

DISCRETIZACION DE LA ECUACION

DE SCHRÖDINGER

PARA LOS OSCILADORES ARMONICO Y ANARMONICO

~~Raul Acosta~~

Rafael González Campos

A LARISA

Y

A AMARANTA

AGRADECIMIENTO

Al Dr. Ramón Ramón Peralta-Fabi,
quien me impulsó a escribir esta
tesis. Por su gran ayuda y sus
atinadas sugerencias, estoy en
deuda con él.

I N D I C E

PARTE I

I. 1	MOTIVACION	2
I. 2	INTRODUCCION	4
I. 3	EL OSCILADOR ARMONICO CUANTICO EN UN ESPACIO VECTORIAL FINITO	6
I. 3. 1	Las hipótesis	6
I. 3. 2	El problema de eigenvalores de $\hat{X}$	10
I. 3. 3	Digresión algebraica	11
I. 3. 4	El problema de eigenvalores de $\hat{P}$	15
I. 3. 5	Representativas de $\hat{P}$ y de $\hat{H}$ en la base $\hat{X}$	16
I. 3. 6	Propiedades minimales	17
I. 3. 7	Algunas consideraciones sobre los resultados	20

PARTE II

II. 1	INTRODUCCION	25
II. 2	ALGUNAS PROPIEDADES GENERALES	27
II. 3	EL OSCILADOR ANARMONICO $V(x)=x^2+Bx^4$: REULTADOS NUMERICOS	29
II. 3. 1	$B>0$	30
II. 3. 2	$B<0$	30
II. 4	NOTAS FINALES	41
II. 5	APENDICE	42
III	LISTA DE REFERENCIAS, NOTAS Y LITERATURA AFIN	46

P A R T E I

I.1 MOTIVACION

En la Mecánica Cuántica, la idea de que el espacio en que vivimos esté cuantizado no ha dejado de estar presente a lo largo de su desarrollo y el interés por ella no ha sido menoscabado por el tiempo a pesar de que dentro de la estructura actual de la teoría no ha sido posible encontrar su lugar todavía. Dicha idea ha sido intuitiva en y manejada de distintas formas^{1,5}, según la concepción y aplicación tenidas.

Conocer la física de los fenómenos que ocurren a distancias realmente pequeñas (menores que 10^{-5} fm) y disponer de una teoría cuántica para dichos fenómenos sin problemas de divergencias, son las principales razones para estudiar la estructura del espacio.

Así, para salvar los problemas de divergencias en las teorías cuánticas de campo locales (aunque en casos importantes los trabajos se desarrollaron sin considerar estos problemas), se pensó en cuantizar al espacio (-tiempo) partiendo de relaciones de conmutación canónicas, es decir de conmutadores de la forma

$$[\text{posicion}, \text{momento}] = i\hbar 1,$$

para los operadores correspondientes asociados al espacio-tiempo^{1,2}. Es interesante notar que en este contexto se le asigna al espacio-tiempo una existencia per se, independiente de los sistemas físicos, y que la frase 'cuantización del espacio-tiempo' no significa granularidad o discretez de sus variables, pues como lo señala Watanabe², el proponer una relación de conmutación canónica para los operadores del espacio-tiempo, no es sino formular el principio de incertidumbre en este espacio de cuatro dimensiones, y como es conocido, este principio no requiere necesariamente discretez en las variables que involucra.

Por otra parte, en fechas más recientes³, se han propuesto modelos para la estructura interna de partículas subnucleares que se basan en una cuantización discreta del espacio-tiempo (forma de red), la que se obtiene al suponer que los operadores asociados al tiempo ($\hat{T}$) y posición ($\hat{R}$) cumplen con

el conmutador

$$[\hat{T}, \hat{R}] = i\hbar$$

en donde $R^2 = \sum X_i X_i$, y las coordenadas espaciales X_i de los eventos conmutan entre ellas mismas, i.e., $[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = 0$, $i, j = 1, 2, 3$.

En este caso, la cuantización del espacio-tiempo sí significa discretez en las variables $\hat{R}$ y $\hat{T}$, pero esta granularidad está determinada por la relación de conmutación anterior y es independiente, nuevamente, de los sistemas físicos o de sus interacciones.

Otro punto de vista del problema ha sido desarrollado por Yan y Ford⁴. Sin llegar a un espacio-tiempo granulado o discreto, introducen un cuanto de longitud en la electrodinámica que interpretan como distancia en la cual los operadores y las variables de campo se promedian.

Por otra parte, sin considerar el aspecto relativista del problema, esto es, restringiéndose solamente a la Mecánica Cuántica no Relativista, es posible desarrollar modificaciones a la teoría convencional para introducir un cuanto de longitud (espacio discreto) e investigar sus consecuencias. Siguiendo las ideas de Wigner⁶, T.D. Palev⁵, muestra que puede ser derivado un espectro discreto y finito para la distancia entre dos partículas no relativistas, como resultado de una cuantización no canónica, la que se obtiene al buscar soluciones de las ecuaciones

$$\hat{p} = - \frac{\partial \hat{U}}{\partial \hat{q}}, \quad \hat{q} = \frac{\hat{p}}{m},$$

de un sistema con Hamiltoniano $\hat{H} = (1/2m)\hat{p}^2 + \hat{U}$, que sean distintas de las canónicas. Wigner mostró que, para el caso del oscilador armónico, existen muchas soluciones que no satisfacen estas relaciones de conmutación, pero que requieren eigenvalores del estado base de $\hat{H}$ distintos al usual $(1/2)\hbar\omega$.

Con este panorama en mente, podemos preguntarnos, ¿será posible desarrollar alguna modificación estructural de la Mecánica Cuántica no relativista que dé lugar a una concepción del espacio distinta a la ortodoxa y tratar, eventualmente, de extenderla al dominio relativista, con objeto de estudiar los fenómenos físicos que ocurren en distancias pequeñas?

I.2 INTRODUCCION

Toda teoría física involucra de alguna manera al espacio en que vivimos, al que, por lo común, se le asigna una existencia independiente de todo lo que en él existe, y se le considera, simplemente, como el medio en donde se desenvuelven los sistemas físicos, si bien, con ciertas propiedades (forma, homogeneidad, isotropía) que sí dependen de los objetos incorporados a él.

Se considera que siempre tiene sentido hablar de espacio, de distancia entre dos puntos, aún cuando el universo esté vacío, aún cuando no exista algo que haga distinguible un punto de otro. Se considera que tiene sentido hablar de la partícula libre y que los conceptos 'espacio' y 'posición de una partícula' son esencialmente distintos, sin tomar en cuenta que, finalmente, el espacio tendría que ser referido a la medición de la posición e identificarse con ella. Es por esto que, en lo que se refiere a nuestro problema, hablar de cuantización del espacio equivaldrá a hablar de discretez del espectro del operador asociado a la posición de una partícula (en el caso en que el sistema consista en sólo una partícula en un campo de fuerzas).

De ocurrir que en la Mecánica Cuántica el espacio estuviera cuantizado, son de esperarse algunos cambios en sus postulados fundamentales, sin los cuales no es posible imaginarse discontinuidad alguna en el espectro del operador posición. La ecuación de Schrödinger, por ejemplo, debería transformarse en otra ecuación que exhibiera este nuevo rasgo; además, si el espectro fuera finito, la condición cuántica $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ también debería cambiar, originando así, todos los cambios que esto trajera consigo.

En este punto, es conveniente hacer las siguientes consideraciones acerca de este tema.

Como se sabe, los postulados de la Mecánica Cuántica asignan elementos de un espacio de Hilbert a estados de un sistema físico, operadores lineales a variables dinámicas y eigenvalores de operadores hermitianos a resultados posibles de una medición. Nada establecen acerca de la naturaleza (continua o discontinua) del espectro de eigenvalores, y por lo tanto, en general, debemos aceptar ambas posibilidades. Excepto cuando tratamos con el caso de la posición. Aquí, los postulados van como un hecho la naturaleza continua de la posición en todo el rango $(-\infty, +\infty)$.

Ha sido posible obtener resultados teóricos concordantes con los datos experimentales de la aplicación de estos postulados a problemas físicos. Sin embargo, supongamos por un momento que éstos establecieran la existencia de un espectro discreto para la posición, que los problemas pudieran ser resueltos y que los resultados teóricos medibles concordaran con los datos experimentales; que sucedería entonces?

Uno no puede dejar de preguntarse, como es que la Mecánica Cuántica, cuyas ecuaciones de movimiento fueran inspiradas por la Mecánica Clásica, permite a la energía de los estados ligados tomar valores discretos mientras que prohíbe a la posición hacer lo mismo, cuando que las dos variables dinámicas

tienen el mismo carácter continuo en la Mecánica Clásica? Es claro que siendo la Mecánica Cuántica una teoría distinta, no tiene por qué preservar la relación continua-continua de algún par de variables 'clásicas', pero tampoco debería prohibir la discontinuidad para alguna de ellas. ¿Qué es lo que distingue a esas dos variables que una puede tomar valores discretos y la otra no? Acerca de esto, las siguientes consideraciones serán útiles.

En los orígenes de la Mecánica Cuántica, la gente se preocupó por explicar un fenómeno que se presentaba ante ellos: las líneas espectrales. Para explicarlo, fue necesario usar la hipótesis de Bohr, la cual se salía del contexto de la Mecánica Clásica y que se puede escribir como

$$\int m \dot{x} dx = J = nh$$

El lado derecho de esta ecuación representa la necesidad de reproducir los valores discretos de la energía en el átomo de Hidrógeno. El lado izquierdo, por otra parte, requiere de la continuidad de la posición puesto que no había experimento que así lo requiriese. Fue esa la ecuación en la cual Heisenberg substituyó

$$X(t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(t) e^{i\alpha\omega_n t}$$

para obtener, primero

$$h = m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \alpha \frac{d}{dn} (\alpha \omega_n |a_{\alpha}|^2)$$

y después, la fórmula que Born y Jordan⁷ escribieron como

$$\sum_k (p_{nk} q_{kn} - q_{kn} p_{nk}) = \frac{h}{i}$$

y que se transformó, finalmente, en la condición cuántica: $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar 1$.

Imaginemos ahora, por un momento, que existiese un experimento que requiriera valores discretos de la posición. Es de esperarse que esta condición y la ecuación de Schrödinger cambiaran. ¿A que sería igual el conmutador $[\hat{X}, \hat{P}]$? ¿Cuál sería la forma de la ecuación de Schrödinger? Es requisito indispensable para el desarrollo de la teoría conocer la respuesta de estas preguntas.

El propósito de este trabajo es examinar las consecuencias que conlleva el hecho de inducir un espectro discreto para la posición. Trabajaremos primeramente con el oscilador armónico

por ser éste un problema relativamente sencillo y del que se obtiene mucha información.

En la siguiente sección de esta primera parte, comenzaremos con las hipótesis con que trabajaremos, las cuales tienen como idea principal substituir cada matriz representativa de un operador por uno de sus bloques. Mostraremos que los eigenvalores de la posición resultan ser raíces de los polinomios de Hermite y obtendremos las eigenfunciones de onda; se mostrarán algunas de sus propiedades algebraicas y se obtendrán las eigenfunciones del momento. Después se obtendrá la ecuación que satisfacen las funciones de onda, y se mostrará que esa ecuación es compatible con cierta propiedad minimal.

I.3 EL OSCILADOR ARMONICO CUANTICO EN UN ESPACIO VECTORIAL FINITO

I.3.1 Las hipótesis

Existen muchas maneras de modificar la teoría cuántica convencional para introducir un cuanto de longitud. Aquí describiremos un método simple para hacer discreto al espacio del oscilador armónico cuántico.

El Hamiltoniano de un oscilador de masa m y de frecuencia angular ω es

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2.$$

El tratamiento usual del problema de eigenvalores de $\hat{H}$ por medio de los operadores de creación y aniquilación nos permite obtener las matrices representativas de $\hat{X}$ y de $\hat{P}$ en la base donde $\hat{H}$ es diagonal, es decir, en la formada por sus eigenvectores de estado $|E_k\rangle$. Aquí y en lo que resta del trabajo, usaremos la notación de Dirac para los observables y estados del sistema. El símbolo $| \rangle$ representará un estado (vector) del sistema y el símbolo $\langle |$, el adjunto hermitiano.

Para saber a que estado nos referimos, lo etiquetaremos con una letra. Así, $|E_k\rangle$ representará el estado del oscilador que tiene energía E_k . Por otra parte, todo operador $\hat{O}$ tiene una representación matricial en una base dada, digamos la base $|E_k\rangle$. Los elementos de la matriz asociada a $\hat{O}$ en esa base, los denotaremos por $\langle E_k | \hat{O} | E_j \rangle$.

Como se sabe, cuando el tiempo no es tomado en cuenta, los elementos de las matrices asociadas a $\hat{X}$ y a $\hat{P}$ en la base de los eigenvectores de $\hat{H}$ son

$$\langle E_k | \hat{X} | E_j \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{k} \delta_{k,j+1} + \sqrt{k+1} \delta_{k,j-1}]$$

y

$$\langle E_k | \hat{P} | E_j \rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} [-\sqrt{k} \delta_{k,j+1} + \sqrt{k+1} \delta_{k,j-1}],$$

respectivamente. Por lo tanto, la ecuación de eigenvalores para $\hat{X}$ toma la forma

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_0 \\ H_1 \\ H_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = X \begin{pmatrix} H_0 \\ H_1 \\ H_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

en donde H_k es el k -ésimo elemento del vector $|X\rangle$ representado en la base $|E_k\rangle$ y viene a ser la k -ésima función de Hermite en la variable x , o escrita en forma mas conocida, la función de onda $\psi_k(x)$ del oscilador armónico.

Para obtener un espectro discreto, substituyamos la ecuación anterior por:

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \sqrt{N-1} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{N-1} & 0 & \sqrt{N} & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{N} & 0 & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_0 \\ P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_N \end{pmatrix} = X \begin{pmatrix} P_0 \\ P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_N \end{pmatrix} \quad (1)$$

Aquí P_i tendría el significado que H_i tiene en el caso anterior, sólo que P_i no sería ya la función i -ésima de Hermite.

sino una función incógnita que queda por determinar.

Al suponer a esta ecuación como la correspondiente al problema de eigenvalores de $\hat{X}$, estamos haciendo dos cosas: primero, substituyendo el espacio de Hilbert por uno dimensionalmente finito y segundo, aceptando que la matriz representativa de $\hat{X}$ es la dada por dicha ecuación. Sobre esto es necesario añadir algo más. Si el espacio de kets es de dimensión finita, el espectro de $\hat{H}$ debe ser finito también, y esto significa que existe una cota superior para sus eigenvectores. Así,

$$(\langle E_j | \hat{H} | E_k \rangle) = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 \\ & & \ddots \\ & & & E_{k-1} & 0 \\ & & & 0 & E_N \end{pmatrix}, \quad (2)$$

en donde es de esperarse que E_k sea de la forma $(k+1/2)\hbar\omega$.

Puesto que la idea clave es substituir una matriz infinita por uno de sus bloques, tenemos una alternativa: escoger $\langle E_j | \hat{H} | E_k \rangle$ con $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ para $n=0,1,2,\dots,N$, como una de las representativas fundamentales, o escoger

$$(\langle E_j | \hat{X} | E_k \rangle) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ & & \ddots \\ 0 & \sqrt{N-1} & 0 \\ \sqrt{N-1} & 0 & \sqrt{N} \\ 0 & \sqrt{N} & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$(\langle E_j | \hat{P} | E_k \rangle) = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ & & \ddots \\ 0 & \sqrt{N-1} & 0 \\ -\sqrt{N-1} & 0 & \sqrt{N} \\ 0 & -\sqrt{N} & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

como las fundamentales, y en términos de ellas encontrar $\langle E_j | \hat{H} | E_k \rangle$.

Estas dos posibilidades no son equivalentes debido a la no linealidad de $\hat{H}$ en $\hat{X}$ y $\hat{P}$. Si escogemos la primera opción, las matrices $(\langle E_j | \hat{X} | E_k \rangle)$ y $(\langle E_j | \hat{P} | E_k \rangle)$ son diferentes de aquellas dadas por las ecs. (3) y (4) solamente por los últimos elementos, y si escogemos la segunda, los eigenvalores de $\hat{H}$ son

$$E_n = \begin{cases} (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega, & n = 0, 1, 2, \dots, N-1, \\ (\frac{N}{2}) \hbar \omega & n = N. \end{cases}$$

A pesar del valor que toma ahora E_N , supondremos válidas las representativas dadas por las ecs. (3) y (4). La simetría que se obtendrá en todos los resultados será considerada como una justificación de este procedimiento.

Acerca de la condición cuántica $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar 1$, se debe decir que, de acuerdo a las ecs. (3) y (4), se transforma en

$$\langle E_j | [\hat{X}, \hat{P}] | E_k \rangle = i\hbar \delta_{jk} - i\hbar \langle E_j | \hat{C} | E_k \rangle \quad (5)$$

en donde

$$\langle E_j | \hat{C} | E_k \rangle = \begin{cases} N+1, & j=k=N, \\ 0, & \text{de otra manera.} \end{cases} \quad (6)$$

El operador $\hat{C}$, nos permite responder algunas preguntas que surgen¹⁰ en el tratamiento del problema de eigenvalores de $\hat{H}$ por medio de los operadores de creación-aniquilación de acuerdo al punto de vista aquí planteado. Por ejemplo, al operador de creación, definíao de la manera usual

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega \hat{X} - i\hat{P}),$$

se le permite ahora satisfacer la relación

$$\hat{a}^+ | E_N \rangle = 0,$$

análoga a la bien conocida

$$\hat{a}|E_0\rangle = 0.$$

I.3.2 El problema de eigenvalores de $\hat{X}$

Hemos establecido ya la forma diagonal de $\hat{H}$ y el conmutador de $\hat{X}$ y $\hat{P}$. Nuestro siguiente paso es resolver el problema de eigenvalores de $\hat{X}$, ecuación (1).

Definamos la variable adimensional $\xi = (2m\omega/\hbar)^{1/2} X$. No es difícil ver que la ecuación característica de (1), $\det(\hat{X} - x1) = 0$, se convierte en

$$He_{N+1}(\xi) = 0,$$

siendo $He_{N+1}(\xi)$ el polinomio $(N+1)$ -ésimo de Hermite cuya función generadora es $EXP[-(1/2)\xi^2]$. Por lo tanto, los eigenvalores de $\hat{X}$ son todos reales, distintos y simétricamente dispuestos alrededor del origen dentro del intervalo $(-2\sqrt{N+1}, +2\sqrt{N+1})$. Cuando $N \rightarrow \infty$ estos puntos forman un conjunto denso dondequiera en cada segmento finito de la recta real.^{11,12}

También se obtiene de la ec. (1) la ecuación de recurrencia

$$\begin{aligned} \sqrt{1} P_1(\xi) &= \xi P_0(\xi) \\ \sqrt{2} P_0(\xi) + \sqrt{2} P_2(\xi) &= \xi P_1(\xi) \\ &\vdots \\ \sqrt{N-1} P_{N-2}(\xi) + \sqrt{N} P_N(\xi) &= \xi P_{N-1}(\xi) \\ \sqrt{N} P_{N-1}(\xi) &= \xi P_N(\xi) \end{aligned} \quad (7)$$

para las componentes $P_k(\xi)$ del eigenket $| \xi \rangle$.

Para resolverlas, principiemos por la última. Tomando en cuenta la condición de normalización, se obtiene

$$\begin{aligned} P_N(\xi) &= \sqrt{\frac{N!}{(N+1)!}} & P_{N-3}(\xi) &= \sqrt{\frac{(N-3)!}{(N+1)!}} [\xi^3 - (2N-1)\xi] \\ P_{N-1}(\xi) &= \sqrt{\frac{(N-1)!}{(N+1)!}} \xi & P_{N-4}(\xi) &= \sqrt{\frac{(N-4)!}{(N+1)!}} [\xi^4 - 3(N-1)\xi^2 + N(N-2)] \\ P_{N-2}(\xi) &= \sqrt{\frac{(N-2)!}{(N+1)!}} (\xi^2 - N) & & \vdots \end{aligned} \quad (8)$$

Como se vera más adelante, estos polinomios satisfacen

$$P_{N-l}(\xi_j) = \sqrt{\frac{N!}{(N+1)(N-l)!}} \frac{He_{N-l}(\xi_j)}{He_N(\xi_j)} \quad (9)$$

para todos los valores de l y j . Aquí, ξ_j es una raíz de $He_{N+1}(\xi)$. Este resultado era necesario según (7), ya que eso hubiéramos obtenido para $P_{N-l}(\xi)$ si, para resolver (7), hubiéramos comenzado por la primera de ellas.

Puesto que $|\xi_j\rangle$ es un eigenket de un operador Hermitiano en un espacio de dimensión finita, sus componentes satisfacen las siguientes relaciones de ortonormalidad

$$\sum_{l=0}^N P_l(\xi_j) P_l(\xi_k) = \delta_{jk}, \quad (10)$$

$$\sum_{j=1}^{N+1} P_l(\xi_j) P_k(\xi_j) = \delta_{lk}. \quad (11)$$

Sin embargo, es instructivo desde el punto de vista algebraico, dar una demostración un poco más 'directa' de esas relaciones, pues se exponen más propiedades de los polinomios $P_l(\xi)$. Esto es lo que haremos en seguida.

I.3.3 Digresión algebraica

Primeramente mostraremos que los polinomios (8) cumplen con la ecuación (9). Para esto escribamos

$$P_{N-l}(\xi) = \sqrt{\frac{(N-l)!}{(N+1)!}} \sum_{\mu=0}^{\lfloor \frac{l}{2} \rfloor} C_{\mu}^l(N) \xi^{l-2\mu} \quad (12)$$

donde $\lfloor l/2 \rfloor$ significa el entero más grande contenido en $[0, l/2]$. Substituyendo la ec. (12) en la ec. (7) obtenemos la ecuación de diferencias

$$C_{\mu}^l(N) = C_{\mu}^{l-1}(N) - (N-l+2) C_{\mu-1}^{l-2}(N) \quad 1 \leq \mu \leq \lfloor l/2 \rfloor$$

para los coeficientes de los polinomios (8). Aquí, $C_0^l(N)=1$ y, si

l es par. $C_{[l/2]}^{k+1} = 0$. Una solución particular de esa ecuación es

$$C_{\mu}^l(N) = \frac{(-1)^{\mu}}{2^{\mu} \mu!} \sum_{k=0}^{\mu} (-1)^k \binom{\mu}{k} \binom{N+1}{2(\mu-k)} (N-l+2k)_{2k}$$

en donde $(x)_l$ es el factorial de x de grado l . i.e.,
 $(k)_l = k(k-1)\dots(k-l+1)$.
 Obsérvese que

$$C_{\mu}^l(l-1) = \frac{(-1)^{\mu} l!}{2^{\mu} \mu! (l-2\mu)!} = a_{\mu}^l.$$

a_{μ}^l es el μ -ésimo coeficiente de He_l cuando este se escribe como

$$He_l(\xi) = \sum_{\mu=0}^{[l/2]} a_{\mu}^l \xi^{l-2\mu}.$$

Por lo tanto, $C_{\mu}^{N+1}(N) = a_{\mu}^{N+1}$ y

$$\{P_0(\xi) - P_1(\xi) \equiv P_1(\xi) = P_{N-(N+1)}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} He_{N+1}(\xi).$$

Usando la ecuación (7) y el hecho de que $He_{N+1}(\xi_j) = 0$, se llega a la ecuación (9).
 Ahora, usando este resultado, la relación

$$\sum_{l=0}^N P_l(\xi_j) P_l(\xi_k) = \frac{N!}{(N+1) He_N(\xi_j) He_N(\xi_k)} \sum_{l=0}^N \frac{He_l(\xi_j) He_l(\xi_k)}{l!}$$

puede ser obtenida fácilmente, y con la fórmula de Christoffel-Darboux para los polinomios de Hermite, la ecuación (10) puede ser probada.

Vayamos ahora con la otra relación de ortogonalidad, ec. (11). Para dar una prueba de ella, supongamos que N sea un número par. Nótese que los coeficientes $C_{\mu}^N(N)$ pueden ser reescritos como elementos de una matriz, para obtener

$$\begin{pmatrix} P_N(\xi) \\ P_{N-1}(\xi) \\ P_{N-2}(\xi) \\ \vdots \\ P_0(\xi) \end{pmatrix} = R A_1 A_2 \begin{pmatrix} 1 \\ \xi \\ \xi^2 \\ \vdots \\ \xi^N \end{pmatrix} \quad (13)$$

en donde R , A_1 y A_2 son matrices definidas por:

$$A_1 = \begin{pmatrix} a_0^N & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_0^{N-1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -a_1^N & 0 & a_0^{N-2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -a_1^N & 0 & a_0^{N-3} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & a_0^0 \\ (-1)^{N/2} a_{N/2}^N & \dots & \dots & \dots & \dots & a_0^0 \end{pmatrix},$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} a_0^{N+1} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_0^{N+1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_1^{N+1} & 0 & a_0^{N+1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_1^{N+1} & 0 & a_0^{N+1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & a_0^{N+1} \\ a_{N/2}^{N+1} & 0 & \dots & \dots & \dots & a_0^{N+1} \end{pmatrix}.$$

Si acordamos denotar la suma $\sum_{j=1}^{N+1} e_j^x$ como $S^{(x)}$, tendremos que

$$\sum_j A_2 \begin{pmatrix} 1 \\ e_j^1 \\ e_j^2 \\ \vdots \\ e_j^N \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} S^{(0)} \\ S^{(1)} \\ S^{(2)} \\ \vdots \\ S^{(N)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0^{N+1} S^{(0)} \\ 0 \\ a_1^{N+1} S^{(0)} - 2a_1^{N+1} \\ \vdots \\ a_{N/2}^{N+1} S^{(N)} - N a_{N/2}^{N+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (N+1) a_0^{N+1} \\ 0 \\ (N-1) a_1^{N+1} \\ \vdots \\ a_{N/2}^{N+1} \end{pmatrix},$$

en donde hemos usado las fórmulas de Newton para las sumas de potencias de raíces polinomiales¹³. De aquí se sigue que

$$A_1 A_2 S^{(\mu)} = \begin{cases} \sum_{k=0}^{N/2} (-1)^{k+N/2} (N+1-2k) a_{N/2-k}^{N-2k} a_k^{N+1}, & \text{si } \mu \text{ es par,} \\ 0, & \text{si } \mu \text{ es impar.} \end{cases}$$

pero

$$\sum_{k=0}^{N/2} (-1)^{k+N/2} (N+1-2k) a_{N/2-k}^{N-2k} a_k^{N+1} = (-1)^{N/2} (N+1) a_{N/2}^N \delta_{N/2,0},$$

de manera que

$$A_1 A_2 S^{(N)} = (N+1) \delta_{N,0}.$$

Recordando ahora la ecuación (13), podemos darnos cuenta de que

$$\sum_{j=1}^{N+1} P_N(\xi_j) P_{N-k}(\xi_j) = \delta_{k0}, \quad 0 \leq k \leq N.$$

De la misma manera se puede mostrar que

$$\sum_{j=1}^{N+1} P_{N-1}(\xi_j) P_{N-k}(\xi_j) = \delta_{k1}, \quad 0 \leq k \leq N,$$

y, por inducción [usando la ecuación de recurrencia de $P_{N-l}(\xi)$], uno puede probar que la ecuación (11) es válida.

Cuando N es impar, la demostración sigue los mismos pasos.

Nótese que si sustituimos (9) en (11), esta última se convierte en

$$\sum_{j=1}^{N+1} \frac{N!}{(N+1) [H_{2N}(\xi_j)]^2} = 1$$

para cuando $l=k=0$. Este resultado coincide con el obtenido para la suma de los números de Christoffel asociados a los polinomios $He^{11,12}$.

I.3.4 El problema de eigenvalores de $\hat{P}$

Habiendo obtenido la forma explícita y algunas propiedades de las componentes de los eigenkets de $\hat{X}$ en la base de $\hat{H}$, procedamos ahora a resolver el problema de eigenvalores de $\hat{P}$.

Definiendo $\eta = (2/\hbar m \omega)^{1/2} P$, y usando la representativa (4), la ecuación de eigenvalores puede ser puesta en la forma

$$\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & & \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & 0 & \sqrt{N} \\ & & & -\sqrt{N} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix} = i\eta \begin{pmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix}.$$

De aquí se obtiene la ecuación característica

$$He_{N+1}(\eta) = 0,$$

mostrando así que el espectro de $\hat{X}$ y de $\hat{P}$ coinciden salvo por una constante. También, de la ecuación de recurrencia correspondiente, se obtiene que

$$g_{N-2}(\eta) = (-i)^2 g_{N-4}(\eta),$$

y por lo tanto, estos polinomios satisfacen las relaciones

$$\sum_{k=0}^N g_k^*(i\eta_j) g_k(i\eta_k) = \delta_{jk},$$

$$\sum_{j=1}^{N+1} g_k^*(i\eta_j) g_k(i\eta_j) = \delta_{kk},$$

en donde η_j es la j -ésima raíz de He_{N+1} y (*) significa complejo conjugado.

I.3.5 Representativas de $\hat{P}$ y $\hat{H}$ en la base de $\hat{X}$

Para dar respuesta a una de las cuestiones planteadas al principio de este trabajo (conocer la forma de la ecuación de eigenvalores de $\hat{H}$ en la representación de $\hat{X}$) se requiere encontrar $\langle X_j | \hat{P} | X_k \rangle$. La manera más directa de hacer esto, es reemplazar la matriz ortogonal

$$(\langle E_l | X_j \rangle) = \begin{pmatrix} P_0(\xi_1) & P_0(\xi_2) & & P_0(\xi_{N+1}) \\ P_1(\xi_1) & P_1(\xi_2) & \vdots & P_1(\xi_{N+1}) \\ & & \ddots & \\ P_N(\xi_1) & P_N(\xi_2) & & P_N(\xi_{N+1}) \end{pmatrix}$$

y la ecuación (4) en

$$\langle X_j | \hat{P} | X_k \rangle = \sum_{l=1}^N \langle X_j | E_l \rangle \langle E_l | \hat{P} | E_n \rangle \langle E_n | X_k \rangle,$$

para obtener

$$\langle X_j | \hat{P} | X_k \rangle = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \sum_{l=0}^{N-1} \sqrt{l+1} [P_{l+1}(\xi_j) P_l(\xi_k) - P_{l+1}(\xi_k) P_l(\xi_j)]. \quad (14)$$

Calculemos $\langle X_j | \hat{P} | X_k \rangle X_j$. Usando la ecuación de recurrencia de $P_l(\xi)$, la forma explícita de $P_N(\xi)$, y la ecuación (10), uno puede ver que

$$\langle X_j | \hat{P} | X_k \rangle X_j = i \frac{\hbar}{2} \left\{ \delta_{jk} - 1 + \sum_{l=1}^{N-1} \sqrt{l(l+1)} [P_{l+1}(\xi_j) P_l(\xi_k) - P_{l+1}(\xi_k) P_l(\xi_j)] \right\},$$

y análogamente,

$$\langle X_j | \hat{P} | X_k \rangle X_k = i \frac{\hbar}{2} \left\{ 1 - \delta_{jk} + \sum_{l=1}^{N-1} \sqrt{l(l+1)} [P_{l+1}(\xi_j) P_l(\xi_k) - P_{l+1}(\xi_k) P_l(\xi_j)] \right\}.$$

De manera que, restando estas dos ecuaciones, podemos encontrar

$$\langle X_j | \hat{P} | X_k \rangle = \begin{cases} (-i\hbar) \frac{1}{X_j - X_k}, & X_j \neq X_k, \\ 0, & X_j = X_k. \end{cases} \quad (15)$$

Esta es la representativa de $\hat{P}$ en la base $\hat{X}$. Es interesante notar la semejanza superficial de este resultado con la bien conocida relación

$$\hat{P} \leftrightarrow (-i\hbar) \frac{d}{dx}$$

del caso en que a $\hat{X}$ se le permite tener un espectro continuo. No olvidar que la diferencia $x_j - x_k$ puede ser cercana a cero, o tan grande como $[8(N+3/2)\hbar/m\omega]^{1/2}$.

Con (15), la forma de la ecuación de eigenvalores para $\hat{H}$,

$$\left(\frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2\right) |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$$

en la base $\hat{X}$ puede ser encontrada fácilmente. Ella es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k, l} \frac{P_n(\xi_k)}{(x_j - x_k)(x_k - x_l)} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_j^2 P_n(\xi_j) = E_n P_n(\xi_j) \quad (16)$$

en donde $(\sum)$ significa suma sobre índices que no hacen nulo al denominador. $P_n(\xi_k) = P_n[(2m\omega/\hbar)^{1/2} x_k]$ es la función de onda definida en x_k correspondiente al eigenvalor E_n . Obviamente, es una solución de (16).

Con esta ecuación hemos terminado de contestar las preguntas hechas al principio de este trabajo. La ec. (16) no es una ecuación diferencial como la de Schrödinger, ni una de diferencias finitas. Una característica interesante es su no-localidad: el operador 'diferencial' que allí aparece toma en cuenta casi todos los puntos del dominio de definición y no únicamente aquellos contenidos en la vecindad de un punto, como ocurre en la ecuación de Schrödinger. Es interesante también, preguntarse si su no-localidad se preserva en su forma límite cuando $\hbar \rightarrow \infty$ (si tal forma existe), por el lugar que esto pudiera ocupar en la discusión acerca de divergencias en las teorías de campo locales.

I.3.6 Propiedades minimales

Como se sabe¹⁴, una ecuación de eigenvalores como $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$ en un espacio lineal finito tiene ciertas propiedades extremales con relación a sus eigenvectores: el cociente de Rayleigh

$$R[X] = \frac{\langle X | \hat{H} | X \rangle}{\langle X | X \rangle}$$

definido para cualquier vector $|X\rangle$ tal que $\langle X | X \rangle \neq 0$, toma un valor estacionario en $|X\rangle = |E_n\rangle$. Este valor resulta mínimo cuando $|E_n\rangle = |E_0\rangle$ y máximo cuando $|E_n\rangle$ es el eigenestado asociado al eigenvalor más grande (principio de Rayleigh). Para nuestro caso, los valores mínimo y máximo de $R[X]$ son, respectivamente, $E_0 = (1/2)\hbar\omega$ y $E_{N+1} = [(2N+1)/2]\hbar\omega$.

En esta sección mostraremos que, además de estas propiedades, los eigenvalores de la posición hacen mínima a

$$\text{Tr } \hat{H} = \sum_K \langle X_K | \hat{H} | X_K \rangle,$$

es decir, la suma de los valores esperados de la energía toma un valor estacionario cuando el sistema se encuentra en los estados $|X_K\rangle$.

Para esto, permitamos a la $\text{Tr } \hat{H}$ ser función de $(N+1)$ variables continuas z_k :

$$\text{Tr } \hat{H}(z_1, z_2, \dots, z_{N+1}) = \hbar\omega \left[\sum_{k,l=1}^{N+1} \frac{1}{(z_k - z_l)^2} + \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{N+1} z_k^2 \right].$$

La condición de punto estacionario

$$\left. \frac{\partial}{\partial z_k} \text{Tr } \hat{H}(z_k) \right|_{z_k = \xi_k} = 0, \quad k=1, 2, \dots, N+1,$$

exige que los puntos satisfagan la ecuación

$$\sum_K \frac{1}{(\xi_j - \xi_K)^3} = \frac{1}{8} \xi_j, \quad (17)$$

y para demostrar que, efectivamente, eso ocurre, consideremos lo siguiente.

De la fórmula de Christoffel-Darboux para los polinomios $P_\ell(\xi)$, se ve inmediatamente que

$$\sum_{\ell=0}^{N-1} \sqrt{N-\ell} [P_{N-\ell}(\xi_j) P_{N-\ell}(\xi_K) - P_{N-\ell}(\xi_j) P_{N-\ell-1}(\xi_K)] = (\xi_j - \xi_K) \sum_{\ell=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{\ell} P_{N-m}(\xi_j) P_{N-m}(\xi_K).$$

Si además notamos que

$$\sum_{\ell=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{\ell} P_{N-m}(\xi_j) P_{N-m}(\xi_K) = \sum_{\ell=1}^N \ell P_{\ell}(\xi_j) P_{\ell}(\xi_K),$$

usando las ecuaciones (14) y (15), podemos llegar a la igualdad

$$\frac{1}{(\xi_j - \xi_k)^2} = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N l P_l(\xi_j) P_l(\xi_k), \quad \xi_j \neq \xi_k;$$

de esta manera,

$$\sum_k \frac{1}{(\xi_j - \xi_k)^3} = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N l P_l(\xi_j) \left[\sum_k \frac{P_l(\xi_k)}{(\xi_j - \xi_k)} \right] = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N l P_l(\xi_j) [D P_l(\xi_j)],$$

en donde hemos hecho la identificación

$$D P_l(\xi_j) = \sum_k \frac{P_l(\xi_k)}{(\xi_j - \xi_k)}.$$

Para calcular $D P_l(\xi_j)$, usemos nuevamente (14) y (15), junto con la ecuación (11). Esto nos da

$$D P_l(\xi_j) = \begin{cases} -\frac{1}{2} P_l(\xi_j), & l=0, \\ \frac{1}{2} [\sqrt{l} P_{l-1}(\xi_j) - \sqrt{l+1} P_{l+1}(\xi_j)], & 1 \leq l \leq N-1, \\ \frac{1}{2} \sqrt{N} P_{N-1}(\xi_j), & l=N. \end{cases}$$

Substituyendo este resultado en la expresión para $\sum_k \frac{1}{(\xi_j - \xi_k)^3}$ y simplificando, se obtiene

$$\sum_k \frac{1}{(\xi_j - \xi_k)^3} = \frac{1}{4} \sum_{l=1}^N \sqrt{l} P_{l-1}(\xi_j) P_l(\xi_j).$$

La suma del lado derecho de esta ecuación no es sino el elemento diagonal $\langle X | \hat{A}^\dagger | X \rangle$, donde $\hat{A}^\dagger$ es el operador de creación, de manera que

$$\langle X_j | \hat{A}^\dagger | X_j \rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \langle X_j | (m\omega\hat{X} - i\hat{P}) | X_j \rangle = \frac{1}{2} \xi_j,$$

y por lo tanto, vemos que se satisface la ecuación (17), condición para que $\text{Tr} \hat{U}(z_1, z_2, \dots, z_{N+1})$ tenga un valor estacionario en $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{N+1})$, y, de esta manera, da lugar a una propiedad adicional al principio variacional arriba mencionado, con la diferencia de que en este las variaciones se hacen sobre los estados $|X\rangle$, y en nuestro caso, sobre los valores z_k .

Para mostrar que ese valor estacionario corresponde a un mínimo, basta probar que la correspondiente matriz Hessiana,

i.e., la matriz formada por las segundas derivadas parciales de $\text{Tr } \hat{H}$ es positiva definida cuando se evalúa en $z_\ell = \xi_\ell$. Para esto, reescribámosla como

$$(F_{ij}) = \begin{pmatrix} \sum_{\ell=1}^n f_{1\ell} & -f_{12} & -f_{13} & \dots & -f_{1n} \\ -f_{12} & \sum_{\ell=1}^n f_{2\ell} & -f_{23} & \dots & -f_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \sum_{\ell=1}^n f_{n\ell} \end{pmatrix} \quad (18)$$

en donde

$$f_{ij} = \begin{cases} \frac{6\hbar^2}{m} \frac{1}{(\xi_i - \xi_j)^4}, & i \neq j, \\ \frac{d^2V}{dz^2} \Big|_{\xi_i}, & i = j. \end{cases}$$

Segundo, probaremos que cualquier matriz que tenga la forma (18), con todas las componentes f_{ij} positivas, es positiva definida.

Tomemos una $(N+1)$ -éada arbitraria Z^t y construyamos la forma $Z^t F Z$. Un poco de álgebra nos lleva a que

$$Z^t F Z = \sum_i f_{ii} z_i^2 + \sum_{i < j} f_{ij} (z_i - z_j)^2,$$

lo cual prueba que nuestra matriz Hessiana es positiva definida, siempre que la segunda derivada de $V(x)$ sea positiva en cada uno de los puntos ξ_j , lo que se satisface para el caso del oscilador armónico.

I.4 ALGUNAS CONSIDERACIONES SOBRE LOS RESULTADOS

Para concluir esta primera parte, discutiremos algunos

puntos importantes relacionados con la hipótesis sobre las que se basa el presente trabajo, que fueron establecidas en la sección I.3.1 e introducidas en lugar de sus análogas de la teoría convencional para obtener un espacio discreto.

Tales hipótesis conllevan los siguientes dos puntos:

- (1) El espacio vectorial de estados del oscilador armónico es de dimensión finita.
- (2) La representativa del conmutador de $\hat{X}$ y $\hat{P}$ en la base de $\hat{X}$ (o en la base de $\hat{P}$) es

$$-i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & & & \\ & 1 & 0 & 1 & & \\ & & 1 & 1 & 0 & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & \ddots & 0 & 1 \\ & 1 & 1 & & & & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ambos puntos son necesarios para obtener la forma no local de la ecuación de Schrödinger dada por la ec. (16) y tener, simultáneamente, un espectro de energía cuya forma no difiere, esencialmente, de aquel dado por la teoría convencional para el oscilador armónico.

El primer punto nos garantiza que el espectro de la posición (y de todo operador) sea discreto, si bien, por sí mismo, no determina ni el número de puntos del espectro (su magnitud), ni la distancia relativa entre ellos (su estructura).

El número $N+1$, que determinó la magnitud del espacio físico del oscilador, es decir, el que determinó la dimensión del espacio vectorial de estados se introdujo de manera un poco arbitraria en la sección I.3.1 de este trabajo. Sin embargo, puede darse una justificación de este hecho si se piensa en que la energía del oscilador debe tener como cota superior a la energía total actual del universo E_U , la cual, de acuerdo al modelo cosmológico estándar¹⁵, aunque muy grande, es finita:

$$E_U = 5 \times 10^{77} \text{ ergs.}$$

Únicamente con el fin de dar una idea de la magnitud del espacio del oscilador y de la distancia relativa entre dos puntos de espacio contiguos, imaginemos que los parámetros de nuestro oscilador tienen valores típicos nucleares. Así, la masa será la de un protón:

$$m \sim m_p = 1.6 \times 10^{-24} \text{ gr.},$$

y la frecuencia será:

$$W \sim 10^{23} \text{ segs}^{-1}.$$

Ahora igualemos el eigenvalor más grande de la energía del oscilador con la energía total del universo para obtener el número N . Esto nos da

$$N \sim 10^{81},$$

un número demasiado grande (el número estimado de bariones en el universo es del orden de 10^{20}).

Como se sabe¹¹, la longitud L del intervalo en que se encuentran contenidas todas las raíces de $H_{N+1}(\xi)$, resulta ser aproximadamente igual a $[8(N+3/2)\hbar/m\omega]^{1/2}$. Para el caso considerado esto se reduce a

$$L = \sqrt{\frac{8N\hbar}{m\omega}} \sim 10^{28} \text{ cm.}$$

Curiosamente, este resultado es del mismo orden que el valor consignado¹⁵ para el radio del universo: $1.1 \cdot 10^{28} \text{ cm.}$

En lo que se refiere a la estructura de ese espacio de puntos, podemos preguntarnos: ¿qué aspectos del sistema físico en cuestión dan como consecuencia que la estructura de los puntos de espacio sea la correspondiente a la de las raíces de los polinomios de Hermite?

Si nos detenemos a buscar la razón, veremos que, de acuerdo a lo establecido en la sección I.3.1, para que la matriz asociada a $\hat{X}$ sea aquella dada por la ec. (3) (que es la que determina ese tipo de raíces), es necesario que el espectro de $\hat{H}$ sea el que fue discutido en esa sección, de manera que puede decirse que la estructura del espacio del oscilador está determinada por la forma de interacción ($\sim X^2$) y por el conmutador $[\hat{X}, \hat{P}]$ (ec. (5)), ya que a su vez, éstos determinan el espectro de $\hat{H}$.

Por otra parte, al querer conocer la distancia entre dos raíces, vemos que la densidad de ceros de los polinomios de Hermite en la recta real no es uniforme, y la distancia entre dos de ellos consecutivos sólo ha podido ser determinada dentro de ciertas cotas.¹¹ Sin embargo, la forma asintótica que tienen los polinomios cuando $N \gg 1$, nos permite saber que una buena estimación para la distancia entre dos puntos consecutivos es

$$l = \frac{L}{N} = \sqrt{\frac{8\hbar}{m\omega N}} \sim 10^{-53} \text{ cm.}$$

Un número demasiado pequeño: 10^{40} veces menor que la longitud de Planck ($L_{\text{Planck}} = 10^{-33} \text{ cm.}$).

No debemos olvidar que los valores numéricos obtenidos para los parámetros N , L y l deberían ser considerados como cotas superiores (o cota inferior, si se trata de l), pues se obtuvieron al igualar la energía máxima del oscilador con su cota superior, y que, además, son números meramente ilustrativos.

Por otra parte, respecto al punto (2), es interesante señalarle algunos rasgos importantes:

Primero: como ya lo mencionamos, tiene influencia en la estructura del espacio del oscilador

Segundo: da lugar a que la representativa de $\hat{P}$ en la base de $\hat{X}$ sea de la forma dada por la ec. (15), como se puede ver fácilmente si se resuelve para $\langle X_j | \hat{P} | X_k \rangle$. Por lo tanto, origina que la ecuación para la función de onda sea de tipo no local.

El hecho de que el conmutador $[\hat{X}, \hat{P}]$ tenga la misma representativa en las bases de $\hat{X}$ y de $\hat{P}$ y que, además, sea independiente explícitamente de $\hbar$, sugiere algo más que una simple coincidencia: lo hace un buen candidato para mantener en problemas distintos del oscilador.

De estos dos últimos puntos se sigue que es también de esperarse que la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j,k} \frac{\psi_n(x_k)}{(x_j - x_k)(x_k - x_j)} + V(x_j) \psi_n(x_j) = E_n \psi_n(x_j), \quad j=1,2,\dots,N, \quad n=0,1,\dots,N-1,$$

resulte ser válida para algunos otros potenciales $V(x)$ bien comportados, entendiendo por válido que la forma de la ecuación se mantenga, que los eigenvalores E_n que allí aparecen sean (con excepción de algunos posiblemente) los de la ecuación de Schrödinger, y que los eigenvectores $\psi_n(x_k)$ se encuentren relacionados de alguna manera con las soluciones exactas de la ecuación diferencial.

Por otra parte, también es de esperarse que la propiedad estacionaria de $\text{Tr } \hat{H}$ en los eigenvalores de la posición se mantenga en otros problemas por el significado físico que esto tiene.

P A R T E I I

II.1 INTRODUCCION

En esta segunda parte, abandonaremos por lo que resta la idea general bajo la cual se ha venido desarrollando el trabajo y que fue planteada en las secciones I.1 y I.2 de la parte anterior, para tomar una de caracter práctico: el obtener soluciones, en principio aproximadas o numéricas, de la ec. de Schrödinger.

Más adelante mostraremos algunos resultados obtenidos al intentar verificar la conjetura concerniente con la validez de la ecuación (10) para un potencial $V(x)$ bien comportado y de la propiedad estacionaria de $\text{Tr } \hat{H}$, planteada al finalizar la primera parte de este trabajo.

Resulta ser de interés considerar la posibilidad de que tal conjetura sea verdadera, ya que de ser esto así, dispondríamos de un método sencillo para estudiar las soluciones de la ecuación de Schrödinger al tener una ecuación de eigenvalores en cierto sentido equivalente, en un espacio de dimensión finita. La abundante literatura sobre métodos de aproximación para resolver esa ecuación bajo diferentes condiciones, da fe del natural interés por encontrar soluciones que se ajusten cada vez mejor a los problemas cuánticos y el intentar hacer esto de manera cada vez más sencilla da sentido a investigar si la conjetura arriba planteada es o no es verdadera. Probar esto en el caso del potencial anarmónico

$$V(x) = x^2 + Bx^4 \quad (19)$$

es uno de los objetivos de esta segunda parte, y como veremos más adelante, la respuesta a esta cuestión es afirmativa en el sentido numérico. Por otra parte, parece ser que existen más funciones $V(x)$ para las que la conjetura es verdadera tal como está planteada.

Para comenzar con tal prueba, el primer paso obvio es buscar soluciones de

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l,k=1}^N \frac{\phi_n(x_k)}{(x_j - x_l)(x_l - x_k)} + V(x_j) \phi_n(x_j) = E_n \phi_n(x_j) \quad (20)$$

con $V(x)$ dado por la ec. (19) y compararlas con resultados bien conocidos y firmemente establecidos. Una ligera vista a la ec. (20) muestra que hay demasiados parámetros desconocidos, a saber, los N puntos x_j , los N eigenvalores E y los N eigenvectores $\phi(x_j)$ ($j=1, \dots, N$). Para que (20) tome la forma de una ecuación de eigenvalores, deben ser conocidos los puntos x_j con anterioridad. Así, a menos que dispongamos de una manera para conocerlos, no podremos resolver el problema de eigenvalores correspondiente a dicha ecuación.

Esta dificultad podía ser eliminada usando la propiedad extremal de $\text{Tr } \hat{H}$ planteada dentro de las conjeturas por probar, ya que la condición necesaria para tener un punto extremal en $x_k = x_N$,

$$\frac{2\hbar^2}{m} \sum_{l=1}^N \frac{1}{(x_j - x_l)^3} = \left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x_j}, \quad j=1, 2, \dots, N, \quad (21)$$

nos da un sistema de N ecuaciones (no lineales) que deberían satisfacer los puntos x_j . Como se puede ver, esa ecuación sólo depende del tipo de función $V(x)$ que se tenga, por lo que una vez conocida, podría intentarse resolverla y obtener los puntos de espacio requeridos para la solución de la ec. (20). Obviamente, la distribución de tales puntos sobre la recta real sería consecuencia de la forma funcional que tuviera el potencial $V(x)$.

Visto de esta manera, el procedimiento podría ser considerado como uno derivado de un principio extremal, en cercana analogía a otros¹⁷.

Si la conjetura fuera verdadera, es de esperarse que los eigenvalores E_n obtenidos a partir de (20) muestren (excepto posiblemente algunos de ellos) independencia del parámetro N , como sucede en el caso del oscilador armónico, de tal manera que el incrementar N dé como resultado nuevos eigenvalores que correspondan a la eigensucesión exacta.

Resumamos el procedimiento por probar. Sólo consta de los siguientes dos pasos:

(1) Resolver la ec. (21) para los puntos $x_1, x_2, \dots, x_N$.
 $N=2, 3, \dots$

(2) Resolver la ec. (20) para los eigenvalores E_n y los eigenvectores $\phi_n(x_j)$, $n=0, 1, \dots, N-1$.

Con referencia a estos puntos, hasta este momento no tenemos una manera de demostrar que realmente se puede obtener una solución de la ec. (21) cuando se tiene una función arbitraria

$V(x)$. Más aún, no sabemos si tal solución existe, ni si es única. Sin embargo, en lo que resta del trabajo, usaremos el hecho de que es posible obtener soluciones numéricas de dicha ecuación para el potencial anarmónico dado por la ec. (19), en un gran rango de valores del parámetro B .

Antes de concluir esta sección, diremos algo acerca de la notación por emplear.

Siempre pensaremos que los puntos x_j que satisfacen la ec. (21) se encuentran arreglados en orden creciente:

$$x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_N.$$

Y cuando la situación sea propicia para confusiones, denotaremos por x_{jN} al j -ésimo de ellos y por $\phi_j^{(N)}(x_{jN})$ y por $E_j^{(N)}$ a los respectivos eigenvectores y eigenvalores.

En la siguiente sección, haremos una pequeña digresión para presentar unos resultados que servirán de apoyo a la idea aquí esbozada y que, por otra parte, mostrarán algunas propiedades de los ceros de las eigenfunciones de la ec. de Schrödinger y de sus eigenvalores. Después pasaremos a mostrar los resultados numéricos obtenidos para el potencial anarmónico para un amplio rango del parámetro no lineal B , y finalmente, propondremos posibles direcciones en las que pueden extenderse los resultados expuestos en este trabajo.

II.2 ALGUNAS PROPIEDADES GENERALES

Como mencionamos anteriormente, al parecer existen más funciones $V(x)$ distintas de la cuadrática para las cuales la conjetura arriba planteada es totalmente válida. Esto es sugerido por lo que mostraremos en seguida.

Debemos anticipar dos cosas. La primera es que estos resultados se obtuvieron al tratar de mostrar en forma analítica dicha conjetura, y la segunda, es que no logran del todo su propósito, como se verá más adelante.

Por su naturaleza, estableceremos estos resultados en la forma de un lema, y su demostración será dada en el apéndice.

Lema. - Toda solución de la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n(x)}{dx^2} + V(x) \psi_n(x) = E_n \psi_n(x),$$

que tenga la forma

$$\psi_n(x) = e^{\frac{1}{2} \alpha_n x^2 + \beta_n x + \gamma_n} f_n(x)$$

en donde α_n , β_n y γ_n son parámetros dependientes del índice n y $f_n(x)$ es un polinomio de orden n , tiene la propiedad de que el conjunto de sus ceros, $[x_1, x_2, \dots, x_n]$,

(a) hacen estacionaria a la función $\text{Tr } \hat{H}(z_1, \dots, z_n)$ definida por

$$\text{Tr } \hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j,k}^n \frac{1}{(z_j - z_k)^2} + \sum_j^n V(z_j),$$

(b) están relacionados con sus eigenvalores por medio de

$$E_n = \frac{3\hbar^2}{2m} \sum_j^n \frac{1}{(x_j - x_j)^2} + V(x_j) - \frac{3\hbar^2}{2m} \alpha_n,$$

(c) y satisfacen la siguiente igualdad

$$\sum_{j=1}^n \frac{1}{(x_j - x_j)} + \alpha_n x_j + \beta_n = 0.$$

Para el caso del oscilador armónico ($\alpha_n = -m\omega/\hbar$, $\beta_n = 0$, $\gamma_n = \text{cte. de normalización}$), la función definida en el inciso (a) como $\text{Tr } \hat{H}$, resulta ser justamente la traza del Hamiltoniano aado por la ec. (2), es decir, resulta ser la suma de los primeros $(n-1)$ eigenvalores de la correspondiente ec. de Schrödinger mas un término (E_n) que no corresponde a la eigensucesión exacta.

No ha sido posible demostrar que suceda algo equivalente a lo anterior en un caso en que los parámetros α_n y β_n tomen

otros valores. lo que nos probaría en parte la conjetura arriba planteada.

Con relación al inciso (b), debemos hacer notar que el valor $E_n + (3\hbar^2/2m)\alpha_n$ puede ser calculado directamente con las raíces x_i , calculadas a su vez usando el resultado anterior (resolviendo la condición de extremo), lo que vendría a ser un resultado interesante si el parámetro α_n mantuviera en otros casos, la forma proporcional a la diferencia $E_{n+1} - E_n$ que tiene en el caso armónico, como se hará ver en el apéndice.

Para finalizar esta sección, mostraremos dos propiedades más de las ecuaciones (20) y (21).

Si $V(x)$ es una función simétrica, entonces:

- (i) Los puntos que satisfacen la ec. (21) están simétricamente dispuestos en la recta real alrededor de cero, y como consecuencia,
- (ii) la ecuación (20) tiene soluciones con simetría definida, es decir, los eigenvectores son pares o impares.

En el apéndice se mostrarán estas afirmaciones.

II.3 EL OSCILADOR ANARMÓNICO $V(x) = x^2 + Bx^4$: RESULTADOS NUMÉRICOS.

Regresemos ahora al problema planteado en el principio de esta segunda parte. Aplicaremos el método de solución ya descrito al potencial dado por la ec. (19) y analizaremos sus resultados para cierto rango del parámetro B . En todo lo largo de esta sección haremos las constantes $\hbar$, m y v iguales a 1.

Nota importante: en la literatura sobre el tema es muy común el 'alisar' al operador Hamiltoniano y reescribirlo

$$[\hat{p}^2 + x^2 + Bx^4] |n\rangle = E_n |n\rangle.$$

Como una de las ideas es comparar los resultados que aquí se obtengan con los ya establecidos, tendremos que adecuar nuestras ecuaciones para poder comparar las mismas variables. Los cambios que esto ocasiona son:

(a) En la ecuación (20)

$$-\sum_{\ell, k}^N \frac{\Phi_n(X_k)}{(X_j - X_\ell)(X_\ell - X_k)} + (X_j^2 + BX_j) \Phi_n(X_j) = E_n \Phi_n(X_j) \quad (20.1)$$

(b) En la ecuación (21)

$$\sum_{\ell} \frac{1}{(X_j - X_\ell)^3} = \frac{1}{2} X_j + BX_j^3 \quad (21.1)$$

II.3.1 $B > 0$

Resolver numéricamente la ec. (21.1) para este caso, no representa mayor problema que el localizar los rangos del parámetro B en donde los puntos $x_j(B)$ tienen variaciones más grandes. Resulta ser que $x_j(B)$ varía más rápidamente para valores pequeños de su argumento, es decir, $|dx_j(B)/dB|$ es más grande para B pequeña y tiende a cero rápidamente cuando B crece. Además, esta rapidez de cambio de $x_j(B)$ a medida de que el valor absoluto del índice j se acerca a cero (o bien, a los valores centrales. Recuérdese que por tener un potencial par, los puntos están simétricamente dispuestos alrededor de cero, y es más conveniente para nuestros propósitos usar la notación simétrica para ellos).

En la figura 1 se aprecia claramente lo anteriormente dicho. La gráfica fue obtenida para $N=30$, pero solamente aparecen los 15 puntos positivos. El intervalo investigado del parámetro B fue $0 < B < 1000$. Sin embargo, por razones prácticas, en la gráfica no fue posible ni deseable tomar el rango entero. La figura 2 muestra la proyección de las líneas $x_j(B)$ sobre el plano $x-B$. No hubo evidencia de que tendieran a un valor constante (como podría parecer), sin embargo, debido a que $x_j(B)$ cambia muy poco cuando B es grande es posible substituir, sin mermar mucho la precisión de los resultados posteriores, el valor exacto de $x_j(B)$ por un valor aproximado y fijo obtenido para algún valor grande de su argumento.

En cuanto a los eigenvalores se refiere, los resultados

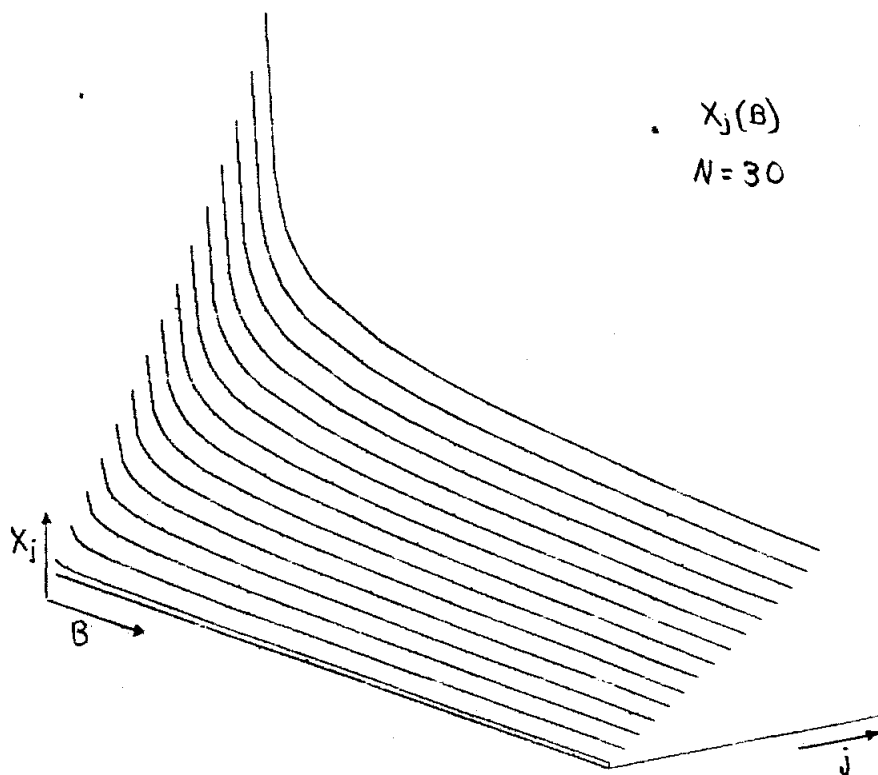


Fig. 1: Dependencia de los puntos $X_j(B)$ en sus parámetros.
 $B=(0.1, \dots, 1.0, 2.0, \dots, 10.0)^j$ y $j=16, 17, \dots, 30$.

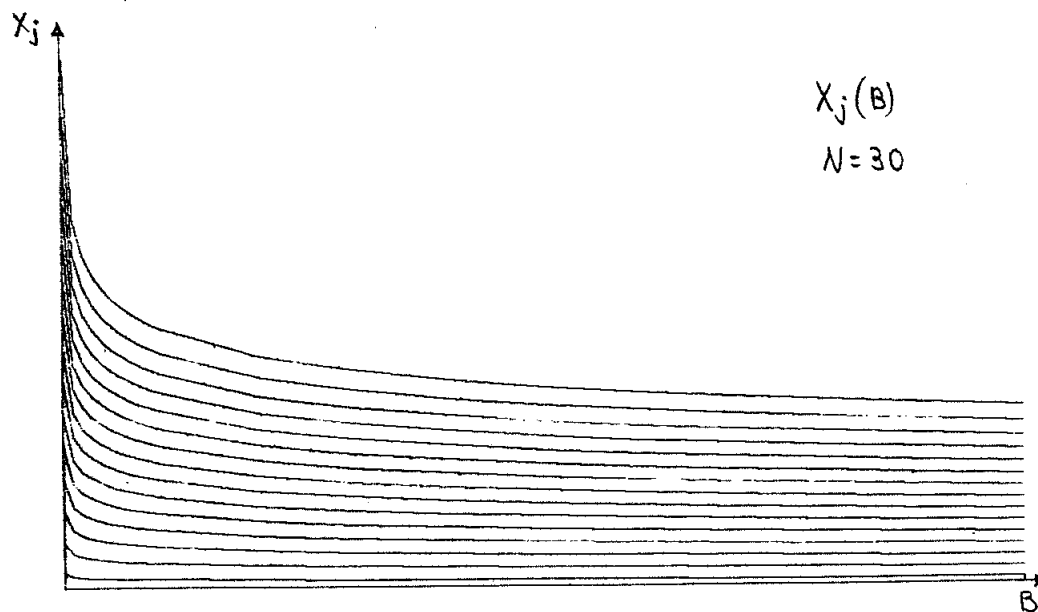


Fig. 2: Proyección de la Fig.1 sobre el plano X-B.

son satisfactorios. Antes de mostrarlos, permítasenos decir lo siguiente.

Estamos trabajando con métodos numéricos de solución para las ecuaciones (20.1) y (21.1), de manera que los resultados estarán cercanos a los exactos. El criterio de cercanía está determinado por y depende de las condiciones de solución. Así, la manera de decidir si se ha alcanzado el objetivo depende de si estamos resolviendo la ec. (21.1) o diagonalizando la ec. (20.1) y del método de solución. Para resolver la ec. (21.1) hemos hecho uso del método de Newton y el criterio para decidir si habíamos 'resuelto' la ecuación fue que

$$\Delta_j = \text{Máx} \left\{ \left(X_{-[\frac{N}{2}]}^{(j+1)} - X_{-[\frac{N}{2}]}^{(j)} \right), \left(X_{-[\frac{N}{2}]+1}^{(j+1)} - X_{-[\frac{N}{2}]+1}^{(j)} \right), \dots, \left(X_{[\frac{N}{2}]}^{(j+1)} - X_{[\frac{N}{2}]}^{(j)} \right) \right\}$$

fuera una sucesión estrictamente decreciente del índice j y que

$$\Delta_j \leq 10^{-13}$$

Una aproximación como ésta en los puntos x_j , da lugar a que

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \text{Tr} \hat{H} < \epsilon(B),$$

en donde $\epsilon(B)$ es del orden de 10^{-11} cuando B es pequeño (~ 10) y del orden de 10^{-9} cuando B es grande (~ 100). Resumiendo, podemos decir que los puntos x_j así calculados, hacen que el valor más grande de $\partial/\partial x_j (\text{Tr} \hat{H})$ sea aproximadamente cero, donde 'aproximadamente' significa 10^{-10} en promedio.

En otras palabras, no es del todo aceptable dicha aproximación, pero como veremos en seguida, aún así produce buenos resultados.

El criterio para decidir si la ec. (20.1) estaba diagonalizada fue directo: la rutina era detenida cuando el elemento no diagonal más grande en valor absoluto era menor que 10^{-14} .

Una vez explicados someramente los criterios de solución usados, pasemos a mostrar los resultados de la diagonalización.

En la tabla 1 se muestran los eigenvalores del estado base del oscilador obtenidos por este método para $H=16$ y B entre 0.1 y 1.0, y son comparados con los resultados obtenidos por Biswas et al.¹⁸ usando la técnica del determinante de Hill. También se muestran los calculados por Graffi et al.¹⁹, quienes trabajaron con los aproximantes de Padé de la serie perturbativa del problema. Todos estos valores quedan dentro de las cotas correspondientes calculadas usando métodos variacionales por Bazley y Fox²⁰, las cuales también son mostradas.

B	E_0 (Bis.)	E_0 (Graf.)	E_0 (trb.)	E_0 (var.)
0.1	1.06528550954371	1.06528550954370	1.0652855095396634	1.065286 1.065278 1.118293
0.2	1.11829265436703	1.11829265435(85)	1.1182926634362477	1.118255 1.164055
0.3	1.16404715735384	1.1640471570(754)	1.164047157348690	1.163987 1.204848
0.4	1.20481032737249	1.204810324(7674)	1.204810327367213	1.204732 1.241957
0.5	1.24185405965149	1.24185404(66782)	1.2418540596645959	1.241746 1.276195
0.6	1.27598356634255	1.2759835(218545)	1.275983566336890	1.275773 1.308110
0.7	1.30774865112003	1.3077485(315493)	1.307748651114280	1.307224 1.338096
0.8	1.33754520814817	1.3375449(370465)	1.337545208142287	1.336760 1.366443
0.9	1.36566982578443	1.3656692(8316623)	1.3656698257783668	1.364340 1.393371
1.0	1.39235164153029	1.392350(6536791)	1.392351641524641	1.390301

TABLA 1: Eigenvalores de la energía del estado base del oscilador obtenidos para B entre 0.1 y 1.0 por Biswas et al E (Bis.), por Graffi et al E (Graf.), en este trabajo E (trb.) (para $N=16$), y las cotas para dichos eigenvalores obtenidas por Bazley y Fox.

B	E_0 (Bis.)	E_0 (trb.)	E_1 (Bis.)	E_1 (trb.)
2	1. 060754130246854	1. 607541302461427	5. 4757845	5. 4757845
2	1. 76958884428039	1. 769588844272263	6. 0868964	6. 0868964
5	2. 01834064936531	2. 018340649355877	7. 0134791	7. 0134791
6	2. 12053292939427	2. 120532929383671	7. 3913260	7. 3913260
9	3. 37597854978310	2. 375978549772895	8. 3308363	8. 3308363
10	2. 44917407211838	2. 449174072106870	8. 5990034	8. 5990034
50	4. 00399276827762	4. 003992768257319	14. 241707	14. 241706
60	4. 24308144642364	4. 243081446403721	15. 104567	15. 104567
90	4. 83231440623305	4. 832314406211253	17. 228425	17. 228425
100	4. 99941754513758	4. 999417545117125	17. 830192	17. 830192
500	-----	8. 461642629040056	-----	30. 271505
600	-----	8. 986305377107782	-----	32. 154485
1000	-----	10. 63978871127619	-----	38. 086833

B	E_3 (Bis.)	E_3 (trb.)	E_6 (Bis.)	E_6 (trb.)	E_9 (Bis.)	E_9 (trb.)
2	15. 884807	15. 884807	35. 268098	35. 268098	42. 472870	42. 472870
3	17. 859316	17. 859316	39. 876587	39. 876587	48. 073337	48. 073337
5	20. 813966	20. 813966	46. 729704	46. 729704	56. 392169	56. 392169
6	22. 009467	22. 009467	49. 492502	49. 492502	59. 743658	59. 743658
9	24. 965808	24. 965808	56. 307403	56. 307403	68. 006918	68. 006918
10	25. 806276	25. 806276	58. 241298	58. 241298	70. 351051	70. 351051
50	43. 321550	43. 321550	98. 369454	98. 369454	118. 95388	118. 95388
60	45. 984800	45. 984800	104. 45568	104. 45568	126. 32212	126. 32212
90	52. 531933	52. 531933	119. 40932	119. 40932	144. 42385	144. 42385
100	54. 385291	54. 385291	123. 64069	123. 64069	149. 54565	149. 54565
500	-----	92. 620596	-----	210. 85296	-----	255. 09274
600	-----	98. 400219	-----	224. 02867	-----	271. 03685
1000	-----	116. 60319	-----	265. 51993	-----	321. 24475

TABLA 2: Valores de la energía correspondientes a distintos eigenestados obtenidos por Biswas et al E (Bis.) y en este trabajo E (trb.), para distintos valores del parametro no lineal.

Como se ve, los eigenvalores aquí calculados, coinciden con los ya publicados hasta la cifra dada por nuestra aproximación en los puntos x_j .

Un poco de trabajo numérico adicional, muestra que la sucesión

$$E_l^{(N)}(x_k^{(0)}), E_l^{(N)}(x_k^{(1)}), \dots, E_l^{(N)}(x_k^{(i)}), \dots$$

es convergente. En otras palabras, entre más cercano esté el punto $x_k^{(i)}$ del valor exacto x_k , los puntos $E_l^{(N)}$ se acercan más a los valores mostrados. Entonces es de esperarse que una mejor aproximación en $x_k^{(i)}$ nos lleve a una mejor aproximación en los eigenvalores de la ec. de Schrödinger.

En la tabla 2 se muestran los eigenvalores aquí obtenidos para $N=16$ y para algunos valores más del parámetro B . Nuevamente son comparados con los obtenidos por Biswas.

En la tabla 3 se muestran los obtenidos para un valor típico de B y distintos valores de N . Como se puede observar, estos datos sugieren dos cosas que ya esperábamos:

La primera es que existe siempre para cada N un eigenvalor espurio ($E_{N,l}^{(N)}$) que no corresponde a la sucesión de eigenvalores de la ec. de Schrödinger, y la segunda es que el eigenvalor $E_l^{(N)}$ ($l \neq N$) se muestra independiente de N en el sentido de que sigue apareciendo en las subsecuentes diagonalizaciones con N mayores, tal como sucede en el caso armónico.

Por lo que toca a los eigenvectores se puede decir lo siguiente.

Como era de esperarse, resultan tener paridad definida: $\phi_{N-1-l}^{(N)}(x_j)$ tiene la paridad indicada por el entero l ($l=0,1,\dots,N-1$). Además, su interpolación lineal tiene exactamente l nodos, es decir, tiene l cambios de signo.

En la figura 3 se muestran las interpolaciones lineales de los primeros tres eigenvectores y en la fig. 4 la interpolación lineal de sus cuadrados, para $N=30$ y $B=1.0$. La línea con símbolos indica los correspondientes eigenvectores del caso armónico ($B=0$).

La fig. 5 muestra la dependencia en N de la interpolación lineal de un eigenvector típico: $\phi_0^{(N)}(x_j)$. La fig. 6 muestra la de sus cuadrados. Y como se puede ver de ellas, la 'forma' asociada al eigenvector es sólo una. El aumentar N , aumenta el 'llenado' de la figura solamente. Es, en cierta manera, algo semejante a lo que sucede con los eigenvalores.

Para concluir este caso ($B>0$), en la fig. 7 mostramos la dependencia en el parámetro B de la interpolación lineal del cuadrado del tercer eigenvector para $N=30$. Como se puede apreciar en la gráfica, el cambio en su forma es más drástico cuando B es pequeña.

N=20 B=0.2

0.1118292654361198D 01 0.3539005287881906D 01 0.6277248616967710D 01
 0.9257765617735003D 01 0.1244060179995824D 02 0.1579953445567605D 02
 0.1931567998422883D 02 0.2297463115878645D 02 0.2676494961477601D 02
 0.3067728407885533D 02 0.3187054427521888D 02 0.3470381527125573D 02
 0.3883788673201797D 02 0.4307374853197279D 02 0.4740637460221478D 02
 0.5183131384389162D 02 0.5634545338502357D 02 0.6093776069045952D 02
 0.6618542274746141D 02 0.6643049133300792D 02

N=25 B=0.2

0.1118292654359294D 01 0.3539005287877728D 01 0.6277248616962253D 01
 0.9257765617725453D 01 0.1244060179994596D 02 0.1579953445565706D 02
 0.1931567998420382D 02 0.2297463115875143D 02 0.2676494961475327D 02
 0.3067728407883009D 02 0.3470381527124527D 02 0.3883788672888795D 02
 0.4267736119611936D 02 0.4307374853834789D 02 0.4740637321700569D 02
 0.5183131962980814D 02 0.5634462999143352D 02 0.6094275032060932D 02
 0.6562246789401524D 02 0.7038086326522356D 02 0.7521525140621906D 02
 0.8012434366201432D 02 0.8509507548523106D 02 0.8980665490139108D 02
 0.9092558566933894D 02

N=30 B=0.2

0.1118292654357418D 01 0.3539005287872384D 01 0.6277248616953897D 01
 0.9257765617710788D 01 0.1244060179993073D 02 0.1579953445564251D 02
 0.1931567998419200D 02 0.2297463115872824D 02 0.2676494961471530D 02
 0.3067728407878666D 02 0.3470381527119661D 02 0.3883788672884020D 02
 0.4307374853827377D 02 0.4740637321692929D 02 0.5183131962977768D 02
 0.5415243965429908D 02 0.5634462999138941D 02 0.6094275031740107D 02
 0.6562246790521749D 02 0.7038086144705721D 02 0.7521526068563252D 02
 0.8012321339938625D 02 0.8510245810227115D 02 0.9015090120721742D 02
 0.9526660031254596D 02 0.1004477225665168D 03 0.1056940934985641D 03
 0.1109896159349436D 03 0.1147025924868248D 03 0.1173728827743252D 03

TABLA 3: Eigenvalores E_j ($j=0,1,2,\dots,N$) obtenidos para $B=0.2$ y $N=20, 25$ y 30 . El eigenvalor espurio se encuentra subrayado.

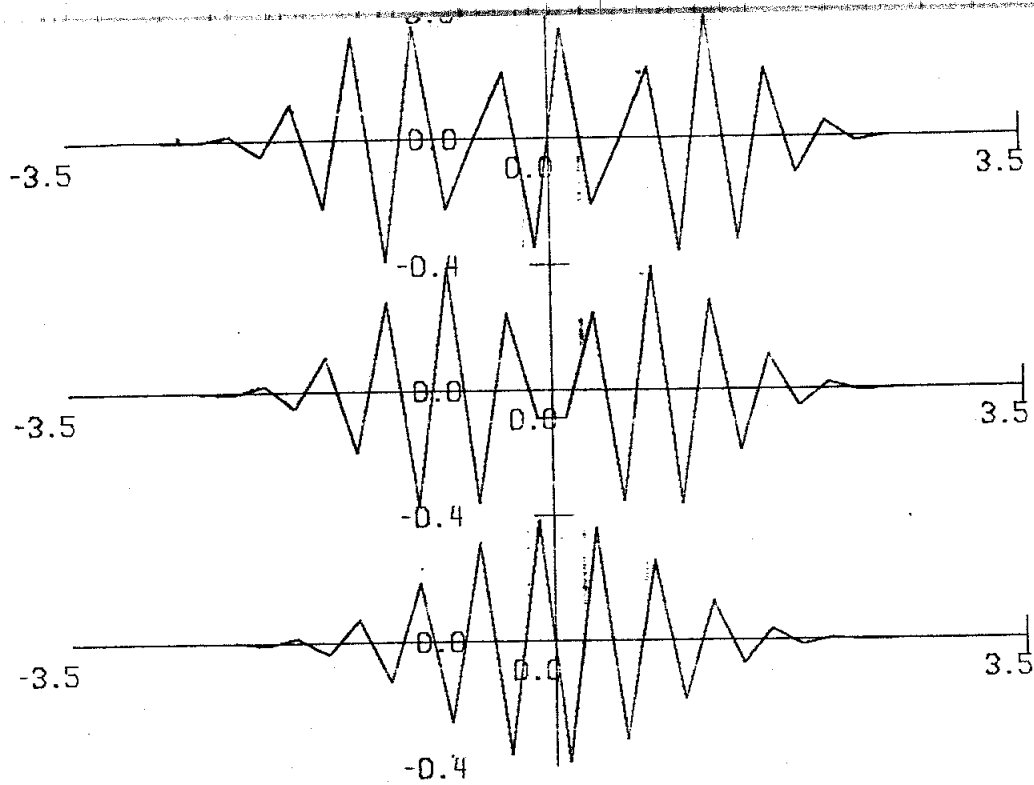


Fig. 3: Los tres primeros eigenestados para $B=1.0$ y $N=30$.

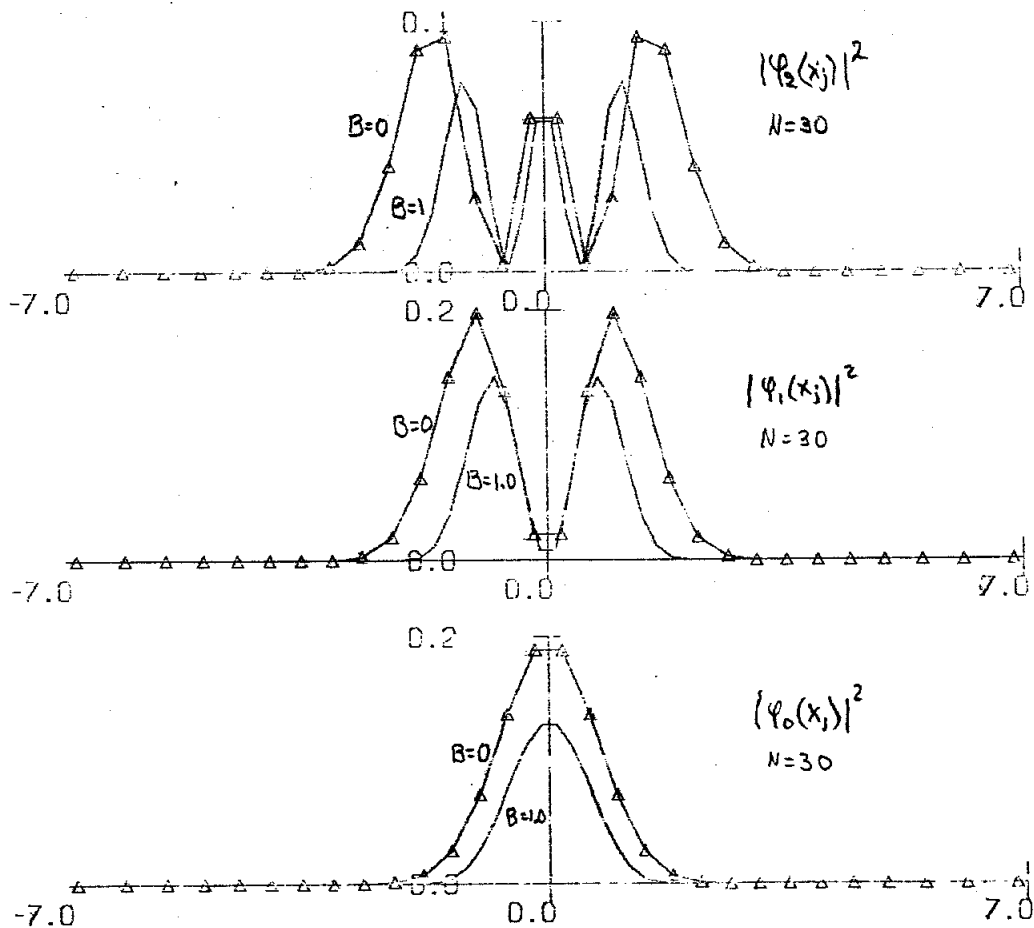


Fig. 4: Cuadrados de las 3 primeras eigenfunciones, para $N=30$, $B=1.0$ y $B=0.0$ (con símbolos).

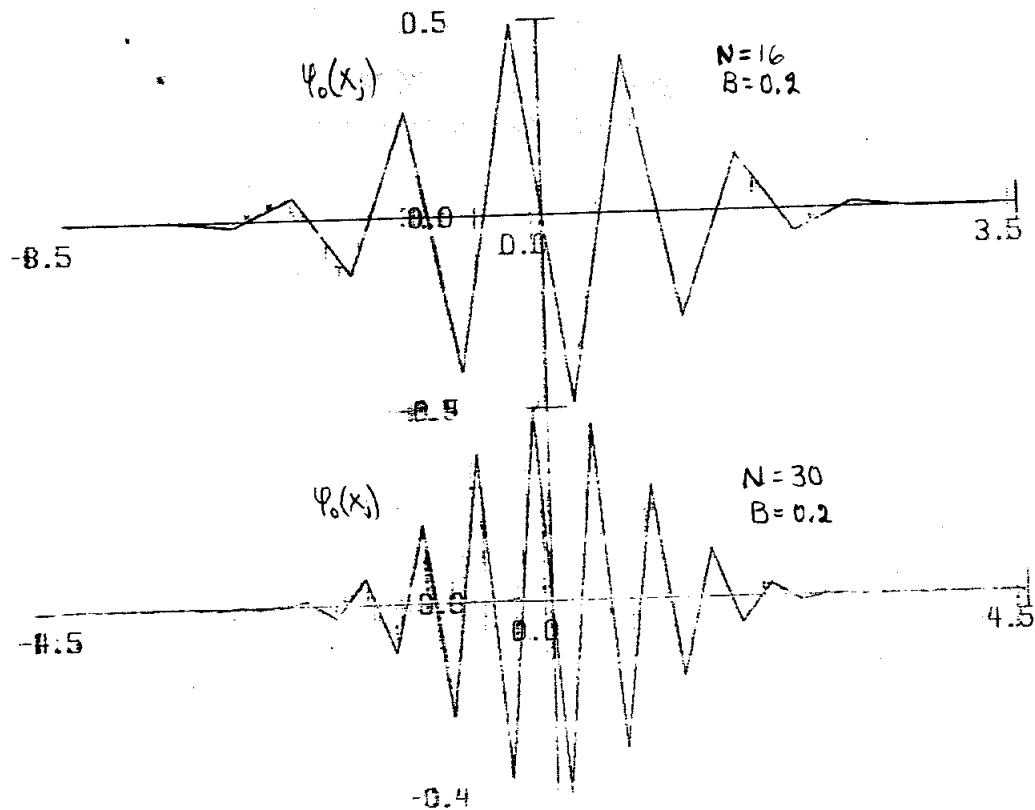


Fig. 5: El estado base del oscilador para $B=0.2$ correspondiente a $N=16$ (fig. sup.) y $N=30$ (fig. inf.).

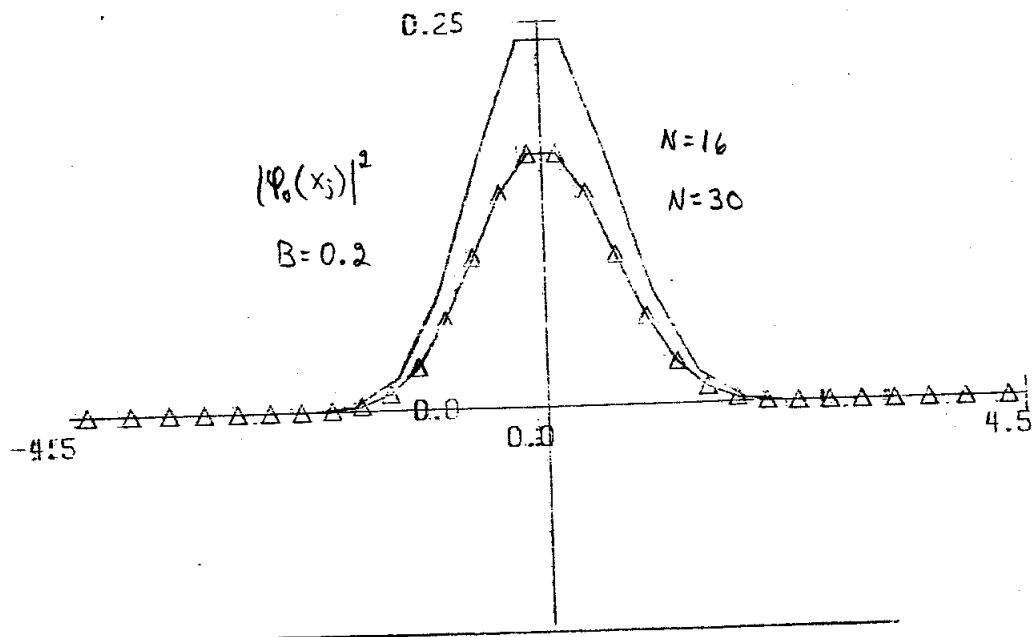


Fig. 6: $|\psi_0(x)|^2$ para $B=0.2$. La línea continua corresponde a $N=16$ y la de símbolos a $N=30$.

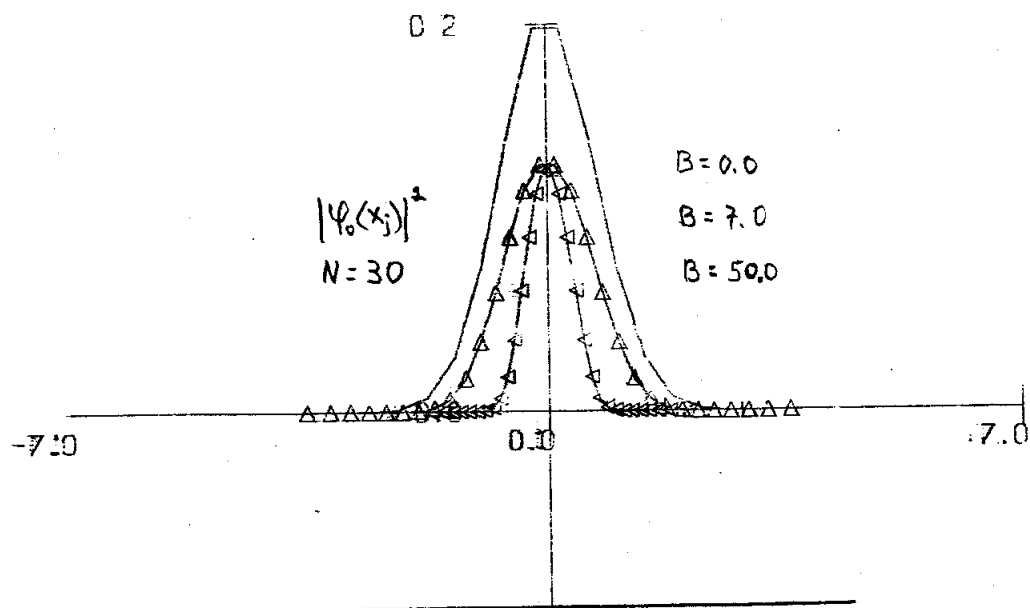


Fig. 7: El estado base para $N=30$ y distintos valores de B . La línea continua corresponde al caso armónico ($B=0$). La del símbolo (Δ), a $B=7.0$, y la del símbolo ($\triangleleft$) a $B=50.0$

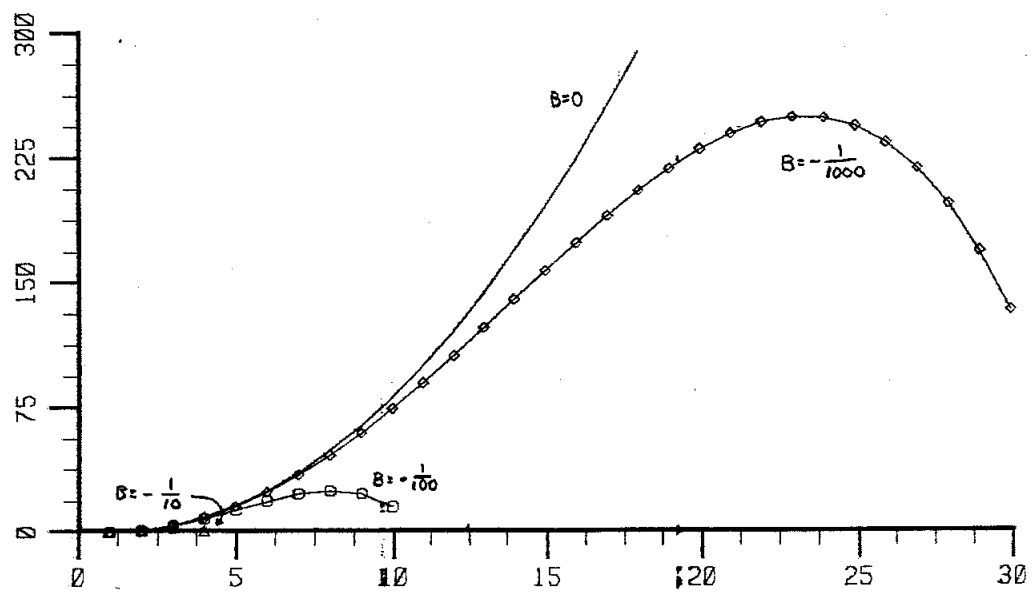


Fig. 8: $V(x) = x^2 + Bx^4$

II.3.2 $B < 0$.

En este caso, primeramente debemos decir que debíao a la forma que toma ahora el potencial no es posible encontrar estados estacionarios estables. Es decir, no hay estados ligados. Sin embargo puede seguir considerándose el tratar de buscar soluciones de la ec. de Schrödinger para un potencial como éste. A tales estados les llamaremos pseudoestados para distinguirlos de los estacionarios estables.

Por lo que se refiere a nuestra búsqueda de pseudoestados para este potencial, los resultados numéricos son los siguientes.

Los problemas empiezan al buscar soluciones de la ec. (21.1). Sólo es posible encontrarlas dentro de un rango muy pequeño a la izquierda de cero del parámetro B . Entre mayor sea el número N de puntos que se quiera encontrar, más pequeño resulta ser el rango negativo donde se les encuentra. Valores típicos son: para $N=30$, el valor mínimo de B para el cual aún es posible encontrar solución de la ec. (21.1) es aproximadamente -0.005 .

Y lo que aparentemente podría aparecer como dificultad, se revierte como un argumento más a favor de este método.

La figura 8 muestra las gráficas de $V(x) = x^2 + Bx^4$ para distintos valores del parámetro $|B|$. Los máximos del potencial se localizan en $\pm 1/(2|B|)^{1/2}$ con $V(x_{\max}) = 1/4|B|$. De manera que para valores cada vez más grandes de $|B|$, el máximo de $V(x)$ se viene abajo recíprocamente.

Con esto a la mano, podemos ahora interpretar nuestro resultado negativo: El número N nos da el número de puntos que intervienen en la ec. (21.1) y el número de eigenestados, por lo que para poder encontrar, p. ej., muchos pseudoestados del potencial, se requiere que su máximo se encuentre lo suficientemente alto. Y viceversa: para valores cada vez más grandes de $|B|$, el potencial es menos alto y menor es el número de pseudoestados. Surge entonces la pregunta: ¿Cuál es el valor mínimo de B para el que existen pseudoestados?

La respuesta que daremos a esta pregunta, debe considerarse dentro del método propuesto.

Puesto que al aumentar $|B|$ debe disminuir N , bastará tomar $N=2$ y buscar el mínimo valor de B para el cual existan soluciones de la ec. (21.1). Esto nos llevará a encontrar una cota inferior para el parámetro B . Con $N=2$, la ec. (21.1) se reduce al sistema

$$\frac{1}{x_1 - x_2} = \frac{1}{2} x_1 + B x_1^3 \quad ; \quad \frac{1}{x_2 - x_1} = \frac{1}{2} x_2 + B x_2^3 .$$

Este sistema tendrá solución sólo si

$$B \geq -\frac{1}{8} .$$

De manera que el razonamiento anterior sugiere que para valores de B menores que $-1/8$, no existirán pseudoestados de la ec. de Schrödinger para el potencial anarmónico (19).

II.4 NOTAS FINALES

Para concluir esta segunda parte y finalizar así el presente trabajo, mencionaremos algunas ideas sobre el mismo que pueden servir de base para un futuro desarrollo.

Como se vió en la sección anterior, el método planteado aquí para obtener soluciones aproximadas de la ec. de Schrödinger para un potencial bien comportado, es extremadamente sencillo y fácil de usar, no requiere mucho tiempo de máquina cuando se realizan cálculos numéricos, pueden obtenerse con él resultados analíticos interesantes y abre muchos caminos en varios campos que deben ser investigados. Sólo a manera de ejemplo mostramos en seguida algunos temas posibles.

(i) Investigar regiones y razón de convergencia y estabilidad de las soluciones de la ec. (21) para arbitraria $V(x)$, e investigar sus consecuencias en las soluciones de la ec. (20).

(ii) Investigar la relación (si existe tal) entre la forma límite de la ec. (20) cuando $\hbar \rightarrow 0$ y la ec. de Schrödinger.

(iii) Investigar si es posible aplicar alguna extensión del método aquí propuesto para otro tipo de problemas físicos, p. ej., sistemas no ligados.

II.5 APENDICE

Comenzaremos por dar la demostración del lema. La idea es simple y solamente requiere un poco de álgebra.

La condición de extremo para la función $\text{Tr } \hat{H}$ definida en el inciso (a) tiene la forma de la ec. (21), a saber:

$$\sum_{\ell=1}^n \frac{1}{(X_\nu - X_\ell)^3} = \frac{m}{2\hbar^2} \frac{dV(x)}{dX} \Big|_{X_\nu}, \quad \nu=1, 2, \dots, n.$$

Supongamos que los n puntos x_j que satisfacen la ec. anterior son raíces de un polinomio $f(x)$, es decir,

$$f(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n).$$

Ahora definamos al polinomio de grado $n-1$

$$f_\nu(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_{\nu-1})(x - x_{\nu+1}) \cdots (x - x_n).$$

Haciendo un poco de álgebra se obtiene que

$$\sum_{\ell \neq \nu}^n \frac{1}{(X_\nu - X_\ell)^3} = \frac{1}{2} \frac{f_\nu'''(X_\nu)}{f_\nu'(X_\nu)} - \frac{3}{2} \frac{f_\nu''(X_\nu) f_\nu(X_\nu)}{f_\nu^2(X_\nu)} + \left[\frac{f_\nu'(X_\nu)}{f_\nu(X_\nu)} \right]^3.$$

Además, los polinomios $f_\nu(x)$ y $f(x)$ satisfacen la relación

$$f_\nu^{(k)}(X_\nu) = \frac{1}{(k+1)} f^{(k+1)}(X_\nu),$$

por lo que se llega a que

$$\sum_{\ell}^n \frac{1}{(X_\nu - X_\ell)^3} = \frac{1}{8} \frac{f^{(4)}(X_\nu)}{f^{(1)}(X_\nu)} - \frac{1}{4} \frac{f^{(3)}(X_\nu) f^{(2)}(X_\nu)}{[f^{(1)}(X_\nu)]^2} + \frac{1}{8} \left[\frac{f^{(2)}(X_\nu)}{f^{(1)}(X_\nu)} \right]^3,$$

y por lo tanto, a que

$$f^{(4)}(x_0)[f^{(1)}(x_0)]^2 - 2f^{(3)}(x_0)f^{(2)}(x_0)f^{(1)}(x_0) + [f^{(2)}(x_0)]^3 = \frac{4m}{\hbar^2} [V^{(1)}(x_0)][f^{(1)}(x_0)]^3 \quad (22)$$

Si suponemos además que el polinomio $f(x)$ satisface una ecuación diferencial de la forma

$$f''(x) + g_1(x)f'(x) + g_0(x)f(x) = 0, \quad (23)$$

tendremos que, usando varias veces esta ec. diferencial, el lado izquierdo de (22) toma la forma

$$[(g_1g_1' - g_0'' - g_0^2 + g_0g_1^2)(f')^2 + (2g_0' + g_0g_1)f'f'' - g_0^3f^2]f + (g_1g_1' - g_1'' - 2g_0')(f')^3.$$

Evaluando esta expresión en $x=x_0$ y substituyéndola en (22) llegamos a que los coeficientes $g_1(x)$ y $g_0(x)$ de la ec. (23) deberán cumplir con

$$g_1(x_0)g_1'(x_0) - g_1''(x_0) - 2g_0'(x_0) = \frac{4m}{\hbar^2} V^{(1)}(x_0), \quad \nu=1,2,\dots,n,$$

resultado que debe ser válido para toda x . Así que integrando dicha ecuación se obtiene

$$-\frac{dg_1(x)}{dx} + \frac{1}{2}[g_1(x)]^2 - 2g_0(x) = \frac{4m}{\hbar^2} V(x) - \frac{4m}{\hbar^2} C \quad (24)$$

en donde hemos escogido a la constante de integración como $-(4m/\hbar^2)C$ por razones que serán claras más adelante. Resumiendo lo que hasta aquí llevamos, podemos afirmar que los ceros de los polinomios que satisfacen la ec. diferencial (23), cuyos coeficientes satisfacen la ec. (24), hacen estacionaria a la función $\text{Tr } \hat{H}$ definida arriba.

Por otra parte, consideremos soluciones de la ec. de Schrödinger que tengan la forma

$$\psi_n(x) = F(x) f_n(x)$$

en donde $f_n(x)$ es un polinomio de grado n . Entonces este polinomio satisface una ec. de la forma (23) en donde los coeficientes de $f_n'(x)$ y de $f_n(x)$ son

$$\frac{2}{F(x)} \frac{dF(x)}{dx} \quad y \quad \frac{1}{F(x)} \frac{d^2 F(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E_n - V(x)],$$

respectivamente.

De acuerdo al resultado ya planteado, para que los ceros de $f_n(x)$ (los ceros de $\Psi_n(x)$) hagan estacionaria a $\text{Tr } \hat{H}$, se requiere que

$$\frac{d^2 F}{dx^2} - \frac{1}{F(x)} \left(\frac{dF}{dx} \right)^2 = \alpha_n F$$

en donde

$$\alpha_n = \frac{m}{\hbar^2} (e - E_n).$$

La solución de esa ecuación resulta ser $e^{\frac{1}{2}\alpha_n x^2 + \beta_n x + \gamma_n}$ y con esto queda establecido el lema. Nótese que para el caso armónico se tiene $\alpha_n = -m\omega/\hbar$ de donde se ve que $e = E_{n-1}$ y esto sugiere que α_n deba ser proporcional a una diferencia de energías en otro caso.

Pasemos ahora a mostrar que los incisos (i) y (ii) de la sección II.2 también se satisfacen.

Primeramente haremos ver que si $V(x)$ es una función par entonces la ec. (21) acepta soluciones simétricas.

Cambemos nuestra notación para los puntos x_j . Pensemos por un momento que n sea un número par y que los puntos se encuentran ordenados en la forma

$$x_{-n/2} < x_{-n/2+1} < \dots < x_{-1} < x_1 < \dots < x_{n/2}.$$

De manera que si en la ec. (21) cambiamos j por $-j$ y re-arreglamos los términos, tendremos

$$\sum_{l=-n/2}^{n/2} \frac{1}{(x_j - x_l)^3} = \frac{m}{2\hbar^2} \frac{dV(x_j)}{dx_j}$$

Si $V(x)$ cumple con la condición de simetría, entonces la ecuación anterior es satisfecha por un conjunto de puntos simétricos, ya que en este caso, $-x_k = x_{-k}$ y la ecuación anterior regresa a su forma original. Por lo tanto, el sistema de ecs. (21) acepta soluciones simétricas si $V(x)$ es simétrico. Ahora bien, pensamos en que la solución de este sistema es única,

concluimos que debe satisfacerse el inciso (i). Por otra parte, si en la ec. (20) sustituimos el eigenvector $\langle E_n | x_j \rangle$ por el vector $\langle E_n | -x_j \rangle$, es decir,

$$\begin{pmatrix} \phi_n(x_{[\frac{n}{2}]}) \\ \phi_n(x_{[\frac{n}{2}]+1}) \\ \vdots \\ \phi_n(x_{[\frac{n}{2}]-1}) \\ \phi_n(x_{[\frac{n}{2}]}) \end{pmatrix} \quad \text{por} \quad \begin{pmatrix} \phi_n(x_{[\frac{n}{2}]}) \\ \phi_n(x_{[\frac{n}{2}]-1}) \\ \vdots \\ \phi_n(x_{[\frac{n}{2}]+1}) \\ \phi_n(x_{[\frac{n}{2}]}) \end{pmatrix}$$

se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k,l=-[\frac{n}{2}]}^{[\frac{n}{2}]} \frac{\phi_n(x_k)}{(x_j - x_l)(x_l - x_k)} + V(x_j) \phi_n(x_j) = E_n \phi_n(x_j); \quad j = -[\frac{n}{2}], \dots, +[\frac{n}{2}],$$

Cambiando índices en la suma y usando la propiedad simétrica de los puntos x_j y del potencial, puede reescribirse de la manera siguiente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k,l=[\frac{n}{2}]}^{-[\frac{n}{2}]} \frac{\phi_n(x_k)}{(x_{-j} - x_l)(x_l - x_k)} + V(x_{-j}) \phi_n(x_{-j}) = E_n \phi_n(x_{-j}); \quad j = -[\frac{n}{2}], \dots, +[\frac{n}{2}].$$

Esto muestra que el vector $\langle E_n | -x_j \rangle$ es también un eigenvector correspondiente al mismo eigenvalor, de manera que de aquí se sigue que a lo más difieren por un signo.

III. LISTA DE REFERENCIAS, NOTAS Y LITERATURA AFIN

- (1) H.S. Snyder, *Phys. Rev.* 71(1947),38. H.Yukawa, *ibid.* 77 (1950),219. P.H. Bergmann and J.H. Brunning, *Rev. Mod.Phys.* 21 (1949),480. P.A.M. Dirac, *Canadian J. Math.* 2 (1950),129.
- (2) I.Watanabe, *Prog. Theor. Phys.* 24 (1960),465. *Ibid.* 266 (1961), 7.
- (3) H.Banai, *Reporte de la Academia de Ciencias Húngara*, No.74 (1982). *Ibid.* No. 75 (1982), y referencias citadas allí.
- (4) T.Yan, *Phys. Rev.* 160 (1967),1182. K.W. Forä, *ibid.* 175 (1968),2048.
- (5) T.D.Palev, *J. Math. Phys.* 23 (1982), 1778.
- (6) E.P. Wigner, *Phys. Rev.* 77 (1950),711.
- (7) M. Born y P. Jordan, *Z. Phys.* 33 (1925),858.
- (8) W. Heisenberg, *Z. Phys.* 33 (1925),879.
- (9) Ver por ejemplo, E.Merzbacher, Quantum Mechanics, 2a.ed., John Wiley and sons, (1970),309,356. P.A.M. Dirac, The principles of Quantum Mechanics, 4a.ed. Oxford Press (1970),18,67,136.
- (10) P.A.M. Dirac, libro citado (ref 9), p.137, último párrafo.
- (11) G. Szego, Orthogonal Polynomials, 4a.ed. publicada por The American Mathematical Society, Colloquium Publications, Vol 23 (1976), caps. 3,6,8,15.
- (12) C. Winston, *Ann. Math.* 35 (1934),658.
- (13) C. Jordan, Calculus of Finite Differences, 2a.ed., Chelsea Publishing Co. New York (1960),593.
- (14) Ver, por ejemplo, Gilbert Strang, Algebra Lineal y sus Aplicaciones, Fondo Educativo Interamericano (1982), cap.6.
- (15) Steven Weinberg, Gravitation and Cosmology, John Wiley

(1972), cap. 15. C.W. Misner, K.S. Thorne y J.A. Wheeler, Gravitation, W.H. Freeman and Co. (1973), cap. 27, p738.

(16) Born y Jordan, loc. cit., sugieren que Tr L debe ser un extremo de acuerdo al principio de mínima acción. Esto no sucede en el caso trabajado aquí. En cambio, si sucede que Tr H se hace estacionaria.

(17) Ching-Teh Li, A. Klein, F. Krejs, Phys. Rev. D 12(8), 2311 (1975)

(18) S.N. Biswas, K. Datta, R.P. Saxena, P.K. Srivastava, V.S. Varma, J. Math. Phys. 14(9), 1190 (1973).

(19) S. Graffi, V. Grecchi, B. Simon, Phys. Lett. 32B(7), 6631 (1970).

(20) N.W. Bazley, D.W. Fox, Phys. Rev. 124(2), 483 (1961).

(21) I.G. Halliday, P. Suranyi, Phys. Rev. D 21(6), 1529 (1980).

(22) S. Graffi, V. Grecchi, J. Math. Phys. 19(5), 1002 (1978).

(23) F.R. Halpen, T.W. Yonkman, J. Math. Phys. 15(10), 1718 (1974).

(24) C.N. Bender, T.T. Wu, Phys. Rev. A 184(5), 1231 (1969).

(25) C.A. Uzes, Phys. Rev. D 14(12), 3362 (1976).

(26) J.H. Henkel, C.A. Uzes, Phys. Rev. D 8(12), 4430 (1973).

(27) G.P. Flessas, Phys. Lett. 83A(3), 121 (1981).

(28) R.N. Chaudhuri, B. Mukherjee, J. Phys. A 17, 277 (1984).

(29) K. Banerjee, J.K. Bhattacharjee, Phys. Rev. D 29(6), 1111 (1984).

(30) K. Yamazaki, Prog. Theor. Phys. 70(3), 629 (1983).

(31) P.B. Abraham, H.E. Moses, Phys Rev. A 22(4), 133 (1980).