

AAPI 190

UNIVERSIDAD CATÓLICA ANDRÉS BELLO

FACULTAD DE INGENIERIA



APROXIMANTES ANALÍTICAS PARA LOS
AUTOVALORES DEL ESTADO BASE DE
LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER, EN
PRESENCIA DE POTENCIALES RADIALES

DE LA FORMA $-\frac{Z}{r} + g r + \lambda r^2$

Trabajo de Ascenso presentado ante
la ilustre Universidad Católica Andrés
Bello, por el Dr. Enrique I. Castro G.
para optar a la clasificación de Profesor
Agregado

2001

RESUMEN

En el presente trabajo se obtuvieron expresiones analíticas aproximadas, usando la técnica de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos, para la energía del estado base de un átomo hidrogénico perturbado en tres dimensiones por un potencial lineal más uno cuadrático, de la forma $V(r) = gr + \lambda r^2$. La expansión de la energía, en serie de potencias, para valores pequeños de los parámetros de acoplamiento se obtuvo usando el teorema del hypervirial y el teorema de Hellman-Feynman. La expansión asintótica, válida solamente para valores intermedios y grandes de los parámetros de acoplamiento, se obtuvo utilizando la teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger. Usando una formulación adecuada de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos, se recuperaron ambas expansiones. Se fijó el parámetro g y se obtuvieron aproximantes válidos para todo valor positivo del parámetro de acoplamiento λ . La precisión de los resultados obtenidos se determinó a través de la integración numérica de la ecuación de Schrödinger. Se calcularon aproximaciones a los autovalores usando el método modificado $1/N$. Los aproximantes cuasifraccionales obtenidos resultaron ser mucho más precisos, para todo valor de los parámetros de acoplamiento.

LISTA DE FIGURAS

- Fig.1. Energía como función el parámetro de acoplamiento λ para los resultados obtenidos usando integración numérica de la ecuación de Schrödinger, la serie potencial $E_{100}^{(HF)}$ y la serie asintótica $E_{000}^{(RS)}$. 41
- Fig.2. Energía como función el parámetro de acoplamiento renormalizado λ' para el aproximante cuasifracional a dos puntos y para el método $1/N$ modificado. 42
- Fig. 3. Error absoluto como función de la constante de acoplamiento renormalizada λ' para el aproximante cuasifracional a dos puntos y para el método $1/N$ modificado. 43

CAPITULO I

INTRODUCCION

El problema de los potenciales polinómicos radiales con simetría esférica, ha sido estudiado en una gran variedad de contextos, debido a su importancia tanto física como matemática.

El operador Hamiltoniano en este caso tiene la forma:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{Z}{r} + \hat{V}(\vec{\beta}, r) + \frac{\hat{L}^2}{2r^2} \quad (1)$$

donde $\hat{V}(\vec{\beta}, r)$ es un polinomio en r y $\vec{\beta}$ denota un vector cuyas componentes son las constantes de acoplamiento, \hat{L}^2 denota el operador momentum angular. Algunos tipos de potenciales radiales simplifican importantes situaciones físicas que son de interés en física atómica, física molecular, astrofísica, física del estado sólido, etc. Ya que en el presente trabajo solo consideraremos el estado base ($l = 0$), no consideramos la parte angular del Hamiltoniano de la ecuación (1)

En la familia general de perturbaciones $\hat{V}(r) = \beta r^p$, siendo β la constante de acoplamiento, el caso con $p = 1$ corresponde por una parte al efecto Stark esférico en el hidrógeno[1,2]. En este caso β viene expresado en unidades atómicas de campo eléctrico $E_h e^{-1} a_0^{-1}$. E. J. Austin[1], calculó la serie potencial a alto orden (28 términos), para valores pequeños del parámetro β , usando el teorema de Hellman-Feynman y a partir de dicha serie potencial obtuvo los aproximantes de Padé. Los aproximantes de Padé diagonales obtenidos resultaron ser convergentes para varios

INDICE

<u>CAPITULO I:</u>	INTRODUCCION	1
<u>CAPITULO II:</u>	TECNICA DE LOS APROXIMANTES CUASIFRACCIONALES A DOS PUNTOS	11
<u>CAPITULO III:</u>	EXPANSION POTENCIAL	
III.1 .-	Introducción.	17
III.2 .-	Teorema De Hellmam-Feynman y Teorema del Hypervirial.	17
III.3 .-	Expansión Potencial a la Energía del Estado Base.	20
<u>CAPITULO IV:</u>	EXPANSION ASINTOTICA	
IV.1 .-	Teoría De Rayleigh -Schrödinger .	25
IV.2 .-	Expansión Asintótica.	26
<u>CAPITULO V:</u>	APROXIMANTES ANALITICOS A LA ENERGIA DEL ESTADO BASE.	
V.1.-	Aproximante Cuasifraccional a dos puntos.	29
V.2.-	Coefficientes del Aproximante Cuasifraccional a dos puntos.	34
<u>CAPITULO VI:</u>	RESULTADOS	
VI.1.-	Resultados.	39
VI.2.-	Figuras.	40
VI.3.-	Análisis de resultados.	44
<u>CAPITULO VII:</u>	CONCLUSIONES.	45
<u>APENDICE A:</u>	METODO 1/N MODIFICADO PARA POTENCIALES CON SIMETRIA ESFERICA.	48
	REFERENCIAS	60

valores del número cuántico parabólico, a pesar de que la serie potencial es divergente. También ha sido estudiado en el contexto del modelo de quark para el espectro J/Ψ y en otros problemas similares en física de partículas[3].

Un estado ligado de un quark encantado y un antiquark encantado tiene mucho en común con los átomos simples, por ejemplo, el átomo de hidrógeno. Dicho estado ligado recibe el nombre de charmonium, debido a la analogía que éste presenta con el positronium, el cual es un estado ligado de un electrón y un positrón.

La hipótesis de los quarks fue propuesta en 1963 independientemente por Murray Gell-Mann y George Zweig[4], pertenecientes ambos al Instituto de Tecnología de California. En la versión original del concepto había tres clases de quarks, denominadas u, d y s, del inglés "up" (arriba), "down" (abajo) y "strange" (extraño) y estaban los tres antiquarks correspondientes, denominados \bar{u} , \bar{d} y \bar{s} . Los hadrones se forman combinando los quarks y los antiquarks según reglas sencillas. Se han identificado más de 100 clases de hadrones, de los cuales los más familiares son el protón y el neutrón.

Observando las reglas de combinación de los quarks y del conteo de sus números cuánticos, se pueden explicar todas las propiedades de los hadrones. Cada hadrón conocido puede definirse como una combinación de un quark y un antiquark, o bien de tres quarks. Aún más, a cada combinación permitida de quarks le corresponde un hadrón conocido.

En 1974 el descubrimiento de la partícula J/Ψ , sugería un nuevo esquema para la clasificación de los hadrones[4]. Esta partícula era un hadrón, pero no podía

formarse mediante ninguna combinación permitida de tres quarks, ya que su masa es de cerca de 3.1 GeV.

Desde el momento de su descubrimiento, la explicación más extendida acerca de la partícula J/Ψ fue la de un estado ligado de un nuevo quark y un nuevo antiquark.

Para distinguir este nuevo quark de los quarks conocidos los investigadores James D. Bjorken, del Stanford Linear Accelerator Center (SLAC), y Sheldon Lee Glashow, de la Harvard University, le asignaron un nuevo número cuántico al cual llamaron "charmed" (encanto). El quark encantado se designa por c y al antiquark encantado por \bar{c} .

Secuidamente, 10 días después del descubrimiento de la partícula Ψ se encontró una nueva partícula de masa 3.684 GeV, estrechamente relacionada con la Ψ . A esta segunda partícula se llamó Ψ' . Al igual que la partícula Ψ , la Ψ' es neutra eléctricamente y tiene una unidad de espín, no tiene vida media tan larga como la Ψ , pero la anchura de la resonancia, de 228.000 electrón-voltios, es aún mucho más estrecha.

Thomas Appelquist y H. David Politzer, de la Harvard University pudieron predecir formas adicionales del charmonium. Encontraron estados sin momento angular orbital y con los espines de los quarks antiparalelos. Los espines en direcciones opuestas se restan, con el resultado de que el conjunto tiene un momento angular cero. Esta configuración se denota por el prefijo "para" y tiene una energía total más baja que la configuración "orto" en la cual los espines tienen la misma dirección.

Encontraron un estado paracharmonium con masa ligeramente menor que la de la Ψ y otro con masa ligeramente menor que la de la Ψ' . El quark y el antiquark deben también combinarse con espines paralelos y con una unidad de momento angular orbital. Estos tres estados se conocen en conjunto como charmonium de onda P. Sus masas están entre la masa de la Ψ y la de la Ψ' . En las transiciones entre los estados del charmonium, los fotones emitidos son rayos gamma de alta energía.

Los quarks encantados son tan pesados que pueden ser tratados no relativisticamente. E. Eichten et al.[3] sugirieron que el espectro de excitación del sistema quark-antiquark puede ser interpretado como una deformación continua de un oscilador armónico isotrópico en un campo Coulombiano, siendo el potencial no relativista asociado

$$V(r) = -\frac{\alpha_S}{r} \left(1 - \left(\frac{r}{a} \right)^2 \right), \quad (2)$$

o lo que es lo mismo

$$V(r) = -\frac{\alpha_S}{r} + \left(\frac{\alpha_S}{a^2} \right) r, \quad (3)$$

siendo α_S la constante de estructura fina.

En otras áreas de la física encontramos que el caso con $p = 2$ puede ser considerado como un efecto Zeeman cuadrático esférico[5,6]. Este potencial es muy importante para el diagnóstico del corrimiento en frecuencia de la línea espectral Lyman- α en el neón, en plasmas de deuterio-tritio[7]. Los resultados experimentales

muestran que el corrimiento en la línea oscila desde el rojo hasta el azul, para bajas densidades, pero para densidades mayores que 4 gr/cm^3 (para el neón) existe un corrimiento continuo hacia el rojo el cual incrementa casi linealmente con la densidad. En esta región el corrimiento puede ser usado para diagnosticar la densidad del plasma.

Estudios realizados usando el modelo del potencial de Debye-Hückel, aunque arrojan resultados correctos para bajas densidades, para altas densidades predicen un corrimiento incorrecto de la línea espectral, hacia el azul.

S. Skupsky[7], usando el modelo de esfera iónica demostró que este potencial conduce a resultados acordes con el corrimiento de las líneas espectrales para altas densidades. En el modelo de esfera iónica el potencial de Coulomb del ion se escoge cero sobre una esfera centrada en el ion, la cual contiene suficientes electrones libres, más el electrón ligado como para neutralizarlo y el cual se puede representar por un potencial de la forma

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{(Z-1)e^2}{2R_0} \left[3 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^2 \right], \quad r \leq R_0 \quad (4)$$

donde R_0 es el radio de la esfera iónica y éste viene dado $R_0 = ((Z-1) / (4\pi n_e / 3))^{1/3}$, siendo n_e la densidad numérica de electrones libres. El primer término en la ecuación (4) es el potencial nuclear que da lugar al espectro normal del átomo de hidrógeno. El término restante es el potencial generado por los electrones libres que rodean al ion. Esta es la fuente del corrimiento de la línea.

R. Cauble et al [8], desarrollaron un formalismo mecánico cuántico para la caracterización de las propiedades atómicas fundamentales de átomos fuertemente ionizados, en plasmas densos. El modelo de esfera iónica se usó, en el contexto de dicho formalismo para hacer comparaciones, en el caso de plasmas de gas neón bajo condiciones de acoplamiento fuertes, con el modelo semiclásico de interacción de dos cuerpos.

Un potencial más general es $V(r) = -\frac{Z}{r} + g r + \lambda r^2$. Potenciales de este tipo han sido sugeridos como potenciales de confinamiento de quark[9], sobre la base de la división de los niveles 3P_J del charmonium, para valores de r intermedios. Corresponden también a átomos hidrogénicos inmersos en campos eléctricos y magnéticos constantes (Efecto Zeeman cuadrático y efecto Stark). Han sido usados en el estudio de problemas similares en estados ligados en física de partículas[10]. Para el caso en que $Z = 0$ tenemos el potencial asociado al modelo vibracional-rotacional más simple de una molécula[11].

R.P. Saxena, P. K. Srivastava and V.S. Varma[52] estudiaron el espectro de energías, para la ocho primeros estados excitados, de las ondas S de un átomo de hidrógeno con la perturbación polinómica radial $2 \lambda r + 2 (\lambda r)^2$, demostrando la existencia de una discontinuidad en el espectro en el límite $\lambda = 0$, cuando λ cambia de positivo a negativo. Este caso fue un ejemplo importante en el área de Catástrofe Cuántica.

En las dos últimas décadas los potenciales polinómicos en r han sido estudiados usando una gran variedad de técnicas, entre las más conocidas podemos citar la teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger[12], métodos variacionales[12], la teoría de Bender-Wu[6], los aproximantes de Padé[13, 17], el teorema del hypervirial y el teorema de Hellman-Feynman[14-17], el método $1/N$ [18-25], el método $1/N$ modificado[11, 26-33], el método de los momentos[34], el método de las fracciones continuas[35-37], métodos basados en la Mecánica Cuántica Supersimétrica SUSYQM[38-45], el método del determinante de Hill[46-48] y otros[49-55].

Un hecho que ha centrado la atención en este tipo de potenciales es que recientemente se han podido dar grandes avances usando SUSYQM y otras técnicas analíticas, las cuales han permitido hallar soluciones exactas para algunos casos particulares, en los cuales se cumplen ciertas restricciones en los parámetros de acoplamiento.

El método $1/N$ modificado [32,33] ha probado ser una herramienta útil, la cual da buenos resultados en el caso de potenciales con simetría esférica que poseen sólo un mínimo. Sin embargo, en la medida en que incrementa el valor de los parámetros g y λ , también incrementa el error en la precisión de los resultados. Además, las aproximaciones analíticas que se obtienen al usar este método son extremadamente extensas, generando mucha incomodidad algebraica si uno necesita calcular la derivada de los autovalores, para obtener por ejemplo susceptibilidades eléctricas o magnéticas, o otras funciones electromagnéticas. Las derivadas de los

autovalores suelen aparecer en algunos cálculos en la espectroscopia de los quarks pesados[49,50], donde el valor de las autofunciones de la onda-s, en el origen (necesario para derivar el ancho leptónico). depende de los autovalores y de sus derivadas. En estos casos es conveniente tener soluciones analíticas, de fácil manipulación, en lugar de métodos de integración numérica.

Es importante mencionar, que el método $1/N$ puede dar resultados muy pobres [33], e incluso incorrectos (puede dar números cuánticos radiales incorrectos), en aquellos casos en los cuales el potencial tiene más de un mínimo.

En este trabajo presentamos una metodología distinta a la desarrollada por otros autores previamente[69]. Es bien sabido que la teoría de perturbaciones de la Mecánica Cuántica permite obtener expansiones en series de potencias validas solamente para valores pequeños de los parámetros de acoplamiento. Por otro lado en el límite del régimen de acoplamiento fuerte (valores grandes de los parámetros de acoplamiento) también se puede obtener una expansión en serie de potencias en función del inverso de los parámetros de acoplamiento (serie asintótica). Aquí nosotros construimos un puente analítico entre ambas expansiones valido para todo valor de los parámetros de acoplamiento y el cual permite recuperar la información de ambas series y las singularidades de la función exacta.

En trabajos anteriores se ha aplicado la técnica de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos en problemas físicos que presentan un comportamiento analítico similar. Un ejemplo importante, es el estudio de los autovalores asociados a un átomo hidrogenoide, sin espín, sometido a un campo magnético uniforme bidimensional[61].

El propósito de este trabajo es analizar las implicaciones de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos en el cálculo de los autovalores asociados a átomos hidrogenicos perturbados por potenciales polinómicos radiales con simetría esférica, similares a los anteriormente descritos, introduciendo algunas modificaciones y mejoras con respecto a la información existente sobre dichos aproximantes, en la literatura conocida.

La ventaja del uso de esta técnica es que se obtiene una única expresión analítica, de fácil aplicación y la cual es valida, con un grado de precisión mayor que el que pueden ofrecer otros métodos conocidos, para todo valor de las constantes de acoplamiento.

El capítulo II, es devoto al estudio de las propiedades analíticas de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos, ilustrando sus características fundamentales, las cuales nos dan criterios para obtener mecanismos algoritmicos que nos indiquen la forma correcta de dichos aproximantes en el caso en estudio.

En el capítulo III, se obtiene la expansión en serie de potencias, alrededor del origen, a la energía del estado base, utilizando el Teorema del hypervirial y el Teorema de Hellman-Feynman.

En el capítulo IV, se determina la expansión asintótica a los autovalores de la energía del estado base utilizando la teoría clásica de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger.

El objetivo del capítulo V es obtener , a partir de la serie potencial y de la expansión asintótica, previamente calculadas, la formulación adecuada para los

aproximantes cuasifracccionales a dos puntos, ilustrando además, las técnicas a usar para el cálculo de los parámetros del aproximante.

En el capítulo VI se presentan los resultados obtenidos, los cuales son comparados con aquellos que se obtienen utilizando técnicas de integración numérica de la ecuación de Schrödinger y con el aproximante analítico desarrollado a partir del método $1/N$ modificado.

Finalmente en el capítulo VII, se presentan las conclusiones que se generan a partir de los resultados obtenidos, ilustrando las ventajas que presenta el uso de esta técnica en esta área, que actualmente es motivo de estudio en la Mecánica Cuántica No Relativista.

CAPITULO II

TECNICA DE LOS APROXIMANTES QUASIFRACCIONALES A DOS PUNTOS

Los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos son aproximaciones analíticas, las cuales permiten obtener una expresión aproximada de una función en aquellos casos cuando se conocen sólo algunos términos de la serie potencial en un punto, para valores pequeños de la variable independiente y algunos términos de su expansión asintótica en un segundo punto, para valores grandes de la variable independiente.

Las ideas que originaron los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos parten de los aproximantes de Padé[56-59]. Este último método provee una manera sistemática para obtener aproximaciones de funciones por medio de cocientes de polinomios, determinándose los respectivos coeficientes a partir de la serie de Taylor asociada a la función que se está aproximando alrededor de un punto. La exactitud de este tipo de aproximación depende de cuan cerca estemos del punto de expansión.

En el caso del método de Padé a dos puntos se suele usar las expansiones en series de Taylor en dos puntos distintos de la variable de expansión. En el caso de Laurent-Padé, se suelen usar expansiones en series de Laurent. La desventaja del uso del método de Padé es que se suelen necesitar un número muy grande de términos de cada una de las expansiones si se desea lograr una buena aproximación. Sin embargo, la ventaja de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos es que con polinomios de muy bajo grado, por lo general se hallan muy buenas aproximaciones.

El método de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos se diferencia del método de Padé a dos puntos en que se usa la serie potencial alrededor de un punto y la serie asintótica alrededor del otro. Por esta razón inicialmente se le dio el nombre de método asintótico modificado de Padé y por sugerencia de los referees examinadores, posteriormente se le dio el nombre de “aproximantes cuasifraccionales a dos puntos” .

La estrategia de dichos aproximantes es obtener una expresión analítica que sirva de puente entre ambos puntos, recuperando la información de los coeficientes de ambas expansiones y minimizando el error cometido al comparar con los valores exactos, obteniendo así resultados muy precisos. La precisión de las aproximaciones analíticas obtenidas con este procedimiento es grande, en todo el rango de valores de los parámetros de acoplamiento, aún en las regiones donde ambas expansiones se comportan en forma divergente. Los resultados son usualmente buenos independiente de los radios de convergencia de cada una de las expansiones. En algunos casos se han obtenido aproximaciones con 7 dígitos exactos usando expansiones con radio de convergencia cero[67].

Para obtener los coeficientes de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos, la metodología a seguir es comparar la serie potencial y la serie asintótica, previamente conocidas, con la serie potencial y la serie asintótica de nuestro aproximante, razón por la cual nos vemos obligados a introducir cocientes de polinomios en combinación con funciones no fraccionales, las cuales se denominan funciones auxiliares.

Estas funciones auxiliares se escogen de manera tal que permitan determinar los parámetros del aproximante sin contradicciones ni ambigüedades. La metodología a seguir en la escojencia de estas, es que no solo han de tener el comportamiento asintótico adecuado, sino que al combinarse con los cocientes de polinomios han de tener el mismo comportamiento potencial de la función. Cuando el aproximante se restringe a funciones fraccionales (cocientes de polinomios) exclusivamente, sus parámetros se determinan siguiendo la técnica de los aproximantes de Padé a dos puntos.

En los aproximantes los puntos de ramificación vienen de a pares, razón por la cual las funciones auxiliares usualmente añaden singularidades fuera de la región de interés, lo cual mejora la exactitud de los resultados en el interior de dicha región.

La regla de oro es que la función y el aproximante deben tener las mismas singularidades en la región de interés, pero es de libre elección decidir en qué puntos fuera de la zona de interés han de estar las singularidades que se introducen, que no son propias de la función en estudio. Dicha región de interés está situada entre los puntos alrededor de los cuales se hacen las expansiones potencial y asintótica.

Los coeficientes del aproximante se determinan comparando las potencias de las series anteriormente mencionadas, y resolviendo el sistema de ecuaciones resultante. En algunos casos se suele escoger un número de ecuaciones que sea menor que el número de parámetros, de manera de dejar más de un parámetro libre los cuales se determinarán por criterios de errores de truncación, minimización de diferencias con resultados numéricos, determinación de la media cuadrática de los

resultados obtenidos al variar la relación entre la cantidad de ecuaciones asintóticas y potenciales del sistema, etc...

Dependiendo de la precisión que se desee, en algunos intervalos de la región de interés, se pueden escoger más ecuaciones de la serie potencial que de la serie asintótica, o viceversa. En el presente trabajo se tomó igual número de ecuaciones de ambas partes.

Las funciones fraccionales en el aproximante deben tener un denominador común con el fin de garantizar la linealidad del sistema de ecuaciones que aparece en la determinación de los coeficientes del aproximante. En el presente trabajo encontraremos que nuestros aproximantes tendrán más de una función auxiliar y por tanto más de una función fraccional, no obstante todas las funciones fraccionales han de tener el mínimo denominador.

Las combinaciones de funciones fraccionales con funciones auxiliares están usualmente expresadas en términos de una variable óptima (parámetro libre), la cual se introduce para minimizar el error del aproximante con la solución exacta y para evitar los defectos. Un defecto es tener un polo y un cero muy cercanos. Al aparecer un defecto, el aproximante se dispara alrededor de ese punto, perdiéndose así todo sentido de aproximación. Estos se reconocen fácilmente pues desaparecen al variar el valor del parámetro libre. Al eliminarse el defecto, el aproximante recupera su comportamiento normal en toda la región de interés.

Es importante hacer notar que en la Mecánica Cuántica no Relativista aparecen frecuentemente análisis potenciales y asintóticos de los parámetros de acoplamiento, al utilizar las teorías de perturbaciones a problemas de autovalores. La

aplicación de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos en esta área surge como una consecuencia directa del intento de construir aproximaciones analíticas con mayor rango de validez y precisión, usando como punto de partida los resultados ya conocidos.

En los siguientes capítulos analizaremos, como se determinan los aproximantes adecuados, a partir de los argumentos enunciados en el presente capítulo.

CAPITULO III

EXPANSION POTENCIAL

III.1.- INTRODUCCION:

Como vimos en el capítulo anterior los coeficientes de los aproximantes cuasifraccionales se determinan comparando las potencias de la serie potencial y la serie asintótica, en dos puntos, con las de la serie potencial y la serie asintótica del aproximante cuasifraccional. El objetivo del presente capítulo es obtener una expansión en series de potencias alrededor del origen, de la energía del estado base, para valores pequeños de los parámetros de acoplamiento g y λ , usando el teorema del hypervirial y el teorema de Hellman-Feynman.

III.2.- EL TEOREMA DEL HYPERVIRIAL Y EL TEOREMA DE HELLMAN-FEYNMAN.

Estos teoremas han sido utilizados en la literatura para obtener expansiones en series de potencias, a los autovalores de la energía, en los casos de potenciales radiales con simetría esférica, para valores pequeños de los parámetros de acoplamiento. R. J. Swenson y S. H. Danforth [15] los usaron para estudiar el caso general de un potencial oscilador armónico.

J. Killingbeck[12,47] aplicó ambos casos para el estudio de un átomo hidrogénico perturbado con un término perturbativo λr y para el caso con un

término perturbativo $2\lambda r + 2\lambda^2 r^2$, determinando en ambos casos, los niveles de energía en función del parámetro perturbativo λ .

C. S. Lai [16,17] obtuvo aproximantes de Padé a la expresión en series de potencias, obtenida usando estos teoremas para el caso del potencial de Yukawa.

La importancia de esta técnica radica en que, para el caso de potenciales polinómicos con simetría esférica, se puede obtener la expansión en series de potencias de los autovalores, alrededor del origen, en forma directa, evitando así complicadas sumas con productos de elementos de matriz, las cuales suelen aparecer en la teoría de Rayleigh-Schrödinger (RS).

Para simplificar los cálculos, usaremos unidades atómicas $\hbar = e = m_e = 1$. En el cálculo de la serie potencial, para cada uno de los casos en estudio en el presente trabajo, la carga nuclear Z se comporta como un factor de escala, y no es importante para la explicación de los métodos expuestos en el presente trabajo, así que tomaremos $Z = 1$. La ecuación radial del Hamiltoniano (1) se puede escribir como

$$\hat{H}(r) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \hat{V}(r), \quad (5)$$

donde $\hat{V}(r)$ es el potencial efectivo, el cual se puede descomponer en la suma del potencial centrífugo y el potencial de confinamiento

$$\hat{V}(r) = \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{r} + \hat{V}(\bar{\beta}, r). \quad (6)$$

Usando la Ec. (5) se pueden obtener las siguientes relaciones de conmutación:

$$\left[\frac{d}{dr}, \hat{H} \right] = \frac{dV(r)}{dr} + \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr}, \quad (7)$$

$$\left[r^j, \hat{H} \right] = \frac{1}{2} j(j+1) r^{j-2} + j r^{j-1} \frac{d}{dr}, \quad (8)$$

donde j son enteros positivos. El teorema del hypervirial (THV) requiere que

$$\left\langle \left[r^j \left(\frac{d}{dr} \right), \hat{H} \right] \right\rangle = 0 \quad (9)$$

para todos los autoestados de la Ec. (2), con $j \geq 0$. Sustituyendo las ecuaciones (5), (7) y (8) en (9), y considerando que estamos estudiando el estado base, obtenemos las relaciones de hypervirial entre la energía E y los valores esperados de $\langle r^j \rangle$, las cuales vienen dadas por:

$$2jE \langle r^{j-1} \rangle = 2j \langle r^{j-1} \hat{V}(r) \rangle + \left\langle r^j \frac{dV(r)}{dr} \right\rangle - \frac{1}{4} j(j-1)(j-2) \langle r^{j-3} \rangle. \quad (10)$$

Introduciendo la Ec.(6) en la Ec. (10) obtenemos las relaciones de hypervirial

$$\begin{aligned} (E - \beta_0) \langle r^j \rangle = & -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{2j+1}{j+1} \right) \langle r^{j-1} \rangle + \left(\frac{1}{4} j(j-1) \right) \langle r^{j-2} \rangle \right. \\ & \left. - \sum_{k=2}^p \beta_k \left(\frac{2j+k+1}{j+1} \right) \langle r^{j+k-1} \rangle \right], \quad (11) \end{aligned}$$

donde p es el orden del polinomio en r y β_k son las constantes de acoplamiento que representan las componentes de $\vec{\beta}$. La energía y los valores esperados de $\langle r^j \rangle$ pueden ser expandidos en series de potencias del parámetro de acoplamiento (asumiendo que todos los β_k se fijan con valores constantes, menos el $k = i$), el cual por comodidad llamaremos genéricamente λ (es decir, $\lambda \equiv \beta_i$), tal que

$$E_n = \sum_{k=0}^{\infty} E_n^{(k)} \lambda^k \quad (12)$$

$$\langle r^j \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} C_j^{(k)} \lambda^k \quad (13)$$

donde la energía del n-ésimo estado no perturbado es conocida y viene dada por

$$E_n^{(0)} = -\frac{1}{2n^2}.$$

El teorema de Hellman-Feynman establece que si $\hat{H} = \hat{H}(\lambda)$, entonces:

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{V}(r)}{\partial \lambda} \right\rangle. \quad (14)$$

Combinando la condición de normalización $\langle r^0 \rangle = \langle 1 \rangle = 1$, tenemos que

$C_k^{(0)} = \delta_{0k}$. Para calcular las energías perturbadas $E_n^{(k)}$ procedemos a introducir

las expresiones (6), (12) y (13) en la ecuación (14), quedándonos

$$k E_n^{(k)} = - \sum_{m=0}^p m \beta_m C_{m-1}^{(k-m)}. \quad (15)$$

Para calcular las energías $E_n^{(k)}$ procedemos a introducir las expresiones (12) y (13) en la ecuación (15), quedándonos

$$\left(\sum_{k=0}^{\infty} E_n^{(k)} \lambda^k - \beta_0 \right) \left(\sum_{i=0}^{\infty} C_j^{(i)} \lambda^i \right) = -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{2j+1}{j+1} \right) \left(\sum_{i=0}^{\infty} C_{j-1}^{(i)} \lambda^i \right) + \frac{1}{4} j(j-1) \left(\sum_{i=0}^{\infty} C_{j-2}^{(i)} \lambda^i \right) + \left(\sum_{k=2}^p \beta_k \left(\frac{2j+k+1}{j+1} \right) \right) \left(\sum_{i=0}^{\infty} C_{j+k-1}^{(i)} \lambda^i \right) \right]. \quad (16)$$

Comparando individualmente los términos con potencias en λ , a ambos lados de la igualdad, determinamos los $C_j^{(k)}$. Para ilustrar presentamos los 4 primeros coeficientes que se determinan usando este procedimiento

$$C_j^{(0)} = \left[\frac{1}{4} j(j-1)C_{j-2}^{(0)} + \left(\frac{2j+1}{j+1} \right) C_{j-1}^{(0)} \right] \quad (17)$$

$$C_j^{(1)} = 0 \quad (18)$$

$$C_j^{(2)} = \left[\frac{1}{4} j(j-1)C_{j-2}^{(2)} + \left(\frac{2j+1}{j+1} \right) C_{j-1}^{(2)} - \left(3C_j^{(0)} - \left(\frac{2j+3}{j+1} \right) C_{j+1}^{(0)} \right) \beta_1 \right] \quad (19)$$

$$C_j^{(3)} = \left[\frac{1}{4} j(j-1)C_{j-2}^{(3)} + \left(\frac{2j+1}{j+1} \right) C_{j-1}^{(3)} - \left(6C_j^{(0)} - \left(\frac{2j+4}{j+1} \right) C_{j+2}^{(0)} \right) \beta_2 \right] \quad (20)$$

Este cálculo se puede extender hasta que se obtengan todos los $C_j^{(k)}$ que se necesiten para determinar las energías perturbadas $E_n^{(k)}$. Introduciendo cada uno de estos coeficientes en la expansión (12), obtenemos la serie en potencias, de los parámetros de acoplamiento, deseada.

III.3.-.- EXPANSION POTENCIAL A LA ENERGIA DEL ESTADO BASE

En la presente sección se obtendrá una expansión, en serie de potencias, de la energía del estado base, para valores pequeños de los parámetros g y λ , asociada al Hamiltoniano radial

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{1}{r} + gr + \lambda r^2, \quad (21)$$

utilizando el teorema de Hellman-Feynman y el teorema del Hypervirial, previamente explicados en la sección anterior.

Las relaciones del hypervirial, obtenidas en la ecuación (11), para el caso del potencial $V(r) = -\frac{1}{r} + g r + \lambda r^2$, adoptan la forma

$$E\langle r^j \rangle = -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{1}{4} j(j-1) \right) \langle r^{j-2} \rangle + \left(\frac{2j+1}{j+1} \right) \langle r^{j-1} \rangle - \left(\frac{2j+3}{j+1} \right) g \langle r^{j+1} \rangle - \left(\frac{2j+4}{j+1} \right) \lambda \langle r^{j+2} \rangle \right]. \quad (22)$$

Definiendo

$$\alpha_j = \frac{1}{4} j(j-1), \quad (23)$$

$$\beta_j = \left(\frac{2j+1}{j+1} \right), \quad (24)$$

$$\gamma_{1j} = - \left(\frac{2j+3}{j+1} \right) g, \quad (25)$$

$$\gamma_{2j} = - \left(\frac{2j+4}{j+1} \right) \lambda, \quad (26)$$

podemos reescribir las relaciones del hypervirial de la forma

$$E\langle r^j \rangle = -\frac{1}{2} \left[\alpha_j \langle r^{j-2} \rangle + \beta_j \langle r^{j-1} \rangle + \gamma_{1j} \langle r^{j+1} \rangle + \gamma_{2j} \langle r^{j+2} \rangle \right]. \quad (27)$$

El teorema de Hellman-Feynman establece en el caso de este potencial que

$$k E_n^{(k)} = 2 g C_1^{(k-2)} + 3 \lambda C_2^{(k-3)}. \quad (28)$$

Si expandimos en series de potencias la energía E y los valores esperados de las coordenadas $\langle r^j \rangle$, ecuaciones (12) y (13), y además consideramos la condición de normalización $C_0^{(k)} = \delta_{0k}$, encontramos que

$$\left(\sum_{k=0}^{\infty} E_n^{(k)} \lambda^k \right) \left(\sum_{i=0}^{\infty} C_j^{(i)} \lambda^i \right) = -\frac{1}{2} \left[\alpha_j \left(\sum_{i=0}^{\infty} C_{j-2}^{(i)} \lambda^i \right) + \beta_j \left(\sum_{i=0}^{\infty} C_{j-1}^{(i)} \lambda^i \right) \right. \\ \left. \gamma_{1j} \left(\sum_{i=0}^{\infty} C_{j+1}^{(i)} \lambda^i \right) + \gamma_{2j} \left(\sum_{i=0}^{\infty} C_{j+2}^{(i)} \lambda^{i+1} \right) \right]. \quad (29)$$

Igualando potencias en λ , en ambos extremos de la igualdad, encontramos que para todo $j \geq -1$, se tiene

$$k = 0 \rightarrow C_j^{(0)} = \alpha_j C_{j-2}^{(0)} + \beta_j C_{j-1}^{(0)}, \quad (30)$$

$$k = 1 \rightarrow C_j^{(1)} = 0, \quad (31)$$

$$k = 2 \rightarrow C_j^{(2)} = \alpha_j C_{j-2}^{(2)} + \beta_j C_{j-1}^{(2)} + \gamma_{1j} C_{j+1}^{(0)} + 3g C_j^{(0)}, \quad (32)$$

$$k = 3 \rightarrow C_j^{(3)} = \alpha_j C_{j-2}^{(3)} + \beta_j C_{j-1}^{(3)} + \gamma_{2j} C_{j+2}^{(0)} + 6\lambda C_j^{(0)}, \quad (33)$$

$$k = 4 \rightarrow C_j^{(4)} = \alpha_j C_{j-2}^{(4)} + \beta_j C_{j-1}^{(4)} + \gamma_{1j} C_{j+1}^{(2)} + 3g C_j^{(2)} - 3g^2 C_j^{(0)}, \quad (34)$$

$$k = 5 \rightarrow C_j^{(5)} = \alpha_j C_{j-2}^{(5)} + \beta_j C_{j-1}^{(5)} + \gamma_{1j} C_{j+1}^{(3)} + \gamma_{2j} C_{j+2}^{(2)} + 3g C_j^{(3)} + \\ 6\lambda C_j^{(2)} - 27g\lambda C_j^{(0)}, \quad (35)$$

$$k = 6 \rightarrow C_j^{(6)} = \alpha_j C_{j-2}^{(6)} + \beta_j C_{j-1}^{(6)} + \gamma_{1j} C_{j+1}^{(4)} + \gamma_{2j} C_{j+2}^{(3)} + 3g C_j^{(4)} + \\ 6\lambda C_j^{(3)} - 3g^2 C_j^{(2)} + \left(\frac{27}{2} g^3 - \frac{129}{2} \lambda^2 \right) C_j^{(0)}, \quad (36)$$

$$k = 7 \rightarrow C_j^{(7)} = \alpha_j C_{j-2}^{(7)} + \beta_j C_{j-1}^{(7)} + \gamma_{1j} C_{j+1}^{(5)} + \gamma_{2j} C_{j+2}^{(4)} + 3g C_j^{(5)} + 6\lambda C_j^{(4)} - 3g^2 C_j^{(3)} + 27g\lambda C_j^{(2)} + 231g^2\lambda C_j^{(0)}. \quad (37)$$

Para obtener los coeficientes $E_n^{(k)}$ utilizamos la expresión (28), encontrando

$$E_1^{(0)} = -\frac{1}{2}, \quad (38)$$

$$E_1^{(1)} = 0, \quad (39)$$

$$E_1^{(2)} = g C_1^{(0)} = \frac{3}{2}g, \quad (40)$$

$$E_1^{(3)} = \frac{2}{3}g C_1^{(1)} + \lambda C_2^{(0)} = 3\lambda, \quad (41)$$

$$E_1^{(4)} = \frac{g}{2} C_1^{(2)} + \frac{3}{4}\lambda C_2^{(1)} = -\frac{3}{2}g^2, \quad (42)$$

$$E_1^{(5)} = \frac{2}{5}g C_1^{(3)} + \frac{3}{5}\lambda C_2^{(2)} = -\frac{27}{2}\lambda g, \quad (43)$$

$$E_1^{(6)} = \frac{g}{3} C_1^{(4)} + \frac{\lambda}{2} C_2^{(3)} = \frac{27}{4}g^3 - \frac{129}{4}\lambda^2, \quad (44)$$

$$E_1^{(7)} = \frac{2}{7}g C_1^{(5)} + \frac{3}{7}\lambda C_2^{(4)} = \frac{231}{2}\lambda g, \quad (45)$$

$$E_1^{(8)} = \frac{g}{4} C_1^{(6)} + \frac{3}{8}\lambda C_2^{(5)} = -\frac{795}{16}g^4 + \frac{2709}{4}g\lambda^2, \quad (46)$$

$$E_1^{(9)} = \frac{g}{4} C_1^{(7)} + \frac{3}{8}\lambda C_2^{(6)} = -\frac{20887}{24}g^3\lambda + \frac{5451}{4}\lambda^3. \quad (47)$$

Finalmente la expansión en serie de potencias, ecuación (12), viene dada por

$$E_{100}^{(HF)}(g, \lambda) = \left(-\frac{1}{2} + \frac{3g(1-g)}{2} + \frac{27}{4}g^3 - \frac{795}{16}g^4 \right) + \left(3 - \frac{27}{2}g + \frac{231}{2}g^2 - \frac{20887}{24}g^3 \right) \lambda + \left(\frac{2709}{16}g - \frac{129}{4} \right) \lambda^2 + \frac{5451}{4}\lambda^3 + \dots \quad (48)$$

Esta expansión está expresada para cualquier valor de g y λ . El propósito del presente trabajo es obtener aproximantes cuasifraccionales a dos puntos como función solamente de un único parámetro, por lo tanto el parámetro g se adopta fijo y debe ser especificado al empezar al análisis para obtener el aproximante apropiado al caso en estudio. La serie de potencias (48) es solamente convergente para pequeños valores de la constante de acoplamiento g , tales que $g < 0.2$. Para ilustrar nuestro método tomaremos $g = 0.1$. Introduciendo el valor numérico de g en la ecuación (48), la serie de potencias en λ viene dada por

$$E_{100}^{(HF)}(\lambda) = a_0 + a_1 \lambda + a_2 \lambda^2 + a_3 \lambda^3 + \dots, \quad (49)$$

donde $a_0 = -0.36$, $a_1 = 1.934$, $a_2 = 35.475$, $a_3 = 1362.75$. Esta serie es divergente para todo valor de λ distinto de cero al igual que sucede con la serie de potencias en λ que se obtiene si se hubiera usado el método clásico de perturbaciones de RS.

CAPITULO IV

EXPANSIÓN ASINTOTICA

IV.1.- TEORÍA DE PERTURBACIONES DE RAYLEIGH-SCHRÖDINGER.

En el presente capítulo obtendremos la expansión asintótica a los autovalores del estado base usando la Teoría de Rayleigh-Schrodinger.

La teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger está concebida para sistemas cuyo operador Hamiltoniano $\hat{H}(\beta)$, siendo β la constante de acoplamiento, puede ser particionado en una parte completamente soluble $\hat{H}_0(r)$, cuyos autovalores y autofunciones son conocidas, y una perturbación $\beta \hat{V}(r)$, de acuerdo a

$$\hat{H}(\beta) = \hat{H}_0(r) + \beta \hat{V}(r) . \quad (50)$$

El formalismo de esta teoría permite expresar un autovalor $E(\beta)$ de $\hat{H}(\beta)$, como una serie de potencias en la constante de acoplamiento β , de la forma

$$E_n(\beta) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \beta^m . \quad (51)$$

Consecuentemente, sólo se pueden obtener resultados con sentido físico para valores pequeños de la constante de acoplamiento. La convergencia de esta serie en una vecindad de β , solo está garantizada si el dominio de \hat{H}_0 está contenido en el dominio de $\hat{V}(r)$, es decir

$$D(\hat{H}_0) \subset D(\hat{V}(r)), \quad (52)$$

y si la desigualdad

$$\|\hat{V}(r)\Psi\| \leq a \|\hat{H}_0\Psi\| + b \|\Psi\|, \quad (53)$$

se satisface para todo $\Psi \in D(\hat{H}_0)$, con a y b constantes positivas cualesquiera[63].

Si el operador perturbativo $\hat{V}(r)$ no satisface ambas condiciones, la serie de la ecuación (51) diverge.

IV.2.- EXPANSIÓN ASINTÓTICA:

Para determinar la expansión asintótica de la energía del estado base del Hamiltoniano radial de la expresión (21), para valores grandes del parámetro de acoplamiento λ , usando la teoría de clásica de perturbaciones de RS, es conveniente tomar como el Hamiltoniano radial no perturbado $\hat{H}_0(r)$ al Hamiltoniano

$$\hat{H}_0(r) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \lambda r^2. \quad (54)$$

El potencial perturbativo es el potencial Coulombiano más el término lineal en r , tal que

$$V(r) = -\frac{1}{r} + gr. \quad (55)$$

En este caso el operador Hamiltoniano radial, dado en la expresión (21) se puede escribir de la forma

$$\hat{H}(r) = \hat{H}_0(r) + V(r). \quad (56)$$

El Hamiltoniano no perturbado radial , ecuación (54), corresponde al Hamiltoniano de un oscilador armónico tridimensional isotrópico, cuyas autofunciones y autovalores son respectivamente

$$\Psi_{n l m}(r, \theta, \phi) = N r^l e^{-\left(\lambda r^2 / 2\right)} {}_1F_1(-n, l+3/2, \lambda r^2) Y_l^m(\theta, \phi) , \quad (57)$$

$$E_{nlm} = \left(2n+1+\frac{3}{2}\right) \sqrt{2\lambda} . \quad (58)$$

Donde N es la constante de normalización, ${}_1F_1(-n, l+3/2, \lambda r^2)$ es la función hipergeométrica confluyente[65] y $Y_l^m(\theta, \phi)$ son los armónicos esféricos. Usando el método de perturbaciones de RS obtenemos las correcciones a primero, segundo y tercer orden para el estado base del Hamiltoniano (21), dadas por

$$E_{000}^{(1)} = V_{00} , \quad (59)$$

$$E_{000}^{(2)} = \sum_{i \neq 1}^8 \frac{V_{0i} V_{i0}}{E_{0i}} , \quad (60)$$

$$E_{000}^{(3)} = \sum_{i, j \neq 1}^8 \frac{V_{0i} V_{ij} V_{i0}}{E_{0i} E_{0j}} - V_{00} \sum_{i \neq 1}^8 \frac{V_{0i} V_{i0}}{(E_{0i})^2} . \quad (61)$$

Se usaron los 8 primeros estados excitados para el cálculo de las expresiones (59) - (61). Para calcular dichas correcciones se uso el software Mathematica® V4.0.

Los resultados obtenidos ordenados en potencias decrecientes de λ vendrán dados por

$$E_{000}^{(RS)} = b_0 \sqrt{\lambda} + b_1 \lambda^{1/4} + b_2 + \frac{b_3}{\sqrt{\lambda}} + \dots , \quad (62)$$

donde $b_0 = 2.1213$, $b_1 = -1.3418$, $b_2 = -0.1577$ y $b_3 = 0.0652$. Los valores de los coeficientes con decrecientes a diferencia de lo que sucede en la serie de potencias, ecuación (49), determinada usando el formalismo de Hellman-Feynman.

CAPITULO V

APROXIMANTES ANALÍTICOS A LA ENERGÍA DEL ESTADO BASE

V.1.- APROXIMANTE CUASIFRACCIONAL A DOS PUNTOS:

Para elegir la forma más apropiada del aproximante cuasifraccional a dos puntos, es conveniente reescribir las expresiones (49) y (62) de la forma

$$E_{100}^{(HF)}(\lambda) = \sum_{i=0}^3 a_i \lambda^i, \quad |\lambda| \ll 1, \quad (63)$$

$$E_{000}^{(RS)}(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(b_n^{(0)} \lambda^{(1/2+n)} + b_n^{(1)} \lambda^{(1/4+n)} + b_n^{(2)} \lambda^n + b_n^{(3)} \lambda^{-(1/4+n)} \right), \quad |\lambda| \gg 1. \quad (64)$$

Desde el punto de vista de los aproximantes cuasifraccionales los coeficientes de la serie de potencias en (63) son tan importantes como aquellos de la expresión asintótica en (64). Las expresiones anteriores sugieren que λ y $\lambda^{1/4}$ son buenas variables en base a las cuales podemos desarrollar el aproximante.

Sólo se conocen los coeficientes de la serie potencial $E_{100}^{(HF)}(\lambda)$ hasta a_3 , en la región definida por $|\lambda| \ll 1$, esto nos indica que en el límite cuando $|\lambda| \rightarrow 0$, el aproximante debe tender a este límite con potencias hasta λ^3 . Para el comportamiento asintótico, en la región $|\lambda| \gg 1$, la expansión asintótica $E_{100}^{(RS)}(\lambda)$

decrece en potencias de $\lambda^{1/4}$. Por lo tanto el aproximante a desarrollar debe tener como máximo, grado 3 para $|\lambda| \ll 1$ y potencias, no enteras, de grado $1/4$ para $|\lambda| \gg 1$.

Para valores de $|\lambda| \ll 1$, los aproximantes cuasifraccionales, al igual que en los aproximantes de Padé, al aproximar el comportamiento potencial de los autovalores, pueden contener expresiones en forma de cocientes de dos polinomios en la variable λ , es decir de la forma

$$\frac{P(\lambda)}{Q(\lambda)} = \frac{\sum_{i=1}^n p_i \lambda^i}{\sum_{j=1}^m q_j \lambda^j} \quad (65)$$

El comportamiento de esta división de polinomios no se ve alterado si se multiplica o divide por una constante, razón por la cual se elige $q_0 = 1$, lo que implica que en el límite $|\lambda| \ll 1$, entonces $Q(\lambda) \rightarrow 1$.

Un punto importante en nuestro análisis es que nuestro aproximante debe ser "eficiente". El significado del término eficiencia se usa en el sentido que las series potencial y asintótica del aproximante cuasifraccional sólo deben involucrar términos en potencias comparables con aquellos obtenidos en las series potencial y asintótica dadas por las ecuaciones (63) y (64). Esto significa que no tenemos que hacer cero los coeficientes que no tienen potencias correspondientes. Dicha especificación es necesaria ya que existen términos en potencias en el aproximante, que no aparecen en la serie original.

En el método de Padé este hecho es usualmente ignorado. El criterio de efectividad en nuestro contexto es muy relevante, ya que este reduce el número de parámetros a ser determinados solamente al número necesario.

Es decir, como ya se dijo, en la serie potencial obtenida usando el HFT y el HVT, la expansión potencial está expresada en potencias de λ , y la expansión asintótica, está expresada en potencias decrecientes de $\lambda^{1/4}$. Si escogemos como nuestra variable $\lambda^{1/4}$, en lugar de λ , entonces el aproximante tendrá la expansión asintótica correcta, pero en este caso nos encontraríamos con muchas potencias indeseables, tales como $\lambda^{1/4}$, $\lambda^{1/2}$, $\lambda^{3/4}$, etc., que no aparecen en la expansión potencial de HF, lo que significa que muchos coeficientes indeseables en la serie de potencias del aproximante tendrán que ser tomados iguales a cero. Esto es lo que entendemos por baja eficiencia. Sin embargo, alta eficiencia significaría que la serie de potencias del aproximante tenga solamente términos con exponentes iguales a aquellos que aparecen en el análisis perturbativo. En resumen el escoger $\lambda^{1/4}$ como nuestra variable nos daría una serie potencial del aproximante eficiente.

Al utilizar el método de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos se deben reproducir las singularidades de la función exacta, por tanto, se deben introducir potencias enteras y potencias fraccionales de la variable λ en el aproximante a través de las funciones auxiliares convenientemente elegidas.

Para hacer una escogencia efectiva de las funciones auxiliares, conviene considerar que si queremos reproducir el comportamiento de la expansión asintótica dada en la expresión (64), debemos considerar cuatro funciones fraccionales

(división de polinomios de potencias enteras) y cuatro funciones de potencias no enteras (funciones auxiliares).

Los puntos de ramificación en el aproximante vienen de a pares, razón por la cual la escogencia de $\lambda^{1/4}$ como una de las funciones auxiliares no es conveniente. En dicho caso tendríamos un punto de ramificación inconveniente en $\lambda = 0$, ya que deseamos conocer el aproximante para $\lambda = 0$, y tendríamos un punto de ramificación correcto en el infinito.

Por esta razón el criterio de escogencia de las funciones auxiliares, para nuestro caso en estudio, debe considerar que el punto de ramificación en $\lambda = 0$ sea trasladado fuera de la región de interés ($\lambda > 0$). En este caso la función auxiliar más simple que podemos escoger es $(1 + \mu\lambda)^{1/4}$ con $\mu > 0$, siendo μ una constante a determinar. Ahora uno de los puntos de ramificación está en el infinito como se requiere y el otro está sobre el eje negativo de las λ , en el punto $\mu = -1/\lambda$, ya que siempre $\lambda \geq 0$ entonces dicho punto de ramificación está fuera de la región de interés. Por esta razón nuestro aproximante cuasi-fraccional deberá contener funciones auxiliares en potencias no enteras de $(1 + \mu\lambda)^{1/4}$.

Teniendo estos argumentos en cuenta se puede concluir que la forma más eficiente para el aproximante es

$$\tilde{E}_{100}^{(1)}(\lambda) = \left[f_1(\lambda) \frac{(p_0 + p_1 \lambda)}{1 + \mu \lambda} + f_2(\lambda) \frac{(P_0 + P_1 \lambda)}{1 + \mu \lambda} \right. \\ \left. f_3(\lambda) \frac{(q_0 + q_1 \lambda)}{1 + \mu \lambda} + f_4(\lambda) \frac{(Q_0 + Q_1 \lambda)}{1 + \mu \lambda} \right], \quad (66)$$

siendo las respectivas funciones auxiliares:

$$f_1(\lambda) = \sqrt{1 + \mu \lambda} \quad , \quad (67)$$

$$f_2(\lambda) = (1 + \mu \lambda)^{1/4} \quad , \quad (68)$$

$$f_3(\lambda) = 1 \quad , \quad (69)$$

$$f_4(\lambda) = (1 + \mu \lambda)^{-1/4} \quad . \quad (70)$$

El orden del aproximante viene dado por el grado del polinomio de mayor orden, en nuestro caso el mayor orden en la expresión (66) es uno, luego nuestro aproximante es de primer orden.

Todas las funciones fraccionales en el aproximante $\tilde{E}_{100}^{(1)}(\lambda)$ deben tener un denominador común con la finalidad de prevenir que surgan ecuaciones no lineales en el proceso de determinar los parámetros $p_0, P_0, p_1, P_1, q_0, Q_0, q_1, Q_1$.

El parámetro μ es un parámetro libre, que le da al aproximante la libertad de seguir la tendencia de cualquiera de las dos expansiones, asintótica o potencial en la región intermedia. Para μ grande el aproximante tiende a seguir la tendencia de la expansión potencial en la región intermedia.

Pudimos haber tomado $\mu = 1$, pero es muy útil dejarlo libre ya que el valor de éste se puede optimizar por medio de un proceso de minimización de la diferencia entre el aproximante cuasifraccional a dos puntos y la solución numérica de los autovalores de la ecuación de Schrödinger. Además, el dejar libre a μ nos permite evitar los defectos que son usuales en los aproximantes de Padé.

V.2.- COEFICIENTES DEL APROXIMANTE CUASIFRACCIONAL:

Para determinar los valores de los parámetros $p_0, P_0, p_1, P_1, q_0, Q_0, q_1, Q_1$ en el aproximante cuasifraccional dado por la ecuación (66), se debe considerar que los términos de la serie potencial y la expansión asintótica del aproximante cuasifraccional deben coincidir con los términos de la serie potencial y de la expansión asintótica, previamente calculadas en las expresiones (63) y (64).

La expansión potencial del aproximante cuasifraccional viene dada por

$$(1+\mu\lambda)\tilde{E}_{\text{Potencial}}^{(1)}(\lambda) = (1+\mu\lambda)^{1/2} (p_0 + p_1\lambda) + (1+\mu\lambda)^{1/4} (P_0 + P_1\lambda) + (q_0 + q_1\lambda) + (1+\mu\lambda)^{-1/4} (Q_0 + Q_1\lambda). \quad (71)$$

Expandiendo en serie de potencias de cada una de las funciones auxiliares, en la forma

$$(1+\mu\lambda)^{1/2} = 1 + \frac{\mu}{2}\lambda - \frac{\mu^2}{8}\lambda^2 + \frac{3\mu^3}{48}\lambda^3 - \dots, \quad (72)$$

$$(1+\mu\lambda)^{1/4} = 1 + \frac{\mu}{4}\lambda - \frac{3\mu^2}{32}\lambda^2 + \frac{7\mu^3}{128}\lambda^3 + \dots, \quad (73)$$

$$(1+\mu\lambda)^{-1/4} = 1 - \frac{\mu}{4}\lambda + \frac{5\mu^2}{32}\lambda^2 - \frac{15\mu^3}{128}\lambda^3 + \dots, \quad (74)$$

y sustituyendo en la expresión (71) obtenemos

$$(1+\mu\lambda)\tilde{E}_{\text{potencial}}^{(1)}(\lambda) = p_0 + \left(p_1 + \frac{\mu p_0}{2}\right)\lambda + \left(\frac{\mu p_1}{2} - \frac{\mu^2 p_0}{8}\right)\lambda^2 + \left(\frac{3\mu^3 p_0}{48} - \frac{\mu^2 p_1}{8}\right)\lambda^3 + \dots$$

$$\begin{aligned}
& + P_0 + \left(\frac{\mu P_0}{4} + P_1 \right) \lambda + \left(\frac{\mu P_1}{4} - \frac{3\mu^2 P_0}{32} \right) \lambda^2 + \left(\frac{7\mu^3 P_0}{128} - \frac{3\mu^2 P_1}{32} \right) \lambda^3 + \dots + q_0 + q_1 \lambda + \dots \\
& + Q_0 + \left(Q_1 - \frac{\mu Q_0}{4} \right) \lambda + \left(\frac{5\mu^2 Q_0}{32} - \frac{\mu Q_1}{4} \right) \lambda^2 + \left(\frac{5\mu^2 Q_1}{32} - \frac{15\mu^3 Q_0}{128} \right) \lambda^3 + \dots \quad (75)
\end{aligned}$$

Introduciendo la serie potencial $E_{100}^{(HF)}(\lambda)$ dada en la expresión (63), en

$\tilde{E}_{\text{Potencial}}^{(1)}(\lambda)$ obtenemos

$$(1 + \mu\lambda)E_{100}^{(HF)}(\lambda) = a_0 + (\mu a_0 + a_1)\lambda + (\mu a_1 + a_2)\lambda^2 + (\mu a_2 + a_3)\lambda^3 + \dots \quad (76)$$

Comparando los términos individuales con potencias $\lambda^0, \lambda^1, \lambda^2, \lambda^3, \dots$ en las expresiones (75) y (76) obtenemos

$$a_0 = p_0 + P_0 + q_0 + Q_0, \quad (77)$$

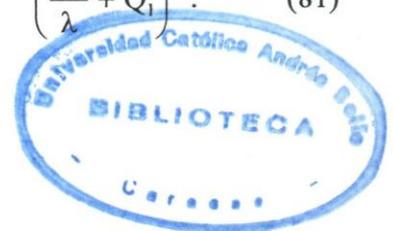
$$a_1 + \mu a_0 = \frac{\mu}{2} p_0 + \frac{\mu}{4} P_0 - \frac{\mu}{4} Q_0 + p_1 + P_1 + q_1 + Q_1, \quad (78)$$

$$a_2 + \mu a_1 = -\frac{\mu^2}{8} p_0 - \frac{3\mu^2}{32} P_0 + \frac{5\mu^2}{32} Q_0 + \frac{\mu}{2} p_1 + \frac{\mu}{4} P_1 - \frac{\mu}{4} Q_1, \quad (79)$$

$$a_3 + \mu a_2 = -\frac{3\mu^2}{48} p_0 - \frac{7\mu^3}{128} P_0 - \frac{15\mu^3}{128} Q_0 - \frac{\mu^2}{8} p_1 + \frac{3\mu^2}{32} P_1 - \frac{5\mu^2}{32} Q_1. \quad (80)$$

Consideremos ahora la expansión asintótica del aproximante la cual presenta la forma

$$\begin{aligned}
\left(1 + \frac{1}{\lambda}\right) \tilde{E}_{\text{Asintótica}}^{(1)}(\lambda) &= \sqrt{\mu} \lambda^{1/2} \left(1 + \frac{1}{\mu\lambda}\right)^{1/2} \left(\frac{p_0}{\lambda} + p_1\right) + \mu^{1/4} \lambda^{1/4} \left(1 + \frac{1}{\mu\lambda}\right)^{1/2} \left(\frac{P_0}{\lambda} + P_1\right) + \\
&+ \left(\frac{q_0}{\lambda} + q_1\right) + \frac{1}{\mu^{1/4} \lambda^{1/4}} \left(1 + \frac{1}{\mu\lambda}\right)^{-1/4} \left(\frac{Q_0}{\lambda} + Q_1\right). \quad (81)
\end{aligned}$$



Si expandimos en serie de potencias cada una de las expresiones asintóticas de las funciones auxiliares tenemos

$$\sqrt{\mu} \lambda^{1/2} \left(1 + \frac{1}{\mu \lambda}\right)^{1/2} = \sqrt{\mu} \lambda^{1/2} \left(1 + \frac{1}{2\mu \lambda} - \frac{1}{8\mu^2 \lambda^2} + \frac{3}{48\mu^3 \lambda^3} + \dots\right), \quad (82)$$

$$\mu^{1/4} \lambda^{1/4} \left(1 + \frac{1}{\mu \lambda}\right)^{1/4} = \mu^{1/4} \lambda^{1/4} \left(1 + \frac{1}{4\mu \lambda} - \frac{3}{32\mu^2 \lambda^2} + \frac{7}{128\mu^3 \lambda^3} - \dots\right), \quad (83)$$

$$\frac{1}{\mu^{1/4} \lambda^{1/4}} \left(1 + \frac{1}{\mu \lambda}\right)^{-1/4} = \frac{1}{\mu^{1/4} \lambda^{1/4}} \left(1 - \frac{1}{4\mu \lambda} + \frac{5}{32\mu^2 \lambda^2} - \frac{15}{128\mu^3 \lambda^3} + \dots\right). \quad (84)$$

Sustituyendo las expresiones (82)-(84) en (81) obtenemos:

$$\left(\mu + \frac{1}{\lambda}\right) \tilde{E}_{\text{Asintótico}}^{(1)}(\lambda) = \mu^{1/2} p_1 \lambda^{1/2} + \mu^{1/4} P_1 \lambda^{1/4} + q_1 + \frac{Q_1}{\mu^{1/4} \lambda^{1/4}} + \dots \quad (85)$$

Igualando $\tilde{E}_{\text{Asintótico}}^{(1)}(\lambda)$ con $E_{000}^{(RS)}(\lambda)$ dado en la expresión (64), hallamos

que

$$\left(\mu + \frac{1}{\lambda}\right) E_{100}^{(RS)}(\lambda) = \mu b_0 \lambda^{1/2} + \mu b_1 \lambda^{1/4} + \mu b_2 + \mu b_3 \lambda^{-1/4} + \dots \quad (86)$$

Comparando los términos individuales con potencias $\lambda^{1/2}, \lambda^{1/4}, \lambda^0, \lambda^{-1/4}, \dots$,

llegamos al siguiente sistema de ecuaciones

$$p_1 = \sqrt{\mu} b_0, \quad (87)$$

$$P_1 = \mu^{3/4} b_1, \quad (88)$$

$$q_1 = \mu b_2, \quad (89)$$

$$Q_1 = \mu^{5/4} b_3. \quad (90)$$

En nuestro análisis hemos usado el mismo número de ecuaciones de la serie potencial que de la serie asintótica, encontrando que las expresiones (77)-(80) y (87)-(90) determinan un sistema de 8 ecuaciones lineales con 8 incógnitas, las cuales serán determinadas como funciones del parámetro libre μ .

No existe ningún método establecido para determinar los parámetros libres, ya que los métodos conocidos no pueden aplicarse, en general, para todos los aproximantes cuasifraccionales a determinar, pues ya sólo el hecho de definir la función que se ha de minimizar resulta problemático.

En nuestro caso en particular, para determinar el valor aproximado que optimice el valor del parámetro libre μ , el cual denotaremos por $\mu_{\text{óptimo}}$, calculamos numéricamente el autovalor de la energía $E_{100}(\lambda)$ para un valor del parámetro de acoplamiento λ . El valor de μ es determinado por la condición de que el aproximante cuasifraccional a dos puntos $\tilde{E}_{100}^{(1)}(\lambda)$ sea igual a $E_{100}(\lambda)$.

El valor de λ a ser considerado, que denotaremos por λ_b , debe ser un valor intermedio en la región donde la serie potencial y la serie asintótica no son precisas. Este punto intermedio actúa como un puente entre ambas expansiones.

Para determinar el autovalor de la energía para este punto intermedio λ_b se procedió a integrar numéricamente la ecuación radial de Schrödinger

$$-\frac{1}{2r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + V(r) R(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2} R(r) = E R(r) , \quad (91)$$

usando el método de Runge-Kutta (RK) a cuarto orden, donde l es el número cuántico asociado al momentum angular, $V(r)$ es el potencial radial de

confinamiento definido por $V(r) = -\frac{1}{r} + gr + \lambda r^2$ y E es el autovalor de la energía. En nuestro caso sólo deseamos estudiar el estado base, por lo tanto se tomó $l = 0$. En este método las condiciones iniciales se obtienen al expandir en serie de potencias a la función $R(r)$, y el autovalor de la energía se introduce como una variable libre a ajustar. La integración se realiza en la variable λ y el autovalor es aquel que logra mantener finita la función de onda, con el mayor número de pasos de integración. El paso de integración se tomó del orden de $\Delta h = 0.01$, obteniendo así cuatro dígitos de precisión, lo cual es más que suficiente para todos los fines teóricos y experimentales de los cuales se tiene conocimiento.

Para simplificar el análisis de los resultados renormalizamos nuestro parámetro de acoplamiento λ , por el parámetro $\lambda' = \lambda / (1 + \lambda)$, el cual mapea los valores de λ , válidos en la región entre $[0, \infty)$, en el intervalo comprendido entre $[0, 1)$.

Una vez determinado el autovalor de la energía para el valor de λ'_b , se determinó el valor de $\mu_{\text{óptimo}}$ usando el método de Newton-Raphson.

CAPITULO VI

RESULTADOS

VI.1.- RESULTADOS

El valor del punto intermedio λ'_b considerado para determinar el autovalor de la energía fue $\lambda'_b = 0.1$ y se tomó $g = 0.1$. El valor de $\mu_{\text{óptimo}}$ obtenido, usando el método de Newton-Raphson, fue de $\mu_{\text{óptimo}} = 174.1192$. Introduciendo este valor de $\mu_{\text{óptimo}}$ en los sistemas de ecuaciones (77)-(80) y (87)-(90), se obtuvieron los parámetros del aproximante, los cuales vienen dados por:

$$\begin{aligned} p_0 &= -0.0680 & , & & P_0 &= -0.6620 & , & & q_0 &= -0.287 & , & & Q_0 &= -0.082 \\ p_1 &= 27.9917 & , & & P_1 &= -64.320 & , & & q_1 &= -27.464 & , & & Q_1 &= 41.243 \end{aligned}$$

Para evaluar la exactitud del aproximante cuasifracional propuesto es necesario comparar con sus correspondientes soluciones numéricas, obtenidas al integrar la ecuación de Schrödinger, para diversos valores de λ' , como valores de referencia.

En la figura 1 se muestra la energía adimensional como función de la constante de acoplamiento λ para los resultados obtenidos usando integración numérica de la ecuación de Schrödinger, la serie potencial $E_{100}^{(HF)}(\lambda)$ y la serie asintótica $E_{000}^{(RS)}(\lambda)$.

La Figura 2, presenta la energía adimensional como una función de la constante de acoplamiento renormalizada λ' , para el aproximante cuasifraccional a dos puntos $\tilde{E}_{100}^{(1)}(\lambda')$, obtenida en la ecuación (66), y el aproximante analítico obtenido usando el método $1/N$ modificado (ver apéndice A).

La Figura 3 ilustra el error absoluto en función de la constante de acoplamiento renormalizada λ' , para el aproximante cuasifraccional a dos puntos y para el método $1/N$ modificado.

VI.2.- FIGURAS:

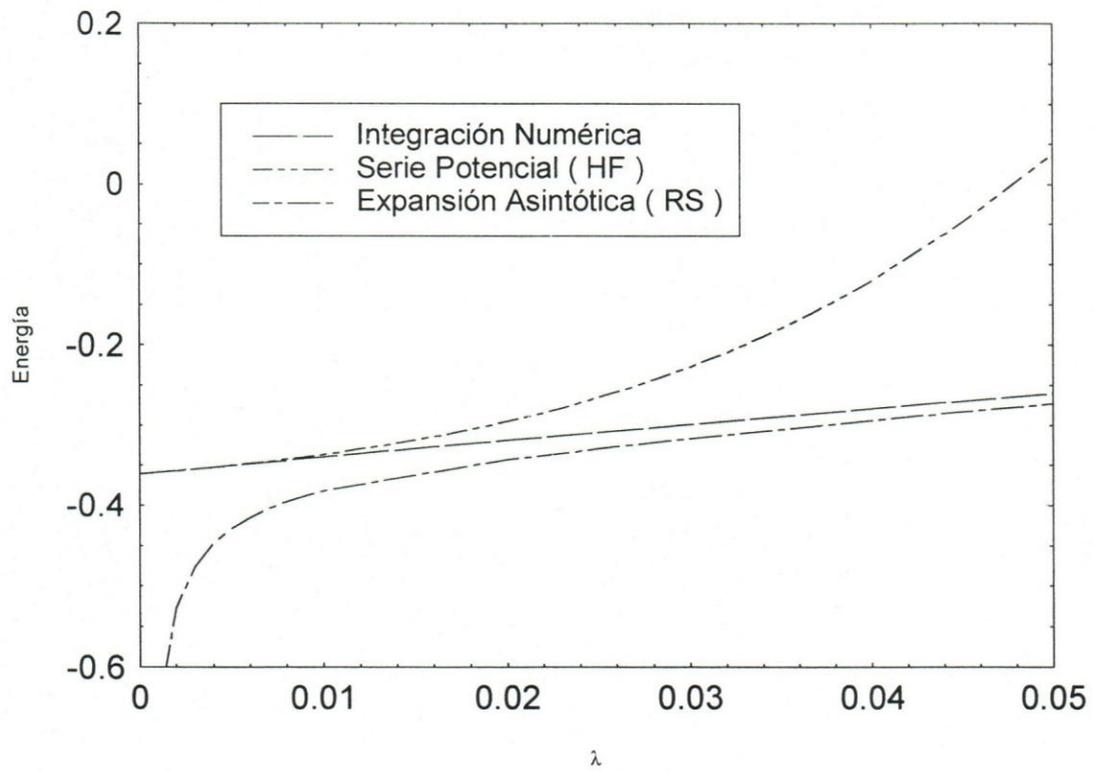
FIGURA 1: Energía en función del parámetro de acoplamiento λ .

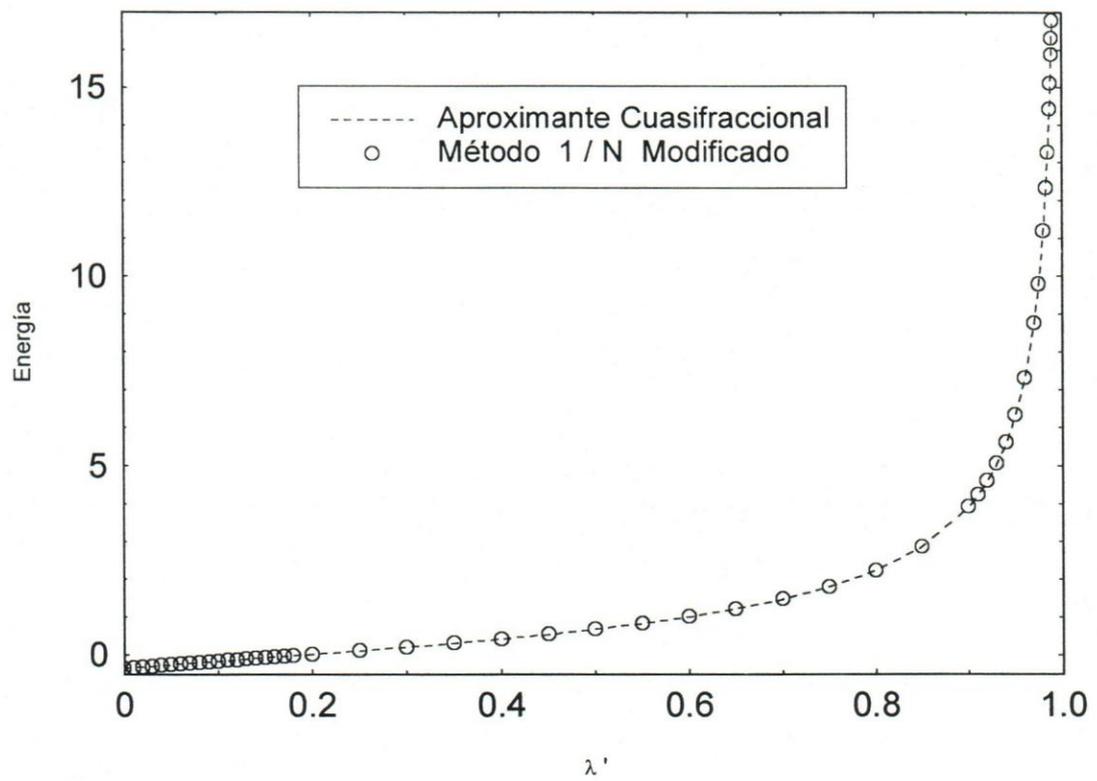
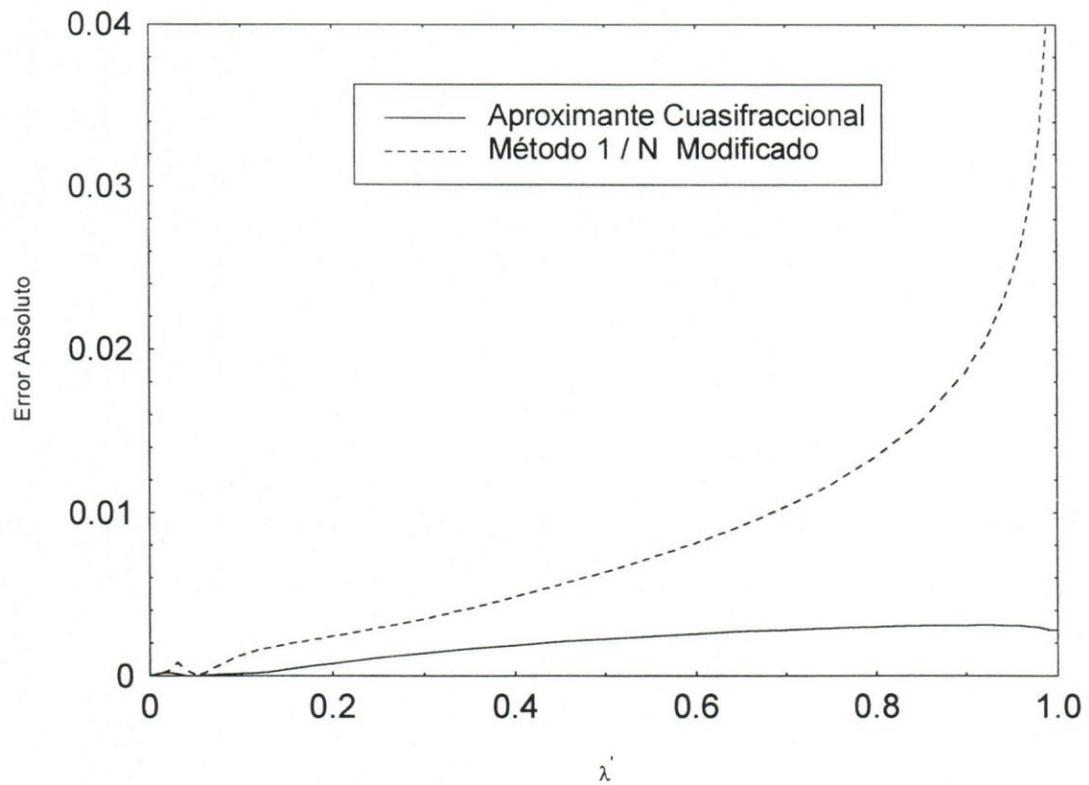
FIGURA 2: Energía como una función de la constante de acoplamiento renormalizada λ' 

FIGURA 3: Error absoluto en función de la constante de acoplamiento renormalizada λ' 

VI.3.- ANALISIS DE RESULTADOS:

Al analizar la Figura 1 encontramos que la serie potencial $E_{100}^{(HF)}(\lambda)$ es convergente alrededor del origen para valores pequeños de λ , y por lo tanto esta serie cumple con los requisitos necesarios para obtener la información alrededor del origen. En contraste, la serie asintótica $E_{000}^{(RS)}(\lambda)$ difiere notablemente de los resultados, para valores pequeños de λ , pero es válida para valores intermedios y grandes de λ .

La Figura 2, ilustra que nuestro aproximante cuasifracional al igual que el obtenido usando el método $1/N$ es válido para todo valor de la constante de acoplamiento renormalizada λ' . Esta figura no nos dice cuan precisos es cada uno de los métodos con respecto a los valores obtenidos por integración numérica.

En la Figura 3 encontramos que nuestro aproximante cuasifracional a primer orden presenta una precisión de más de cuatro dígitos exactos para valores de $\lambda' < 0.25$ y para valores de λ' cercanos a 1, es donde encontramos el mayor error absoluto. Sin embargo, aún en esta región nuestro aproximante es notablemente más preciso que el aproximante obtenido usando el método $1/N$ modificado.

En resumen, podemos afirmar que la precisión del aproximante cuasifracional a dos puntos, para todo valor de λ' , es superior a la obtenida con el método $1/N$ modificado, haciendose más pronunciada esta diferencia para valores grandes del parámetro de acoplamiento.

CAPITULO VII

CONCLUSIONES

En el presente trabajo se obtuvieron expresiones analíticas aproximadas, usando la técnica de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos, para la energía del estado base de un átomo hidrogénico perturbado por potenciales polinómicos radiales con simetría esférica de la forma $V(r) = -\frac{Z}{r} + gr + \lambda r^2$.

El método de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos es una técnica que permite obtener expresiones analíticas aproximadas para autovalores en función de los parámetros de acoplamiento del potencial, con una precisión superior a la de otros métodos conocidos y valida en regiones donde otros métodos fallan.

El método de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos, en función de un solo parámetro libre, necesita dos expansiones, una alrededor de un punto, para valores pequeños del parámetro de acoplamiento, y otra alrededor de otro punto, para valores grandes del parámetro de acoplamiento. La idea fundamental de dichos aproximantes es servir de puente, para construir una expansión analítica que recupere la información en ambos puntos de expansión, y que además, sea valida con un buen grado de precisión, en todos los puntos intermedios en la región de estudio, donde las expansiones previamente consideradas divergen.

La precisión de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos depende fundamentalmente de la información contenida en los coeficientes de las expansiones que se utilizan para obtenerlos, pero no dependen del radio de convergencia de estas, encontrándose que aún en los casos en que dichas expansiones tengan radio de convergencia cero se pueden obtener aproximantes muy precisos.

Las ventajas de obtener una solución analítica aproximada en lugar de la solución numérica son:

- 1.- Es sencillo ver como la solución depende de los diversos parámetros de acoplamiento del potencial.
- 2.- Al observar el comportamiento de las funciones auxiliares se pueden identificar claramente las singularidades de la solución exacta.
- 3.- Es fácil incorporar la solución en otras expresiones que involucren la cantidad calculada.

Con la finalidad de obtener un aproximante con un solo parámetro libre se fijó el valor de g dejando a λ como el parámetro de acoplamiento libre. El valor usado para g , fue $g = 0.1$, con la finalidad de ilustrar el método usado. Para pequeños valores del parámetro de acoplamiento λ , se realizó una expansión en series de potencias a los autovalores de la energía, usando el teorema de Hellman-Feynman y el teorema del hypervirial. Para valores intermedios y grandes de λ se obtuvo una expansión asintótica usando el método de Rayleigh-Schrödinger.

Los aproximantes así calculados recuperan los valores de la energía del estado base, para los valores extremos de λ , expresados en la serie potencial y la expansión asintótica.

Los resultados obtenidos muestran que también en este caso los aproximantes cuasifraccionales permiten obtener resultados mucho más precisos que aquellos obtenidos usando el método $1/N$ modificado. La precisión de los resultados en el peor de los casos es superior a tres cifras decimales exactas.

Si se desea obtener aproximantes más precisos, se deberá incrementar el esfuerzo de cálculo de la serie potencial y la expansión asintótica, para obtener así correcciones a mayor orden. Sin embargo en todos los casos analizados en el presente trabajo, usando solamente aproximantes a primer orden, se pudieron obtener resultados cuyos ordenes de precisión son suficientemente buenos para todas las aplicaciones experimentales conocidas.

Este hecho nos permite afirmar que la técnica de los aproximantes cuasifraccionales a dos puntos es una herramienta útil y muy precisa en el cálculo de los autovalores, en forma aproximada, para sistemas hidrogénicos en presencia de potenciales polinómicos radiales con simetría esférica.

APENDICE A

METODO 1/N MODIFICADO PARA POTENCIALES CON SIMETRIA ESFERICA

Expansiones para valores grandes del número de dimensiones espaciales "N", han sido aplicadas frecuentemente como una alternativa a la teoría de perturbaciones en la Mecánica Cuántica No Relativista, en especial para aquellos potenciales en los cuales no se conoce una solución exacta a la ecuación de Schrödinger. Estas no son expansiones en una constante de acoplamiento, por tanto no es un método perturbativo, sino que cada coeficiente en la expansión es una función de las constantes de acoplamiento.

El método 1/N modificado ha sido aplicado a una gran variedad de casos en los cuales están involucrados potenciales con simetría esférica, tales como el potencial de Yukawa[22,23], el potencial de Hulthén [28] y otros[23].

Para entender dicho método consideremos las coordenadas de un punto arbitrario P en N dimensiones espaciales denotadas por $(r, \alpha_1, \dots, \alpha_{N-1})$, donde r es la coordenada radial y α_i ($i = 1, \dots, N-1$) son las coordenadas angulares. La ecuación de Schrödinger adimensional, independientemente del tiempo, en N dimensiones espaciales es

$$\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{(N-1)}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2} \right) + V(r, \alpha_1, \dots, \alpha_{N-1}) \right) \Psi(r, \alpha_j) = E \Psi(r, \alpha_j), \quad (A1)$$

donde L^2 es la generalización N-dimensional del operador momentum angular. Este depende solamente de las coordenadas angulares α_j . Las autofunciones de L^2 son los polinomios de Gegenbauer $T_l(\alpha_j)$ tal que

$$L^2 T_l(\alpha_j) = l(l + N - 2) T_l(\alpha_j). \quad (A2)$$

Si el polinomio presenta simetría esférica, es decir $V = V(r)$, podemos asumir que $\Psi(r, \alpha_j) = \psi(r) T_l(\alpha_j)$, donde $\psi(r)$ satisface la ecuación radial de Schrödinger N dimensional

$$\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l + N - 2)}{2r^2} + V(r) \right) \psi(r) = E \psi(r). \quad (A3)$$

Si definimos $\phi(r) = \psi(r) r^{-(N-1)/2}$, la ecuación anterior adopta la forma

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) \right) \phi(r) = E \phi(r), \quad (A4)$$

donde $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{(N+2l-3)(N+2l-1)}{8r^2}$ es el potencial efectivo.

Denotando por $k = N+2l$, encontramos que la ecuación (A4) puede expresarse como

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{(k-3)(k-1)}{8r^2} \right) \phi(r) = E \phi(r). \quad (A5)$$

En el método 1/N propuesto inicialmente por U. Sukhatme y T. Imbo [26] el parámetro de expansión es 1/k. La aplicación de este método fue extensivamente

estudiada en potenciales de la forma $V(r) = Ar^v$, motivados fundamentalmente en la existencia de soluciones exactas para “ $v = -1$ (potencial de Coulomb)” y “ $v = 2$ (oscilador armónico)”. Sin embargo, T. Imbo, A. Pagnamenta y U. Sukhatme[27] mostraron que el método $1/N$ modificado daba mejores resultados. En este nuevo método el parámetro de expansión es $1/\bar{k}$, con $\bar{k} = k - a$, siendo a un grado de libertad adicional que se introdujo para obtener resultados altamente precisos al compararlos con los resultados conocidos para el oscilador armónico y para el caso Coulombiano.

Además, al introducir un grado de libertad adicional se

- 1.- simplifican los cálculos
- 2.- mejora la convergencia de las expansiones, por esta razón algunos autores se refieren a este método como un método de convergencia rápida[31].
- 3.- convierte la solución al problema de determinar los autovalores de la energía en un proceso algorítmico.

En términos de esta nueva variable adicional la ecuación (A5) se puede reescribir como

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\bar{k}^2(1-(1-a)/\bar{k})(1-(3-a)/\bar{k})}{8r^2} + V(r) \right) \phi(r) = E \phi(r) . \quad (A6)$$

El método $1/N$ modificado consiste entonces en resolver la ecuación (A6) sistemáticamente en términos del parámetro de expansión $1/\bar{k}$. La contribución

principal a la energía (leading term), para valores grandes de \bar{k} , se obtiene a partir del potencial efectivo

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{1}{8r^2} + \frac{V(r)}{\bar{k}^2}. \quad (\text{A7})$$

I. E. Avron et al [66], mostraron que en el límite de \bar{k} grande, la autofunción $\phi(r)$ tiene un pico alrededor del mínimo r_0 del potencial efectivo y todo el espectro de autovalores se concentra alrededor del valor $V_{\text{eff}}(r_0)$.

Asumiendo que $V(r)$ se comporta lo suficientemente bien como para que $V_{\text{eff}}(r)$ tenga un mínimo y además su estado base esté bien definido entonces la siguiente relación es válida $\left. \frac{d}{dr} V_{\text{eff}}(r) \right|_{r=r_0} = 0$, obteniendo así

$$4r_0^3 \frac{dV(r=r_0)}{dr} = \bar{k}^2. \quad (\text{A8})$$

Si corremos nuestro origen de coordenadas a $r = r_0$, es conveniente definir

$$x = \bar{k}^{1/2} \frac{(r - r_0)}{r_0} \quad (\text{A9})$$

o lo que es lo mismo

$$r = r_0 \left(1 + \frac{x}{\bar{k}^{1/2}} \right) \quad (\text{A10})$$

tal que

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{\bar{k}}{r_0^2} \frac{d^2}{dr^2}. \quad (\text{A11})$$

Sustituyendo en la ecuación (A6) y expandiendo alrededor de $x = 0$ en potencias de x se obtiene

$$\left\{ \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \bar{k} \left(1 + \frac{3x^2}{\bar{k}} - \frac{4x^3}{\bar{k}^{3/2}} + \frac{5x^4}{\bar{k}^2} - \dots \right) + \left(\frac{(1-a)(3-a)}{8\bar{k}} - \frac{(2-a)}{4} \right) \left(1 - \frac{2x}{\bar{k}^{1/2}} + \frac{3x^2}{\bar{k}} - \dots \right) + \frac{r_0^2}{\bar{k}} \left(V(r_0) + \frac{\dot{V}(r_0) r_0^2 x^2}{2\bar{k}} + \frac{\ddot{V}(r_0) r_0^3 x^3}{2\bar{k}^{3/2}} + \dots \right) \right\} \phi(x) = \frac{E r_0^2}{\bar{k}} \phi(x), \quad (\text{A12})$$

si hacemos las siguientes identificaciones:

$$\omega = \frac{1}{2} \left(3 + \frac{r_0 \ddot{V}(r_0)}{\dot{V}(r_0)} \right)^{1/2}, \quad g = \frac{1}{\bar{k}}, \quad \lambda = \frac{E r_0^2}{\bar{k}}, \quad (\text{A13})$$

$$\varepsilon_0 = \frac{\bar{k}}{8} - \frac{(2-a)}{4} + \frac{(1-a)(3-a)}{8\bar{k}} + \frac{r_0^2 V(r_0)}{\bar{k}}, \quad (\text{A14})$$

$$\varepsilon_1 = \frac{(2-a)}{2}, \quad (\text{A15})$$

$$\varepsilon_2 = -\frac{3(2-a)}{4}, \quad (\text{A16})$$

$$\varepsilon_3 = -\frac{1}{2} + \frac{r_0^5 \ddot{V}(r_0)}{6\bar{k}^2}, \quad (\text{A17})$$

$$\varepsilon_4 = \frac{5}{8} + \frac{r_0^6 V^{IV}(r_0)}{24\bar{k}^2}, \quad (\text{A18})$$

$$\delta_1 = -\frac{(1-a)(3-a)}{4}, \quad (\text{A19})$$

$$\delta_2 = \frac{3(1-a)(3-a)}{8}, \quad (\text{A20})$$

$$\delta_3 = (2-a) , \quad (A21)$$

$$\delta_4 = -\frac{5(2-a)}{4} , \quad (A22)$$

$$\delta_5 = -\frac{3}{4} + \frac{r_0^7 V^V(r_0)}{120\bar{k}^2} , \quad (A23)$$

$$\delta_6 = \frac{7}{8} + \frac{r_0^8 V^{VI}(r_0)}{720\bar{k}^2} , \quad (A24)$$

obtenemos finalmente, que la ecuación de Schrödinger (A12) se puede reescribir de la forma

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 + \varepsilon_0 + V(x) \right) \phi(x) = E \phi(x) , \quad (A25)$$

en donde el término $V(x)$ viene representado por

$$V(x) = g^{1/2} (\varepsilon_1 x + \varepsilon_3 x^3) + g (\varepsilon_2 x^2 + \varepsilon_4 x^4) + g^{3/2} (\delta_1 x + \delta_3 x^3 + \delta_5 x^5) + g^2 (\delta_2 x^2 + \delta_4 x^4 + \delta_6 x^6) . \quad (A26)$$

Como podemos ver el potencial no perturbativo corresponde al de un oscilador armónico simple, cuyas autovalores y autofunciones son conocidas y tienen la forma

$$E_n^0 = \varepsilon_0 + \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega , \quad (A27)$$

$$\phi_n^0(x) = \left(\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\omega x^2 / 2} H_n(\sqrt{\omega} x) . \quad (A28)$$

Para obtener la solución aproximada a la ecuación de Schrödinger de la ecuación (A25), podemos utilizar la teoría de perturbaciones clásica de Rayleigh-Schrödinger. Las correcciones a primer y segundo orden, $E_n^{(1)}$ y $E_n^{(2)}$, de la energía

no perturbada $E_n^{(0)}$, suelen ser de uso muy común en los textos de Mecánica Cuántica, sin embargo las correcciones a tercer y cuarto orden, $E_n^{(3)}$ y $E_n^{(4)}$, aunque son fáciles de derivar, no son tan fáciles de ubicar en la literatura, siendo estas

$$E_n^{(1)} = V_{nn} \quad (A29)$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{i \neq n} \frac{V_{ni} V_{in}}{E_{ni}} \quad (A30)$$

$$E_n^{(3)} = \sum_{i,j \neq n} \frac{V_{ni} V_{ij} V_{jn}}{E_{ni} E_{nj}} - V_{nn} \sum_{i \neq n} \frac{V_{ni} V_{in}}{(E_{ni})^2} \quad (A31)$$

$$E_n^{(4)} = \sum_{i,j,k \neq n} \frac{V_{ni} V_{ij} V_{jk} V_{kn}}{E_{ni} E_{nj} E_{nk}} - \sum_{i,j \neq n} \frac{V_{ni} (V_{in} V_{nj} + 2 V_{nn} V_{ij}) V_{jn}}{(E_{ni})^2 E_{nj}} + |V_{nn}|^2 \sum_{i \neq n} \frac{V_{ni} V_{in}}{(E_{ni})^3} \quad (A32)$$

en donde $E_{nj} \equiv E_n^{(0)} - E_n^{(j)}$ y además $V_{ij} \equiv \langle i, l, m | V(r) | j, l', m' \rangle$,

obteniendo así $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + E_n^{(3)} + E_n^{(4)} + \dots$. Los cálculos son

largos y tediosos pero directos en principio. Los resultados son

$$E_{n,1} = \left(\frac{\bar{k}}{r_0}\right)^2 \left(\frac{1}{8} + \frac{r_0^2 V(r_0)}{\bar{k}^2} + \left(\left(n + \frac{1}{2}\right) \omega - \frac{(2-a)}{4} \right) \frac{\gamma^{(1)}}{\bar{k}^2} + \frac{\gamma^{(2)}}{\bar{k}^3} + O\left(\frac{1}{\bar{k}^4}\right) + \dots \right) \quad (A33)$$

donde

$$\gamma^{(1)} = \frac{(1-a)(3-a)}{8} + (1+2n) \tilde{\varepsilon}_2 + 3(1+2n+2n^2) \tilde{\varepsilon}_4 - \frac{1}{\omega} (\tilde{\varepsilon}_1^2 + 6(1+2n) \tilde{\varepsilon}_1 \tilde{\varepsilon}_3 + (11+30n+30n^2) \tilde{\varepsilon}_3^2) \quad (A34)$$

$$\begin{aligned} \gamma^{(2)} = & (1+2n) \tilde{\delta}_2 + 3(1+2n+2n^2) \tilde{\delta}_4 + 5(3+8n+6n^2+4n^3) \tilde{\delta}_6 - \\ & \frac{1}{\omega} \left[(1+2n) \tilde{\varepsilon}_2^2 + 12(1+2n+2n^2) \tilde{\varepsilon}_2 \tilde{\varepsilon}_4 + 2(21+59n+51n^2+34n^3) \tilde{\varepsilon}_4^2 + \right. \\ & 2 \tilde{\varepsilon}_1 \tilde{\delta}_1 + 6(1+2n) \tilde{\varepsilon}_1 \tilde{\delta}_3 + 30(1+2n+2n^2) \tilde{\varepsilon}_1 \tilde{\delta}_5 + 6(1+2n) \tilde{\varepsilon}_3 \tilde{\delta}_1 + \\ & \left. 2(11+30n+30n^2) \tilde{\varepsilon}_3 \tilde{\delta}_3 + 10(13+40n+42n^2+28n^3) \tilde{\varepsilon}_3 \tilde{\delta}_5 \right] + \\ & \frac{1}{\omega^2} \left[4 \tilde{\varepsilon}_1^2 \tilde{\varepsilon}_2 + 36(1+2n) \tilde{\varepsilon}_1 \tilde{\varepsilon}_2 \tilde{\varepsilon}_3 + 8(11+30n+30n^2) \tilde{\varepsilon}_2 \tilde{\varepsilon}_3^2 + \right. \\ & 24(1+2n) \tilde{\varepsilon}_1^2 \tilde{\varepsilon}_4 + 8(31+78n+78n^2) \tilde{\varepsilon}_1 \tilde{\varepsilon}_3 \tilde{\varepsilon}_4 + 12(57+189n+225n^2 + \\ & \left. 150n^3) \tilde{\varepsilon}_3^2 \tilde{\varepsilon}_4 \right] - \frac{1}{\omega^3} \left[8 \tilde{\varepsilon}_1^3 \tilde{\varepsilon}_3 + 108(1+2n) \tilde{\varepsilon}_1^2 \tilde{\varepsilon}_2^2 + \right. \\ & \left. 48(11+30n+30n^2) \tilde{\varepsilon}_3^3 \tilde{\varepsilon}_1 + 30(31+109n+141n^2+94n^3) \tilde{\varepsilon}_3^4 \right] \quad (A35) \end{aligned}$$

con

$$\tilde{\varepsilon}_j = \frac{\varepsilon_j}{(2\omega)^{j/2}} \quad ; \quad \tilde{\delta}_j = \frac{\delta_j}{(2\omega)^{j/2}} \quad ; \quad (j=1, 2, \dots) \quad (A36)$$

Sustituyendo las anteriores expresiones en la ecuación (A33) obtenemos una expresión para el método 1/N modificado para los autovalores de la energía en términos de r_0 , \bar{k} y a . Como podemos observar la principal contribución a la energía (Leading Term) es $\bar{k}^2 V_{\text{eff}}(r)$, la siguiente contribución es del orden de

\bar{k} y viene dada por $\frac{\bar{k}}{r_0^2} \left(\left(n + \frac{1}{2} \right) \omega - \frac{(2-a)}{4} \right)$. El parámetro libre "a" se

escoge para que este término de una contribución nula. U. Sukhatme y T. Imbo [26] compararon los resultados obtenidos usando el método 1/N modificado con los resultados analíticos exactos clásicamente conocidos del oscilador armónico y del átomo de hidrógeno, encontrando que si se hacia cero dicho término se podían obtener resultados altamente satisfactorios en cada uno de los casos. Entonces se tiene

$$a = 2 - 2(2n + 1)\omega \quad (A37)$$

Además, usando las expresiones (A8), (A13) y (A37) podemos obtener una expresión que explícitamente nos permite hallar el valor de r_0 , usando el método de ensayo y error, y la cual tiene la forma

$$N + 2l - 2 + (2n + 1) \left[3 + \frac{r_0 \ddot{V}(r_0)}{\dot{V}(r_0)} \right]^{1/2} = \left[4r_0^3 \dot{V}(r_0) \right]^{1/2} \quad (A38)$$

es importante notar que el valor de r_0 depende del número cuántico radial n y del número cuántico angular l . Una vez determinados todos los parámetros anteriores, los autovalores de la energía vendrán dados por

$$E_{n,l} = \left(\frac{\bar{k}}{r_0} \right)^2 \left(\frac{1}{8} + \frac{r_0^2 V(r_0)}{\bar{k}^2} + \frac{\gamma^{(1)}}{\bar{k}^2} + \frac{\gamma^{(2)}}{\bar{k}^3} + O\left(\frac{1}{\bar{k}^4}\right) + \dots \right) \quad (A39)$$

Este método ha demostrado ser una de las herramientas más útiles en el análisis de los autovalores de la energía para aquellos sistemas en los cuales no se conoce la solución exacta, y siendo además el método más usado en el área. Los resultados obtenidos en la mayoría de los casos en la literatura [21-27] indican

claramente que cuanto más grande es el número cuántico radial " n " mayor es la precisión de estos, y que para aquellos casos en los cuales se analiza el estado base, en especial para valores grandes de las constantes de acoplamiento en el potencial perturbativo, más grande se hace la diferencia con el resultado exacto.

A continuación se presenta un programa, el cual permite generar la expansión a los autovalores de la energía, para el caso del potencial $V(r) = -1 / r + g r + \lambda r^2$, usando la teoría del método 1/N modificado. El presente programa fue elaborado en GWBasic.

```

1  REM " PROGRAMA 1/N.BAS "
2  CLS
5  H = .00001
6  DIM DELTAP(92)
9  DIM G(92)
10 OPEN "DP1SN.DAT" FOR INPUT AS #1
11 OPEN "DP1SN2.DAT" FOR OUTPUT AS #2
12 OPEN "INF1SN.DAT" FOR OUTPUT AS #3
14 C = 0
15 WHILE NOT EOF(1)
16 INPUT #1, DELTAP(C)
17 PRINT "DELTAPRIMA = "; DELTAP(C)
18 G1 = 0
20 G(C) = DELTAP(C) / (1 - DELTAP(C))
21 G2 = G(C)
30 REM ***** CALCULO DE R0 *****
40 R0 = 0
50 A1 = 1 + (3 * G1 * (R0 ^ 2)) + (8 * G2 * (R0 ^ 3))
60 A2 = 1 + (G1 * (R0 ^ 2)) + (2 * G2 * (R0 ^ 3))
70 A3 = R0 + (G1 * (R0 ^ 3)) + (2 * G2 * (R0 ^ 4))
80 TERM1 = 1 + SQR(A1 / A2)
90 TERM2 = SQR(4 * A3)
100 REST = TERM1 - TERM2
110 DIF = ABS(REST)
120 IF DIF < .0001 THEN GOTO 160
125 IF R0 > 2 THEN GOTO 800
130 R0 = R0 + H
140 GOTO 50
160 REM ***** CALCULO DE LOS PARAMETROS FUNDAMENTALES *****
170 W = (.5) * SQR(A1 / A2)
180 A = 2 * (1 - W)

```

```

190 K2 = 4 * A3
200 K = SQR(K2)
210 E1 = (2 - A) / (2 * SQR(2 * W))
220 E2 = (3 * (A - 2)) / (8 * W)
230 E3 = ((1 / (4 * A2)) - .5) / (SQR(2 * W) ^ 3)
240 E4 = ((5 / 8) - (1 / (4 * A2))) / (4 * (W ^ 2))
250 D1 = ((A - 1) * (3 - A)) / (4 * SQR(2 * W))
260 D2 = (3 * (1 - A) * (3 - A)) / (16 * W)
270 D3 = (2 - A) / (SQR(2 * W) ^ 3)
280 D4 = (5 * (A - 2)) / (16 * (W ^ 2))
290 D5 = ((1 / (4 * A2)) - (3 / 4)) / (SQR(2 * W) ^ 5)
300 D6 = ((7 / 8) - (1 / (4 * A2))) / (8 * (W ^ 3))
310 REM ***** CALCULO DE GAMMA1 *****
320 G11 = ((1 - A) * (3 - A)) / 8
330 G12 = E2
340 G13 = 3 * E4
350 G14 = E1 ^ 2
360 G15 = 6 * E1 * E3
370 G16 = 11 * (E3 ^ 2)
380 GAMMA1 = (G11 + G12 + G13) - ((G14 + G15 + G16) / W)
390 REM ***** CALCULO DE GAMMA2 *****
400 G21 = D2
410 G22 = 3 * D4
420 G23 = 15 * D6
430 TG21 = G21 + G22 + G23
440 G24 = E2 ^ 2
450 G25 = 12 * E2 * E4
460 G26 = 42 * (E4 ^ 2)
470 G27 = 2 * E1 * D1
480 G28 = 6 * E1 * D3
490 G29 = 30 * E1 * D5
500 G210 = 6 * E3 * D1
510 G211 = 22 * E3 * D3
520 G212 = 130 * E3 * D5
530 TG22 = ((G24 + G25 + G26 + G27 + G28 + G29 + G210 + G211 + G212) / W)
540 G213 = 4 * (E1 ^ 2) * E2
550 G214 = 36 * E1 * E2 * E3
560 G215 = 88 * E2 * (E3 ^ 2)
570 G216 = 24 * (E1 ^ 2) * E4
580 G217 = 248 * E1 * E3 * E4
590 G218 = 684 * (E3 ^ 2) * E4
600 TG23 = ((G213 + G214 + G215 + G216 + G217 + G218) / (W ^ 2))
610 G219 = 8 * (E1 ^ 3) * E3
620 G220 = 108 * (E1 ^ 2) * (E3 ^ 2)
630 G221 = 528 * E1 * (E3 ^ 3)
640 G222 = 930 * (E3 ^ 4)
650 TG24 = ((G219 + G220 + G221 + G222) / (W ^ 3))
660 GAMMA2 = TG21 - TG22 + TG23 - TG24
670 REM ***** CALCULO DE LA ENERGIA *****
680 A4 = (G1 * (R0 ^ 2)) + (G2 * (R0 ^ 3)) - 1
690 FC = K2 / (R0 ^ 2)

```

```
700 EFIRST = FC * ((1 / 8) + (A4 / (4 * A2)))
710 ESECOND = GAMMA1 / (R0 ^ 2)
715 ESEGUNDO = EFIRST + ESECOND
720 ETHIRD = FC * (GAMMA2 / (K ^ 3))
730 ENERGY = EFIRST + ESECOND + ETHIRD
774 PRINT #2, USING "###.#####  ###.#####"; DELTAP(C); ENERGY
784 PRINT #3, USING "###.#####  ###.#####  ###.#####";
    DELTAP(C); ENERGY; R0
785 C = C + 1
787 WEND
788 CLOSE #1
790 CLOSE #2
795 CLOSE #3
800 END
```

REFERENCIAS:

- 1.- E. J. Austin, Mol. Phys. **40**, 893 (1981)
- 2.- E. R. Virscay, Phys. Rev. A **32**, 2054 (1985)
- 3.- C. Quigg and J. L. Rosmer, Phys. Rep. **56**, 167 (1979); Eichten E., Gottfried K., Kinoshita T., Lane K., And Yan T-M, Phys. Rev. D **17**, 3090 (1978).
- 4.- J. J. Aubert et al, Phys. Rev. Lett. **33**, 1404(1974); J. E. Ausin et al., Phys. Rev. Lett. **33**, 1406(1974); Pedro Pascual , " Partículas Elementales, Quarks, Leptones y Unificación de las Fuerzas". Prensa Científica, 1983; B. R. Martin and G. Shaw "Particle Physics", Second Edition, John Wiley & Sons, 1997.
- 5.- J. Killingbeck, Rep. Prog. Phys. **40**, 963 (1977)
- 6.- J. E. Avron, Ann. Phys. N Y **131**, 73 (1981)
- 7.- S. Skupsky, Phys. Rev. A **21**, 1316 (1980)
- 8.- R. Cauble, M. Blaha and J. Davis, Phys. Rev. A **29**, 3280 (1984)
- 9.- V. Gupta and A. Khare, Phys. Lett. **70B**, 313 (1977)
- 10.- A. P. Haulot, Phys. Lett. A **38**, 305 (1972)
- 11.- R. K. Roychoudhury and Y. P. Varshni, Phys. Rev. A **37**, 2309 (1988)
- 12.- J. Killingbeck, Phys. Lett. A **67**, 13 (1978)
- 13.- G. J. Iafrate and L. B. Mendelsohn, Phys. Rev. A **2**, 561 (1970)
- 14.- J. O. Hirschfelder, J. Chem. Phys. **33**, 1462 (1966)
- 15.- R. J. Swenson and S. H. Danforth, J. Chem. Phys. **57**, 1734 (1972)
- 16.- M. Grant and C. S. Lai, Phys. Rev. A **20**, 718 (1979)

- 17.- C. S. Lai, Phys. Rev. A **23**, 455 (1981)
- 18.- L. D. Mlodinow and N. Papanicolau, Ann. Phys. **128**, 314 (1980)
- 19.- L. D. Mlodinow and N. Papanicolau, Ann. Phys. **131**, 1 (1981)
- 20.- L. D. Mlodinow and M. P. Shatz, J. Math. Phys. **25**, 943 (1984)
- 21.- T. Imbo, A. Pagnamenta and U. Sukhatme, Phys. Lett. A **105**, 183 (1984)
- 22.- G. Moreno and A. Zepeda, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **17**, 21 (1984)
- 23.- A. Chatterjee, J. Phys. A: Math. Gen **18**, 1193 (1985) ; **19**, 3707 (1986);
18, 2403 (1985)
- 24.-E. Papp and C. Micu, Can. J. Phys. **74**,102 (1996)
- 25.- V. S. Popov, B. M. Karnakov and V. D. Mur, Phys. Lett A **224**, 15 (1996)
- 26.-U. Sukhatme and T. Imbo, Phys. Rev. D **28**, 418 (1983)
- 27.- T. Imbo, A. Pagnamenta and U. Sukhatme, Phys. Rev. D **29**, 1669 (1984)
- 28.- B. Roy and R. Roychoudhury, J. Phys. A: Math. Gen. **20**, 3051 (1987)
- 29.- O. Mustafa, J. Phys. : Condens. Matter **5**, 1327 (1993)
- 30.- V. M. Villalba and R. Pino, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 8067 (1996)
- 31.- O. Mustafa, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 8073 (1996)
- 32.- R. K. Roychoudhury and Y. P. Varshni, J. Phys. A: Math. Gen **21**, 3025 (1988)
- 33.- R. K. Roychoudhury and Y. P. Varshni, Phys. Rev. A **42**, 184 (1990)
- 34.- D. Bessis, E. R. Vrscaj and C. R. Handy, J. Phys. A : Math. Gen. **20**, 419 (1987)
- 35.- M. Znojil, J. Phys. A: Math. Gen. **16**, 213 (1983)
- 36.- D. P. Datta and S. Mukherjee, J. Phys. A: Math. Gen **13**, 1361 (1980)
- 37.- G. P. Flessas, , J. Phys. A: Math. Gen. **15**, L1 (1982)
- 38.- R. W. Haymaker and A R. P. Rau, Am. J. Phys. **54**, 928 (1986)

- 39.- A. Lahiri, P. K. Roy and B. Bagchi, , J. Phys. A: Math. Gen **20**, 3825 (1987)
- 40.- R. Dutt, A. Khare and U. P. Sukhatme, Am. J. Phys. **56**, 163 (1988)
- 41.-J. W. Dabrowska, A. Khare and U. P. Sukhatme, , J. Phys. A: Math. Gen **21**, L195 (1988)
- 42.- R. Adhikari, R. Dutt and Y. P. Varshni, Phys. Lett. A **141**, 1 (1989)
- 43.- R. Roychoudhury and Y. P. Varshni, Phys. Rev. A **37**, 2309 (1988)
- 44.- A. Gangopadhyaya, A. Khare and U. P. Sukhatme, Phys. Lett. A **208**, 261 (1995)
- 45.- R. N. Chaudhuri and M. Mondal, Phys. Rev. A **52**, 1850 (1995)
- 46.- R. N. Chaudhuri, J. Phys. A: Math. Gen. **16**, 209 (1983)
- 47.- J. Killingbeck, J. Phys. A: Math. Gen. **19**, 2903 (1986)
- 48.- R. N. Chaudhuri, J. Phys. A: Math. Gen. **21**, 567 (1988)
- 49.- H. J. W. Müller-Kirsten and N. Vahedi-Faridi, J. Math. Phys. **14**, 1291 (1973)
- 50.- H. J. W. Müller-Kirsten, G. E. Hite and S. K. Bose, J. Math. Phys. **20**, 1878 (1978)
- 51.- R. P. Saxena and V. S. Varma, J. Phys. A: Math. Gen. **15**, L149 (1982)
- 52.- R. P. Saxena and V. S. Varma, J. Phys. A: Math. Gen. **15**, L221 (1982);
R. P. Saxena, P. K. Srivastava and V. S. Varma, J. Phys. A: Math. Gen. **21**, L389-L394 (1988);
- 53.- A. De S. Dutra, Phys. Lett. A **131**, 139 (1988)
- 54., S. C. Chhajlany, Phys. Lett. A **173**, 215 (1993)
- 55.- I. A. Ivanov, J. Phys. A : Math. Gen. **29**, 3203 (1996)

- 56.- G. A. Baker, Jr. And P. R. Graves-Morris, "Padé Approximants, Part. I : Basic Theory", Encyclopedia of Mathematics and its Applications, vol. **13** (Cambridge U.

- 56.- G. A. Baker, Jr. And P. R. Graves-Morris, "Padé Approximants, Part. I : Basic Theory", Encyclopedia of Mathematics and its Applications, vol. **13** (Cambridge U. P., London, 1981)
- 57.- G. A. Baker, Jr. And P. R. Graves-Morris, "Padé Approximants, Part. II: Extensions and Applications", Encyclopedia of Mathematics and its Applications, vol. **14** (Cambridge U. P., London, 1981).
- 58.- G. Dattoli, *Il Nuovo Cimento* **109**, 1655 (1996)
- 59.- J. Cízek, E. J. Weniger, P. Bracken and V. Špirko, *Phys. Rev. E* **53**, 2925 (1996)
- 60.- P. Martín, G. A. Baker, Jr., *J. Math. Phys.* **32**, 1471 (1991)
- 61.- P. Martín, J. J. Rodríguez-Nuñez and J. L. Marquez, *Phys. Rev. B* **45**, 8359 (1992)
- 62.- José Luis Marqués Rodríguez, "Aproximantes a Autovalores de Potenciales Anarmónicos Sexticos 3D. y al Efecto Zeeman Cuadrático 2D.". Tesis Doctoral, Universidad Simón Bolívar.
- 63.- M. Reed and B. Simon, "Methods of Modern Mathematical Physics IV: Analysis of Operators" (Academic Press, New York, 1978)
- 64.- Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu and Franck Laloë, "Quantum Mechanics". (John Wiley & Sons, 1997), p. 547
- 65.- Walter Greiner, " Quantum Mechanics an Introduction ", Third Edition, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1994), Chapter 7
- 66.- I. E. Avron, I. W. Herbst and B. Simon, *Phys. Lett. A* **62**, 219 (1977)
- 67.- E. Chalbaud and P. Martín, *J. Math. Phys.* **27**, 699 (1986)

68.- Burden Faires, "Análisis Numérico", Segunda Edición. (Grupo Editorial Iberoamericana S. A. de C. V., 1996), p. 260.

69.- E. Castro and P. Martín, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 1 (2000)