

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

ESCUELA SUPERIOR DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS

LICENCIATURA EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

Aproximación analítica a la ecuación de Schrödinger con el potencial de Eckart.

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
LICENCIADO EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

Presenta:
Marco Benjamín Enríquez Flores

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Jesús García Ravelo

Resumen

La presente tesis está dedicada al estudio de las soluciones analíticas de la ecuación de Schrödinger con el potencial de Eckart. Las soluciones a los estados ligados de la ecuación de Schrödinger con el potencial de Eckart con término centrífugo son obtenidas mediante una aproximación a dicho término. Las funciones de onda normalizadas también son obtenidas. Es mostrado que dichas funciones pueden ser expresadas en términos de las funciones hipergeométricas ${}_2F_1(a, b; c; z)$.

Para verificar nuestros resultados, evaluamos los eigenvalores para números cuánticos dados l y n . Los cuales coinciden en buena medida con los obtenidos usando un programa en MATHEMATICA hecho por Lucha y Schöberl para potencial de rango corto (a grande) sin aproximación analítica. Encontramos que el espectro de energía obtenido a través de esta aproximación, se reduce al potencial de Hulthén para el caso $l = 0$ cuando uno de sus parámetros se anula.

Agradecimientos

A mis padres Sr. Marco Aurelio Enríquez López y Sra. Margarita Flores Sierra.

A Instituto Politécnico Nacional y a la Escuela Superior de Física y Matemáticas por proporcionarme las instalaciones y profesores quienes fueron un apoyo para completar mis estudios.

Al Dr. Jesús García Ravelo por el apoyo en la elaboración de la presente tesis. Al Dr. Shi Hai Dong por sus comentarios y aportaciones a este trabajo.

Contenido

Contenido	iv
Introducción	1
1 Solución Aproximada a la Ecuación de Schödinger con Potencial de Eckart	6
2 Comparación de Resultados	14
3 Casos Especiales	17
4 Conclusiones	18
A Funciones Hipergeométricas	19
Referencias	22

Introducción

Las soluciones exactas de la ecuación estacionaria de Schrödinger juegan un rol importante en mecánica cuántica. Sin embargo, es posible obtener solo unas pocas soluciones analíticas que corresponden a casos tales como el átomo de hidrógeno, el oscilador armónico y otros [1, 2]. En general, los sistemas cuánticos pueden ser tratados solo por métodos aproximativos. Un ejemplo típico es el potencial de Morse tratado por la aproximación WKB [3, 4]. Recientemente, ha resurgido el interés en los potenciales de tipo exponencial, como el potencial de Hulthén [5, 6], los potenciales multiparamétricos de tipo exponencial [7-10], el potencial de Rosen-Manning [11, 12] y el potencial tipo Eckart [13-15]. El potencial tipo Eckart es

$$V(r) = -\alpha \frac{e^{-r/a}}{1 - e^{-r/a}} + \beta \frac{e^{-r/a}}{(1 - e^{-r/a})^2}; \quad \alpha, \beta > 0, \quad (1.1)$$

donde r es la coordenada radial. Aquí, los parámetros α y β describen la profundidad del pozo de potencial, mientras que el parámetro a está relacionado con el rango del potencial. Las siguientes gráficas muestran la forma del potencial para distintos valores de los parámetros α , β y a .

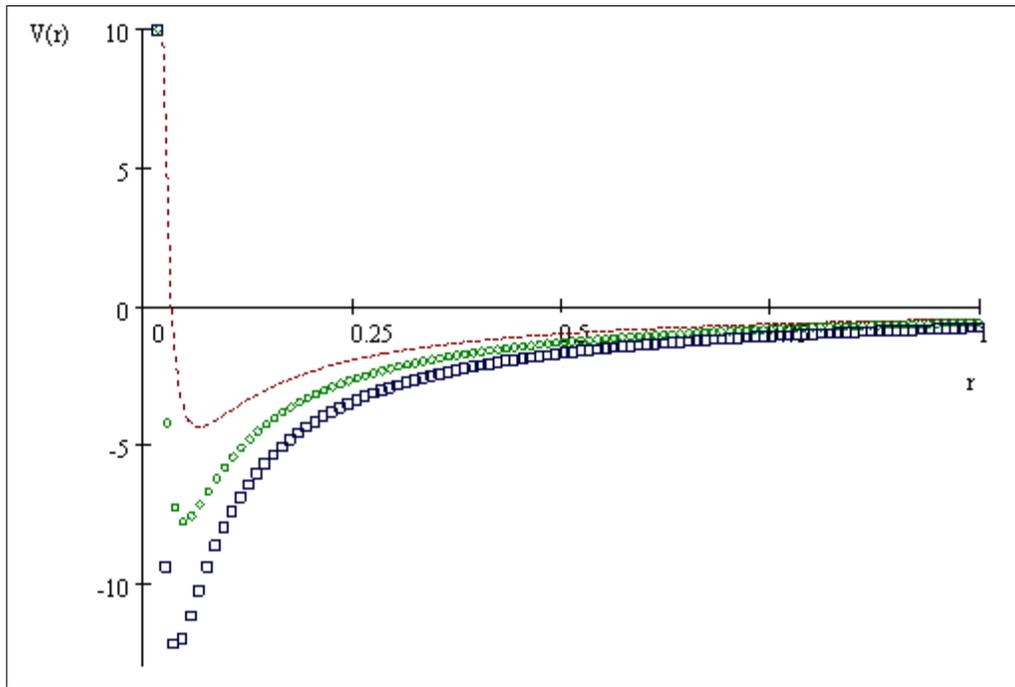


Fig. 1 Potencial de Eckart $a = 2, \beta = 0.005, (---)\alpha = 0.3, (o) \alpha = 0.4, \square \alpha = 0.5$

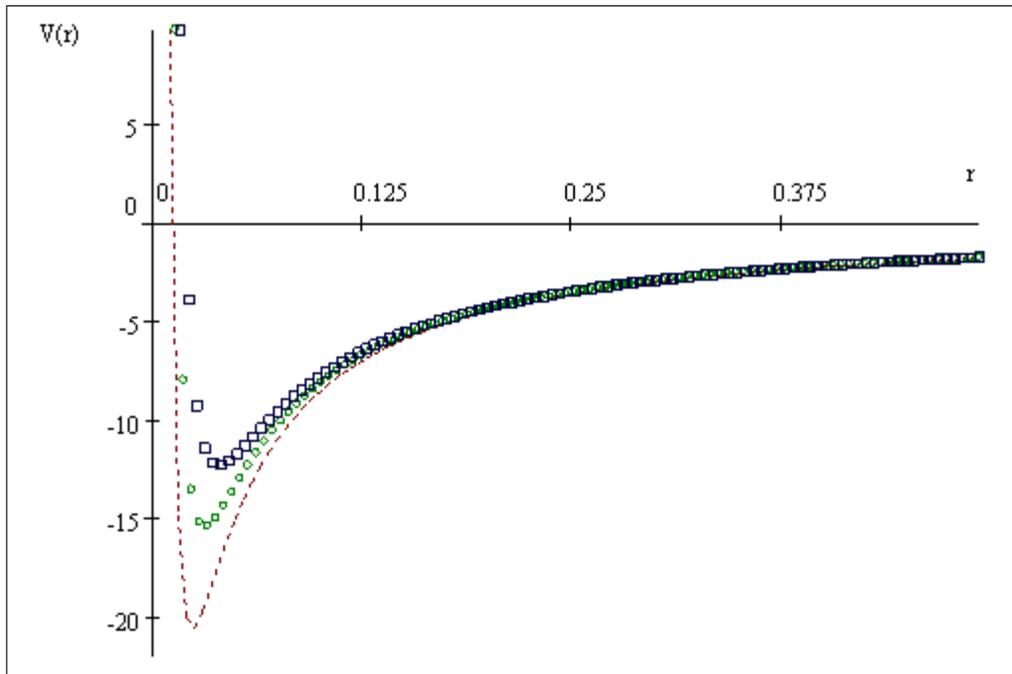


Fig 2. Potencial de Eckart $a = 2, \alpha = 0.5, (---)\beta = 0.003, (o)\beta = 0.004, \square\beta = 0.005$

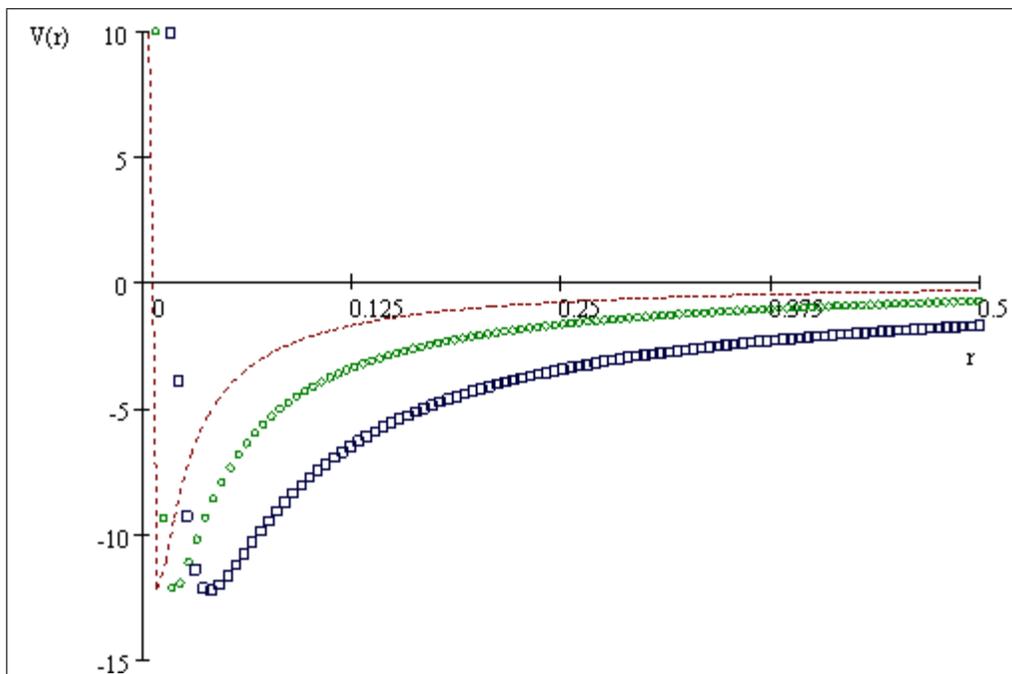


Fig 3. Potencial de Eckart $\alpha = 0.5, \beta = 0.005, (---)a = 0.5, (o)a = 1, \square a = 2$

El potencial de Eckart introducido por él mismo [16] ha sido ampliamente aplicado en física [17] y química cuántica [18,19]. En seguida mostramos que este potencial tiene

un valor mínimo $V(r_0) = -\frac{(\alpha-\beta)^2}{4\beta}$ en $r_0 = a \ln\left[\frac{\alpha+\beta}{\alpha-\beta}\right]$ para $\alpha > \beta$. Calculamos la primera derivada de (1.1)

$$\frac{d}{dr}V(r) = \frac{\alpha}{a} \left[\frac{e^{-2r/a}}{(1 - e^{-r/a})^2} + \frac{e^{-r/a}}{1 - e^{-r/a}} - \frac{2e^{-2r/a}\beta}{(1 - e^{-r/a})^3} - \frac{e^{-2r/a}\beta}{(1 - e^{-r/a})^2} \right] \quad (1.2)$$

$$= \frac{e^{r/a}[(e^{r/a}-1)\alpha - (e^{r/a}+1)\beta]}{a(1 - e^{r/a})^3}. \quad (1.3)$$

Para encontrar el valor de r que minimiza al potencial debemos resolver la ecuación

$$\frac{d}{dr}V(r) = 0, \quad (1.4)$$

entonces de las ecuaciones (1.3) y (1.4) obtenemos

$$(e^{r/a} - 1)\alpha - (e^{r/a} + 1)\beta = 0, \quad (1.5)$$

$$e^{r/a} = \frac{\alpha + \beta}{\alpha - \beta}, \quad (1.6)$$

$$r_0 = a \ln\left(\frac{\alpha + \beta}{\alpha - \beta}\right). \quad (1.7)$$

Ahora calculamos la segunda derivada de (1.1)

$$\frac{d^2}{dr^2}V(r) = \frac{e^{r/a} [\alpha(1 - e^{2r/a}) + \beta(1 + 4e^{r/a} + e^{2r/a})]}{a^2(e^{r/a} - 1)^4}. \quad (1.8)$$

$$\left. \frac{d^2V}{dr^2} \right|_{r=r_0} = \frac{(\alpha^2 - \beta^2)^2}{8a^2\beta^3}. \quad (1.9)$$

Como era de esperarse $\left. \frac{d^2V}{dr^2} \right|_{r=r_0} > 0$ lo que confirma un mínimo del potencial en las gráficas en $r = r_0$.

Debe ser mencionado que la mayoría de las contribuciones en la literatura para la ecuación de Schrödinger con este potencial son concernientes al caso de ondas s [5, 6].

El propósito de este trabajo es doble. Primero, estudiamos las soluciones para un estado

l -arbitrario de la ecuación de Schrödinger con el potencial de Eckart (1.1) mediante una aproximación al término centrífugo, la cual también ha sido usada para estudiar las soluciones para los estados l -arbitrarios de la ecuación de Schrödinger con el potencial de Hulthén [5,6]. Sin duda, este estudio proveerá una buena referencia para interpretar teóricamente el sistema cuántico con los estados l para el potencial de rango corto. Segundo, los eigenvalores así obtenidos también son comparados con simulaciones numéricas de los eigenvalores para el problema no aproximado.

Este trabajo está organizado como sigue. En el Capítulo 1 mostramos cómo derivar las soluciones para un estado l arbitrario de la ecuación de Schrödinger con el potencial de Eckart mediante una aproximación al término centrífugo. En el Capítulo 2 obtenemos algunos valores de la energía usando un programa en MATHEMATICA programado por Lucha y Schölberg para la solución de este problema sin aproximación al término centrífugo y los comparamos con los obtenidos mediante nuestra aproximación. El Capítulo 3 está dedicado a dos casos especiales: para $l = 0$ y $\beta = 0$. Las conclusiones son dadas en el Capítulo 4.

CAPITULO 1

Solución Aproximada a la Ecuación de Schödinger con Potencial de Eckart

La ecuación de Schrödinger en unidades naturales $\hbar = \mu = 1$ para un potencial central está dada por

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + V(r) - E \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (1.10)$$

Tomando $\psi(\mathbf{r}) = r^{-1}R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$, considerando el potencial (1.1) y aplicando el método de separación de variables, obtenemos la siguiente ecuación radial de Schrödinger

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \left[2E - \frac{2\beta e^{-r/a}}{(1 - e^{-r/a})^2} + \frac{2\alpha e^{-r/a}}{1 - e^{-r/a}} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0; \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (1.11)$$

Esta ecuación no puede ser resuelta analíticamente para $l \neq 0$ debido al término centrífugo. Una forma alternativa para tratar este problema consiste en usar una aproximación al término centrífugo de la ecuación (1.11) similar a la usada por otros autores [5, 6, 20]. Es observado que para valores grandes del parámetro a , i. e. para pequeños r/a la siguiente fórmula

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{1}{a^2} \frac{e^{-r/a}}{(1 - e^{-r/a})^2} \quad (1.12)$$

es una buena aproximación a $1/r^2$. La figura (4) muestra las gráficas $1/r^2$ y su aproximación para distintos valores del parámetro a .

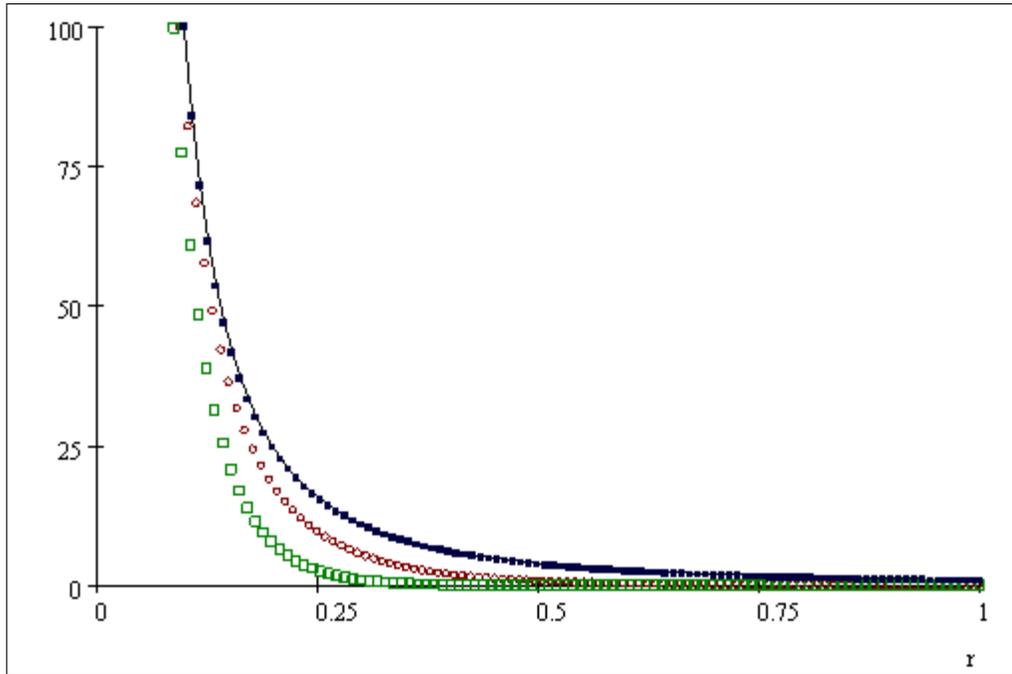


Fig. 4 $\frac{1}{r^2}$ y su aproximación (1.12). (o) $a = 0.1$, $\square a = 0.05$, $\times a = 0.5$

Tomando esta aproximación en cuenta, definimos las siguientes variables

$$z = e^{-r/a}, \tag{1.13}$$

$$\lambda = \sqrt{-2Ea^2}. \tag{1.14}$$

Con el cambio de variable dado por la ecuación (1.13), obtenemos las derivadas respecto de la nueva variable z

$$\frac{d}{dr} = \frac{d}{dz} \frac{dz}{dr} = -\frac{1}{a} z \frac{d}{dz}, \tag{1.15}$$

$$\frac{d^2}{dr^2} = \frac{d}{dr} \frac{d}{dr} = \frac{d}{dz} \frac{dz}{dr} \left(-\frac{z}{a} \frac{d}{dz} \right) = \frac{z}{a^2} \frac{d}{dz} \left(z \frac{d}{dz} \right) = \tag{1.16}$$

$$= \frac{z^2}{a^2} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{z}{a^2} \frac{d}{dz}. \tag{1.17}$$

Ahora sustituimos lo anterior en la ecuación (1.11), y así expresamos dicha ecuación en términos de z

$$z^2 \frac{d^2 R(z)}{dz^2} + z \frac{dR(z)}{dz} - \left[\frac{Bz}{(1-z)^2} - \frac{Az}{1-z} + \frac{l(l+1)z}{(1-z)^2} + \lambda^2 \right] R(z) = 0, \quad (1.18)$$

donde $A = 2\alpha a^2$ y $B = 2\beta a^2$.

De la ecuación (1.13) observamos $z \rightarrow 0$ ($r \rightarrow \infty$) y $z \rightarrow 1$ ($r \rightarrow 0$). Como un resultado, las condiciones de frontera de las funciones de onda $R(z)$ son tomadas como sigue

$$R(z) \rightarrow \begin{cases} 0, & \text{cuando } z \rightarrow 1, \\ 0, & \text{cuando } z \rightarrow 0, \end{cases} \quad (1.19)$$

de las cuales podemos tomar las formas asintóticas de las funciones radiales $R(z)$

$$R(z) \sim \begin{cases} (1-z)^{1+\delta}, & \text{cuando } z \rightarrow 1, \\ z^\gamma, & \text{cuando } z \rightarrow 0, \end{cases} \quad (1.20)$$

además

$$\delta > 0, \quad (1.21)$$

$$\gamma > 0, \quad (1.22)$$

por lo que la función de onda $R(z)$ debe tener la forma dada por la siguiente relación

$$R(z) = (1-z)^{1+\delta} z^\gamma F(z), \quad (1.23)$$

donde $F(z)$ es una función de z por determinar.

Ahora consideremos las formas asintóticas de la ecuación (1.11) para determinar los valores de δ y λ . Para el caso $z \rightarrow 1$, calculamos las derivadas de $R(z)$ en su forma

asintótica (1.20)

$$\frac{d}{dz}R(z) = -(1 + \delta)(1 - z)^\delta, \quad (1.24)$$

$$\frac{d^2}{dz^2}R(z) = \delta(1 + \delta)(1 - z)^{\delta-1}. \quad (1.25)$$

Sustituyendo las relaciones anteriores en la ecuación (1.18) obtenemos la ecuación para δ

$$\delta(1 + \delta)z^2 - (1 + \delta)(1 - z)z - Bz - Az(1 - z) - l(l + 1)z - \lambda^2(1 - z)^2 = 0, \quad (1.26)$$

y usando el hecho $z \rightarrow 1$, llegamos finalmente a

$$\delta(1 + \delta) - B - l(l + 1) = 0, \quad (1.27)$$

cuyas soluciones son

$$\delta = \frac{1}{2} \left[-1 \pm \sqrt{(1 + 2l)^2 + 4B} \right], \quad (1.28)$$

de donde descartamos el signo " - " por la restricción impuesta en (1.21), por lo tanto

$$\delta = \frac{1}{2} \left[-1 + \sqrt{(1 + 2l)^2 + 4B} \right]. \quad (1.29)$$

Ahora consideremos la forma asintótica de la ecuación (1.18) para el caso $z \rightarrow 0$

$$\frac{d}{dz}R(z) = \gamma z^{\gamma-1}, \quad (1.30)$$

$$\frac{d^2}{dz^2}R(z) = \gamma(\gamma - 1)z^{\gamma-2}, \quad (1.31)$$

sustituyendo lo anterior en la ecuación (1.18) obtenemos

$$\gamma(\gamma - 1)z^\gamma + \gamma z^\gamma - \left[\frac{Bz}{(1 - z)^2} - \frac{Az}{1 - z} + \frac{l(l + 1)z}{(1 - z)^2} + \lambda^2 \right] z^\gamma = 0, \quad (1.32)$$

$$\gamma(\gamma - 1) + \gamma - \left[\frac{Bz}{(1 - z)^2} - \frac{Az}{1 - z} + \frac{l(l + 1)z}{(1 - z)^2} + \lambda^2 \right] = 0. \quad (1.33)$$

Cuando $z \rightarrow 0$ en la ecuación anterior, llegamos finalmente a la condición para λ

$$\gamma(\gamma - 1) + \gamma - \lambda^2 = 0, \quad (1.34)$$

cuyas soluciones son

$$\gamma = \pm\lambda, \quad (1.35)$$

pero por la restricción (1.22) solo consideramos el signo ” + ”, por lo tanto

$$\gamma = \lambda. \quad (1.36)$$

Para encontrar $F'(z)$ sustituimos la ecuación (1.23) en la ecuación (1.18) lo que conduce a la siguiente ecuación

$$-(1 - z)^{\delta-1} z^{\lambda+1} M(z) F(z) + (1 - z)^{\delta-1} z^{\lambda+1} N(z) F'(z) + (1 - z)^{\delta-1} z^{\lambda+1} F''(z) = 0, \quad (1.37)$$

donde

$$M(z) = B + l(l + 1) + A(z - 1) - (\delta + 1)(-1 + z + z\delta + 2(z - 1)\lambda), \quad (1.38)$$

$$N(z) = 1 + 2\lambda - z(3 + 2\delta + 2\lambda). \quad (1.39)$$

Reordenando, llegamos finalmente a

$$(1 - z)z \frac{d^2 F(z)}{dz^2} + [2\lambda + 1 - z(2\delta + 2\lambda + 3)] \frac{dF(z)}{dz} + [A - B - l(l + 1) - (\delta + 1)(1 + 2\lambda)] F(z) = 0, \quad (1.40)$$

cuyas soluciones no son otra cosa que las funciones hipergeométricas [21]

$$F(z) = {}_2F_1(a, b; c; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k (b)_k}{(c)_k} \frac{z^k}{k!}, \quad (1.41)$$

donde el símbolo de Pochhammer $(x)_k$ está dado por

$$(x)_k \doteq \frac{\Gamma(x+k)}{\Gamma(x)}, \quad (1.42)$$

$$(-x)_k \doteq \frac{(-1)^k k!}{(x-k)!}. \quad (1.43)$$

Para encontrar los parámetros a, b y c igualamos las ecuaciones (1.40) y (A.1) lo cual nos conduce al siguiente sistema de ecuaciones

$$a + b + 1 = 2\delta + 2\lambda + 3, \quad (1.44)$$

$$ab = A - B - l(l+1) - (\delta+1)(1+2\lambda), \quad (1.45)$$

$$c = 2\lambda + 1, \quad (1.46)$$

resolviendo para a y b encontramos

$$a = 1 + \delta + \lambda - \sigma, \quad (1.47)$$

$$b = 1 + \delta + \lambda + \sigma, \quad (1.48)$$

donde

$$\sigma = \sqrt{\lambda^2 + A - B - l(l+1) + \delta(\delta+1)}. \quad (1.49)$$

De las propiedades de las funciones hipergeométricas $F(z)$ dada en la ecuación (1.41) se aproxima a infinito a menos que $a = 1 + \delta + \lambda - \sigma$ sea un entero negativo. Por lo tanto, las funciones de onda $R(z)$ serán infinitas en todas partes a menos que

$$a = 1 + \delta + \lambda - \sigma = -n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.50)$$

de lo cual, junto con las ecuaciones (1.29) y (1.49) obtenemos

$$\lambda = -\frac{(n+1)^2 - A + B + l(l+1) + (2n+1)\delta}{2(n+\delta+1)}. \quad (1.51)$$

Sustituyendo esto en la ecuación (1.14) conduce al siguiente espectro de energía

$$E_{nl} = -\frac{1}{2a^2} \left[\frac{(n+1)^2 - A + B + l(l+1) + (2n+1)\delta}{2(n+\delta+1)} \right]^2. \quad (1.52)$$

Ahora estudiaremos las eigenfunciones de este sistema. Usando las ecuaciones (1.46), (1.47) y (1.48) podemos escribir las funciones radiales como

$$R(z) = N(1-z)^{\delta+1} z^\lambda {}_2F_1[-n, n+2(\delta+\lambda+1), 2\lambda+1, z], \quad (1.53)$$

donde N es el factor de normalización para ser determinado por la condición $\int_0^\infty R(r)^2 dr =$

1. Además esto puede ser puesto como sigue

$$\int_0^\infty R(r)^2 dr = \int_0^1 R(z)^2 \frac{dr}{dz} dz, \quad (1.54)$$

o explícitamente

$$aN^2 \int_0^1 (1-z)^{2(\delta+1)} z^{2\lambda-1} \{ {}_2F_1[-n, n+2(\delta+\lambda+1), 2\lambda+1, z] \}^2 dz = 1. \quad (1.55)$$

Dado que usando la ecuación (1.41) podemos escribir la ecuación como (1.55)

$$aN^2 \sum_{q=0}^n \frac{(-n)_q (2(\delta+\lambda+1))_q}{(2\lambda+1)_q q!} \int_0^1 (1-z)^{2(\delta+1)} z^{2\lambda+q+1} {}_2F_1[-n, n+2(\delta+\lambda+1), 2\lambda+1, z] dz = 1, \quad (1.56)$$

podemos despejar el valor de la constante de normalización

$$\begin{aligned}
 N &= \frac{1}{\sqrt{t(n)}}, \\
 t(n) &= a n! \Gamma(2\delta + 3) \Gamma(2\lambda + 1) \sum_{q=0}^n \frac{(-1)^q (n + 2(\delta + \lambda + 1))_q}{(q + 2\lambda)(n - q)! q! \Gamma(q + 2\delta + 2\lambda + 3)} \\
 &\quad \times {}_3F_2(-n, q + 2\lambda, n + 2\delta + 2\lambda + 2; 2\lambda + 1, q + 2\delta + 2\lambda + 3; 1),
 \end{aligned} \tag{1.57}$$

donde hemos usado la siguiente fórmula integral [21]

$$\int_0^1 z^{\varrho-1} (1 - z)^{\sigma-1} {}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z) dz = \frac{\Gamma(\varrho)\Gamma(\sigma)}{\Gamma(\varrho + \sigma)} {}_3F_2(\alpha, \beta, \varrho; \gamma, \varrho + \sigma; 1). \tag{1.58}$$

CAPITULO 2

Comparación de Resultados

Para verificar nuestros resultados, calculamos los eigenvalores de energía para números cuánticos dados n y l . Para tal efecto los valores obtenidos de la ecuación (1.52) son comparados con los obtenidos resolviendo numéricamente la ecuación de Schrödinger con potencial de Eckart sin aproximación al término centrífugo con un programa hecho en el paquete de MATHEMATICA, por Lucha y Schöberl [22]. Como se muestra en las Tablas 1 y 2, encontramos que los resultados obtenidos por los dos métodos están en buen acuerdo para el potencial de rango corto (a grande). Sin embargo, las diferencias entre ellos aparecen para valores pequeños del parámetro a . Esto quiere decir que la ecuación (1.12) no es una buena aproximación para el término centrífugo cuando el parámetro a del potencial es pequeño. Además, debe ser mencionado que la razón por la que tomamos los valores del parámetro β muy pequeños, es para obtener estados ligados ($E < 0$) para el potencial de Eckart.

Tabla 2.1. Eigenvalores (1.52) para los estados 2p, 3p y 3d en unidades atómicas ($\hbar = \mu = 1$) y con $\alpha = 1/a$.

estados	$1/a$	$\beta = 0.00005$			$\beta = 0.0001$		
		presente	Schröderl	Δ	presente	Schröderl	Δ
2p	0.025	-0.111363	-0.1064737	0.0048893	-0.108086	-0.1008358	0.0072502
	0.050	-0.100968	-0.0994162	0.0015518	-0.100574	-0.0978358	0.0027382
	0.075	-0.090161	-0.0891284	0.0010326	-0.089988	-0.0884183	0.0015697
	0.100	-0.079897	-0.0787809	0.0011161	-0.079788	-0.0783854	0.0014026
	0.150	-0.061191	-0.0592734	0.0019176	-0.061131	-0.0591059	0.0020251
	0.200	-0.044962	-0.0417989	0.0031631	-0.044925	-0.0417120	0.0032130
	0.250	-0.031225	-0.0265616	0.0046634	-0.031200	-0.0265124	0.0046876
	0.300	-0.019983	-0.0137615	0.0062215	-0.019967	-0.0137330	0.0062340
	0.350	-0.011239	-0.0037780	0.0074610	-0.011229	-0.0137330	0.0025040
3p	0.025	-0.043284	-0.0418400	0.0014440	-0.042284	-0.0401250	0.0021590
	0.050	-0.033267	-0.0327011	0.0005659	-0.033135	-0.0322482	0.0008868
	0.075	-0.024332	-0.0237464	0.0005856	-0.024275	-0.0235553	0.0007197
	0.100	-0.016774	-0.0159559	0.0008181	-0.016742	-0.0158588	0.0008832
	0.150	-0.005856	-0.0044376	0.0014184	-0.005844	-0.0044091	0.0014349
3d	0.025	-0.043407	-0.0424588	0.0009482	-0.042757	-0.0413642	0.0013928
	0.050	-0.033274	-0.0324736	0.0008004	-0.033165	-0.0321973	0.0009677
	0.075	-0.024333	-0.0229146	0.0014184	-0.024281	-0.0227991	0.0014819
	0.100	-0.016775	-0.0144257	0.0023493	-0.016743	-0.0143675	0.0023755
	0.150	-0.005856	-0.0013808	0.0044752	-0.005844	-0.0013650	0.0044790

Tabla 2.2. Eigenvalores (1.52) para los estados 4p, 4d, 4f, 5p, 5d, 5f, 5g, 6p, 6d, 6f y 6g en unidades atómicas ($\hbar = \mu = 1$) y para $\alpha = 1/a$.

estados	$1/a$	$\beta = 0.00005$			$\beta = 0.0001$		
		presente	Schröberl	Δ	presente	Schröberl	Δ
4p	0.025	-0.0197893	-0.0191787	0.0006106	-0.0193674	-0.0184632	0.0009042
	0.050	-0.011207	-0.0108852	0.0003218	-0.0111533	-0.0107159	0.0004374
	0.075	-0.0049826	-0.0045636	0.0004190	-0.0049637	-0.0045059	0.0004578
	0.100	-0.0012436	-0.0007380	0.0005056	-0.0012370	-0.0007212	0.0005158
4d	0.025	-0.0198398	-0.0193753	0.0004645	-0.0195625	-0.0189216	0.0006409
	0.050	-0.0112098	-0.0105633	0.0006465	-0.0111644	-0.0104603	0.0007041
	0.075	-0.0049830	-0.0038001	0.0011829	-0.0049654	-0.0037658	0.0011996
4f	0.025	-0.0198615	-0.0193525	0.0005090	-0.0196478	-0.0190220	0.0006258
	0.050	-0.011211	-0.0099876	0.0012234	-0.0111692	-0.0099137	0.0012555
	0.075	-0.0049832	-0.0025321	0.0024511	-0.0049661	-0.0025081	0.0024580
5p	0.025	-0.0093460	-0.0090320	0.0003140	-0.0091391	-0.0086850	0.0004541
	0.050	-0.0027955	-0.0025853	0.0002102	-0.0027747	-0.0025231	0.0002516
5d	0.025	-0.0093703	-0.0090768	0.0002935	-0.0092332	-0.0088576	0.0003756
	0.050	-0.0027966	-0.0022752	0.0005214	-0.0027788	-0.0088576	0.00060788
5f	0.025	-0.0093807	-0.0089892	0.0003915	-0.0092743	-0.0088297	0.0004446
	0.050	-0.0027970	-0.0017570	0.0010400	-0.0027805	-0.0017307	0.0010498
5g	0.025	-0.0093866	-0.0088194	0.0005672	-0.0092973	-0.0086943	0.0006030
	0.050	-0.0027973	-0.0009957	0.0018016	-0.0027815	-0.0009755	0.0018060
6p	0.025	-0.0041446	-0.0039648	0.0001798	-0.0040376	-0.0037873	0.0002503
6d	0.025	-0.0041570	-0.0039447	0.0002123	-0.0040857	-0.0038327	0.0002530
6f	0.025	-0.0041623	-0.0038337	0.0003286	-0.0041067	-0.0037525	0.0003542
6g	0.025	-0.0041653	-0.0036554	0.0005099	-0.0041184	-0.0035919	0.0005265

CAPITULO 3

Casos Especiales

En este capítulo vamos a estudiar dos casos especiales de nuestros resultados. Primero, estudiaremos el caso de ondas s ($l = 0$). Sustituyendo la ecuación (1.29) en (1.52) llegamos

$$E_{nl} = \frac{-[-A + B + l(1+l) + (1+n)^2 + (-1 + \sqrt{1+4B})(1/2+n)]^2}{2a^2(1 + \sqrt{1+4B} + 2n)^2}, \quad (3.59)$$

y tomando $l = 0$ obtenemos

$$E_{n0} = -\frac{[-A + B + (1+n)^2 + (-1 + \sqrt{1+4B})(1/2+n)]^2}{2a^2(1 + \sqrt{1+4B} + 2n)^2}. \quad (3.60)$$

Este espectro de energía concuerda con el obtenido en la referencia [23].

El potencial de Hulthén está dado por la siguiente expresión

$$V(r) = -Ze^2\delta \frac{e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}}, \quad (3.61)$$

de la ecuación (1.1) podemos ver que el potencial de Eckart se reduce al potencial de Hulthén cuando $\beta = 0$. Así, de la ecuación (1.52) tenemos

$$E_{nl} = -\frac{[A - (l+n+1)]^2}{8a^2(l+n+1)^2}. \quad (3.62)$$

Si tomamos $\alpha = Ze^2\delta$ donde Z, e pueden ser identificados con el número atómico y la carga del electrón, respectivamente y $\delta = 1/a$, obtenemos

$$E_{nl} = -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{n+l+1} - \frac{(n+l+1)}{2a} \right]^2, \quad (Z = e = 1), \quad (3.63)$$

Este resultado coincide con el dado en la Ref. [5].

CAPITULO 4

Conclusiones

Las soluciones para el estado l -arbitrario de la ecuación de Schrödinger con el potencial de Eckart han sido presentadas considerando una aproximación al término centrífugo (1.12). Es encontrado que las soluciones pueden ser expresadas por las funciones hipergeométricas ${}_2F_1(a, b; c; z)$. Y su normalización también es realizada. Para propósitos de verificación de nuestros resultados, el espectro (1.52) es comparado con aquel obtenido usando el programa de Lucha y Schölberg con muy buen acuerdo para n y l dados. También hemos estudiado que los dos casos especiales para $l = 0$ y $\beta = 0$, son consistentemente recuperados.

APENDICE A

Funciones Hipergeométricas

Las funciones hipergeométricas son soluciones a la ecuación diferencial hipergeométrica [24], que tiene un punto singular regular en el origen. Para derivar las soluciones de la ecuación

$$z(1 - z)y'' + [c - (a + b + 1)z]y' - aby = 0, \quad (\text{A.1})$$

usamos el método de Frobenius. Proponemos una solución en serie de potencias en la variable z

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} A_n z^n. \quad (\text{A.2})$$

Sustituimos la ecuación (A.2) en la ecuación (A.1) y obtenemos la siguiente relación

$$\sum_{n=0}^{\infty} \{(n + 1)(n + c)A_n - [n^2 + (a + b)n + ab]A_n\} z^n = 0, \quad (\text{A.3})$$

por independencia lineal de las potencias en z llegamos a la relación de recurrencia

$$A_{n+1} = \frac{(n + a)(n + b)}{(n + 1)(n + c)} A_n, \quad (\text{A.4})$$

La sustitución de la ecuación (A.4) en la ecuación (A.2) da como resultado

$$y = A_0 \left[1 + \frac{ab}{1!c} z + \frac{a(a + 1)b(b + 1)}{2!c(c + 1)} z^2 + \dots \right]. \quad (\text{A.5})$$

Esta es la llamada solución regular, denotada por

$${}_2F_1(a, b; c; z) = 1 + \frac{ab}{1!c}z + \frac{a(a+1)b(b+1)}{2!c(c+1)}z^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n}{(c)_n} \frac{z^n}{n!}, \quad (\text{A.6})$$

la cual converge si c no es un entero negativo. Existen dos casos (1) para todo $|z| < 1$ y (2) en el círculo unitario $|z| = 1$ si $\text{Re}(c - a - b) > 1$. Aquí $(a)_n$ es el símbolo de Pochhammer definido en la ecuación (1.42).

El primer índice de ${}_2F_1$ indica que dos símbolos de Pochhammer aparecen en el numerador y el segundo índice que un símbolo de Pochhammer aparece en el denominador.

De la ecuación (A.6) podemos ver que c no puede ser cero o un entero negativo. Por otro lado si a y b son cero o un entero negativo la serie termina y la función hipergeométrica se convierte en un polinomio.

La solución completa a la ecuación diferencial hipergeométrica es

$$y = A {}_2F_1(a, b; c; z) + B z^{1-c} {}_2F_1(a+1-c, b+1-c; 2-c; z). \quad (\text{A.7})$$

La serie hipergeométrica es convergente para a, b y c arbitrarios y $-1 < z < 1$, y también cuando $z = \pm 1$ si $c > a + b$.

Las derivadas de ${}_2F_1(a, b; c; z)$ están dadas por las siguientes relaciones

$$\frac{d}{dz} {}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{ab}{c} \cdot {}_2F_1(a+1, b+1; c+1; z), \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{d^2}{dz^2} {}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)} \cdot {}_2F_1(a+2, b+2; c+2; z). \quad (\text{A.9})$$

En el caso general, las series hipergeométricas son escritas como

$${}_pF_q(a_1, \dots, a_p; b_1, \dots, b_q; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_n}{n!} z^n, \quad (\text{A.10})$$

donde $\alpha_0 = 1$ y

$$\frac{\alpha_{n+1}}{\alpha_n} = \frac{(n + a_1)(n + a_2) \cdots (n + a_p)}{(n + b_1)(n + b_2) \cdots (n + b_q)}. \quad (\text{A.11})$$

Una forma alternativa es

$${}_pF_q(a_1, \dots, a_p; b_1, \dots, b_q; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_1)_n (a_2)_n \cdots (a_p)_n}{(b_1)_n (b_2)_n \cdots (b_q)_n} \frac{z^n}{n!}. \quad (\text{A.12})$$

Referencias

- [1] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (McGraw-Hill, New York, 1955).
- [2] D. J. Griffiths *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd ed. (Prentice Hall, New Jersey, 1995).
- [3] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory*, 3rd ed. (Pergamon, Oxford, 1977).
- [4] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Revised Ed. (Addison-Wesley, New York, 1994).
- [5] O. Bayrak, G. Kocak and I. Boztosun, J. Phys. A: Math. Gen. **39**, 11521 (2006).
- [6] B. Gönül, O. Özer, Y. Cançelik and M. Koçak, Phys. Lett. A **275**, 238 (2000).
- [7] H. Eğrifes, D. Demirhan, F. Büyükkiliç, Phys. Lett. A **275**, 229 (2000).
- [8] C. S. Jia, Y. F. Diao, L. Min, Q. B. Yang, L. T. Sun, R. Y. Huang, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, 11275 (2004).
- [9] C. S. Jia, Y. Li, Y. Sun, J. Y. Liu, L. T. Sun, Phys. Lett. A **311**, 115 (2003).
- [10] C. S. Jia, X. L. Zeng and L. T. Sun, Phys. Lett. A **294**, 185 (2002).
- [11] S. H. Dong and J. García-Ravelo, Physica Scripta **75**, 307 (2007).
- [12] A. Diaf, A. Chouchaoui and R. J. Lombard, Ann. Phys. **317**, 354 (2005).
- [13] E. Olğar, R. Koç, H. Tütüncüler, Chin. Phys. Lett. **23**, 539 (2006).
- [14] X. Zou, L. Z. Yi, C. S. Jia, Phys. Lett. A **346**, 54 (2005).
- [15] S. H. Dong and W.C. Qiang, J. Phys. A **40**, 10555 (2007).
- [16] C. Eckart, Phys. Rev. **35**, 1303 (1930).
- [17] F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, Phys. Rep. **251**, 267 (1995).
- [18] J. J. Weiss, J. Chem. Phys. **41**, 1120 (1964).

- [19] A. Cimas, M. Aschi, C. Barrientos, V. M. Rayón, J. A. Sordo and A. Largo, Chem. Phys. Lett. **374**, 594 (2003).
- [20] R. L. Greene and C. Aldrich, Phys. Rev. A **14**, 2363 (1976).
- [21] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series, and Products* 5th Edition (Academic Press, New York, 1994).
- [22] W. Lucha and F. F. Schöberl, Int. J. Mod. Phys. C **10**, 607 (1999).
- [23] B. Sahu and S. K. Agarwalla, Pramana J. of Physics, **70**, 1 (2008)
- [24] G. Arfken, "*Hypergeometric Functions.*" §13.5 in *Mathematical Methods for Physicists*, pp. 748-752, 3rd ed. (Academic Press, Orlando, FL, 1985).