciales isoespectrales parametrizados por k .

Apéndice A.

Ecuación de Riccati.

La ecuación de Riccati es una ecuación diferencial que aparece en muchas áreas de la física-matemática, tiene la siguiente forma:

$$\frac{dy}{dx} + p(x)y + q(x)y^2 = r(x). \quad (\text{A-1})$$

Ésta es una ecuación diferencial ordinaria de primer orden, no-lineal, de coeficientes variables e inhomogénea, definida en un intervalo \mathcal{I} del eje real. Las funciones $p(x)$, $q(x)$ y $r(x)$ son funciones continuas en \mathcal{I} con $q(x) \neq 0$ en dicho intervalo.

La ecuación de Riccati puede entenderse como la aproximación a segundo orden de una función $f = f(x, y)$ en términos de la derivada de la función $y = y(x)$:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y). \quad (\text{A-2})$$

Hacemos un desarrollo en potencias de y de la función $f(x, y)$ en un punto x , y obtenemos:

$$\frac{dy}{dx} = r(x) - p(x)y - q(x)y^2 + \dots \quad (\text{A-3})$$

Tomando la aproximación a segundo orden en y , resulta la ecuación diferencial de Riccati. A pesar de que la ecuación (A-1) es una ecuación diferencial no-lineal, se puede transformar en una ecuación lineal si se hace el siguiente cambio de función:

$$y(x) = \frac{1}{q(x)} \frac{1}{z(x)} \frac{dz(x)}{dx}. \quad (\text{A-4})$$

Derivando la expresión anterior y sustituyendo en (A-1) queda:

$$\frac{1}{qz} \frac{d^2z}{dx^2} - \frac{1}{qz^2} \left(\frac{dz}{dx} \right)^2 - \frac{1}{q^2z} \frac{dz}{dx} \frac{dq}{dx} + \frac{p}{qz} \frac{dz}{dx} + qy^2 = r(x). \quad (\text{A-5})$$

El segundo término se cancela con el término proporcional a y^2 y si el resultado lo multiplicamos por el factor $q(x)z(x)$ queda la siguiente ecuación diferencial lineal:

$$\frac{d^2z}{dx^2} + \left[p(x) - \frac{1}{q} \frac{dq}{dx} \right] \frac{dz}{dx} - r(x)q(x)z = 0, \quad (\text{A-6})$$

la cual es una ecuación diferencial lineal y puede ser resuelta para encontrar una solución particular de (A-1).

A partir de una solución particular podemos encontrar una segunda solución de la ecuación de Riccati. Sea $z_p(x)$ una solución particular de la ecuación (A-6), entonces usando (A-4) obtenemos una solución de la ecuación de Riccati (A-1), que se denotará como $y_p(x)$, esto es:

$$\frac{dy_p}{dx} + p(x)y_p + q(x)y_p^2 = r(x). \quad (\text{A-7})$$

Considerando una solución de la ecuación de Riccati de la forma:

$$y(x) = y_p(x) + u(x), \quad (\text{A-8})$$

y sustituyendo en la ecuación de Riccati resulta:

$$\frac{dy_p}{dx} + \frac{du}{dx} + p(x)(y_p + u) + q(x)(y_p^2 + 2y_p u + u^2) = r(x). \quad (\text{A-9})$$

Usando la ecuación (A-7) obtenemos la siguiente ecuación diferencial homogénea para la función $u(x)$:

$$\frac{du}{dx} + [p(x) + 2q(x)y_p]u + q(x)u^2 = 0. \quad (\text{A-10})$$

Esta ecuación puede resolverse con los métodos usuales de la teoría de las ecuaciones diferenciales, una vez conocida la solución particular $y_p(x)$.

Usando la ecuación (A-4) se tiene que la solución propuesta en (A-8) queda de la siguiente forma:

$$y(x) = \frac{1}{q(x)} \frac{1}{z(x)} \frac{dz(x)}{dx} + u(x). \quad (\text{A-11})$$

Apéndice B.

Identidad entre wronskianos.

En el primer capítulo de este trabajo se utilizó la siguiente propiedad del wronskiano:

$$W \left[\frac{W(f, g)}{f}, \frac{W(f, h)}{f} \right] = \frac{W(f, g, h)}{f}, \quad (\text{B-1})$$

donde $f(x)$, $g(x)$ y $h(x)$ son funciones derivables. Partiendo de las expresiones:

$$\frac{W(f, g)}{f} = g' - \frac{f'}{f}g \quad (\text{B-2})$$

y

$$\frac{W(f, h)}{f} = h' - \frac{f'}{f}h, \quad (\text{B-3})$$

donde la prima sobre la función indica derivada con respecto a x , se demostrará la ecuación (B-1). Sustituyendo las expresiones anteriores en (B-1) resulta:

$$W \left[\frac{W(f, g)}{f}, \frac{W(f, h)}{f} \right] = W \left[g' - \frac{f'}{f}g, h' - \frac{f'}{f}h \right]. \quad (\text{B-4})$$

Desarrollando el lado derecho de la ecuación anterior obtenemos:

$$W \left[g' - \frac{f'}{f}g, h' - \frac{f'}{f}h \right] = \frac{1}{f} [f (g'h'' - g''h') + f' (g'h - gh'') + f'' (gh' - g'h)]. \quad (\text{B-5})$$

Reordenando los dos últimos términos para factorizar las funciones g y h nos permite darle la siguiente forma:

$$W \left[g' - \frac{f'}{f}g, h' - \frac{f'}{f}h \right] = \frac{1}{f} [f (g'h'' - g''h') + g (h'f'' - h''f') + h (f'g'' - f''g')]. \quad (\text{B-6})$$

El paréntesis cuadrado del lado derecho de la ecuación anterior es el wronskiano $W(f, g, h)$, ya que éste desarrollado por menores es:

$$W(f, g, h) = f (g'h'' - g''h') + g (h'f'' - h''f') + h (f'g'' - f''g') \quad (\text{B-7})$$

y la propiedad dada por (B-1) queda demostrada.

Apéndice C.

Eigenfunciones y potencial de Morse transformados iso-espectralmente.

En este apéndice calcularemos explícitamente las primeras eigenfunciones y el potencial del problema de Morse transformado iso-espectralmente, considerando el caso particular en que los parámetros toman los valores; $V_0 = 4.5$, $r_0 = 1$ y $a = 1$. En este caso, de acuerdo a las ecuaciones (2.35) y (2.49), se tiene que $\beta = 3$ y $\epsilon_0 = \frac{5}{2}$. Con estos valores, la función gamma incompleta involucrada en la función $\eta(r)$, ecuación (3.42), es

$$\begin{aligned} \gamma\left(2\epsilon_0, 2\beta e^{-\frac{r-r_0}{a}}\right) &= \gamma(5, 6e^{1-r}) \\ &= \int_0^{6e^{1-r}} t^4 e^{-t} dt, \end{aligned} \quad (\text{C-1})$$

y llevando a cabo la integral, la función gamma se reduce a una constante más el producto de un polinomio con una exponencial:

$$\begin{aligned} \gamma(5, 6e^{1-r}) &= 24 - [1296e^{4(1-r)} + 864e^{3(1-r)} + 432e^{2(1-r)} + 144e^{1-r} + 24] e^{-6e^{1-r}} \\ &= 24 \left\{ 1 - [54e^{4(1-r)} + 36e^{3(1-r)} + 18e^{2(1-r)} + 6e^{1-r} + 1] e^{-6e^{1-r}} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C-2})$$

Sustituyendo este resultado, junto con los parámetros $\beta = 3$ y $\epsilon_0 = \frac{5}{2}$, en la función $\eta(r)$, ecuación (3.42), obtenemos:

$$\begin{aligned} \eta(r) &= \frac{A_0^2 e^{5(1-r)} e^{-6e^{1-r}}}{\frac{24A_0^2}{6^5} \left\{ 1 - [54e^{4(1-r)} + 36e^{3(1-r)} + 18e^{2(1-r)} + 6e^{1-r} + 1] e^{-6e^{1-r}} \right\} - k} \\ &= \frac{A_0^2 e^{5(1-r)} e^{-6e^{1-r}}}{\frac{A_0^2}{324} \left\{ 1 - [54e^{4(1-r)} + 36e^{3(1-r)} + 18e^{2(1-r)} + 6e^{1-r} + 1] e^{-6e^{1-r}} \right\} - k}. \end{aligned} \quad (\text{C-3})$$

Multiplicando y dividiendo por el factor $324/A_0^2$, y tomando en cuenta que k es una constante arbitraria por seleccionarse, queda:

$$\eta(r) = \frac{324e^{5(1-r)}e^{-6e^{1-r}}}{1 - k - [54e^{4(1-r)} + 36e^{3(1-r)} + 18e^{2(1-r)} + 6e^{1-r} + 1] e^{-6e^{1-r}}}. \quad (\text{C-4})$$

Sustituimos esta función $\eta(r)$ junto con los valores de los parámetros dados anteriormente en la ecuación (3.47) para construir las eigenfunciones transformadas, obtenemos:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_n(r) = & A_n(n-5)e^{\epsilon_n(1-r)}e^{-3e^{1-r}} \left[nL_n^{5-2n}(6e^{1-r}) - L_{n-1}^{5-2n}(6e^{1-r}) \right. \\ & \left. \times \frac{324e^{5(1-r)}e^{-6e^{(1-r)}}}{1-k - [54e^{4(1-r)} + 36e^{3(1-r)} + 18e^{2(1-r)} + 6e^{1-r} + 1]e^{-6e^{(1-r)}}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C-5})$$

La eigenfunción transformada del estado base corresponde a $n = 1$ y tenemos $\epsilon_1 = \frac{3}{2}$ de la ecuación (2.49), sustituyendo estos parámetros en la ecuación (C-5) tenemos:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_1(r) = & -4A_1e^{\frac{3}{2}(1-r)}e^{-3e^{1-r}} \left[L_1^3(6e^{1-r}) - L_0^3(6e^{1-r}) \right. \\ & \left. \times \frac{324e^{5(1-r)}e^{-6e^{(1-r)}}}{1-k - [54e^{4(1-r)} + 36e^{3(1-r)} + 18e^{2(1-r)} + 6e^{1-r} + 1]e^{-6e^{(1-r)}}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C-6})$$

donde $A_1 = \frac{1}{\sqrt{0.03701}}$ y es la constante de normalización del primer estado excitado del problema original. Como

$$L_1^3(6e^{1-r}) = 4 - 6e^{1-r}$$

y

$$L_0^3(6e^{1-r}) = 1,$$

la ecuación (C-6) queda entonces:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_1(r) = & 4A_1e^{\frac{3}{2}(1-r)}e^{-3e^{1-r}} \left[6e^{1-r} - 4 \right. \\ & \left. + \frac{324e^{5(1-r)}e^{-6e^{(1-r)}}}{1-k - [54e^{4(1-r)} + 36e^{3(1-r)} + 18e^{2(1-r)} + 6e^{1-r} + 1]e^{-6e^{(1-r)}}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C-7})$$

De la misma manera, el primer estado excitado corresponde a $n = 2$ y se tiene $\epsilon_2 = 0.5$ de la ecuación (2.49), entonces la eigenfunción transformada es:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_2(r) = & -3A_2e^{0.5(1-r)}e^{-3e^{1-r}} \left[2L_2^1(6e^{1-r}) - L_1^1(6e^{1-r}) \right. \\ & \left. \times \frac{324e^{5(1-r)}e^{-6e^{(1-r)}}}{1-k - [54e^{4(1-r)} + 36e^{3(1-r)} + 18e^{2(1-r)} + 6e^{1-r} + 1]e^{-6e^{(1-r)}}} \right], \end{aligned} \quad (\text{C-8})$$

donde $A_2 = \frac{1}{\sqrt{0.49981}}$ y es la constante de normalización del segundo estado excitado del problema original. Como:

$$L_2^1(6e^{1-r}) = 18e^{2(1-r)} - 18e^{1-r} + 3$$

y

$$L_1^1(6e^{1-r}) = 2 - 6e^{1-r},$$

entonces la ecuación (C-8) queda:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_2(r) = & 3A_2 e^{0.5(1-r)} e^{-3e^{1-r}} \left[36e^{1-r} - 36e^{2(1-r)} - 6 \right. \\ & \left. + \frac{324e^{5(1-r)} e^{-6e^{(1-r)}} (2 - 6e^{1-r})}{1 - k - [54e^{4(1-r)} + 36e^{3(1-r)} + 18e^{2(1-r)} + 6e^{1-r} + 1] e^{-6e^{(1-r)}}} \right]. \end{aligned} \quad (C-9)$$

Las ecuaciones (C-7) y (C-9) son las eigenfunciones transformadas que se muestran en la gráfica 3.7 con $k = -0.1$. El potencial transformado lo obtenemos sustituyendo los valores de los parámetros anteriores y la función $\eta(r)$, ecuación (C-4), en la ecuación (3.50), resulta:

$$\begin{aligned} \tilde{U}(r) = & 4.5 [e^{2(1-r)} - 2e^{1-r}] + \\ & \frac{324e^{5(1-r)} e^{-6e^{(1-r)}} (6e^{1-r} - 5)}{1 - k - [54e^{4(1-r)} + 36e^{3(1-r)} + 18e^{2(1-r)} + 6e^{1-r} + 1] e^{-6e^{(1-r)}}} \\ & + \left(\frac{324e^{5(1-r)} e^{-6e^{(1-r)}}}{1 - k - [54e^{4(1-r)} + 36e^{3(1-r)} + 18e^{2(1-r)} + 6e^{1-r} + 1] e^{-6e^{(1-r)}}} \right)^2. \end{aligned} \quad (C-10)$$

Este es el potencial transformado que se muestra en las gráficas 3.8 y 3.9 con $k = -0.1$.

Bibliografía

- [1] V. B. Matveev and M. A. Salle. *Darboux Transformations and Solitons*. Springer-Verlag (1991)
- [2] Micheal S. Berger and Nail S. Ussembayev. *Isospectral Potentials From Modified Factorization*. Phys. Rev. **82** (1), 022121 (2010).
- [3] M.A Acevedo M., J. López Bonilla, J. Morales *A Note On The Riccati Equation*. The Himalayan Physics, Vol.4, No.4 (2013).
- [4] Siegfried Flugge. *Practical Quantum Mechanics*. Springer (2008)
- [5] H. Taseli. *Exact solutions for vibrational levels of the Morse potential*. Journal of Physics A: Math. Gen. **31** (1998).
- [6] O. Bayrak, I. Boztosun. *Arbitrary ℓ -state solutions of the rotating Morse potential by the asymptotic iteration method*. Journal of Physics: Math. and Gen. **39**,6955 (2006).
- [7] L. de la Peña. *Introducción a la Mecánica Cuántica*. FCE (2006)
- [8] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables*. Dover Publications (2012)
- [9] A. Jáuregui y A. Uribe Araujo. *Funciones Especiales*. Unison 1ra. edición (2007)