



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO DEL MÉTODO DE LANZOS APLICADO A  
PROBLEMAS CUÁNTICOS UNIDIMENSIONALES

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

**FÍSICO**

PRESENTA :

**ALDO DÉCTOR OLIVER**



DIRECTOR DE TESIS:  
**DR. JUAN CARLOS LÓPEZ VIEYRA**

2007



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

FACULTAD DE CIENCIAS



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO


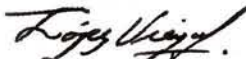




División de Estudios Profesionales

**ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ**  
**Jefe de la División de Estudios Profesionales**  
**Facultad de Ciencias**  
**Presente.**

Por este medio hacemos de su conocimiento que hemos revisado el trabajo escrito titulado:

**"Aplicaciones del Método de Lanczos a Problemas Cuánticos Unidimensionales"**


realizado por **Déctor Oliver Aldo**, con número de cuenta **09954547-3**, quien opta por titularse en la opción **Tesis** en la licenciatura en **Física**. Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Propietario	Dr.	Eugenio Ley Koo	
Propietario Tutor(a)	Dr.	Juan Carlos López Vieyra	 
Propietario	Dr.	Antonmaría Minzoni Alessio	
Suplente	Dr.	José Julio Emilio Herrera Velázquez	
Suplente	Dr.	Kurt Bernardo Wolf	

Atentamente  
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"  
Ciudad Universitaria, D.F., a 12 de marzo del 2007.  
**LA COORDINADORA DEL COMITÉ DE TITULACIÓN  
DE LA LICENCIATURA EN FÍSICA**



**M. EN C. ALICIA ZARZOSA PÉREZ**

  
FACULTAD DE CIENCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Señor sinodal: antes de firmar este documento, solicite al estudiante que le muestre la versión digital de su trabajo y verifique que la misma incluya todas las observaciones y correcciones que usted hizo sobre el mismo.

\* \* \*

## Agradecimientos

Dedico la presente tesis a mi Madre y a mi Hermana, agradeciéndoles todo su amor y apoyo en cada día. Ellas son el motor de mi vida. Agradezco a mi querido padre su amor y apoyo incondicional. Gracias a todos ellos por animarme siempre a perseguir mis sueños.

Gracias a Mary y a mis tíos Roberto y Carmen. Su apoyo, ayuda y cariño inmenso se encuentran más allá de lo que las palabras pueden expresar.

Agradezco a mi tío Arturo por su incondicional apoyo y su enorme cariño. Espero poder algún día satisfacer las esperanzas que ha puesto en mi.

A todos ellos, les agradezco por su amor, que me honra.

\* \* \*

## Agradecimientos

Mi más sincero agradecimiento al Dr. Julio Herrera Velázquez, Dr. Eugenio Ley Koo, Dr. Antonmaría Minzoni Alessio, y Dr. Kurt Bernardo Wolf por su cuidadosa lectura del presente trabajo y por sus muy valiosas observaciones.

Agradezco infinitamente al Dr. Alexander Turbiner por proponer el tema de la presente tesis y por su interés y guía a lo largo de la realización de la misma. Han sido invaluable las numerosas lecciones recibidas de él sobre ciencia y quehacer científico.

Finalmente, deseo agradecer muy especialmente al Dr. Juan Carlos López Vieyra por su acertada dirección de tesis y por todo el tiempo invertido en ella. Ha sido gracias a su interés, su apoyo, guía y comprensión que el presente trabajo ha llegado a término. Considero que la parte más fructífera en la realización de esta tesis ha sido el trabajar directamente con él, además de haber sido sumamente gratificante.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. El Método de Lanczos</b>	<b>7</b>
2.1. Introducción . . . . .	7
2.2. Demostración del Método de Lanczos . . . . .	8
2.2.1. Otra demostración . . . . .	14
2.3. Consideraciones . . . . .	16
<b>3. Oscilador Armónico y el Procedimiento de Lanczos.</b>	<b>19</b>
3.1. Introducción. . . . .	19
3.2. El Oscilador Armónico Unidimensional. . . . .	19
3.3. El Procedimiento de Lanczos. . . . .	22
3.3.1. Funciones de Lanczos . . . . .	23
3.4. Estudio del Espectro de Energía. . . . .	28
3.5. Estados mas bajos . . . . .	29
3.6. Continuación Analítica en el Espectro. Puntos Rama. . . . .	33
3.6.1. Caso $2 \times 2$ . . . . .	34
3.6.2. Caso $3 \times 3$ . . . . .	37
3.6.3. Cruce del estado base y el primer estado excitado par .	40
3.6.4. Mas sobre la identificación de puntos rama . . . . .	42
3.7. Conclusiones . . . . .	42
<b>4. Potencial de Morse y el Procedimiento de Lanczos</b>	<b>47</b>
4.1. Introducción . . . . .	47
4.2. El Potencial de Morse. . . . .	47
4.3. El Procedimiento de Lanczos . . . . .	52
4.4. Diagonalización . . . . .	60
4.5. Estudio del Espectro . . . . .	66

4.6. Conclusiones . . . . .	68
<b>5. Oscilador Anarmónico y el Procedimiento de Lanczos</b>	<b>73</b>
5.1. Introducción . . . . .	73
5.2. El Oscilador Anarmónico Cuártico. . . . .	73
5.3. Caso I. Base del Oscilador Armónico. . . . .	75
5.4. Caso II. Procedimiento de Lanczos: Primera Prueba. . . . .	81
5.5. Caso III. Procedimiento de Lanczos: Segunda Función de Prue- ba. . . . .	89
5.6. Conclusiones. . . . .	96
<b>6. Conclusión</b>	<b>99</b>
<b>Apéndice A</b>	<b>101</b>
<b>Apéndice B</b>	<b>105</b>
<b>Apéndice C</b>	<b>113</b>
<b>Apéndice D</b>	<b>117</b>
<b>Referencias</b>	<b>123</b>

## Prefacio

La motivación original del presente trabajo surgió en el contexto de estudios variacionales de sistemas coulombianos en campos magnéticos intensos llevados a cabo por los Dres. Alexander Turbiner y Juan Carlos López Vieyra en su grupo de investigación en el Instituto de Ciencias Nucleares de la Universidad Nacional Autónoma de México. Pensando en una manera de mejorar los cálculos variacionales, se pensó en introducir correcciones usando para ello las funciones de Lanczos generadas a partir de la función variacional del estado base. De esta manera se comenzó la exploración del método de Lanczos en el contexto de sistemas mecánico-cuánticos simples y exactamente solubles como el oscilador armónico y el oscilador de Morse. Estos estudios fueron planteados como ejercicios preliminares en donde se pudieran seguir en detalle los pasos y resultados del método. Dichos estudios son el contenido principal del presente trabajo de tesis. Con la experiencia adquirida se planeó aplicar el método de Lanczos al estudio de los niveles mas bajos del oscilador anarmónico  $V = mx^2 + gx^4$ . En esta dirección se hicieron algunos cálculos preliminares y que también han sido incluidos al final de ésta tesis. El objetivo principal de estos estudios no es el de hacer un tratamiento numérico intensivo, como es el que suele hacerse con el método de Lanczos, sino mas bien hacer un estudio de las propiedades analíticas de las funciones de Lanczos generadas a partir de una función inicial seleccionada adecuadamente y que reproduzca las características físicas principales del sistema en estudio. A futuro se vislumbra la posibilidad de aplicar el método a problemas físicos mucho mas complejos, como en los estudios de sistemas coulombianos en campos magnéticos intensos, los cuales están fuera de los objetivos del presente trabajo.



# Capítulo 1

## Introducción

El problema principal de la mecánica cuántica puede resumirse, sin temor a exagerar, en resolver la ecuación de Schrödinger del sistema:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (1.1)$$

donde el *hamiltoniano*  $\hat{H}$  es un operador diferencial lineal hermitiano que contiene la información física del sistema,  $E$  es la energía, y  $\psi(x)$  la *función de onda*. La ecuación de Schrödinger es una ecuación de eigenvalores y como tal se le considera un problema espectral. La ecuación (1.1) es una ecuación diferencial que solo en un pequeño número de casos con relevancia para la física puede ser resuelta de manera exacta. Es por esta razón que han sido desarrollados un gran número de métodos de aproximación alternativos para resolver y obtener información confiable del sistema bajo estudio, como son la teoría perturbativa o el método variacional.

Una forma estándar de atacar el problema es convertir la ecuación diferencial (1.1), a un problema de álgebra lineal (ver apéndice A). En este caso, el procedimiento estándar consiste a grandes rasgos en tomar una base de funciones, que se considere apropiada al sistema, en términos de la cual se expande la función de onda. Como la base es completa y por lo tanto infinita, la expansión es exacta. La aproximación consiste en truncar la base en algún elemento  $N$  de la misma. Así, con este subconjunto finito de la base podemos construir una matriz Hamiltoniana del sistema. Puesto explícitamente, si elegimos un subconjunto finito de la base de funciones:

$$\{\phi_n(x)\}_{n=0}^N, \quad (1.2)$$

$$\psi(x) \simeq \sum_{n=0}^N v_n \phi_n(x), \quad (1.3)$$

entonces podemos utilizarla para construir los elementos de matriz del sistema en esta base, definidos en general como:

$$h_{i,j} \equiv \frac{\langle \phi_i, \hat{H} \phi_j \rangle}{\sqrt{\langle \phi_i, \phi_i \rangle \langle \phi_j, \phi_j \rangle}},$$

donde  $\langle , \rangle$  representa el producto escalar propio del sistema y los índices  $i$  y  $j$  corren desde cero hasta  $N$ . De esta forma, la representación matricial del operador Hamiltoniano bajo esta base queda como;

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_{00} & h_{01} & h_{02} & \cdots & h_{0N} \\ h_{10} & h_{11} & h_{12} & \cdots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ h_{N0} & & & & h_{NN} \end{pmatrix}.$$

Así, con nuestra aproximación matricial de orden  $N$  al Hamiltoniano, queda resolver la ecuación matricial de eigenvalores:

$$\mathbf{H}\vec{v} = E\vec{v}. \quad (1.4)$$

donde  $E$  sigue representando la energía del sistema y  $\vec{v}$  es un eigenvector de la matriz  $\mathbf{H}$  cuyas entradas  $(v_0, v_1, \dots, v_n)$  corresponden a los coeficientes de la expansión (1.3). La matriz Hamiltoniana en nuestra base será una matriz cuadrada de orden  $N$ . Es en este sentido que  $N$  determina el grado de la aproximación. Esta forma de proceder es ampliamente usada en varias ramas de la física cuántica donde se necesitan de cálculos muy grandes para estudiar un sistema, debido a que en la representación matricial es posible hacer uso de distintas simplificaciones y de métodos numéricos para resolver el problema de eigenvalores (1.4). Así, por ejemplo, en la química cuántica se suele usar bases de funciones gaussianas con el propósito de poder evaluar fácilmente los elementos de matriz  $h_{i,j}$  de las interacciones Coulombianas. Sin embargo, el tener facilidad de cálculo no garantiza la obtención de buenas aproximaciones a las cantidades relevantes del sistema en estudio y usualmente se requiere así de matrices Hamiltonianas de orden muy grande. Si bien esto no

representa ya un problema serio con las computadoras actuales, si lo es la interpretación física en términos de las funciones de onda resultantes.

Uno de los puntos principales de este enfoque reside, por tanto, en la elección adecuada de la base de funciones (1.2). Dicha elección puede ser mas o menos arbitraria o no<sup>1</sup>, además de que puede solo ser conveniente para aproximar ciertas propiedades del sistema, como por ejemplo, la energía en un cierto dominio del problema, etc. Es por esta razón que se requiere de bases muy grandes, con las cuales se piensa que los resultados tendrán una mejor *convergencia*. Y es en este punto donde podemos introducir el método de Lanczos. El método de Lanczos es un procedimiento tipo Gram-Schmidt que permite, a partir de una función inicial o semilla, construir una base de funciones de manera recursiva. Además, y aquí es donde reside el interés en el método de Lanczos, dicha base de funciones, por la forma en que está construida, se espera que contenga información del sistema. La razón de esto es que el método emplea directamente el operador Hamiltoniano del sistema para construir sus funciones. La consecuencia principal es que la representación matricial del Hamiltoniano en una base de funciones de Lanczos es tridiagonal. Este simple hecho hace de la base de Lanczos una opción muy adecuada para tratamientos numéricos. Asimismo, la convergencia de las cantidades relevantes del sistema se espera sea más rápida.

Debido a la gran facilidad con la que el método se presta para hacer cálculos numéricos, gran parte de los estudios existentes sobre el método de Lanczos en sí mismo se realizan a partir del punto de vista de los métodos numéricos (véase [6] y referencias allí citadas). Esto puede dar por sentado, o incluso minimizar algunos aspectos analíticos relevantes del método. El presente trabajo pretende hacer un estudio del método de Lanczos centrándose en algunos aspectos analíticos, tomando como sistemas de estudio problemas exactamente solubles, en los que las características principales sean perfectamente conocidas. El objetivo principal pretende entender las bondades y posibles defectos del método en el contexto de sistemas solubles para después intentar aplicarlo a problemas no exactamente solubles como el del célebre potencial anarmónico  $V(x) = x^2 + gx^4$ . Por su complejidad, este último punto quedará fuera de los objetivos de la presente tesis y solo se harán algunos estudios preparativos.

---

<sup>1</sup>Por ejemplo es conveniente elegir bases de funciones que tengan las mismas simetrías que el problema original.

Entre otros puntos, nos enfocaremos en estudiar algunas de las propiedades analíticas de las soluciones obtenidas por el método, además de que esperamos poner a prueba algunas características particulares del mismo, como su rapidez de convergencia, su capacidad de recuperar los resultados conocidos, etc.

Con este propósito, el presente trabajo se encuentra dividido en 4 partes, cada una dedicada a un aspecto particular del Método de Lanczos, o relacionado con el mismo.

- Parte I. El Método de Lanczos. En esta parte se presenta el Método de Lanczos por primera vez. Se pretende hacer una demostración del procedimiento, haciendo hincapié en los primeros pasos del mismo. Asimismo, se fija la notación que será utilizada en los capítulos siguientes.
- Parte II. El Oscilador Armónico Simple. En esta parte se aplica el Método de Lanczos a un problema concreto. El problema bajo estudio es, además, exactamente soluble y uno de los sistemas más estudiados y mejor conocidos. El interés de aplicar el método de Lanczos a este problema es poder comparar los resultados obtenidos para las funciones de Lanczos y sus energías respectivas, con las eigenfunciones y eigenvalores exactos del sistema. En particular, se desea ver si por medio del procedimiento se puede obtener una base completa de funciones.
- Parte III. El Oscilador de Morse. En esta parte se aplica el Método de Lanczos a un problema con espectro cuantizado finito. Gran parte de la literatura actual sobre el método mismo gira alrededor del problema de la localización e identificación de niveles espurios, producto únicamente del procedimiento. Deseamos ver de forma analítica cómo es que dichos niveles pueden aparecer en el estudio de este tipo de problemas, y si su aparición puede ser controlada de alguna forma y bajo qué condiciones. Se estudia igualmente el tema de la congruencia de los resultados del método con los resultados exactos, y qué condiciones es necesario cumplir para recuperarlos. En esta parte se busca además poner de manifiesto la importancia que hay en la elección de la función inicial para el método, y todas las consecuencias y condiciones que impone sobre las funciones de Lanczos subsiguientes generadas a partir de la misma.

- Parte IV. El Oscilador Anarmónico Cuártico. En esta parte se hace un bosquejo de aplicación del método de Lanczos a un sistema quasi-exactamente soluble. Este sistema es uno de los sistemas mejor conocidos de toda la física matemática moderna, y se cuenta con una gran cantidad de resultados confiables acerca del mismo. En esta parte se busca explorar sobre todo el aspecto analítico del método de Lanczos, tomando como función semilla una función variacional elegida adecuadamente que satisfaga, entre otras, las propiedades asintóticas del problema. También en este estudio se emplean distintas formas de aproximación: la primera tomando una base fija de eigenfunciones del oscilador armónico (que no satisfacen las mismas propiedades asintóticas del oscilador anarmónico), prescindiendo del procedimiento de Lanczos. Las dos formas siguientes hacen uso del método, partiendo de dos funciones iniciales distintas.



# Capítulo 2

## El Método de Lanczos

### 2.1. Introducción

En el presente capítulo introducimos el método de Lanczos [1], algunas de cuyas aplicaciones son el objeto de estudio en los capítulos siguientes. Intentamos introducir el método de una manera relativamente formal, haciendo especial hincapié en los primeros pasos del procedimiento con el fin de hacer que el lector adquiera cierta familiaridad con el método.

Sea  $\hat{H}$  un operador lineal actuando en un cierto espacio vectorial  $\mathcal{V}$  de dimensión finita o infinita. Cualquier representación matricial de dicho operador se escribirá como:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_{00} & h_{01} & h_{02} \dots & h_{0j} & \dots \\ h_{10} & h_{11} & h_{12} \dots & h_{1j} & \dots \\ \vdots & & & \vdots & \\ h_{i0} & h_{i1} & h_{i2} \dots & h_{ij} & \dots \\ \vdots & & & \vdots & \end{pmatrix},$$

donde

$$h_{i,j} \equiv \langle \phi_i, \hat{H}\phi_j \rangle,$$

y  $\{\phi_i\}$  es una base ortonormal para el espacio vectorial  $\mathcal{V}$ . Entonces, si el operador  $\hat{H}$  es hermitiano, es posible obtener una base ortonormal en la cual la representación matricial de  $\hat{H}$  sea tridiagonal. Esta base se puede obtener de forma constructiva usando el *procedimiento de Lanczos*, que describimos en detalle a continuación.

A lo largo de la descripción siguiente, adoptaremos la convención de referirnos a las funciones obtenidas por el procedimiento como *funciones de Lanczos*. A su vez, nos referiremos a las funciones de Lanczos como  $\phi_n$  cuando no se encuentren normalizadas, y como  $\psi_n$  cuando lo estén; más específicamente:

$$\psi_n \equiv \frac{\phi_n}{\langle \phi_n, \phi_n \rangle^{\frac{1}{2}}}.$$

Además, definimos:

$$\phi^{(n)} \equiv \hat{H}^n \psi_0,$$

y recordamos que, siendo  $\hat{H}$  un operador hermitiano, se cumple la ecuación  $\langle \psi_n, \hat{H} \psi_m \rangle = \langle \hat{H} \psi_n, \psi_m \rangle$ . Esta última relación será muy importante para la demostración del procedimiento.

## 2.2. Demostración del Método de Lanczos

El método de Lanczos puede ser resumido en su forma algorítmica de manera bastante simple: Dado un operador Hamiltoniano  $\hat{H}$  y una función inicial normalizada  $\psi_0$ , podemos construir una base de funciones usando el procedimiento de ortogonalización de Gram-Schmidt partiendo de una base<sup>1</sup>, construida a partir de la función  $\psi_0$  y el operador  $\hat{H}$ :

$$B_K(\psi_0, \hat{H}) \equiv \left\{ \psi_0, \hat{H}\psi_0, \hat{H}^2\psi_0, \hat{H}^3\psi_0 \dots \right\},$$

para obtener una base ortonormal en la cual la representación matricial del operador  $\hat{H}$  aparecerá en forma tridiagonal.

La demostración de dicha afirmación se puede llevar a cabo de manera bastante directa por medio de inducción matemática. A continuación se procede a hacer dicha demostración, llevando a cabo de manera explícita los primeros pasos del procedimiento, con el fin de obtener claridad.

Sea  $\psi_0$  cualquier función normalizada ( $\langle \psi_0, \psi_0 \rangle = 1$ ) en  $\mathcal{V}$ , y definamos  $\phi^{(1)}$  en la siguiente forma:

$$\phi^{(1)} = \hat{H}\psi_0. \quad (2.1)$$

<sup>1</sup>La base a partir de la cual se desarrolla el método de Lanczos es llamada *Base de Krylov*.



Aplicando el procedimiento de Gram-Schmidt podemos ortogonalizar  $\phi^{(1)}$ . De ésta forma obtenemos:

$$\phi_1 = \phi^{(1)} - \langle \phi^{(1)}, \psi_0 \rangle \psi_0 ,$$

o sustituyendo la definición de  $\phi^{(1)}$  (ec. 2.1), y usando la hermiticidad de  $\hat{H}$ :

$$\phi_1 = \hat{H}\psi_0 - \langle \psi_0, \hat{H}\psi_0 \rangle \psi_0 .$$

Podemos normalizar  $\phi_1$  para obtener:

$$\psi_1 = \frac{\hat{H}\psi_0 - \langle \psi_0, \hat{H}\psi_0 \rangle \psi_0}{\|\hat{H}\psi_0 - \langle \psi_0, \hat{H}\psi_0 \rangle \psi_0\|} , \quad (2.2)$$

la cual es la forma explícita de la primera función de Lanczos.

Si definimos:

$$\begin{aligned} \|\hat{H}\psi_0 - \langle \psi_0, \hat{H}\psi_0 \rangle \psi_0\| &\equiv N_1 , \\ \langle \psi_0, \hat{H}\psi_0 \rangle &\equiv h_{00} , \end{aligned}$$

podemos escribir la ecuación (2.2) en la siguiente forma:

$$N_1\psi_1 = \hat{H}\psi_0 - h_{00}\psi_0 , \quad (2.3)$$

Continuando con este orden de ideas, podemos construir la segunda función de Lanczos  $\psi_2$  . Primero definamos  $\phi^{(2)}$  como:

$$\phi^{(2)} \equiv \hat{H}^2\psi_0 ,$$

que se puede simplificar si se usa la ecuación (2.3) para obtener:

$$\begin{aligned} \phi^{(2)} &= \hat{H}(\hat{H}\psi_0) = \hat{H}(N_1\psi_1 + h_{00}\psi_0) \\ &= N_1\hat{H}\psi_1 + h_{00}\hat{H}\psi_0 \\ &= N_1\hat{H}\psi_1 + h_{00}N_1\psi_1 + h_{00}^2\psi_0 . \end{aligned} \quad (2.4)$$

Así, aplicando de nuevo el procedimiento de Gram-Schmidt obtenemos:

$$\phi_2 = \phi^{(2)} - \langle \phi^{(2)}, \psi_1 \rangle \psi_1 - \langle \phi^{(2)}, \psi_0 \rangle \psi_0 , \quad (2.5)$$

la cual podemos escribir en términos de  $\psi_0$  y  $\psi_1$  sustituyendo (2.4) en (2.5) hasta obtener:

$$\phi_2 = N_1 \left( \hat{H}\psi_1 - \langle \psi_1, \hat{H}\psi_1 \rangle \psi_1 - \langle \psi_1, \hat{H}\psi_0 \rangle \psi_0 \right),$$

en donde usamos la hermiticidad de  $\hat{H}$  para poner  $\langle \hat{H}\psi_1, \psi_0 \rangle = \langle \psi_1, \hat{H}\psi_0 \rangle$ . Normalizando obtenemos

$$\psi_2 = \frac{\hat{H}\psi_1 - \langle \psi_1, \hat{H}\psi_1 \rangle \psi_1 - \langle \psi_1, \hat{H}\psi_0 \rangle \psi_0}{\|\hat{H}\psi_1 - \langle \psi_1, \hat{H}\psi_1 \rangle \psi_1 - \langle \psi_1, \hat{H}\psi_0 \rangle \psi_0\|}, \quad (2.6)$$

la cual es la forma explícita de la segunda función de Lanczos.

Si definimos ahora:

$$\begin{aligned} \|\hat{H}\psi_1 - \langle \psi_1, \hat{H}\psi_1 \rangle \psi_1 - \langle \psi_1, \hat{H}\psi_0 \rangle \psi_0\| &\equiv N_2, \\ \langle \psi_1, \hat{H}\psi_1 \rangle &\equiv h_{11}, \\ \langle \psi_1, \hat{H}\psi_0 \rangle &\equiv h_{10}, \end{aligned}$$

podemos poner (2.6) como:

$$N_2\psi_2 = \hat{H}\psi_1 - h_{11}\psi_1 - h_{10}\psi_0. \quad (2.7)$$

Ahora, construyamos la tercera función de Lanczos,  $\psi_3$ . Empezamos definiendo

$$\phi^{(3)} \equiv \hat{H}^3\psi_0$$

la cual deseamos desarrollar en términos de  $\psi_2$ ,  $\psi_1$  y  $\psi_0$ . Para hacerlo, recordamos la forma de  $\hat{H}^2\psi_0$ , en la ecuación (2.4), y usamos la ecuación (2.7) para sustituir  $\hat{H}\psi_1$ . El resultado es:

$$\hat{H}^2\psi_0 = N_1N_2\psi_2 + N_1(h_{11} + h_{00})\psi_1 + (N_1h_{10} + h_{00}^2)\psi_0,$$

la cual podemos usar para desarrollar  $\phi^{(3)} = \hat{H}^3\psi_0 = \hat{H}(\hat{H}^2\psi_0)$ . Esta última ecuación quedará en términos de  $\hat{H}\psi_2$ ,  $\hat{H}\psi_1$  y  $\hat{H}\psi_0$ . Podemos usar (2.7) y (2.3) para sustituir  $\hat{H}\psi_1$  y  $\hat{H}\psi_0$  respectivamente. El resultado final es:

$$\begin{aligned} \phi^{(3)} = \hat{H}^3\psi_0 = \\ N_1N_2\hat{H}\psi_2 + N_1N_2(h_{11} + h_{00})\psi_2 + N_1(h_{11}(h_{11} + h_{00}) + (N_1h_{10} + h_{00}^2))\psi_1 + \\ (h_{01}N_1(h_{11} + h_{00}) + h_{00}(N_1h_{10} + h_{00}^2))\psi_0 \end{aligned}$$

Así, sustituyendo esta expresión en la función obtenida mediante el procedimiento de Gram-Schmidt:

$$\phi_3 = \phi^{(3)} - \langle \phi^{(3)}, \psi_2 \rangle \psi_2 - \langle \phi^{(3)}, \psi_1 \rangle \psi_1 - \langle \phi^{(3)}, \psi_0 \rangle \psi_0,$$

obtenemos, después de simplificar:

$$\phi_3 = N_1 N_2 \left( \hat{H}\psi_2 - \langle \psi_2, \hat{H}\psi_2 \rangle \psi_2 - \langle \psi_2, \hat{H}\psi_1 \rangle \psi_1 - \langle \psi_2, \hat{H}\psi_0 \rangle \psi_0 \right).$$

Aquí vemos que  $\phi_3$  no tiene componente sobre  $\psi_0$  ya que

$$\langle \psi_2, \hat{H}\psi_0 \rangle = \langle \psi_2, N_1\psi_1 + h_{00}\psi_0 \rangle = 0.$$

Luego, la ecuación queda:

$$\phi_3 = N_1 N_2 \left( \hat{H}\psi_2 - \langle \psi_2, \hat{H}\psi_2 \rangle \psi_2 - \langle \psi_2, \hat{H}\psi_1 \rangle \psi_1 \right),$$

y normalizando:

$$\phi_3 = \frac{\hat{H}\psi_2 - \langle \psi_2, \hat{H}\psi_2 \rangle \psi_2 - \langle \psi_2, \hat{H}\psi_1 \rangle \psi_1}{\|\hat{H}\psi_2 - \langle \psi_2, \hat{H}\psi_2 \rangle \psi_2 - \langle \psi_2, \hat{H}\psi_1 \rangle \psi_1\|}, \quad (2.8)$$

que es la forma explícita de la tercera función de Lanczos. Si definimos, como antes,

$$\begin{aligned} \|\hat{H}\psi_2 - \langle \psi_2, \hat{H}\psi_1 \rangle \psi_1 - \langle \psi_2, \hat{H}\psi_2 \rangle \psi_2\| &\equiv N_3, \\ \langle \psi_2, \hat{H}\psi_2 \rangle &\equiv h_{22}, \\ \langle \psi_2, \hat{H}\psi_1 \rangle &\equiv h_{21}, \end{aligned}$$

entonces podemos escribir (2.8) como:

$$\psi_3 = \frac{1}{N_3} \left( \hat{H}\psi_2 - h_{22}\psi_2 - h_{21}\psi_1 \right).$$

Claramente, podemos ver cómo la base producirá una representación matricial tridiagonal. En efecto, la matriz obtenida hasta ahora es:

$$\mathbf{H}_{3 \times 3} = \begin{pmatrix} h_{00} & h_{01} & 0 \\ h_{10} & h_{11} & h_{12} \\ 0 & h_{21} & h_{22} \end{pmatrix}.$$

Los elementos fuera de la diagonal principal cumplen:

$$\begin{aligned} h_{01} = h_{10} &= \langle \psi_1, \hat{H}\psi_0 \rangle = \langle \psi_1, N_1\psi_1 + h_{00}\psi_0 \rangle = N_1, \\ h_{12} = h_{21} &= \langle \psi_2, \hat{H}\psi_1 \rangle = \langle \psi_2, N_2\psi_2 + h_{11}\psi_1 + h_{01}\psi_0 \rangle = N_2, \end{aligned}$$

es decir, los elementos fuera de la diagonal son iguales a las normas de las funciones de Lanczos. Así, la matriz anterior queda:

$$\mathbf{H}_{3 \times 3} = \begin{pmatrix} h_{00} & N_1 & 0 \\ N_1 & h_{11} & N_2 \\ 0 & N_2 & h_{22} \end{pmatrix}.$$

Por lo que resta del capítulo redefinimos  $h_{i,i} \equiv h_i$  por simplicidad.

En este punto, podemos imaginar la forma general de deben tener las funciones de Lanczos siguientes, i.e.

$$\psi_i = \frac{1}{N_i} \left( \hat{H}\psi_{i-1} - h_{i-1}\psi_{i-1} - N_{i-1}\psi_{i-2} \right), \quad (2.9)$$

donde, como antes:

$$\|\hat{H}\psi_{i-1} - h_{i-1}\psi_{i-1} - N_{i-1}\psi_{i-2}\| \equiv N_i.$$

Para probar la validez de la ecuación (2.9), usamos inducción matemática. Consideramos lo hecho hasta  $n=3$  como base de inducción. Supongamos ahora que la ecuación (2.9) es válida para  $i=n$  (hipótesis de inducción). Esto quiere decir que:

$$\psi_n = \frac{1}{N_n} \left( \hat{H}\psi_{n-1} - h_{n-1}\psi_{n-1} - N_{n-1}\psi_{n-2} \right)$$

y debemos probar lo mismo para  $i=n+1$ , i.e.

$$\psi_{n+1} = \frac{1}{N_{n+1}} \left( \hat{H}\psi_n - h_n\psi_n - N_n\psi_{n-1} \right)$$

Ahora, por el procedimiento de Gram-Schmidt, la  $(n+1)$ -ésima función de Lanczos es:

$$\phi_{n+1} = \phi^{(n+1)} - \sum_{i=0}^n \langle \phi^{(n+1)}, \psi_i \rangle \psi_i. \quad (2.10)$$

con  $\phi^{(n+1)}$  definida como:

$$\phi^{(n+1)} \equiv \hat{H}^{n+1}\psi_0$$

al igual que antes. Analizando la forma que tienen  $\phi^{(1)}$ ,  $\phi^{(2)}$  y  $\phi^{(3)}$  podemos decir que  $\phi^{(n+1)}$  tiene, de manera muy general, la siguiente forma:

$$\phi^{(n+1)} = \alpha \hat{H}\psi_n + \sum_{k=0}^n C_k \psi_k$$

donde  $\alpha$  y  $C_k$  son ciertos coeficientes. Si sustituimos ésta ecuación en (2.10) se tiene:

$$\phi_{n+1} = \alpha \hat{H}\psi_n + \sum_{k=0}^n C_k \psi_k - \sum_{i=0}^n \left( \alpha \langle \hat{H}\psi_n, \psi_i \rangle + \sum_{k=0}^n C_k \langle \psi_k, \psi_i \rangle \right) \psi_i. \quad (2.11)$$

Pero las funciones de Lanczos son ortonormales, i.e.  $\langle \psi_k, \psi_i \rangle = \delta_{k,i}$ ; luego tenemos que:

$$\sum_{i=0}^n \sum_{k=0}^n C_k \langle \psi_k, \psi_i \rangle \psi_i = \sum_{i=0}^n \sum_{k=0}^n C_k \delta_{k,i} \psi_i = \sum_{i=0}^n C_i \psi_i$$

y sustituyendo en (2.11) obtenemos:

$$\phi_{n+1} = \alpha \left( \hat{H}\psi_n - \sum_{i=0}^n \langle \hat{H}\psi_n, \psi_i \rangle \psi_i \right) \quad (2.12)$$

pero, por hermiticidad  $\langle \hat{H}\psi_n, \psi_i \rangle = \langle \psi_n, \hat{H}\psi_i \rangle$ , y como  $\hat{H}\psi_i = N_{i+1}\psi_{i+1} + h_i\psi_i + N_i\psi_{i-1}$  entonces:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^n \langle \psi_n, \hat{H}\psi_i \rangle \psi_i &= \sum_{i=0}^n (N_{i+1} \langle \psi_n, \psi_{i+1} \rangle + h_i \langle \psi_n, \psi_i \rangle + N_i \langle \psi_n, \psi_{i-1} \rangle) \psi_i \\ \sum_{i=0}^n \langle \psi_n, \hat{H}\psi_i \rangle \psi_i &= \sum_{i=0}^n (N_{i+1} \langle \psi_n, \psi_{i+1} \rangle + h_i \langle \psi_n, \psi_i \rangle + N_i \langle \psi_n, \psi_{i-1} \rangle) \psi_i \\ &= \sum_{i=0}^n (N_{i+1} \delta_{n,i+1} + h_i \delta_{n,i} + N_i \delta_{n,i-1}) \psi_i \\ &= h_n \psi_n + N_n \psi_{n-1} \end{aligned}$$

Sustituyendo este resultado en (2.12):

$$\phi_{n+1} = \alpha \left( \hat{H}\psi_n - h_n\psi_n - N_n\psi_{n-1} \right)$$

o, normalizando:

$$\psi_{n+1} = \frac{\hat{H}\psi_n - h_n\psi_n - N_n\psi_{n-1}}{\|\hat{H}\psi_n - h_n\psi_n - N_n\psi_{n-1}\|}$$

y si, como antes, definimos:

$$\|\hat{H}\psi_n - h_n\psi_n - N_n\psi_{n-1}\| \equiv N_{n+1}$$

entonces obtenemos:

$$\psi_{n+1} = \frac{1}{N_{n+1}} \left( \hat{H}\psi_n - h_n\psi_n - N_n\psi_{n-1} \right)$$

que es lo que deseábamos demostrar. De esta forma, por el procedimiento de Lanczos obtenemos una representación matricial tridiagonal, de la forma:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_{00} & N_1 & 0 & \dots & \cdot & \cdot & 0 \\ N_1 & h_{11} & N_2 & 0 & \dots & \cdot & 0 \\ 0 & N_2 & h_{22} & \ddots & \cdot & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & & N_i & 0 \\ \cdot & \vdots & & 0 & N_i & h_{ii} & \ddots \\ \cdot & \cdot & \vdots & \cdot & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

### 2.2.1. Otra demostración

El procedimiento de Lanczos puede plantearse de varias formas. Por ejemplo, consideremos las funciones de Lanczos ortogonales no-normalizadas generadas por el operador hermitiano (hamiltoniano)  $\hat{H}$  y la función inicial  $\phi_0$  definidas como

$$\phi_n = \hat{H}\phi_{n-1} - \sum_{k=0}^{n-1} \langle \hat{H}\phi_{n-1}, \phi_k \rangle \phi_k, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.13)$$

Con esta definición es fácil demostrar que

$$\hat{H}\phi_n = c_{n+1}\phi_{n+1} + c_n\phi_n + c_{n-1}\phi_{n-1}, \quad (2.14)$$

en donde

$$c_{n+1} = 1, c_n = \langle \hat{H}\phi_n, \phi_n \rangle, c_{n-1} = \langle \hat{H}\phi_n, \phi_{n-1} \rangle,$$

y por lo tanto la representación matricial de  $\hat{H}$  en la base  $\{\phi_i\}$  será tridiagonal. En efecto, si observamos la secuencia de las primeras funciones de Lanczos de acuerdo con (2.13) obtenemos

$$\begin{aligned} \phi_0 &= \phi_0, \\ \phi_1 &= \hat{H}\phi_0 - \langle \hat{H}\phi_0, \phi_0 \rangle \phi_0, \\ \phi_2 &= \hat{H}\phi_1 - \langle \hat{H}\phi_1, \phi_1 \rangle \phi_1 - \langle \hat{H}\phi_1, \phi_0 \rangle \phi_0, \\ \phi_3 &= \hat{H}\phi_2 - \langle \hat{H}\phi_2, \phi_2 \rangle \phi_2 - \langle \hat{H}\phi_2, \phi_1 \rangle \phi_1 - \langle \hat{H}\phi_2, \phi_0 \rangle \phi_0. \end{aligned} \quad (2.15)$$

En la definición de la función  $\phi_3$  usamos la propiedad de hermiticidad de  $\hat{H}$  para escribir

$$\langle \hat{H}\phi_2, \phi_0 \rangle = \langle \phi_2, \hat{H}\phi_0 \rangle = 0,$$

ya que  $\hat{H}\phi_0$  solo tiene proyección sobre el *plano* generado por  $\{\phi_0, \phi_1\}$ , como se ve de la definición de la función  $\phi_1$  arriba. Por lo tanto las primeras funciones (2.15) satisfacen la propiedad (2.14). La demostración general puede hacerse por inducción: consideremos la función  $\phi_{n+1}$

$$\begin{aligned} \phi_{n+1} &\equiv \hat{H}\phi_n - \sum_{k=0}^n \langle \hat{H}\phi_n, \phi_k \rangle \phi_k, \\ &= \hat{H}\phi_n - \sum_{k=0}^n \langle \phi_n, \hat{H}\phi_k \rangle \phi_k, \end{aligned} \quad (2.16)$$

en donde hemos usado la propiedad de hermiticidad del operador  $\hat{H}$ . Ahora bien, por hipótesis

$$\hat{H}\phi_k = c_{k+1}\phi_{k+1} + c_k\phi_k + c_{k-1}\phi_{k-1}, \quad (k < n). \quad (2.17)$$

en donde  $c_{k+1} = 1$ ,  $c_k = \langle \hat{H}\phi_k, \phi_k \rangle$ ,  $c_{k-1} = \langle \hat{H}\phi_k, \phi_{k-1} \rangle$ . Sustituyendo (2.17) en (2.16) obtenemos

$$\begin{aligned}\phi_{n+1} &= \hat{H}\phi_n - \sum_{k=0}^n \langle \phi_n, \phi_{k+1} + c_k\phi_k + c_{k-1}\phi_{k-1} \rangle \phi_k, \\ &= \hat{H}\phi_n - \sum_{k=0}^n \left( \langle \phi_n, \phi_{k+1} \rangle + c_k \langle \phi_n, \phi_k \rangle + c_{k-1} \langle \phi_n, \phi_{k-1} \rangle \right) \phi_k \\ &= \hat{H}\phi_n - \langle \phi_n, \phi_n \rangle \phi_{n-1} - c_n \langle \phi_n, \phi_n \rangle \phi_n,\end{aligned}$$

en donde el último término no contribuye ya que  $k \leq n$ . Por lo tanto  $\hat{H}\phi_n$  satisface la propiedad (2.14), i.e.

$$\hat{H}\phi_n = \phi_{n+1} + c_n \langle \phi_n, \phi_n \rangle \phi_n + \langle \phi_n, \phi_n \rangle \phi_{n-1}.$$

De aquí vemos que los elementos de matriz son

$$\begin{aligned}h_{nn} &\equiv \frac{\langle \phi_n | \hat{H} | \phi_n \rangle}{\langle \phi_n | \phi_n \rangle} = c_n, \\ h_{n+1n} &\equiv \frac{\langle \phi_{n+1} | \hat{H} | \phi_n \rangle}{\sqrt{\langle \phi_{n+1} | \phi_{n+1} \rangle \langle \phi_n | \phi_n \rangle}} = \sqrt{\frac{\langle \phi_{n+1} | \phi_{n+1} \rangle}{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}}, \\ h_{n\ n+1} &\equiv \frac{\langle \phi_n | \hat{H} | \phi_{n+1} \rangle}{\sqrt{\langle \phi_{n+1} | \phi_{n+1} \rangle \langle \phi_n | \phi_n \rangle}} = \sqrt{\frac{\langle \phi_{n+1} | \phi_{n+1} \rangle}{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}}.\end{aligned}$$

### 2.3. Consideraciones

Como se puede observar, el método de Lanczos nos permite construir una familia de funciones ortonormales de manera recursiva y bastante directa. Además, el hecho de que en la construcción de dichas funciones esté involucrado directamente el operador hamiltoniano nos permite esperar que las funciones de Lanczos contengan información sobre el sistema particular bajo estudio. De hecho, la característica más importante (y atractiva) del método es su capacidad de crear una base de funciones a partir del sistema mismo. Podríamos esperar entonces que dicha base incorpore de algún modo varias características propias del sistema, y que nos proporcionara de una mejor aproximación al estudio del espectro de energías.



Un elemento necesario para construir funciones apropiadas según los criterios ya mencionados se encuentra en la elección adecuada de la función inicial. Siguiendo los mismos lineamientos, se debe procurar que dicha función esté relacionada con el sistema físico. Así, por ejemplo, podemos pensar en elegir como función inicial una función variacional para el estado base que satisfaga condiciones físicas apropiadas siguiendo algún criterio, como el de Turbiner [7, 8, 9] que consiste básicamente en lo siguiente.

Construir una función variacional adecuada  $\psi_0$ , para la cual el potencial<sup>2</sup>

$$W(x) \equiv \frac{d_x^2 \psi_0}{\psi_0},$$

reproduzca las propiedades más importantes del problema original de forma tan precisa como sea posible. Si se trata del estado base, la función de onda variacional se debe desvanecer en la frontera del sistema y no debe tener nodos dentro del dominio de definición del problema.

A lo largo de nuestro estudio particular de distintos sistemas, escogemos funciones iniciales de este tipo.

Finalmente, debemos fijar un poco de notación. Primero que nada, nos referiremos de aquí en adelante a las funciones no-normalizadas y normalizadas como  $\phi(x)$  y  $\psi(x)$  respectivamente, a menos que se indique que sea de otra forma. Las funciones normalizadas están definidas, al igual que en este capítulo, como:

$$\psi(x) \equiv \frac{\phi(x)}{\langle \phi(x) | \phi(x) \rangle^{\frac{1}{2}}},$$

Sea cual sea la regla por la que se defina el producto escalar. Además, esta regla se aplica tanto a funciones de Lanczos como a funciones de otro tipo.

A lo largo del resto de este trabajo estudiamos un par de sistemas exactamente solubles de la mecánica cuántica, y comparamos las eigenfunciones exactas de dichos sistemas con funciones obtenidas para los mismos a través del método de Lanczos. Es por lo tanto necesario hacer una distinción entre ambos tipos de funciones. Proponemos en primer lugar referirnos siempre a las eigenfunciones exactas de los sistemas precisamente como *eigenfunciones* y a las funciones obtenidas por el procedimiento como *funciones de Lanczos*,

<sup>2</sup>La función variacional  $\Psi_0$  es, por construcción, una solución exacta del potencial  $W(x)$ .

---

a menos que se indique de otra forma. Así, para marcar la diferencia entre ambas funciones, distinguimos a las funciones de Lanczos con un superíndice, de la forma  $\psi(x)^{\mathcal{L}}$ .

# Capítulo 3

## Oscilador Armónico y el Procedimiento de Lanczos.

### 3.1. Introducción.

El propósito del presente capítulo es hacer una primera aplicación del método de Lanczos a un problema totalmente conocido: el oscilador armónico. Así, por medio de una función inicial simple, pero adecuada, y a través del procedimiento obtenemos una secuencia de funciones ortonormales y una representación matricial tridiagonal para el Hamiltoniano del sistema. Con el fin de hacer las cosas simples elegimos como función inicial una eigenfunción correspondiente al estado base de un oscilador armónico cuya frecuencia será un parámetro variacional, y realizamos un estudio de las funciones de Lanczos generadas por esta función inicial así como del espectro de energía. Se hace un análisis de algunas de las propiedades analíticas de las funciones de Lanczos y del espectro de energías como función del parámetro variacional y en particular en el límite para el cual el parámetro coincide con la frecuencia del problema original.

### 3.2. El Oscilador Armónico Unidimensional.

El oscilador armónico unidimensional es un problema que ocupa un lugar especial en la mecánica cuántica. Es un sistema exactamente soluble; tiene un espectro de energías totalmente discreto cuya característica principal es

que es equidistante<sup>1</sup>. Su importancia radica en el hecho de que puede ser utilizado para hacer una primera aproximación a otros sistemas alrededor de posiciones de equilibrio estable de los mismos. El oscilador armónico simple se encuentra descrito por el potencial

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad (-\infty < x < +\infty), \quad (3.1)$$

en donde  $\omega$  es la frecuencia del oscilador clásico<sup>2</sup>, y  $m$  es la masa de la partícula que oscila.

A lo largo de las líneas siguientes adoptamos unidades tales que  $\hbar = m = 1$ , y por simplicidad fijamos la frecuencia del oscilador como  $\omega = 1$ . Así, la ecuación estacionaria de Schrödinger correspondiente es:

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + x^2\psi = \epsilon\psi, \quad (3.2)$$

donde  $\epsilon \equiv 2E$ , y  $E$  es la energía del oscilador en las unidades elegidas. Las funciones de onda  $\psi(x)$  satisfacen las condiciones de frontera:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) \rightarrow 0, \quad (3.3)$$

tienen paridad definida<sup>3</sup>, y se eligen normalizadas  $\langle \psi(x) | \psi(x) \rangle = 1$ , con el producto escalar usual definido como:

$$\langle f(x) | g(x) \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x) dx. \quad (3.4)$$

El análisis asintótico de la ecuación (3.2), junto con las condiciones de frontera (3.3), dictan la forma de la función de onda correspondiente al estado

<sup>1</sup>Esto quiere decir que la diferencia en energía entre dos niveles consecutivos cumplen:

$$\Delta\epsilon_n \equiv \epsilon_n - \epsilon_{n-1} = \text{Const.} \quad n = 1, 2, \dots$$

<sup>2</sup>La frecuencia de oscilación  $\omega$  esta relacionada con la constante  $k$  de la ley de Hooke  $F = -kx$ , por la relación  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ .

<sup>3</sup>Como el Hamiltoniano del sistema  $\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2$  conmuta con el operador de paridad  $\hat{P}f(x) = f(-x)$  entonces sus eigenfunciones tienen paridad definida, i.e.  $\psi(-x) = \pm\psi(x)$ .

fundamental del sistema. Esta función de onda no tiene nodos (*teorema de Perron*) y tiene la forma normalizada<sup>4</sup>:

$$\psi_0(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2}}. \quad (3.5)$$

Una propiedad muy importante en el caso del oscilador armónico es que todas sus eigenfunciones tienen la forma factorizada  $\psi(x) = \psi_0(x) u(x)$ , en donde  $\psi_0(x)$  corresponde a la función de onda del estado base. Entonces, haciendo esta sustitución en la ecuación de Schrödinger (3.2) y multiplicando<sup>5</sup> el resultado por  $e^{\frac{x^2}{2}}$ , obtenemos una nueva ecuación de eigenvalores para la función  $u(x)$ . Propiamente:

$$-\frac{d^2u}{dx^2} + 2x \frac{du}{dx} + u = \epsilon u. \quad (3.6)$$

La ecuación (3.6) puede resolverse asumiendo soluciones  $u(x)$  que tengan la forma de una expansión en serie de potencias (*método de Frobenius*). Las soluciones físicas corresponden a soluciones polinomiales las cuales demandan que se cumpla la condición de cuantización de la energía

$$\epsilon - 1 \equiv 2n, \quad (3.7)$$

con  $n$  un entero no-negativo. Así, la ecuación (3.6) se transforma en la ecuación diferencial de Hermite:

$$-\frac{d^2H_n(x)}{dx^2} + 2 \frac{dH_n(x)}{dx} - 2nH_n(x) = 0,$$

con  $n = 0, 1, 2, \dots$  y donde  $H_n(x)$  son las soluciones polinomiales a la ecuación, llamadas *polinomios de Hermite*, definidos explícitamente mediante la relación:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}).$$

---

<sup>4</sup>Vale la pena mencionar que la eigenfunción correspondiente al estado base, en las unidades originales tiene la forma:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}.$$

<sup>5</sup>Esto es, *rotando* el operador Hamiltoniano original con la función de onda del estado fundamental  $\psi_0$

Los primeros polinomios de Hermite son:

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1, \\ H_1(x) &= 2x, \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2, \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x, \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12. \end{aligned}$$

Estos polinomios están ortonormalizados con la función de peso

$$w(x) \equiv e^{-x^2},$$

y con producto escalar

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{m,n}.$$

Finalmente, repetimos que la cuantización del espectro de energía está dada por la condición (3.7), tal que el valor de la energía del  $n$ -ésimo estado ligado es:

$$\epsilon_n = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.8)$$

De esta forma podemos ver que el espectro de energía del oscilador armónico está cuantizado, con una separación entre niveles de  $\Delta\epsilon \equiv \epsilon_{n+1} - \epsilon_n = 2$  y con una energía de punto cero  $\epsilon_0 = 1$ . Las soluciones normalizadas a la ecuación de Schrödinger original (3.2) están dadas por:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \quad (3.9)$$

igualmente con  $n = 0, 1, \dots, \infty$ .

### 3.3. El Procedimiento de Lanczos.

En este punto podemos empezar a emplear el procedimiento de Lanczos, tomando como punto de partida el operador Hamiltoniano correspondiente a la ecuación de Schrödinger (3.2):

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2. \quad (3.10)$$

y considerando como función inicial a:

$$\psi_0^{\mathcal{L}} = \frac{1}{(\pi\alpha)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}, \quad (3.11)$$

donde  $\alpha$  es un parámetro real positivo:  $0 < \alpha < \infty$ . La elección de dicha función inicial está motivada por varias características que la hacen adecuada para describir al estado base del sistema: carece de nodos, es normalizable y satisface las condiciones de frontera (3.3) de nuestro problema. Además, esta función inicial es igual a la eigenfunción exacta del estado base del sistema en el límite  $\alpha \rightarrow 1$ <sup>6</sup>. El potencial asociado a esta función inicial está dado por:

$$W(x) \equiv \frac{\partial_x^2 \psi_0^{\mathcal{L}}}{\psi_0^{\mathcal{L}}} = \frac{x^2}{\alpha^2} - \frac{1}{\alpha}.$$

Es decir, nuestra función inicial es en realidad el estado base exacto de un oscilador armónico determinado por la ecuación de Schrödinger siguiente:

$$-\frac{d^2 \psi_0^{\mathcal{L}}}{dx^2} + \tilde{\omega}^2 x^2 \psi_0^{\mathcal{L}} = \tilde{\epsilon}_0 \psi_0^{\mathcal{L}},$$

con frecuencia  $\tilde{\omega} = \frac{1}{\alpha}$ , y cuya energía es  $\tilde{\epsilon}_0 = \frac{1}{\alpha}$ .

### 3.3.1. Funciones de Lanczos

Puede demostrarse rigurosamente (ver apéndice C) que las funciones pares obtenidas por el procedimiento de Lanczos (no normalizadas) están dadas por:

$$\phi_n^{\mathcal{L}}(x) = \frac{(\alpha^2 - 1)}{2\alpha} \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n}(2n-2)!}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}} H_{2n}\left(\frac{x}{\sqrt{\alpha}}\right), \quad (3.12)$$

con las normas respectivas:

$$N_n^{\mathcal{L}} = \sqrt{\frac{(2n)!}{(2n-2)!}} \frac{(\alpha^2 - 1)}{2\alpha}, \quad (3.13)$$

<sup>6</sup>Aunque la selección de la función inicial es en principio arbitraria, la forma de la función de onda para el estado base del oscilador armónico está prácticamente fijada por el mismo problema.

donde  $N_n$  se define como:

$$N_n^{\mathcal{L}} \equiv \langle \phi_n^{\mathcal{L}} | \phi_n^{\mathcal{L}} \rangle^{\frac{1}{2}}$$

de tal forma que las funciones de Lanczos normalizadas resultan ser:

$$\psi_n^{\mathcal{L}}(x) = \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}} H_{2n}\left(\frac{x}{\sqrt{\alpha}}\right), \quad (3.14)$$

donde  $n = 1, 2, \dots, \infty$ ; y donde usamos nuestra convención:

$$\psi_n^{\mathcal{L}}(x) \equiv \frac{\phi_n^{\mathcal{L}}(x)}{N_n^{\mathcal{L}}}.$$

Estas funciones resultan ser todas eigenfunciones de un oscilador armónico de frecuencia  $\omega = \frac{1}{\alpha}$ , y en el límite  $\alpha = 1$  son iguales a las eigenfunciones pares exactas del sistema original.

Debemos hacer notar algunas de las características de la familia de funciones obtenida hasta el momento a partir del procedimiento de Lanczos. La primera es que todas las funciones tienen paridad par (i.e.  $\psi_n^{\mathcal{L}}(-x) = +\psi_n^{\mathcal{L}}(x)$ ), como resultado de usar una función inicial de paridad par en su construcción y de la invariancia del Hamiltoniano bajo transformaciones  $x \rightarrow -x$  arriba mencionada. Por lo tanto, nuestro estudio queda así restringido a los estados ligados pares del sistema. Si deseamos estudiar los estados ligados impares del problema, entonces debemos utilizar una función inicial de paridad impar, como:

$$\psi_0^{\mathcal{L}} = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi\alpha^3}}} x e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}, \quad (3.15)$$

la cual es la eigenfunción correspondiente al primer estado excitado de un oscilador armónico con frecuencia  $\omega = \frac{1}{\alpha}$ . Al utilizar dicha función obtenemos que las funciones de Lanczos normalizadas son:

$$\psi_n^{\mathcal{L}}(x) = \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n+1}(2n+1)!}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}} H_{2n+1}\left(\frac{x}{\sqrt{\alpha}}\right), \quad (3.16)$$

donde  $n = 1, 2, \dots, \infty$ .

En lo sucesivo será útil conocer la norma de las funciones de Lanczos no-normalizadas en el caso impar. Estas normas, en analogía con (3.13) están dadas por

$$N_n^{\mathcal{L}} \equiv \sqrt{\frac{(2n+1)!}{(2n-1)!}} \frac{(\alpha^2 - 1)}{2\alpha}. \quad (3.17)$$



Por simplicidad y sin pérdida de generalidad, a lo largo de las líneas siguientes optamos por estudiar solamente los estados pares del sistema, ya que en el estudio del espectro de energías, las dos familias de funciones no se mezclan.

Otro punto que debemos mencionar acerca del conjunto de funciones obtenido es que forma una base completa de funciones de paridad par, y por lo tanto somos capaces de realizar un estudio igualmente completo sobre los estados ligados pares del sistema. Esta completez es una característica particular muy importante de nuestro problema, dado que nada en el procedimiento de Lanczos en sí nos garantiza a priori la obtención de una base completa.

### El límite $\alpha \rightarrow 1$

Debemos observar que en el límite  $\alpha \rightarrow 1$  las funciones no normalizadas y sus respectivas normas son ambas iguales a cero. Sin embargo, las funciones normalizadas no solo no desaparecen en ese límite, sino que son iguales a las eigenfunciones del problema original. Puesto esquemáticamente:

$$\begin{aligned}\lim_{\alpha \rightarrow 1} \phi_n^{\mathcal{L}} &= 0 \\ \lim_{\alpha \rightarrow 1} N_n^{\mathcal{L}} &= 0\end{aligned}$$

pero:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1} \psi_n^{\mathcal{L}} = \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{\phi_n^{\mathcal{L}}}{N_n^{\mathcal{L}}} \neq 0$$

Claramente, tomar el límite  $\alpha \rightarrow 1$  en las funciones normalizadas  $\psi_n$  es un proceso no trivial, menos aun si se considera que, si hubiéramos fijado  $\alpha = 1$  en la función inicial desde el principio, esto es, antes de implementarla en el procedimiento, entonces no hubiera resultado posible construir ninguna función de Lanczos, dado que la función inicial en  $\alpha = 1$  es una eigenfunción del operador Hamiltoniano, y el procedimiento no permite construir funciones de Lanczos a partir de una eigenfunción del operador.

Las funciones de Lanczos, pares e impares, se pueden expresar convenientemente como las eigenfunciones (3.9) del operador original, pero ahora en la

variable  $\frac{x}{\sqrt{\alpha}}$ . Es decir:

$$\psi_n^{\mathcal{L}}(x) = \psi_n\left(\frac{x}{\sqrt{\alpha}}\right).$$

Esta forma tan concisa de nuestras funciones de Lanczos nos permite evaluar fácilmente los elementos de matriz diagonales en nuestra representación matricial tridiagonal del Hamiltoniano. Estos elementos de matriz, definidos como:  $h_n \equiv \langle \psi_n^{\mathcal{L}} | \hat{H} | \psi_n^{\mathcal{L}} \rangle$  están dados por:

$$h_n = (4n + 1) \frac{(\alpha^2 + 1)}{2\alpha}, \quad (3.18)$$

para el caso par, y como:

$$h_n = (4n + 3) \frac{(\alpha^2 + 1)}{2\alpha},$$

para el caso impar, donde en ambos casos  $n = 0, 1, \dots, \infty$ .

De igual forma recordamos que los elementos subdiagonales son:

$$N_n^{\mathcal{L}} = \sqrt{\frac{(2n)!}{(2n-2)!}} \frac{(\alpha^2 - 1)}{2\alpha},$$

para el caso par, y:

$$N_n^{\mathcal{L}} \equiv \sqrt{\frac{(2n+1)!}{(2n-1)!}} \frac{(\alpha^2 - 1)}{2\alpha},$$

para el caso impar, donde aquí en ambos casos  $n = 1, 2, \dots, \infty$ .

De esta forma, y volviendo al caso par, nuestra matriz Hamiltoniana tridiag-

onal tiene la forma:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2\alpha} \begin{pmatrix} (\alpha^2 + 1) & \sqrt{2}(\alpha^2 - 1) & 0 & \dots & 0 \dots \\ \sqrt{2}(\alpha^2 - 1) & 5(\alpha^2 + 1) & \sqrt{12}(\alpha^2 - 1) & & \\ 0 & \sqrt{12}(\alpha^2 - 1) & & & 0 \dots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & \sqrt{\frac{(2n)!}{(2n-2)!}}(\alpha^2 - 1) & 0 \\ \vdots & & \sqrt{\frac{(2n)!}{(2n-2)!}}(\alpha^2 - 1) & (4n + 1)(\alpha^2 + 1) & \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

o equivalentemente

$$\mathbf{H} = \frac{(\alpha^2 + 1)}{2\alpha} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2}\chi & 0 & \dots & 0 \dots \\ \sqrt{2}\chi & 5 & \sqrt{12}\chi & & \\ 0 & \sqrt{12}\chi & & & 0 \dots \\ 0 & & \ddots & & \\ 0 & & & \sqrt{\frac{(2n)!}{(2n-2)!}}\chi & 0 \dots \\ \vdots & & \sqrt{\frac{(2n)!}{(2n-2)!}}\chi & (4n + 1) & \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

en donde  $\chi = \frac{(\alpha^2 - 1)}{(\alpha^2 + 1)}$ .

### Diagonalización

En cada aproximación, tomar el límite  $\alpha \rightarrow 1$  equivale a diagonalizar la matriz Hamiltoniana  $N \times N$  (pues  $\lim_{\alpha \rightarrow 1} N_n^{\mathcal{L}} = 0$ ), dejándonos la matriz hamiltoniana correspondiente a los primeros  $N$  estados pares (o impares) del oscilador armónico en su solución exacta. El hecho de que en el límite  $\alpha \rightarrow 1$  la matriz se diagonalice es una característica especial de este problema y de la función inicial elegida.

### 3.4. Estudio del Espectro de Energía.

A continuación realizamos un análisis general de los distintos eigenvalores de la matriz Hamiltoniana, como funciones del parámetro  $\alpha$ . Una propiedad muy interesante del espectro de energía puede ser derivada de la forma específica de nuestra matriz. En efecto, se puede observar que bajo la transformación conforme del parámetro  $\alpha \rightarrow \frac{1}{\alpha}$ , los elementos de matriz fuera de la diagonal (esto es, las normas (3.13) para el caso par, y (3.17) para el caso impar) se transforman como  $N_n^{\mathcal{L}} \rightarrow -N_n^{\mathcal{L}}$ . Pero como sabemos de la teoría de matrices tridiagonales (Apéndice B, Teorema B.1), ésta nueva matriz transformada conformemente es completamente equivalente a la matriz original, con iguales eigenvalores. Por lo tanto, el espectro de energía de nuestro problema es invariante ante transformaciones conformes de  $\alpha$ , es decir:

$$E_n(\alpha) = E_n\left(\frac{1}{\alpha}\right).$$

Podemos obtener el mismo resultado analizando la ecuación secular asociada a las matrices Hamiltonianas de distinto grado. Definamos la ecuación secular correspondiente a una matriz Hamiltoniana  $n \times n$  como:

$$\mu_n(\lambda) \equiv \det |\mathbf{H}_n - \lambda \mathbf{I}_n|,$$

donde  $\mathbf{H}_n$  es la matriz Hamiltoniana de orden  $n$ , e  $\mathbf{I}_n$  es la matriz identidad de orden  $n$ . De hecho,  $\mu_n(\lambda)$  es un polinomio de grado  $n$  en  $\lambda$ , cuyos ceros son los eigenvalores de la matriz Hamiltoniana.

Como sabemos de la teoría de matrices tridiagonales (Apéndice B, Teorema B.3), la ecuación secular de grado  $k$  cumple con la relación de recurrencia:

$$\mu_k(\lambda) = (h_{k-1} - \lambda)\mu_{k-1}(\lambda) - (N_{k-1}^{\mathcal{L}})^2 \mu_{k-2}(\lambda),$$

entonces, en nuestro caso particular podemos usar la forma explícita de los elementos de matriz diagonales (3.18) para obtener:

$$\mu_k(\lambda) = \left( (4k-3) \frac{(\alpha^2+1)}{2\alpha} - \lambda \right) \mu_{k-1}(\lambda) - (2k-2)(2k-3) \frac{(\alpha^2-1)^2}{4\alpha^2} \mu_{k-2}(\lambda),$$

válida para  $k = 0, 1, 2, \dots$ , donde por consistencia definimos:

$$\mu_0(\lambda) \equiv 1.$$

Por sustitución directa podemos ver que la relación de recurrencia es invariante bajo transformaciones  $\alpha \rightarrow \frac{1}{\alpha}$ . El hecho de que un polinomio de grado  $n$  sea invariante bajo esta transformación indica que sus ceros (las energías del sistema) también lo serán. Esta propiedad simplifica de cierta forma el estudio del espectro, ya que al analizarlo sobre cierto rango de valores  $\alpha$ , simultánea e implícitamente lo estudiamos en  $\frac{1}{\alpha}$ .

### 3.5. Estados mas bajos

Para tener una idea de la convergencia del método, en las figuras (3.1)-(3.3) se muestran gráficas de los estados mas bajos del espectro de energías como función del parámetro  $\alpha$  en varias aproximaciones de la base de Lanczos, desde la aproximación  $2 \times 2$  hasta  $6 \times 6$ . En la figura (3.4) se grafican las energías correspondientes desde el estado base hasta el quinto estado excitado (de paridad par), en la aproximación  $6 \times 6$  en la base de Lanczos<sup>7</sup>. Igualmente, en la Tabla (3.1) se muestra el valor numérico de la energía correspondiente a los estados base, primer y segundo estados excitados pares, evaluados en distintos valores de  $\alpha$ . Debemos recordar que, gracias a la simetría del espectro bajo transformaciones conformes  $\alpha \rightarrow \frac{1}{\alpha}$ , en la Tabla (3.1) no solo estudiamos el espectro en  $\alpha = 2, 3$ , sino también, implícitamente, en  $\alpha = \frac{1}{2}, \frac{1}{3}$ . En otras palabras, el estudio del espectro en el intervalo  $\alpha \in (1, \infty)$  es equivalente al estudio del espectro en el intervalo  $(0, 1)$  del parámetro  $\alpha$ . La conclusión es clara: entre mas cerca de  $\alpha = 1$  la convergencia será más rápida al valor real de la energía. Por supuesto, esto no es ninguna sorpresa considerando que en el valor  $\alpha = 1$  obtenemos de hecho las energías exactas del sistema. La simetría  $\alpha \rightarrow 1/\alpha$  nos dice, además, que la convergencia es mejor para valores  $\alpha > 1$  que para valores  $\alpha < 1$ , como puede verse de las Figuras (3.1)-(3.3). Las gráficas (3.1)-(3.3) y (3.4) nos muestran también otra peculiaridad de este tipo de aproximaciones usando bases truncadas: la convergencia es mucho mejor para los estados mas bajos (en particular para el estado base) que para los estados mas excitados. Por ejemplo, de la Tabla (3.1) podemos ver que en la aproximación de orden  $N = 3$  y  $\alpha = 2$  la diferencia relativa entre la energía exacta y la energía obtenida para el estado base  $E_0$  es de  $\sim 0.5\%$  mientras que para el segundo estado (par) excitado dicha diferencia relativa

<sup>7</sup>Para obtener las gráficas mostradas, se utilizó *Mathematica* para diagonalizar la matriz Hamiltoniana y así obtener expresiones para las energías como funciones del parámetro  $\alpha$ .

N	$E_0$			$E_1$			$E_2$		
	$\alpha = 1$	$\alpha = 2$	$\alpha = 3$	$\alpha = 1$	$\alpha = 2$	$\alpha = 3$	$\alpha = 1$	$\alpha = 2$	$\alpha = 3$
1	1	1,250	1,667	—	—	—	—	—	—
2	1	1,034	1,170	5	6,466	8,830	—	—	—
3	1	1,005	1,049	5	5,374	6,541	9	12,371	17,410

Tabla 3.1: Convergencia numérica de las energías para los estados pares mas bajos del oscilador armónico en las primeras aproximaciones de la base de Lanczos de dimensión  $N = 1, 2, 3$ .

en la energía  $E_2$  es de  $\sim 38\%$ , y para  $\alpha = 3$  dichas diferencias relativas son  $\sim 5\%$  y  $\sim 90\%$  !

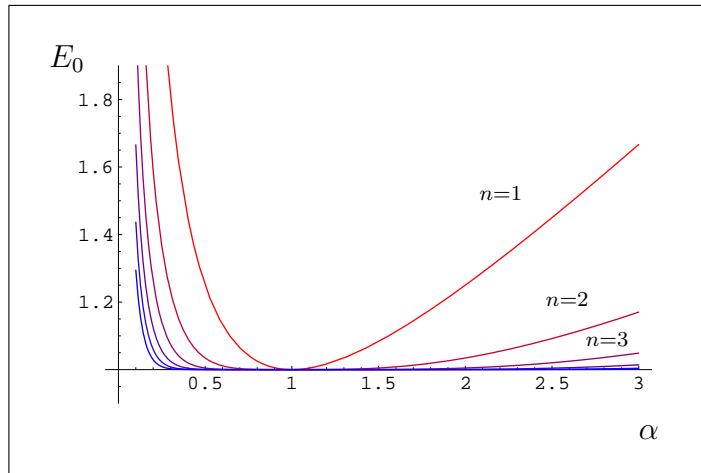


Figura 3.1: Energía  $E_0$  del estado base del oscilador armónico para distintas aproximaciones en la base de Lanczos como función del parámetro  $\alpha$ .

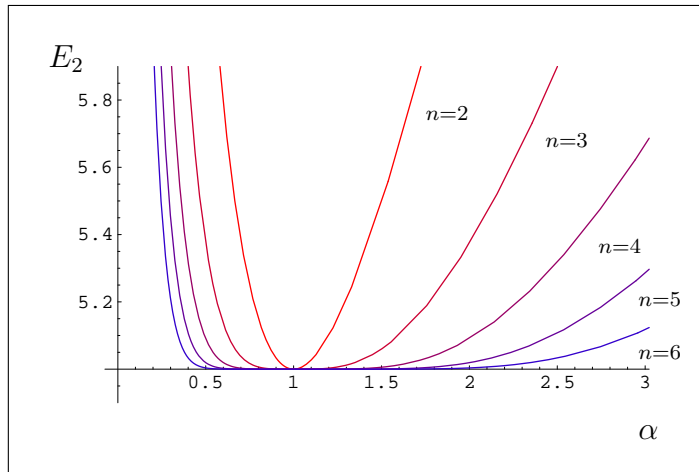


Figura 3.2: Energía  $E_2$  del primer estado excitado de paridad par del oscilador armónico para distintas aproximaciones en la base de Lanczos como función del parámetro  $\alpha$ .

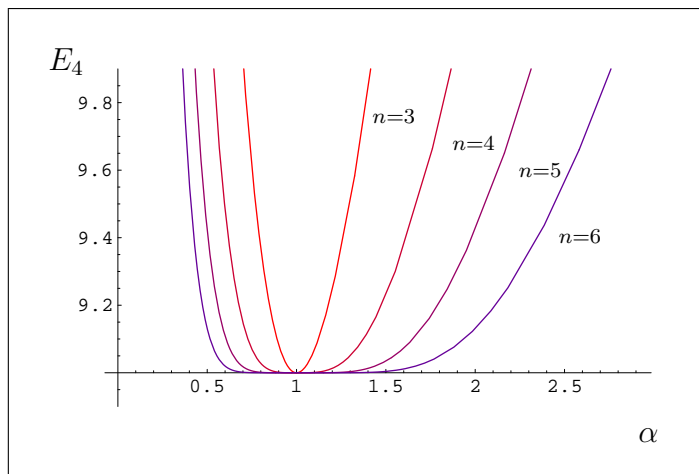


Figura 3.3: Energía  $E_4$  del segundo estado excitado de paridad par del oscilador armónico para distintas aproximaciones en la base de Lanczos como función del parámetro  $\alpha$ .

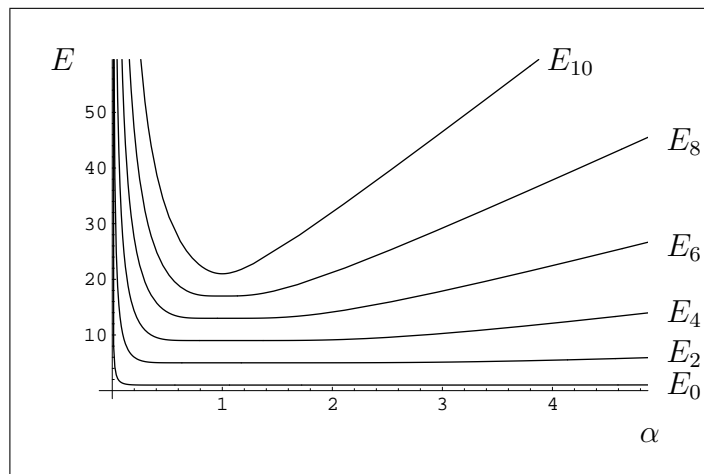


Figura 3.4: Estados mas bajos de energía con paridad par para el oscilador armónico correspondientes a la aproximación  $6 \times 6$  en la base de Lanczos construída a partir de la función inicial (3.11) como función del parámetro  $\alpha$  (frecuencia variacional).



### 3.6. Continuación Analítica en el Espectro. Puntos Rama.

En el estudio previo del oscilador armónico hemos considerado la situación en donde la matriz hamiltoniana, como función del parámetro  $\alpha$  de la función inicial de Lanczos (3.11), es hermitiana. Ahora podemos permitir que el parámetro  $\alpha$  tome valores complejos con lo cual estudiaremos algunas propiedades de la continuación analítica del problema espectral como función de este parámetro. En particular hacemos un ensayo para estudiar el comportamiento de los puntos rama correspondientes al cruzamiento de niveles, su identificación y cómo dichos niveles están conectados analíticamente. Debemos aclarar que la continuación analítica en  $\alpha$  se efectúa directamente sobre los elementos de matriz obtenidos por el procedimiento de Lanczos. Hablando en general, extendemos el dominio de  $\alpha$  a todo el plano complejo, menos el cero, ya que los elementos de matriz son singulares en  $\alpha = 0$ <sup>8</sup>. De esta forma, hay que advertir que aunque esta extensión del dominio sea válida para los elementos de matriz como funciones de  $\alpha$ , la misma extensión puede no tener validez (en algunas regiones, al menos) para la totalidad del problema. Por ejemplo, claramente los elementos de matriz están perfectamente bien definidos en la región donde  $\alpha$  es real negativo. Sin embargo, las funciones de Lanczos (3.11) no son normalizables en dicho intervalo de  $\alpha$ . Para extender el problema espectral de manera más correcta sería necesario continuar analíticamente el problema (3.2) al plano complejo  $x \in \mathbb{C}$ , y generalizar las condiciones de frontera (3.3) de forma consistente (véase p.ej. [23]). Sin embargo en este trabajo no es nuestra intención el hacer un estudio amplio de este aspecto del problema. El procedimiento correcto para la continuación analítica del problema de eigenvalores de la ecuación de Schroedinger fue discutido por primera vez por Bender y Wu [22] para el caso del oscilador anarmónico.

Cuando  $\alpha$  tiene valores reales positivos, la matriz Hamiltoniana es real y simétrica, condición necesaria y suficiente para que tenga eigenvalores reales, los cuales pueden ser ordenados (*Teorema de Oscilación*), y cuyo ordenamiento se mantendrá al hacer variar los valores de  $\alpha$  sobre el eje real positivo.

---

<sup>8</sup>La singularidad de los elementos de matriz (y por lo tanto en la energía) en  $\alpha = 0$  implica, por medio de la simetría bajo transformaciones  $\alpha \leftrightarrow \frac{1}{\alpha}$ , que el problema es singular en  $\alpha = \infty$ .

Cuando permitimos que  $\alpha$  tome valores complejos, nuestra matriz Hamiltoniana seguirá siendo simétrica, pero no será hermitiana, por lo que los eigenvalores de energía podrán tomar en general valores complejos. Así, al hacer la extensión del dominio al plano complejo en los elementos de matriz, realizamos simultáneamente una continuación analítica en los niveles de energía como función del parámetro  $\alpha$ . Más aun, los eigenvalores, definidos sobre la parte compleja del nuevo dominio, no están obligados a seguir ningún ordenamiento.

### 3.6.1. Caso $2 \times 2$

Consideremos ahora el caso más sencillo a la mano, el caso  $2 \times 2$ . En el dicho caso, la ecuación secular es:

$$\mu_2(\lambda) = \frac{7}{2} + \frac{3(1 + \alpha^4)}{4\alpha^2} - \frac{3(1 + \alpha^2)}{\alpha} \lambda + \lambda^2,$$

y las expresiones para los eigenvalores (energías) son:

$$\lambda_{\pm}(\alpha) = \frac{3(1 + \alpha^2) \pm \sqrt{2(3 + 2\alpha^2 + 3\alpha^4)}}{2\alpha}, \quad (3.19)$$

donde los signos menos y mas corresponden al estado base y al primer estado excitado (par) respectivamente.

Hagamos una breve pausa en este momento y fijemos nuestra atención en la expresión para los eigenvalores  $\lambda_{\pm}(\alpha)$ . Debemos recordar que la raíz cuadrada definida sobre el plano complejo es una función multivaluada, y su presencia en nuestras expresiones para las energías las convierte a su vez en funciones multivaluadas. Como es sabido, el estudio de este tipo de funciones obliga a la elección de una rama particular de las mismas y, más importante aun, indica la presencia de cortes que separan una hoja de otra en la superficie de Riemann definida por la función particular. La convención usual (aunque no necesaria) para definir el corte de la raíz cuadrada es eliminar la parte real negativa del dominio de la misma en el plano complejo; es decir, si la función en cuestión está dada por:

$$g(z) = \sqrt{f(z)},$$

la convención es eliminar del dominio de  $g(z)$  los puntos donde  $f(z)$  es real negativo. Como sabemos de la teoría elemental de funciones complejas, si definimos una trayectoria que parta de un punto del plano complejo sobre el dominio de la raíz hasta llegar al mismo punto, pero atravesando el corte, entonces tenemos que al evaluar la función en ese mismo punto obtenemos 2 valores distintos, consecuencia de la definición misma de función multivaluada. El hecho fundamental aquí es que, al atravesar el corte, hemos rodeado necesariamente algún punto  $z_0$  del dominio de  $g(z)$  en donde  $f(z_0) = 0$ . A esta clase de puntos se les conoce como *puntos rama*, y siempre que rodeemos dichos puntos estamos cambiando de una hoja de Riemann de la función a otra. Dicho en otras palabras estamos conectando analíticamente las dos soluciones  $\lambda_{\pm}(\alpha)$ .

Continuando con el caso  $n = 2$ , definamos ahora el argumento de la raíz cuadrada (discriminante) en  $\lambda_{\pm}(\alpha)$  como  $f(\alpha) \equiv 2(3 + 2\alpha^2 + 3\alpha^4)$ . Si hacemos  $\alpha = x + yi$ , entonces la parte imaginaria de  $f(\alpha)$  está dada por<sup>9</sup>:

$$\Im(f(\alpha)) = 12x^3y - 12xy^3 + 4xy = 4xy(3x^2 - 3y^2 + 1).$$

A partir de la ecuación  $\Im(f(\alpha)) = 0$  y la condición  $\Re(f(\alpha)) < 0$  podemos encontrar el lugar geométrico para el corte de las funciones  $\lambda_{\pm}(\alpha)$ . Resolviendo para  $y$  obtenemos, para el primer cuadrante por ejemplo:

$$y = \sqrt{\frac{1}{3} + x^2}. \quad (3.20)$$

Podemos ver que estas curvas coinciden con los cortes encontrados en la solución numérica (usando Mathematica) y graficados en la Fig.3.5.

Los puntos rama en esta aproximación  $2 \times 2$  (uno en cada cuadrante) están definidos por  $f(\alpha) = 0$  y son:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 0,5773 + 0,8165i, \\ \alpha_2 &= -0,5773 + 0,8165i, \\ \alpha_3 &= -0,5773 - 0,8165i, \\ \alpha_4 &= 0,5773 - 0,8165i. \end{aligned}$$

Estos puntos rama corresponden al cruce del estado base y el primer estado excitado de paridad par y a los cuales denotaremos como  $(0,1)$ .

<sup>9</sup>Se ha descartado la solución  $x = y = 0$ , pues implica  $\alpha = 0$ , donde el problema es singular.

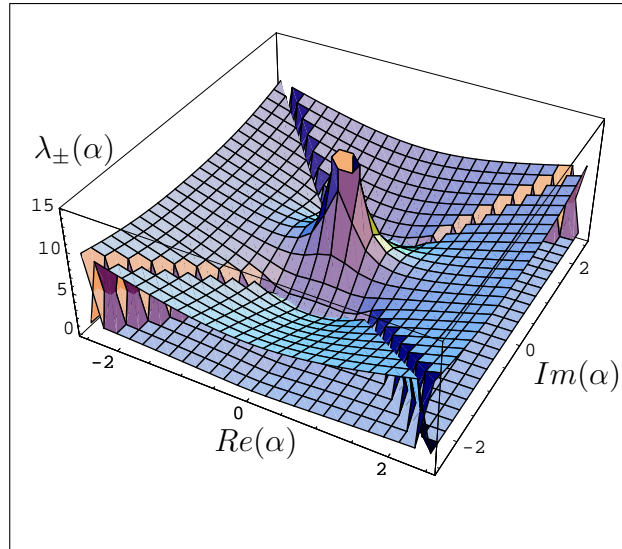


Figura 3.5: Cortes en los eigenvalores  $\lambda_{\pm}(\alpha)$  en la aproximación  $2 \times 2$ .

Es importante notar que los cortes, aún en el caso más simple, tienen lugares geométricos no triviales. Sin embargo, es la presencia de cortes en las expresiones para las energías en lo que radica la importancia subyacente del estudio de sus puntos rama. Considerando el mismo ejemplo del caso  $2 \times 2$ , supongamos que trazamos una trayectoria sobre el plano complejo de  $\alpha$ , que parta de algún punto rodeando algún punto rama hasta regresar al mismo punto. En esta excursión se atraviesa el corte de la función. Si evaluamos la función correspondiente al estado base en el punto inicial, digamos  $\alpha = 1$ , no obtenemos sino la energía exacta de ese estado. Sin embargo, si seguimos la trayectoria regresando al mismo valor  $\alpha = 1$  obtenemos un valor distinto, y ese valor resulta ser el valor exacto del primer estado excitado par. De esta forma hemos podido conectar analíticamente los dos estados del espectro. Lo mismo ocurre cuando se tratan aproximaciones de grado más grande en la matriz Hamiltoniana. En principio podríamos pasar de un estado a otro mediante continuación analítica si se conoce la estructura analítica del espectro. Por ello es importante conocer la posición de los puntos rama y la identificación apropiada del cruzamiento de niveles que ocurre en cada punto rama.

Volvamos ahora al caso de nuestras energías. Al igual que en la aproximación

$2 \times 2$ , los eigenvalores correspondientes a aproximaciones de mayor grado tienen funciones multivaluadas del tipo raíz cuadrada, y raíz cúbica a lo menos. Como comentamos antes, esto las convierte en funciones multivaluadas, y como tales presentan cortes y puntos rama en su dominio. Para localizar los puntos rama podemos hacerlo en general partiendo de la ecuación secular de una aproximación dada y usando el *discriminante* del polinomio característico  $\mu_k(\lambda)$ . El discriminante de  $\mu_k(\lambda)$  está definido como:

$$D(\mu_k) \equiv \prod_{i < j}^k (\lambda_i - \lambda_j)^2,$$

donde  $\lambda_i$  es la  $i$ -ésima raíz de  $\mu_k$ . Para encontrar los puntos rama debemos resolver la ecuación para  $\alpha$ :

$$D(\mu_k(\alpha)) = \prod_{i < j}^k (\lambda_i(\alpha) - \lambda_j(\alpha))^2 = 0,$$

lo cual puede hacerse numéricamente con relativa facilidad con programas como *Maple* o *Mathematica*, al menos para las primeras aproximaciones. El aspecto más complejo de este análisis consiste en la identificación apropiada del cruzamiento de niveles que toma lugar en cada punto rama. Este aspecto lo discutimos con un poco más de detalle en las siguientes líneas.

### 3.6.2. Caso $3 \times 3$

En el caso  $2 \times 2$  el corte en los eigenvalores representado por la curva (3.20) pudo ser encontrado con relativa facilidad, pero en el caso  $3 \times 3$  resulta ya demasiado difícil hacerlo. En principio uno podría, por ejemplo, adoptar otra convención para los cortes, de tal forma que éstos estuvieran dados finalmente por líneas rectas, digamos. Pero esto ha resultado un problema técnico no resuelto hasta el momento y los cortes se tienen que hallar de forma numérica. Afortunadamente, no resulta necesario calcular analíticamente el lugar geométrico de los cortes. Su localización es visible al graficar el valor absoluto de las energías sobre el plano complejo de  $\alpha$ . En las figuras (3.6) - (3.7) se puede ver esquemáticamente la localización de los cortes en los casos  $3 \times 3$  y  $4 \times 4$ .

n	(0, 1)		(0, 2)		(0, 3)	
	$\alpha$	$E$	$\alpha$	$E$	$\alpha$	$E$
2	0.577-0.816 i	1.732				
3	0.313-0.545 i	1.678-0.042 i	0.791-1.380 i	1.678+0.042 i		
4	0.218-0.410 i	1.660-0.055 i				

n	(1, 2)		(1, 3)		(2, 3)	
	$\alpha$	$E$	$\alpha$	$E$	$\alpha$	$E$
3	0.859-0.511 i	5.947				
4	0.383-0.924 i	1.605	1.012-1.900 i(*)	1.660+0.055 i	0.930-0.367 i	10.026
	0.589-0.439 i	5.890-0.099 i			1.091-0.814 i (*)	5.890+0.099 i

Tabla 3.2: Localizacion de los puntos rama en diferentes aproximaciones.

Conocer la localización de los cortes es muy importante para la identificación apropiada de los cruces en los niveles de energía. En el presente trabajo se usó un camino directo: partiendo de cada punto rama se determinaron los eigenvalores para diferentes valores del parámetro  $\alpha$  siguiendo una trayectoria recta hasta llegar al eje real. La mayoría de las veces la recta era paralela al eje imaginario de  $\alpha$ , aunque en algunos casos se le daba a la trayectoria cierta inclinación. Claramente, para un punto rama dado, solo dos hojas de Riemann estarán unidas, i.e. solo se cruzan dos niveles, por lo que en realidad se tienen dos diferentes trayectorias para los eigenvalores correspondientes sobre cada una de dichas hojas. Al irnos moviendo sobre la línea recta en el plano complejo de  $\alpha$  hacia el eje real, las trayectorias de los eigenvalores se van separando hasta llegar a ciertos valores sobre el eje real, donde se puede hacer una identificación consistente de los niveles que se cruzaron en el punto rama, siempre y cuando la trayectoria no haya cruzado algún corte, o que se puedan identificar claramente cada uno de los cortes que se hayan cruzado. Por esta razón el conocer la localización de los cortes sobre las distintas hojas es importante para nuestra identificación de los cruces. Observemos brevemente el caso  $3 \times 3$ . Los cortes están representados en la Fig. (3.6). Consideremos solo el primer cuadrante. Si nuestras trayectorias son líneas rectas a partir de los puntos rama hasta el eje real de manera paralela al eje imaginario, entonces ninguna de las trayectorias cruza ningún corte y la identificación de los cruces puede hacerse sin ambigüedad. Sin embargo, podemos elegir otra trayectoria recta que parta del punto rama más alejado del origen, correspondiente al cruce  $(0,2)$ , de tal forma que pase por el corte que surge del punto rama inferior, el correspondiente al cruce  $(1,2)$ . Entonces esa trayectoria, al llegar al eje real, lo hace habiendo cruzado un corte y por lo tanto, habiendo cambiado de hoja de Riemann, por lo que la identificación difiere al compararse con aquella obtenida al haber seguido la trayectoria original. En este ejemplo, nosotros hemos intencionalmente desviado la trayectoria, y aun de esta manera hay forma de recuperar la identificación original puesto que conocemos la posición de los cortes, pero en casos subsecuentes no hay forma de sortear los cortes, y a veces se debe cruzar más de uno. Es esta la razón por la que no se pudo hacer una identificación de todos los puntos rama para todas las aproximaciones de distinto grado. En general, nosotros escogemos siempre identificar los cruces de acuerdo al criterio de trayectorias que no crucen ningún corte.

La identificación de los puntos rama es importante por varias razones. En principio, nosotros conocemos todos los elementos de matriz en esta representación tridiagonal del Hamiltoniano, de tal forma que conocemos la forma de la matriz Hamiltoniana de grado infinito. Pero llegar a este límite implica tener una base completa e *infinita* de funciones de Lanczos, por medio de las cuales podemos construir cualquier eigenfunción del sistema. Más importante aun, esta expansión infinita de las eigenfunciones en términos de las funciones de Lanczos debe ser independiente del valor del parámetro  $\alpha$ . Así, tenemos:

$$\psi_k(x) = \sum_{m=0}^{\infty} C_k^m(\alpha) \psi_m^{\mathcal{L}}(x; \alpha),$$

donde:

$$C_k^m(\alpha) = \langle \psi_m^{\mathcal{L}} | \psi_k \rangle.$$

El punto que debemos notar es que la eigenfunción exacta  $\psi_k(x)$  es independiente de  $\alpha$ , aun cuando los elementos de la base en los que se expande sean funciones explícitas de este parámetro. Esto por supuesto se repite en el caso del espectro: en el límite infinito el espectro debe ser independiente del parámetro  $\alpha$  aun cuando los elementos de matriz sean funciones del mismo. Así, todo fenómeno que resulte del uso de este parámetro, tanto en las funciones de Lanczos como en el espectro, debe desaparecer conforme se aumenta el grado de la matriz Hamiltoniana. De esta forma esperamos que los puntos rama en el plano complejo de  $\alpha$  evolucionen de tal forma que no influyan en el espectro cuando se avanza en el grado de la matriz hasta el caso infinito, puesto que en el espectro real del sistema jamás hay cruces de niveles, e identificando los cruces que ocurren en estos puntos podemos evaluar dicha evolución. En la Tabla (3.2) se muestran la localización e identificación de algunos cruces en los que esta última es más o menos definitiva.

### 3.6.3. Cruce del estado base y el primer estado excitado par

El cruce que se ha estudiado mejor es el cruce (0,1), esto es, el cruce del estado base con el primer estado excitado (par) según nuestra identificación. Este punto rama aparece como el más próximo al origen con respecto a cualquier otro punto rama en cualquier aproximación dada. Esta proximidad al origen



nos permite, además, tener cierta confianza en que nuestra identificación es correcta, puesto que siendo siempre el punto rama más cercano al origen sería raro que nuestra trayectoria de identificación atravesara un cruce originado por otro punto más lejano. Así, la localización e identificación del cruce (0,1) se llevó a cabo para las aproximaciones desde  $2 \times 2$  hasta  $18 \times 18$ . Los resultados se muestran en la Tabla (3.3).

Tabla 3.3: Evolución del punto rama (0,1) correspondiente al cruce entre el estado base y el primer estado excitado de paridad par para varias aproximaciones de Lanczos.

n	(0, 1)	
	$\alpha$	$E$
2	$0,577 + 0,816 i$	1,732
3	$0,313 + 0,545 i$	$1,678 + 0,042 i$
4	$0,218 + 0,410 i$	$1,660 + 0,055 i$
5	$0,169 + 0,329 i$	$1,651 + 0,061 i$
6	$0,139 + 0,275 i$	$1,647 + 0,064 i$
7	$0,118 + 0,236 i$	$1,644 + 0,066 i$
8	$0,102 + 0,207 i$	$1,642 + 0,067 i$
9	$0,091 + 0,185 i$	$1,641 + 0,068 i$
10	$0,082 + 0,166 i$	$1,640 + 0,069 i$
11	$0,074 + 0,151 i$	$1,639 + 0,069 i$
12	$0,068 + 0,139 i$	$1,639 + 0,069 i$
13	$0,062 + 0,128 i$	$1,638 + 0,070 i$
14	$0,058 + 0,119 i$	$1,638 + 0,070 i$
15	$0,054 + 0,112 i$	$1,638 + 0,070 i$
16	$0,051 + 0,105 i$	$1,638 + 0,070 i$
17	$0,048 + 0,099 i$	$1,638 + 0,070 i$
18	$0,045 + 0,093 i$	$1,638 + 0,070 i$

Con estos resultados podemos observar algo. La posición del cruce (0,1) aparentemente evoluciona hacia el origen del plano complejo de  $\alpha$  conforme aumenta el grado de la aproximación. Por supuesto, como el origen del plano es una singularidad para todos los elementos de matriz, entonces el cruce (0,1) tiende en este sentido a salir del dominio de definición del problema mismo. La transformación conforme  $\alpha \rightarrow 1/\alpha$  nos indica efectivamente que

$\alpha \rightarrow 0$  es equivalente a la afirmación  $\alpha \rightarrow \infty$ .

### 3.6.4. Mas sobre la identificación de puntos rama

Pero aun se puede ir un poco más lejos. Consideremos la Figura (3.8), en la cual se muestra el primer cuadrante del plano complejo de  $\alpha$  en la aproximación  $14 \times 14$ . Se puede observar la formación de un arco formado por puntos rama en el intervalo  $0 < \Re(\alpha) < 1$ , bajo del cual hay una región libre de puntos rama. Este tipo de distribución de los puntos rama se repite en cada aproximación que se haga. El hecho de que en esa región no haya puntos rama permite hacer una identificación de aquellos que forman el arco.

El resultado de esta identificación es interesante. Siempre el punto más cercano al origen es el correspondiente al cruce (0,1) y le siguen sobre el arco hacia la derecha el cruce (1,2), después el (2,3), hasta llegar al punto sobre el arco más cercano al valor  $\alpha = 1$ , cuyo cruce será el de los dos últimos niveles sucesivos dentro de esa aproximación. Aparentemente el punto de cruce de los dos últimos niveles (los niveles más lejanos) dentro de cada aproximación surge siempre cerca del valor  $\alpha = 1$  y posteriormente se va desplazando hacia la izquierda sobre el arco, acercándose al valor  $\alpha = 0$ . Más aún, conforme se avanza en el grado de la aproximación el punto de cruce más lejano aparece cada vez más cerca de  $\alpha = 1$ , y el cruce (0,1), como dijimos antes, cada vez se acerca más a  $\alpha = 0$ . Esto permite conjeturar que, en el caso de la matriz Hamiltoniana de grado infinito, todos los cruces de niveles de este tipo se concentran en  $\alpha = 0$ , desapareciendo así del problema. Esto sería de esperar, puesto que en el caso ideal en que nuestra matriz Hamiltoniana fuera infinita, el espectro obtenido es el espectro real del problema, el cual no tiene cruzamientos de niveles ni dependencia en ningún parámetro.

## 3.7. Conclusiones

En este capítulo logramos poner por primera vez en práctica el procedimiento de Lanczos. El sistema en cuestión fue el oscilador armónico simple, uno de los sistemas más estudiados y quizás el mejor conocido de toda la mecánica cuántica. A partir de una función inicial simple dependiente de un

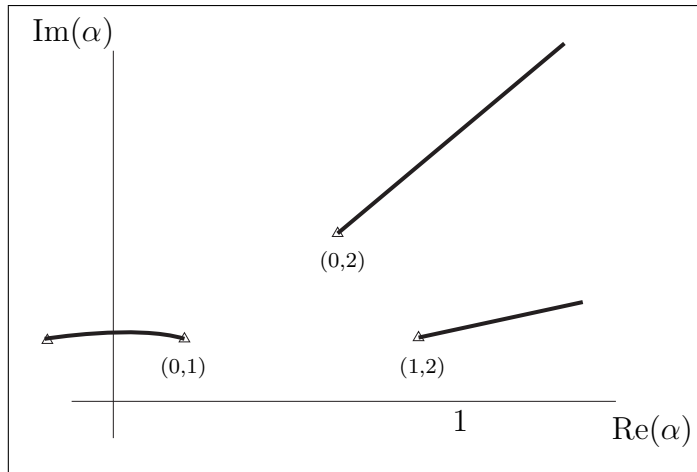


Figura 3.6: Puntos Rama y Cortes en Caso  $3 \times 3$  (Primer Cuadrante).

parámetro variacional logramos construir de forma explícita todas las funciones de Lanczos y obtener expresiones analíticas para todos los elementos de matriz correspondientes a su representación matricial. En particular se estudió la continuación analítica del problema espectral como función del parámetro variacional y se intentó identificar el cruce de niveles correspondiente a la aparición de puntos rama y cortes en los eigenvalores de cada aproximación. Dicha identificación es muy difícil en general, aunque se pudo identificar el comportamiento de algunos puntos rama, como el correspondiente al cruce  $(0,1)$  mas cercano al origen, y la identificación de los cruces mas cercanos al eje real de  $\alpha$ , los cuales forman un arco y siguen el orden  $(0,1)$ ,  $(1,2)$ , ...

El estudio de este sistema exactamente soluble mediante el procedimiento de Lanczos puede considerarse como un ejercicio y a la vez como un primer paso en la aplicación del método a problemas mas complejos como el caso del oscilador anarmónico  $V = x^2 + gx^4$ .

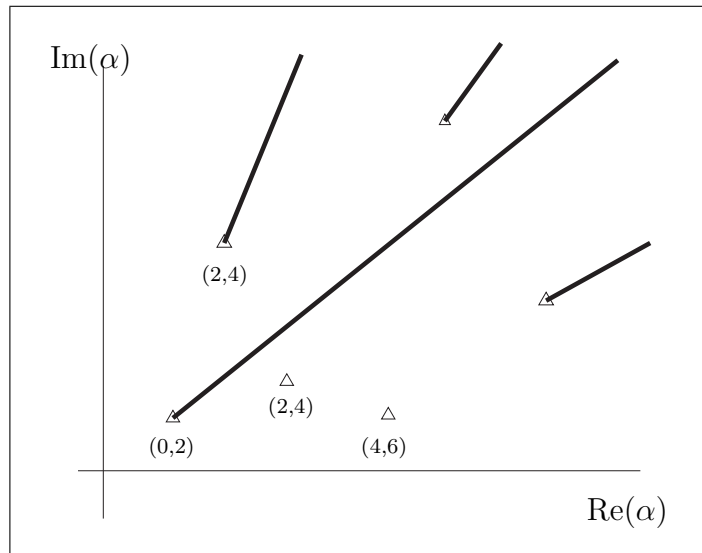


Figura 3.7: Puntos Rama y Cortes en Caso  $4 \times 4$  (Primer Cuadrante).

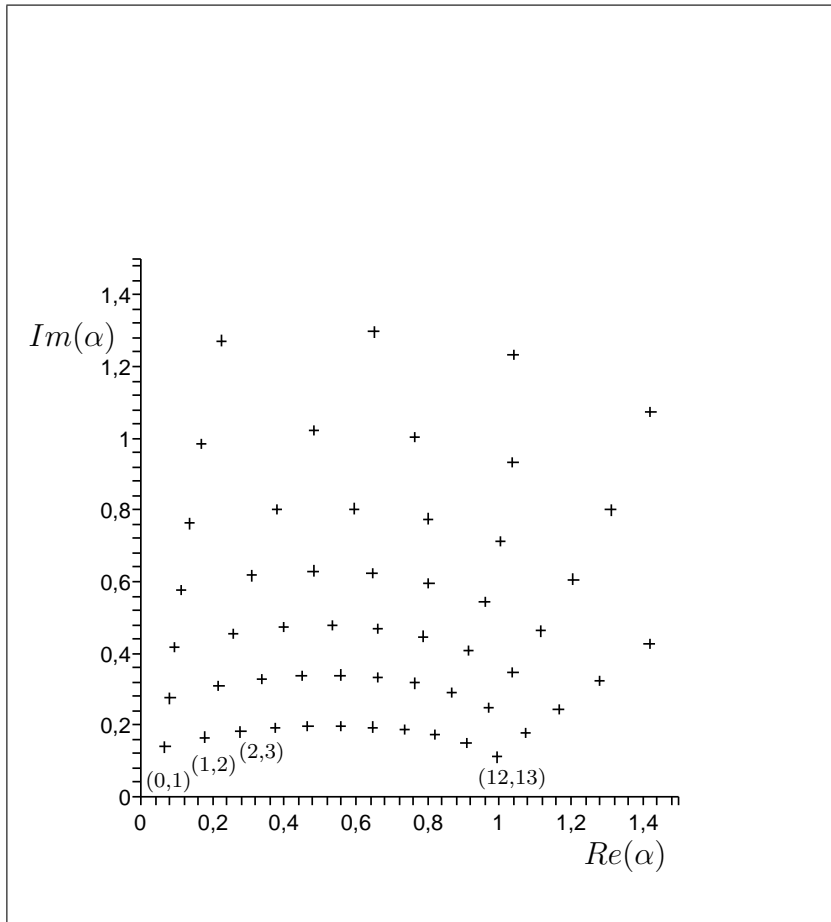


Figura 3.8: Distribución de Puntos Rama en la aproximación  $N = 14$ . Puede verse que los puntos rama mas cercanos al eje real de  $\alpha$  forman un arco, en la región  $0 < \Re(\alpha) < 1$ , siguiendo el ordenamiento  $(0,1)$ ,  $(1,2)$ ,  $(2,3)$  ...  $(N-2,N-1)$ . La identificación de los demás puntos rama es muy complicada especialmente por la precencia de cortes en los eigenvalores.



# Capítulo 4

## Potencial de Morse y el Procedimiento de Lanczos

### 4.1. Introducción

En el presente capítulo estudiamos otro problema famoso de la mecánica cuántica: el potencial de Morse. Dicho sistema, al igual que el oscilador armónico simple, es exactamente soluble, tiene espectro cuantizado y ha sido estudiado ampliamente<sup>1</sup>. Sin embargo, el potencial de Morse tiene una propiedad adicional: su espectro discreto es finito. El número de estados ligados del sistema depende de los dos parámetros ajustables del potencial. El propósito de las líneas siguientes es estudiar cómo reacciona el método de Lanczos ante un problema con un espectro discreto finito; veremos si hay la aparición de niveles de energía espurios y si el mismo método tiene alguna forma de distinguir y separar dichos niveles.

### 4.2. El Potencial de Morse.

Consideremos en este capítulo el potencial de Morse, dado por:

$$V(x) = D(e^{-\frac{2x}{a}} - 2e^{-\frac{x}{a}}), \quad (-\infty < x < +\infty). \quad (4.1)$$

Este potencial es usado comúnmente como aproximación para describir las vibraciones de moléculas diatómicas en espectroscopia molecular. Los parámetros

---

<sup>1</sup>El potencial de Morse también tiene un espectro continuo que no consideramos en este trabajo.

ros  $D$  y  $a$  del potencial están relacionados con su profundidad y su ancho respectivamente (véase la Fig. (4.1)). Dicho potencial está definido sobre toda la línea real:  $-\infty < x < \infty$ , y alcanza un valor mínimo  $V = -D$ , en  $x = 0$ <sup>2</sup>. El potencial de Morse desaparece asintóticamente para valores positivos de la coordenada  $x$  (i.e.  $\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) \rightarrow 0$ ) y crece a infinito para valores negativos de la coordenada  $x$  (i.e.  $\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) \rightarrow \infty$ ). A lo largo del estudio que sigue trabajamos con unidades tales que  $\hbar = c = 2m = 1$ , y sin ninguna pérdida de generalidad fijaremos  $a = 1$ . Así, la ecuación de Schrödinger correspondientes es:

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + K^2(e^{-2x} - 2e^{-x})\psi = \epsilon\psi, \quad (4.2)$$

donde por conveniencia hemos introducido el parámetro  $K$ , definido como  $K^2 \equiv D$ , y con las condiciones de frontera

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) \rightarrow 0, \quad (4.3)$$

para los estados ligados del sistema<sup>3</sup>.

El problema se puede simplificar notoriamente al proponer el cambio de variable

$$y = 2Ke^{-x}. \quad (4.4)$$

De esta forma, la ecuación de Schrödinger (4.2) se vuelve:

$$-y^2 \frac{d^2\psi}{dy^2} - y \frac{d\psi}{dy} + \left(\frac{y^2}{4} - Ky\right)\psi = \epsilon\psi, \quad (4.5)$$

definida en el dominio  $-\infty < y < \infty$ . La ecuación (4.5) resulta ser exactamente soluble, como mostramos a continuación<sup>4</sup>.

Supongamos que las soluciones de la ecuación (4.5) son todas de la forma  $\psi_n(y) \equiv u_n(y)f(y)$ , con  $n$  un entero que etiqueta los estados, y donde definimos:

$$u_n(y) = y^{(K-n-\frac{1}{2})} e^{-\frac{y}{2}}.$$

<sup>2</sup>Alrededor de su posición de equilibrio puede ser aproximado convenientemente (para oscilaciones de baja energía) por un potencial de oscilador armónico  $V \simeq -D + \frac{D}{a^2} x^2$  de frecuencia  $\omega = \frac{2}{a} \sqrt{D} = \frac{2K}{a}$ , y energía de punto cero  $\epsilon_0 = \frac{\omega}{2} = \frac{K}{a}$ .

<sup>3</sup>Es conveniente mencionar en este momento que el potencial de Morse no es simétrico bajo la transformación de paridad  $x \rightarrow -x$  por lo que sus eigenfunciones no tienen una paridad definida

<sup>4</sup>Las líneas siguientes no pretenden mostrar la forma exacta de resolver el problema, sino solo motivar los resultados finales.



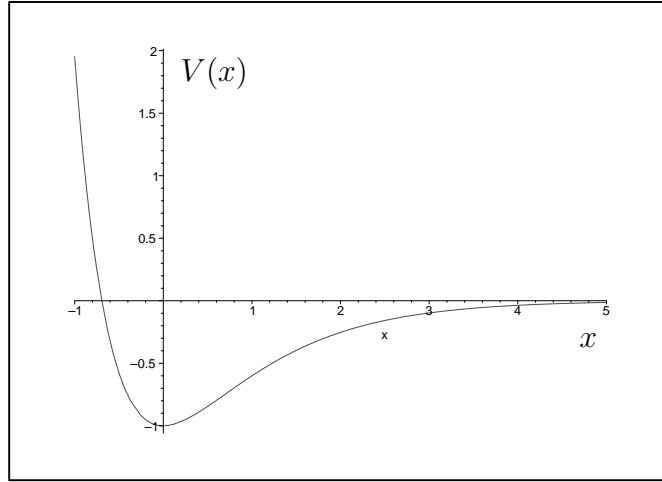


Figura 4.1: Potencial de Morse (4.1) para  $D = 1, a = 1$ .

Sustituyendo esta forma de la función  $\psi_n(y)$  en la ecuación (4.5), y multiplicando el resultado por<sup>5</sup>  $u_n^{-1}(y)$ , podemos obtener<sup>6</sup> la siguiente ecuación diferencial para la función  $f(y)$ :

$$y f''(y) + (2K - 2n - y)f'(y) + \left( n + \frac{1}{y} \left( (K - n - \frac{1}{2})^2 + \epsilon \right) \right) f(y) = 0.$$

Si en este punto hacemos la suposición de que la energía  $\epsilon$  satisface<sup>7</sup>:

$$\epsilon \equiv -\left( K - n - \frac{1}{2} \right)^2, \quad n = 0, 1, \dots$$

obtenemos finalmente la ecuación diferencial:

$$y f''(y) + (2K - 2n - y)f'(y) + n f(y) = 0. \quad (4.6)$$

Ahora, podemos comparar la ecuación (4.6) con la ecuación asociada de Laguerre:

$$y f''(y) + (\nu + 1 - y)f'(y) + m f(y) = 0, \quad (4.7)$$

<sup>5</sup>Es decir, rotando el operador  $\hat{H}$  por  $u_n(y)$ .

<sup>6</sup>Después de dividir por  $y$ .

<sup>7</sup>A veces esta relación se escribe como  $\epsilon \equiv 2K(n + \frac{1}{2}) - (n + \frac{1}{2})^2 - K$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$

donde los parámetros  $\nu$  y  $m$  son números reales. Claramente, podemos lograr una identificación completa entre ambas ecuaciones simplemente definiendo:

$$\begin{aligned}\nu &\equiv 2K - 2n - 1, \\ m &\equiv n.\end{aligned}$$

La ecuación (4.7) es exactamente soluble, y tiene como soluciones (para  $m = 0, 1, 2, \dots$ ) a los polinomios asociados de Laguerre  $L_m^\nu(y)$ , definidos como:

$$\begin{aligned}L_m^\nu(y) &\equiv \frac{e^y y^{-\nu}}{m!} \frac{d^m}{dy^m} (e^{-y} y^{m+\nu}), \\ &\equiv \sum_{l=0}^m (-1)^l \frac{(m+\nu)!}{(m-l)!(\nu+l)!(l)!} y^l.\end{aligned}$$

Los primeros 4 polinomios asociados de Laguerre son:

$$\begin{aligned}L_0^\nu(y) &= 1, \\ L_1^\nu(y) &= -y + \nu + 1, \\ L_2^\nu(y) &= \frac{1}{2}(y^2 - 2(\nu+2)y + (\nu+1)(\nu+2)), \\ L_3^\nu(y) &= \frac{1}{6}(-y^3 + 3(\nu+3)y^2 - 3(\nu+2)(\nu+3)y + (\nu+1)(\nu+2)(\nu+3)).\end{aligned}$$

Además, los polinomios de Laguerre tienen la función de peso:

$$W(y) \equiv y^\nu e^{-y},$$

y satisfacen la siguiente relación de ortogonalidad:

$$\int_0^\infty e^{-y} y^\nu L_n^\nu(y) L_m^\nu(y) dy = \frac{(n+\nu)!}{n!} \delta_{n,m}.$$

Así, regresando al problema original dado por la ecuación (4.5), tenemos que sus soluciones exactas son:

$$\psi_n = \frac{1}{N_n} y^{(K-\frac{1}{2}-n)} e^{-\frac{y}{2}} L_n^{2K-1-2n}(y), \quad (4.8)$$

con  $n = 0, 1, \dots, \lfloor K - \frac{1}{2} \rfloor$ , donde  $\lfloor \cdot \rfloor$  significa el número entero menor inmediato. Esta cota superior al espectro está de hecho dada por el requerimiento de que  $n < K - \frac{1}{2}$ , es la condición necesaria para tener funciones integrables. Esto lo podemos ver de la forma explícita de  $\psi_n$ , (4.8), ya que la función es normalizable solo si  $K - \frac{1}{2} - n$  es positivo. Efectivamente, si regresamos a la antigua variable  $x$  (véase la definición (4.4)), podemos ver que las eigenfunciones cargan siempre con un prefactor  $e^{-(K-\frac{1}{2}-n)x}$ , correspondiente en la nueva variable al factor  $y^{(K-\frac{1}{2}-n)}$  en la función  $u_n(y)$ , el cual exige que el exponente sea positivo para tener convergencia de las normas de las funciones en  $x \rightarrow \infty$ . De esta forma, la condición de normalización para las funciones está dada únicamente por el factor  $y^{(K-\frac{1}{2}-n)}$  que aparece en (4.8).

En las soluciones (4.8)  $N_n$  es un factor de normalización dado por:

$$N_n = \left( \frac{\Gamma(2K - n)}{n!(2K - 1 - 2n)} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.9)$$

De esta forma, la ecuación (4.5) resulta ser exactamente soluble, teniendo como solución a una familia de funciones pertenecientes al espacio de Hilbert, un espectro cuantizado de energía y, aun más importante, un número finito de estados ligados.

Así, la función correspondiente al estado base del sistema bajo este nuevo cambio de variable está dada como<sup>8</sup>:

$$\psi_0 = \frac{y^{(K-\frac{1}{2})} e^{-\frac{y}{2}}}{\sqrt{\Gamma(2K - 1)}}. \quad (4.10)$$

Finalmente repetimos que la cuantización del espectro estará dada por la condición:

$$\epsilon_n = -\left(K - \frac{1}{2} - n\right)^2, \quad (4.11)$$

con  $n = 0, 1, \dots, \lfloor K - \frac{1}{2} \rfloor$ , donde  $\lfloor m \rfloor$  significa el número entero menor inmediato a  $m$ .

La aparición de un número dado de estados ligados en el sistema está claramente ligada a la condición de normalización y a la función exponencial arriba

---

<sup>8</sup>Esta función desempeñará un papel importante en el momento de implementar el método de Lanczos más adelante.

mencionada. En efecto, si deseamos tener 2 niveles ligados por ejemplo, debemos referirnos a la expresión (4.11), la cual nos pedirá que  $n = 1$  y nos hace fijar  $K > \frac{3}{2}$  como dominio de normalización en  $K$ . De igual forma podemos obtener restricciones en el dominio de  $K$  del tipo  $K > \frac{5}{2}$  para el segundo nivel excitado,  $K > \frac{7}{2}$  para el tercer nivel excitado, etc. y dichas condiciones son visibles en la parte exponencial de las funciones correspondientes; es decir, tenemos prefactores  $y^{(K-\frac{3}{2})}$  en la segunda eigenfunción,  $y^{(K-\frac{5}{2})}$  en la tercera, etc. A partir de este punto trataremos a  $K$  como un parámetro libre, en un intento de controlar el número de estados ligados de nuestro sistema.

Otro punto importante que debemos recalcar es aquel concerniente a la evaluación de integrales definidas. Efectivamente, bajo el nuevo cambio de variables, las integrales que debemos evaluar transforman como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = \int_0^{\infty} \frac{f(y)}{y} dy.$$

Dicha regla fue considerada al evaluar todos los elementos de matriz, normas y, en general, cualquier integración necesaria para nuestros fines.

### 4.3. El Procedimiento de Lanczos

En este punto podemos comenzar a usar el procedimiento de Lanczos, usando el operador Hamiltoniano:

$$\hat{H} = -y^2 \frac{d^2}{dy^2} - y \frac{d}{dy} + \left( \frac{y^2}{4} - Ky \right), \quad (4.12)$$

y la función inicial<sup>9</sup>:

$$\psi_0^{\mathcal{L}} = \frac{y^{(K-\frac{\alpha}{2})} e^{-\frac{\beta y}{2}}}{\sqrt{\Gamma(2K - \alpha)}}, \quad (4.13)$$

donde  $\alpha$  y  $\beta$  son parámetros reales necesarios para implementar la función inicial en el procedimiento, ya que éste último no permite construir funciones a partir de una eigenfunción del operador en uso. Fijamos el dominio de los parámetros como  $0 < \alpha < \infty$  y  $0 < \beta < \infty$ . Debemos notar que en el límite

<sup>9</sup>Esta función carece de nodos y no es simétrica bajo paridad  $x \rightarrow -x$ , por lo que es buen candidato para representar la función del estado base del sistema.

$\alpha = \beta = 1$ , la función inicial corresponde a la eigenfunción exacta del estado base del operador (4.12).

La elección de la función inicial (4.13) no es arbitraria. Primero, hemos escogido la eigenfunción correspondiente al estado base del oscilador de Morse (4.10), implementada con 2 parámetros reales independientes. El hecho de haber escogido este tipo de función inicial es en parte debido a que, cuando es usada para calcular su potencial correspondiente, éste último reproduce más fielmente algunas de las características del potencial original. Además, hemos colocado en este caso 2 parámetros reales en afán de hacer un análisis lo más general posible. Efectivamente, en el caso del oscilador armónico lo que hicimos para construir la función inicial (3.11) fue tomar la eigenfunción del estado base del sistema, e implementarla con un parámetro real. Además, en ese caso, la elección en la localización del parámetro era única. En el caso del oscilador de Morse, si deseamos construir una función inicial siguiendo los mismos lineamientos, entonces encontramos que hay muchas formas de implementar un parámetro en la función (4.10). Es así que, para sortear este problema, y por afán de generalidad, hemos escogido usar dos parámetros reales en lugares significativos de la función.

Sin embargo, la elección de la localización de los parámetros en la función inicial no es simple en nuestro caso actual. Efectivamente, las funciones de Lanczos resultan ser muy sensibles a la localización de los parámetros, volviéndose muy complejas o muy simples de una elección a otra. Por lo tanto, este punto es muy importante para la simplicidad de todos los futuros cálculos. Además, una elección inteligente en la localización de los parámetros es necesaria para que nuestras funciones de Lanczos tengan ciertas propiedades deseables. Por ejemplo, en nuestro actual problema, la elección en la localización del parámetro  $\alpha$  está pensada como un intento de controlar las condiciones de normalización de las funciones construidas con el procedimiento. Si consideramos solamente el parámetro  $\beta$  en la función inicial (lo cual sería equivalente a fijar desde un inicio  $\alpha = 1$ ), entonces perderemos todo control sobre las propiedades de normalización de las funciones de Lanczos resultantes, y será difícil esperar que estas propiedades por si solas sean en alguna forma similares a las de las eigenfunciones exactas; de hecho, este resulta ser el caso: las funciones de Lanczos obtenidas sin considerar al parámetro  $\alpha$  tienen propiedades de normalización incorrectas, como se ve líneas más abajo.

Finalmente, el hecho de que en los límites  $\alpha = 1$  y  $\beta = 1$  la función inicial sea igual a la función correspondiente al estado base del sistema (4.10), nos hace esperar que en ese mismo límite podamos recuperar las características principales del sistema cuando trabajemos con las funciones de Lanczos y el espectro de energía en sus distintas aproximaciones, sin embargo, la recuperación de las eigenfunciones exactas del sistema resulta ser un asunto no trivial<sup>10</sup>, como se ve líneas más adelante.

Antes de continuar, recordamos brevemente la forma en que las funciones de Lanczos están definidas en general. La primera función de Lanczos es:

$$\psi_1^{\mathcal{L}} = \frac{1}{N_1} \left( \hat{H}\psi_0^{\mathcal{L}} - h_{00}\psi_0^{\mathcal{L}} \right),$$

donde:

$$N_1 = \left\| \hat{H}\psi_0^{\mathcal{L}} - h_{00}\psi_0^{\mathcal{L}} \right\|^{\frac{1}{2}},$$

y  $h_{00}$  es el elemento de matriz:

$$h_{00} = \left\langle \psi_0^{\mathcal{L}} | \hat{H} | \psi_0^{\mathcal{L}} \right\rangle.$$

La segunda función de Lanczos esta dada en general por:

$$\psi_2^{\mathcal{L}} = \frac{1}{N_2} \left( \hat{H}\psi_1^{\mathcal{L}} - h_{11}\psi_1^{\mathcal{L}} - N_1\psi_0^{\mathcal{L}} \right),$$

donde:

$$N_2 = \left\| \hat{H}\psi_1^{\mathcal{L}} - h_{11}\psi_1^{\mathcal{L}} - N_1\psi_0^{\mathcal{L}} \right\|^{\frac{1}{2}},$$

y  $h_{11}$  es el elemento de matriz:

$$h_{00} = \left\langle \psi_1^{\mathcal{L}} | \hat{H} | \psi_1^{\mathcal{L}} \right\rangle.$$

Por medio del procedimiento se pudo llegar a construir una matriz Hamiltoniana tridiagonal de grado  $7 \times 7$ .

<sup>10</sup>En otras palabras, el tomar el límite  $\alpha \rightarrow 1, \beta \rightarrow 1$  en las funciones de Lanczos no es suficiente para diagonalizar a la matriz hamiltoniana, como si fue el caso para el oscilador armónico.

A continuación presentamos un pequeño resumen de las propiedades más importantes de las dos primeras funciones de Lanczos cuando se consideran los dos parámetros  $\alpha$  y  $\beta$ , evaluándolos en ciertos límites de interés. Procedemos de esta forma, en casos particulares, y no analizando las funciones de Lanczos en su forma general debido a su excesiva complejidad como expresiones en términos de  $\alpha$ ,  $\beta$  y la variable  $y$ . Finalmente hacemos una comparación de estas funciones de Lanczos con las correspondientes eigenfunciones del sistema, dadas por (4.8).

### Algunas propiedades de las primeras funciones de Lanczos en la aproximación $\beta = 1$ .

#### I : Primera Función de Lanczos.

La primera función de Lanczos en la aproximación  $\beta = 1$  está dada por:

$$\psi_1^{\mathcal{L}} = \frac{y^{(K-\frac{\alpha}{2})} e^{-\frac{y}{2}} ((2K - \alpha) - y)}{\sqrt{(2K - \alpha)\Gamma(2K - \alpha)}}, \quad (4.14)$$

con las siguientes características:

- La función tiene un solo nodo y está localizado en:  $y_0 = 2K - \alpha$ .
- La condición para que la función tenga un nodo positivo y sea normalizable es:  $K > \frac{\alpha}{2}$ .

Por otro lado, la eigenfunción exacta correspondiente al primer estado excitado es:

$$\psi_1 = \frac{y^{(K-\frac{3}{2})} e^{-\frac{y}{2}} ((2K - 2) - y)}{\sqrt{(2K - 2)\Gamma(2K - 3)}}, \quad (4.15)$$

con las características:

- El nodo de la función está localizado en:  $y_0 = 2K - 2$ .
- La condición para que la función tenga nodo positivo es:  $K > 1$ .
- La condición para que la función sea normalizable es:  $K > \frac{3}{2}$ .

En este punto podemos hacer una pausa para hacer notar que todas las funciones de Lanczos subsiguientes tienen la estructura de la función  $\psi_1^{\mathcal{L}}$ ; es decir, constan de una parte polinomial en la variable  $y$ , multiplicada por una función de tipo exponencial:  $y^{(K-\frac{\alpha}{2})} e^{-\frac{y}{2}}$ . Más aún, la

convergencia de la normalización de las funciones de Lanczos está dada por ésta última función, explícitamente por la desigualdad  $K > \frac{\alpha}{2}$ .

Así pues, a pesar de que ninguna elección del parámetro  $\alpha$  en la función de Lanczos reproduce las eigenfunciones exactas, la elección de  $\alpha = 2$  da una aproximación relativamente buena, al menos en lo concerniente a la localización del nodo y su valor positivo.

Un hecho muy importante que debemos notar es que la parte polinomial de la primera función de Lanczos es un polinomio de primer orden si y solo si  $\beta = 1$  (con cualquier otro valor de  $\beta$ , tenemos un polinomio de segundo grado). Esta reducción de grado es aún más importante (y deseable) si tenemos en mente la naturaleza iterativa del procedimiento y que, por lo tanto, cualquier complejización en un paso del mismo se ve reflejada y muy posiblemente amplificadas en todos los subsiguientes. Finalmente, la unicidad en la elección de  $\beta$  para poder tener un polinomio de primer grado puede ser vista como un indicador de que  $\beta = 1$  es necesaria para tener una representación mínima de las funciones de Lanczos.

Seguimos a continuación el mismo análisis, pero ahora para la segunda función de Lanczos.

## II: Segunda Función de Lanczos.

La segunda función de Lanczos en la aproximación  $\beta = 1$  es:

$$\psi_2^{\mathcal{L}} = \frac{y^{(K-\frac{\alpha}{2})} e^{-\frac{y}{2}} ((2K - \alpha)(1 + 2K - \alpha) - 2(1 + 2K - \alpha)y + y^2)}{\sqrt{2(2K - \alpha + 1)(2K - \alpha)\Gamma(2K - \alpha)}}, \quad (4.16)$$

con las siguientes características:

- La función tiene dos nodos, localizados en:  $(y_0)_{\pm} = 1 + 2K - \alpha \pm \sqrt{1 + 2K - \alpha}$ .
- La condición para que la función tenga nodos reales es:  $K > \frac{\alpha-1}{2}$  (Esta condición es satisfecha por la condición para la primera función de Lanczos:  $K > \frac{\alpha}{2}$ ).
- La condición para que la función tenga nodos positivos y sea normalizable es:  $K > \frac{\alpha}{2}$ .



Por otra parte, la eigenfunción exacta del segundo estado excitado es:

$$\psi_2 = \frac{y^{(K-\frac{5}{2})} e^{-\frac{y}{2}} ((2K-4)(2K-3) - 2(2K-3)y + y^2)}{\sqrt{2(2K-3)(2K-4)\Gamma(2K-5)}}, \quad (4.17)$$

con las características:

- La función tiene dos nodos, localizados en:  $(y_0)_\pm = 2K - 3 \pm \sqrt{2K - 3}$ .
- La condición para que la función tenga nodos reales es:  $K > \frac{3}{2}$ .
- La condición para que la función tenga nodos positivos es:  $K > 2$ .
- La condición para que la función sea normalizable es:  $K > \frac{5}{2}$ .

De manera similar al caso de la primera función de Lanczos, podemos obtener una buena aproximación de la segunda eigenfunción si hacemos  $\alpha = 4$  en la segunda función de Lanczos.

A continuación presentamos un pequeño análisis de las normas de la primera y segunda funciones de Lanczos. El estudio de las normas es importante en el sentido de que nos puede ayudar a definir regiones en el dominio de los parámetros  $K$ ,  $\alpha$  y  $\beta$  donde las funciones son cuadrado integrables y pertenecen al espacio de Hilbert, de tal forma que tengan relevancia física. Al igual que con las funciones de Lanczos, hacemos una comparación de las normas de las funciones de Lanczos contra las normas de las eigenfunciones, dadas por (4.9).

### III: Normas de Lanczos

Las normas de la primera y segunda función de Lanczos en la aproximación  $\beta = 1$  son:

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{(\alpha - 1)}{2} \sqrt{2K - \alpha}, \\ N_2 &= \frac{(\alpha - 3)}{2} \sqrt{2(2K - \alpha + 1)}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Ambas normas son reales si se satisface la condición  $K > \frac{\alpha}{2}$ , y son positivas si  $\alpha > 1$  para  $N_1$ , y si  $\alpha > 3$  para  $N_2$ .

Los ceros de las normas están dados por:

$$N_1 = 0 \Leftrightarrow \alpha = 1, \text{ y/o } K = \frac{\alpha}{2},$$

$$N_2 = 0 \Leftrightarrow \alpha = 3, \text{ y/o } K = \frac{(\alpha - 1)}{2}.$$

La representación tan compacta de las normas es una ventaja especial de escoger  $\beta = 1$ . En la expresión general,  $N_1^2$  es un polinomio de 3er grado en  $K$ , y  $N_2^2$  es un polinomio de 7mo grado en  $K$ . Además, ambas normas son simultáneamente igual a cero en  $K = \frac{3}{2}$  y  $\alpha = 3$ . Si, por ejemplo, hubiéramos escogido  $\alpha = 1$ , entonces no habría manera de hacer ambas normas cero simultáneamente (de hecho, un cero de  $N_2$  se encontraría en  $K = -\frac{1}{2}$ ).

Solo por completez presentamos a continuación un breve resumen de las características más importantes de las funciones de Lanczos y de sus normas, cuando consideramos  $\beta \neq 1$ .

### Algunas propiedades de las funciones de Lanczos en la aproximación $\beta \neq 1$ .

Hacemos un resumen de algunas de las propiedades de las funciones de Lanczos cuando escogemos  $\beta \neq 1$ .

Sobre la primera función de Lanczos podemos resumir:

- La parte polinomial en la primera función de Lanczos  $\psi_1^{\mathcal{L}}$  es un polinomio de 2do grado  $\Leftrightarrow \beta \neq 1$ .
- La parte polinomial de las segunda función de Lanczos  $\psi_2^{\mathcal{L}}$  es un polinomio de 4to grado si  $\beta \neq 1$  (esta sobrecomplejización es de hecho el resultado de las propiedades de  $\psi_1^{\mathcal{L}}$  mencionadas en la línea anterior).

En cuanto a los nodos de la segunda función de Lanczos podemos decir:

- Si  $\alpha = 2$ , tenemos 1 nodo negativo y 3 positivos para todos los valores de  $\beta$ .
- Si  $\alpha = 1$ , tenemos 1 nodo negativo y 2 nodos positivos para todos los valores de  $\beta$ , y 1 nodo negativo si  $\beta < 1$ .

- Si  $\alpha = \frac{1}{2}$ , tenemos 2 nodos negativos para  $\beta < 1$  y 2 nodos positivos para todos los valores de  $\beta$ .

Sobre las normas de las funciones de Lanczos:

- Como mencionamos arriba, el cuadrado de la primera norma  $N_1^2$  es un polinomio de 3er grado en  $K$  si  $\beta \neq 1$ , y se reduce a un polinomio de 1er grado en  $K$  si  $\beta = 1$ .
- El cuadrado de la segunda norma  $N_2^2$  es un polinomio de 7mo grado en  $K$  si  $\beta \neq 1$ , y se reduce a un polinomio de 1er grado en  $K$  si  $\beta = 1$ .

El propósito del análisis anterior es mostrar que considerar la elección del parámetro  $\beta = 1$  simplifica notablemente el problema. Más aún: no hay otra elección del parámetro  $\beta$  con la que podamos conseguir esto. En conclusión, es mejor que en cualquier análisis futuro fijemos  $\beta = 1$  para tener una representación mínima y realizar cálculos de forma más simple.

Sin embargo, en el análisis anterior podemos observar que, aun simplificando el problema escogiendo  $\beta = 1$ , no hay una elección de  $\alpha$  que nos refiera a las eigenfunciones del problema original, de la misma forma que se había podido hacer en el caso del oscilador armónico simple en el capítulo anterior.

*La conclusión más importante del análisis anterior es que las solas funciones de Lanczos generadas por la función inicial (4.13), como funciones de los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$ , no permiten recuperar las eigenfunciones exactas del problema de Morse al ser evaluadas en ningún valor límite de los mismos parámetros.*

## 4.4. Diagonalización

Consideremos ahora, y por simplicidad, el caso de la aproximación matricial  $2 \times 2$  del Hamiltoniano de Morse en la base de Lanczos. Podemos entonces, usando las dos primeras funciones de Lanczos, construir las dos eigenfunciones de la matriz hamiltoniana; dichas eigenfunciones son por supuesto combinaciones lineales de dichas funciones. Puesto más explícitamente, si tenemos la ecuación de eigenvalores en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} h_{00} & h_{01} \\ h_{10} & h_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_0 \\ v_1 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} v_0 \\ v_1 \end{pmatrix},$$

entonces las eigenfunciones están dadas por:

$$\Psi^{(i)} = \frac{1}{N_{\Psi}^{(i)}} (v_0^{(i)} \psi_0^{\mathcal{L}} + v_1^{(i)} \psi_1^{\mathcal{L}}), \quad i = 0, 1,$$

donde  $N_{\Psi}^{(i)}$  es la norma de la  $i$ -ésima función, y  $v_0^{(i)}$  y  $v_1^{(i)}$  satisfacen:

$$v_0^{(i)2} + v_1^{(i)2} = 1.$$

Este proceso de encontrar las eigenfunciones correspondientes a las matrices mismas puede ser fácilmente generalizado para matrices Hamiltonianas de mayor grado, y es precisamente lo que hacemos para aquellas que hemos obtenido a través del método de Lanczos. Por simplicidad, de aquí en adelante nos referimos a este procedimiento simplemente como *diagonalización*.

Ahora, regresando a nuestro ejemplo actual, como hay dos eigenvectores tenemos entonces dos funciones diferentes en principio. De esta forma, deseamos poder hacer una identificación entre ambas eigenfunciones y los estados base y primer excitado del sistema<sup>11</sup>. Para el caso  $2 \times 2$  en particular, podemos desarrollar un poco más las cosas. La forma explícita de la matriz hamiltoniana en este caso es

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{(2K - 2 + \alpha)(2K - \alpha)}{4} & \frac{(\alpha - 1)\sqrt{2K - \alpha}}{2} \\ \frac{(\alpha - 1)\sqrt{2K - \alpha}}{2} & 2 + 3K - \frac{5}{2}\alpha - K^2 + \frac{1}{4}\alpha^2 \end{pmatrix}$$

<sup>11</sup>De hecho, esta identificación resulta ser exacta.

Recordando que en el procedimiento de Lanczos la matriz Hamiltoniana es simétrica y que los elementos de matriz  $h_{01} = h_{10}$  son iguales a la norma de la primera función de Lanczos  $N_1$  (Ec. (4.18)), podemos expresar los eigenvalores en este caso como:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left( \text{Tr}H \pm \sqrt{(\text{Tr})^2 - 4 \text{Det}H} \right), \quad (4.19)$$

donde  $\text{Tr}H = h_{00} + h_{11}$ ,  $\text{Det}H = h_{00}h_{11} - h_{10}^2 = h_{00}h_{11} - N_1^2$ , y sus respectivos eigenvectores como

$$\vec{V}_{\pm} = \frac{1}{N_{\pm}} \left( \begin{array}{c} \frac{1}{2} \left( h_{00} - h_{11} \pm \sqrt{(h_{00} - h_{11})^2 + 4N_1^2} \right) \\ N_1 \end{array} \right),$$

con  $N_{\pm}$  un factor de normalización correspondiente, y donde los signos *menos* y *mas* corresponden al estado base y al primer estado excitado respectivamente. Como solo usamos las funciones inicial y primera de Lanczos (para  $\beta = 1$ ), la única restricción sobre  $\alpha$  es que  $K > \frac{\alpha}{2}$  para garantizar la normalizabilidad de las funciones.

De esta forma, obtenemos dos funciones diferentes  $\Psi_+$  y  $\Psi_-$ . Ambas funciones están compuestas por el producto de un polinomio de primer grado con una función de tipo exponencial, heredada directamente de la función inicial (4.13). Como aún esperamos que una función  $\Psi_{\pm}$  corresponda en algún límite de  $\alpha$  a la eigenfunción exacta del estado base y la otra a la eigenfunción exacta del primer estado excitado, podemos evaluar los valores  $\alpha = 1$  y  $\alpha = 3$  en las funciones  $\Psi_{\pm}$  para que sus funciones exponenciales sean iguales a aquellas de las eigenfunciones exactas del sistema, (4.10) y (4.15). Vemos entonces si este proceso de *imitación* de las componentes exponenciales de las eigenfunciones nos puede dar algunos resultados.

Analicemos primero el límite  $\alpha = 1$ . En este caso la matriz hamiltoniana se diagonaliza automáticamente:

$$H = \left( \begin{array}{cc} -\frac{(2K-1)^2}{4} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} + 3K - K^2 \end{array} \right)$$

con sus eigenvectores correspondientes

$$\Psi_- = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_+ = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

En este límite las funciones de Lanczos tienen la forma

$$\begin{aligned} \psi_0^{\mathcal{L}} &= \frac{y^{(K-\frac{1}{2})} e^{-\frac{y}{2}}}{\sqrt{\Gamma(2K-1)}}, \\ \psi_1^{\mathcal{L}} &= \frac{y^{(K-\frac{1}{2})} e^{-\frac{y}{2}} ((2K-1) - y)}{\sqrt{(2K-1)\Gamma(2K-1)}}. \end{aligned}$$

Entonces  $\Psi_- = \psi_0^{\mathcal{L}}$  se convierte en la eigenfunción exacta correspondiente al estado base de nuestro problema. Sin embargo, en este límite la eigenfunción<sup>12</sup>  $\Psi_+ = \psi_1^{\mathcal{L}}$  tiene un carácter espurio, ya que el eigenvalor correspondiente es positivo en el rango  $K < \frac{3}{2} + \sqrt{2}$ . Pero ahora, podemos variar  $\alpha$  de 1 a 3. Dentro de ese intervalo, la función cambia arbitrariamente, pero al llegar al valor  $\alpha = 3$  ocurre algo no-trivial: la función  $\Psi_-$  se transforma de nuevo en la eigenfunción exacta del estado base! Esto quiere decir que a partir de la función  $\Psi_-$  es posible recuperar la primera eigenfunción del oscilador de Morse evaluándola en 2 valores de  $\alpha$  diferentes. En el límite  $\alpha = 3$  la matriz hamiltoniana tiene la forma

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{(2K+1)(2K-3)}{4} & \sqrt{2K-3} \\ \sqrt{2K-3} & -\frac{13}{4} + 3K - K^2 \end{pmatrix},$$

con eigenvalores y eigenvectores

$$\begin{aligned} E_- &= -\frac{(2K-1)^2}{4}, \quad \Psi_- = \begin{pmatrix} -\sqrt{2K-3} \\ 1 \end{pmatrix}, \\ E_+ &= -\frac{9}{4} + 3K - K^2, \quad \Psi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2K-3} \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

<sup>12</sup>Al igual que en el caso del oscilador armónico, la *norma*  $N_1$  de la función de Lanczos no-normalizada desaparece en el límite  $\alpha \rightarrow 1$ , sin embargo la función normalizada correspondiente  $\psi_1^{\mathcal{L}}$  tiene una continuación analítica correcta en ese límite.

En este límite las funciones de Lanczos son:

$$\begin{aligned}\psi_0^{\mathcal{L}} &= \frac{e^{(-\frac{y}{2})} y^{(K-3/2)}}{\sqrt{\Gamma(2K-3)}} \\ \psi_1^{\mathcal{L}} &= \frac{e^{(-\frac{y}{2})} y^{(K-3/2)} ((2K-3) - y)}{\sqrt{\Gamma(2K-3)} \sqrt{2K-3}}.\end{aligned}$$

De aquí podemos ver que las eigenfunciones obtenidas por la diagonalización

$$\begin{aligned}\Psi_- &= -\sqrt{2K-3} \psi_0^{\mathcal{L}} + \psi_1^{\mathcal{L}} = \frac{e^{(-\frac{y}{2})} y^{(K-1/2)}}{\sqrt{\Gamma(2K-3)} \sqrt{2K-3}}, \\ \Psi_+ &= \frac{1}{\sqrt{2K-3}} \psi_0^{\mathcal{L}} + \psi_1^{\mathcal{L}} = \frac{e^{(-\frac{y}{2})} y^{(K-3/2)} ((2K-2) - y)}{\sqrt{\Gamma(2K-3)} \sqrt{2K-3}},\end{aligned}$$

corresponden, salvo normalización, a las eigenfunciones exactas del estado base y del primer estado excitado (Ecs. (4.10) y (4.15) respectivamente).

Así, en este ejemplo particular puede verse que para recuperar las eigenfunciones exactas, el parámetro  $\alpha$  debe evaluarse en distintos valores. Esto está en claro contraste con el caso del oscilador armónico simple (Cap. 3), donde un solo valor de  $\alpha$  nos permitía recuperar las eigenfunciones exactas.

Ahora, volviendo a las eigenfunciones exactas del oscilador de Morse, vemos que las condiciones de normalización imponen una restricción en el parámetro  $K$  la cual está dada por la desigualdad  $K > n + \frac{1}{2}$ , donde  $n = 0, 1, 2, \dots$ , dependiendo del número de estados ligados del sistema. Así, en el caso en que solo existe el estado base del sistema se tiene como condición  $K > \frac{1}{2}$  y en el caso en que también exista el primer estado excitado la condición es  $K > \frac{3}{2}$ . A su vez, las condiciones de normalización sobre las funciones de Lanczos están dadas por  $K > \alpha/2$ . Entonces, en el límite  $\alpha \rightarrow 1$  solo existe el estado base, mientras que en el límite  $\alpha \rightarrow 3$  existen los dos primeros estados y que corresponden a aquéllos resultantes de la diagonalización. Para cualquier valor  $1 < \alpha < 3$  tenemos un estado base aproximado y un primer estado excitado espurio.

En este punto conviene fijar algo de notación. Como a continuación trabajaremos con matrices de Jacobi más grandes, conviene renombrar a las funciones

obtenidas por medio de la diagonalización de las mismas. De aquí en adelante nos referimos a dichas funciones como  $\Psi_m^n$ , donde  $n$  corresponde al grado de la matriz hamiltoniana, y  $m$  corresponde a nuestra identificación con determinada eigenfunción del sistema. Así por ejemplo,  $\Psi_-$  y  $\Psi_+$  son  $\Psi_0^2$  y  $\Psi_1^2$  correspondientemente en la nueva notación.

El proceso de diagonalización puede ser extendido para matrices de Lanczos de mayor grado y tenemos el mismo fenómeno observado en el caso  $2 \times 2$ . En el caso  $3 \times 3$  obtenemos tres funciones:  $\Psi_0^3$ ,  $\Psi_1^3$  y  $\Psi_2^3$ . En analogía con el caso anterior se evaluaron las funciones en los valores del parámetro  $\alpha = 1$ ,  $\alpha = 3$  y  $\alpha = 5$ . Los resultados son los siguientes:

- Cuando  $\alpha = 1$ ,  $\Psi_0^3 \rightarrow \psi_0$ ,  $\Psi_1^3 \rightarrow$  Otra Función,  $\Psi_2^3 \rightarrow$  Otra Función.
- Cuando  $\alpha = 3$ ,  $\Psi_0^3 \rightarrow \psi_0$ ,  $\Psi_1^3 \rightarrow \psi_1$ ,  $\Psi_2^3 \rightarrow$  Otra Función.
- Cuando  $\alpha = 5$ ,  $\Psi_0^3 \rightarrow \psi_0$ ,  $\Psi_1^3 \rightarrow \psi_1$ ,  $\Psi_2^3 \rightarrow \psi_2$ .

donde el término *Otra función* significa que se obtuvo en ese límite una función diferente a cualquier eigenfunción del oscilador de Morse y corresponde a un estado espurio.

El mismo análisis se extendió hasta el caso de una matriz Hamiltoniana  $4 \times 4$ . La totalidad de los resultados se encuentran en la siguiente tabla 5.1.

En este punto podemos ver varias cosas. En primer lugar, hay una identificación entre algunos valores de  $\alpha$  con la aparición de determinados niveles excitados del sistema;  $\alpha = 1$  con el estado base,  $\alpha = 3$  con el primer estado excitado,  $\alpha = 5$  con el segundo estado excitado,  $\alpha = 7$  con el tercer estado excitado, etc<sup>13</sup>.

De esta forma, se establece de manera natural un protocolo para recuperar las características propias del sistema. Podemos intentar resumirlo en las siguientes líneas:

- Solo ciertos valores definidos del parámetro  $\alpha$  nos permite recuperar las eigenfunciones exactas del oscilador de Morse a partir de las funciones de Lanczos.

<sup>13</sup>Aunque no se hicieron los cálculos explícitamente, no hay razón para pensar que en los pasos siguientes no aparezca el mismo fenómeno.



Tabla 4.1: Eigenfunciones del potencial de Morse obtenidas por diagonalización en el método de Lanczos (con la función inicial (4.13) para  $\beta = 1$ ) evaluadas en distintos valores del parámetro  $\alpha$ . Las soluciones exactas se denotan como  $\psi_0, \psi_1, \psi_2 \dots$

Eigenfunción	$\alpha = 1$	$\alpha = 3$	$\alpha = 5$	$\alpha = 7$
$\Psi_0^2$	$\psi_0$	$\psi_0$	Otra Función	Otra Función
$\Psi_1^2$	Otra Función	$\psi_1$	Otra Función	Otra Función
$\Psi_0^3$	$\psi_0$	$\psi_0$	$\psi_0$	Otra Función
$\Psi_1^3$	Otra Función	$\psi_1$	$\psi_1$	Otra Función
$\Psi_2^3$	Otra Función	Otra Función	$\psi_2$	Otra Función
$\Psi_0^4$	$\psi_0$	$\psi_0$	$\psi_0$	$\psi_0$
$\Psi_1^4$	Otra Función	$\psi_1$	$\psi_1$	$\psi_1$
$\Psi_2^4$	Otra Función	Otra Función	$\psi_2$	$\psi_2$
$\Psi_3^4$	Otra Función	Otra Función	Otra Función	$\psi_3$

- Dichos valores de  $\alpha$  están relacionados directamente con la aparición de un nuevo nivel de energía del oscilador de Morse:  $\alpha = 1$  con el estado base,  $\alpha = 3$  con el primer estado excitado,  $\alpha = 5$  con el segundo estado excitado, etc.

De esta forma, como comentábamos antes, si en la aproximación  $3 \times 3$  evaluamos las funciones en el valor  $\alpha = 1$ , entonces solo tenemos oportunidad de aproximar el estado base. Esto a su vez significa que solo una función de nuestra aproximación se vuelve la eigenfunción correspondiente, mientras que las otras dos restantes están sobrando, de tal forma que las energías relacionadas con dichas funciones sobrantes son en general energías espurias, aunque de hecho las eigenfunciones resultantes tienen norma finita.

Así, al momento de querer recuperar un cierto límite el sistema original, debemos ser cuidadosos de qué valor del parámetro usamos y donde evaluamos las funciones. De otra forma estamos estudiando niveles espurios producto únicamente del uso de una base inapropiada.

Como breve conclusión de esta sección podemos observar el hecho de que hemos encontrado de nuevo consistencia lógica en el procedimiento al recuperar los límites originales del sistema, aunque fuera de forma más compleja. Además, hemos encontrado la presencia de niveles espurios, pero más importante aún, tenemos la forma de identificarlos y controlar en cierta medida

su aparición. Esto es de mucha importancia para nuestros propósitos, ya que ahora deseamos ver cómo se comporta el espectro de energías ante la presencia de dichos niveles.

## 4.5. Estudio del Espectro

En este punto ya entendemos en qué límites podemos recuperar las soluciones exactas del sistema original, de tal forma que podemos empezar un breve estudio del espectro como función del parámetro  $\alpha$  en las funciones de Lanczos y de  $K$ , el parámetro de profundidad del pozo, y ver cómo se comporta ante la presencia de niveles espurios. El propósito es ver si el procedimiento de Lanczos permite una fácil localización de dichos niveles para que en dado caso puedan ser rápidamente descartados<sup>14</sup>.

Analizamos por simplicidad y sin ninguna pérdida de generalidad un caso particular, el caso de la aproximación  $5 \times 5$ <sup>15</sup>. El nivel máximo de energía que puede estudiarse a partir de dicha matriz Hamiltoniana es el cuarto estado excitado, relacionado a su vez, según hemos podido concluir, con el valor  $\alpha = 9$ . Probamos evaluar en dicha matriz los valores de  $\alpha = 1, 3, 5, 7$  y  $9$ . Solo por completez presentamos la forma general de la matriz Hamiltoniana en este caso<sup>16</sup>:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_0 & N_1 & 0 & 0 & 0 \\ N_1 & h_1 & N_2 & 0 & 0 \\ 0 & N_2 & h_2 & N_3 & 0 \\ 0 & 0 & N_3 & h_3 & N_4 \\ 0 & 0 & 0 & N_4 & h_4 \end{pmatrix},$$

donde recordamos que cada elemento de matriz está definido de la manera usual:

$$h_i \equiv \langle \psi_i^{\mathcal{L}}, \hat{H} \psi_i^{\mathcal{L}} \rangle,$$

<sup>14</sup>El estudio de métodos de localización e identificación de niveles espurios es una de las partes de mayor desarrollo e importancia en la literatura disponible sobre el método de Lanczos.

<sup>15</sup>Todos los resultados observados en el caso  $5 \times 5$  se observan también en matrices hamiltonianas de menor grado.

<sup>16</sup>Las expresiones explícitas de dichos elementos de matriz como funciones de  $K$  y  $\alpha$  son ejemplarmente concisas, pero escribirlas aquí está fuera de las intenciones del presente análisis.

y  $N_i$  es la norma de la función de Lanczos  $\psi_i^{\mathcal{L}}$ :

$$N_i \equiv \langle \psi_i^{\mathcal{L}}, \psi_i^{\mathcal{L}} \rangle^{\frac{1}{2}}.$$

Lo primero que podemos ver al evaluar los elementos de matriz en los distintos valores del parámetro  $\alpha$  es lo siguiente: en cada uno de los valores de  $\alpha = 1, 3, 5, \dots$  una de las normas de Lanczos  $N_i$  se hace cero; para  $\alpha = 1$ ,  $N_1 = 0$ ; para  $\alpha = 3$ ,  $N_2 = 0$ , etc. De esta forma, dos elementos subdiagonales opuestos en la matriz Hamiltoniana desaparecen para un valor dado de  $\alpha$  y la matriz hamiltoniana se separa en dos bloques: un bloque correspondiente a los niveles de energía reales, y otro correspondiente a los niveles espúrios.

Supongamos por ejemplo que  $\alpha = 5$ . Dicho valor esta relacionado con la aparición del segundo estado excitado, de tal forma que en nuestra aproximación  $5 \times 5$  nos enfrentamos a la posible presencia de dos niveles espúrios (véase la Fig. (4.2)). Para  $\alpha = 5$  se tiene que  $N_3 = 0$ . Así, la matriz Hamiltoniana se puede dividir en dos: una submatriz  $3 \times 3$  y otra submatriz  $2 \times 2$ . A la primera matriz la denominaremos  $\mathbf{H}_{real}$ , mientras que a la otra  $\mathbf{H}_{esp.}$ ; la razón de dicha notación es porque la primera matriz resulta traer consigo la información real del sistema, mientras que la otra trae información espuria. La división de la matriz Hamiltoniana se puede poner esquemáticamente como:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{real} & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_{esp.} \end{pmatrix},$$

Para el cálculo del determinante y la ecuación secular de  $\mathbf{H}$ , podemos valer nos del teorema .3. Según dicho teorema. la ecuación secular de la matriz Hamiltoniana de grado  $n \times n$  cumple con la relación de recurrencia:

$$\phi_n(\lambda) = (h_{n-1} - \lambda)\phi_{n-1}(\lambda) - N_{n-1}^2\phi_{n-2}(\lambda),$$

por lo que, cuando los elementos subdiagonales  $N_k$  se hacen cero, la relación de recurrencia se rompe, dando lugar al comienzo de otra relación nueva. Así, quedan dos ecuaciones seculares separadas, una para para  $\mathbf{H}_{real}$  y otra para  $\mathbf{H}_{esp.}$ , sin ninguna relación entre ellas. El espectro obtenido a partir de la primera ecuación secular nos da la información del espectro real del problema, mientras que la otra nos trae información espuria.

Podemos ahora graficar el espectro resultado de alguna aproximación dada como función de la profundidad del pozo  $K$ , para un valor de  $\alpha$  fijo. Intentemos, por continuidad, evaluar la matriz Hamiltoniana en los valores  $\alpha = 5$  hasta  $\alpha = 9^{17}$ . Las gráficas de las distintas energías como funciones del parámetro  $K$  se muestran en las gráficas (4.2), (4.3) y (4.4). En la figura (4.2) hemos evaluado los eigenvalores para el valor  $\alpha = 5$ . La figura nos muestra de hecho las energías correspondientes a los estados mas bajos. Para valores  $K < \alpha$  la figura nos muestra la aproximación a las energías del estado base, del primero y del segundo estados excitados, además nos muestra dos estados espurios restantes con energía positiva de forma bastante clara. Lo mismo ocurre en la figura (4.3), donde se tomó  $\alpha = 7$ , con la diferencia de que ahora hay solo un nivel espurio, el cual es aún fácilmente reconocible. En la figura (4.4), donde se evaluó  $\alpha = 9$  se muestran todas la energías reales del oscilador de Morse hasta el cuarto estado excitado.

De esta forma, hemos podido observar la aparición de niveles espurios propios del procedimiento de Lanczos. La identificación de los mismos ha sido además ejemplarmente sencilla.

## 4.6. Conclusiones

Como conclusión general al presente capítulo podemos presentar un número de características nuevas no presentes en el caso del oscilador armónico simple. En primer lugar, hemos visto que la elección de una función inicial adecuada es de crucial importancia. Una función inicial no apropiada puede complicar innecesariamente el problema entero. Más aun, se debe escoger la función inicial con el objetivo de que la funciones de Lanczos obtenidas a partir de la misma posean algunas propiedades deseables. Por ejemplo, en nuestro caso actual diseñamos la función inicial haciendo especial incapie en controlar las propiedades de normalización de las funciones de Lanczos.

---

<sup>17</sup>Recordamos que en este caso las energías reales del oscilador de Morse son:

$$E_n = -\left(K - \frac{1}{2} - n\right)^2$$

donde  $n = 0, 1, 2, 3, 4$ .

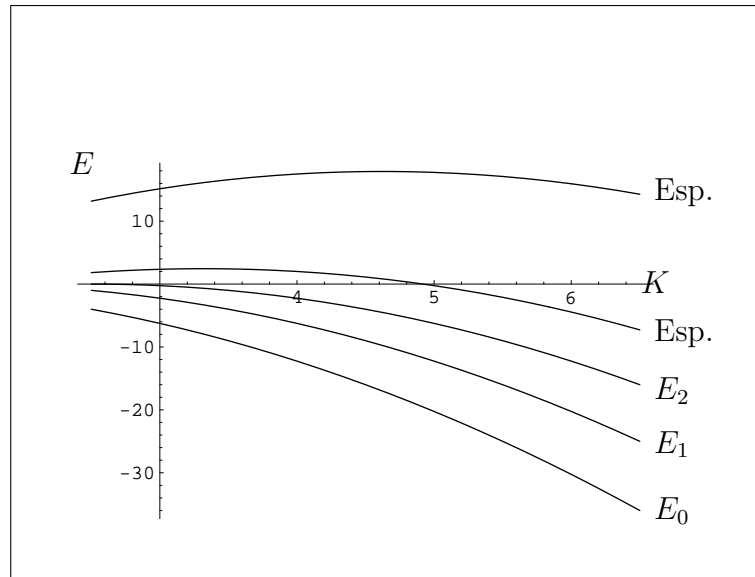


Figura 4.2: Espectro de energías para el potencial de Morse como función de la profundidad del pozo  $K$  (cf. Ec. (4.2)) en la aproximación de Lanczos  $5 \times 5$ , para  $\alpha = 5$ . Se observa la aparición de dos niveles de energía positiva espurios para  $K < \alpha$ .

Para recuperar las funciones exactas en algún límite de los parámetros fue necesario recurrir a la diagonalización de la matriz Hamiltoniana en cuestión. Más aún, vimos que el valor de los parámetros en los cuales se recuperan las soluciones exactas no corresponde a los valores obtenidos en el cálculo variacional del estado base, que en el presente caso corresponde a elegir  $\alpha = 1, \beta = 1$ . Por el contrario, y dependiendo del número de estados ligados que puede contener el potencial, las soluciones exactas se recuperan al elegir  $\alpha = 1, 3, 5, 7, \dots$  si se tienen  $1, 2, 3, 4 \dots$  estados ligados respectivamente<sup>18</sup>. Para estos mismos valores del parámetro  $\alpha = 1, 3, 5, 7, \dots$ , la matriz hamiltoniana se separa en dos bloques, uno conteniendo la información real del sistema, y otro que incluye la presencia de niveles espurios.

<sup>18</sup>El número de estados ligados esta determinado por la profundidad del pozo  $K$  y los niveles de energía posibles son  $n = 0, 1, \dots, \lfloor K - \frac{1}{2} \rfloor$ .

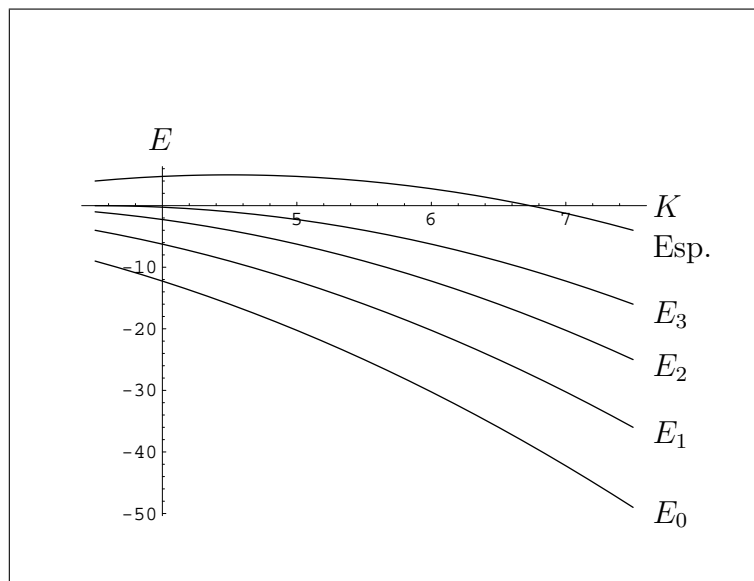


Figura 4.3: Espectro de energías para el potencial de Morse como función de la profundidad del pozo  $K$  (cf. Ec. (4.2)) en la aproximación de Lanczos  $5 \times 5$ , para  $\alpha = 7$ . Se observa la aparición de un nivel de energía positiva espurio para  $K < \alpha$ .

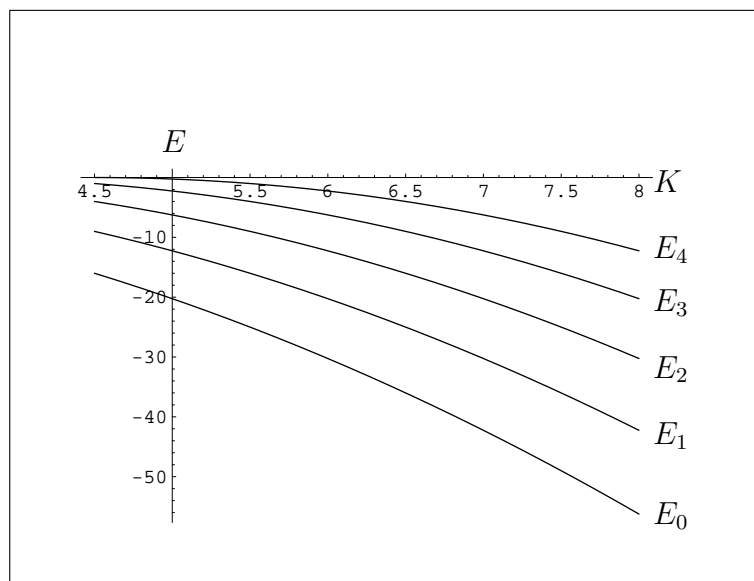


Figura 4.4: Espectro de energías para el potencial de Morse como función de la profundidad del pozo  $K$  (cf. Ec. (4.2)) en la aproximación de Lanczos  $5 \times 5$ , para  $\alpha = 9$ . En este caso no aparecen niveles de energía espurios.





# Capítulo 5

## Oscilador Anarmónico y el Procedimiento de Lanczos

### 5.1. Introducción

En este capítulo aplicamos el método de Lanczos un problema que no es exactamente soluble. El sistema en cuestión, sin embargo, es uno de los más estudiados y mejor conocidos dentro de la mecánica cuántica, lo cual nos permite contar con información para juzgar los resultados obtenidos por el procedimiento. De esta forma intentamos evaluar el método en su capacidad de incorporar las propiedades físicas del sistema en las funciones base construídas con el método. Gran énfasis se ha dado al método de Lanczos desde el punto de vista de los métodos numéricos, sin embargo el interés del presente estudio es sobre todo en lo que respecta a las propiedades analíticas de las primeras funciones de Lanczos y cómo estas propiedades dependen de la función inicial que se elija.

### 5.2. El Oscilador Anarmónico Cuártico.

Consideramos en esta sección uno de los problemas más antiguos e importantes de la física matemática moderna: el oscilador anarmónico cuártico unidimensional. El potencial de dicho sistema es presentado usualmente como:

$$V(x) = m^2x^2 + gx^4, \quad (-\infty < x < +\infty), \quad (5.1)$$

y donde  $g$  y  $m^2$  son parámetros reales que cumplen  $g \geq 0$  y  $m^2 > 0$ . La ecuación de Schrödinger es usualmente representada en la literatura por:

$$-\frac{d^2 \psi}{dx^2} + (m^2 x^2 + g x^4) \psi = E \psi, \quad (5.2)$$

con las condiciones de frontera

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) \rightarrow 0.$$

El potencial (5.1) es simétrico ante transformaciones de paridad  $x \rightarrow -x$ , por lo que sus eigenfunciones tienen una paridad definida.

El oscilador anarmónico cuártico es considerado como uno de los problemas más simples en no ser exactamente soluble. Sin embargo, el hecho de no poder ser resuelto analíticamente no ha impedido que sea estudiado a fondo, hasta llegar a ser uno de los sistemas mejor comprendidos en la actualidad. De hecho, el interés y entusiasmo subyacente a tales investigaciones está bien justificado. La serie de artículos de C. Bender-T.T. Wu [22] (piedra de toque para cualquier empresa relacionada con el problema) mostraron la riqueza de estructura interna del oscilador anarmónico cuártico. Su rango de aplicaciones cubre desde varias ramas de la física hasta la química y la biología. Para la física en particular ha demostrado tener gran importancia. El hecho de que la aplicabilidad de la teoría perturbativa estándar de Rayleigh-Schrödinger sea limitada debido a su comportamiento asintótico divergente<sup>1</sup> en el parámetro  $g$ , ha impulsado el estudio de métodos no-perturbativos y hace al oscilador anarmónico cuártico un campo ideal de pruebas para dichos estudios y un paradigma para problemas mas complejos.

A lo largo de las siguientes líneas proponemos métodos distintos para encontrar aproximaciones a las eigenfunciones y las energías del oscilador anarmónico cuártico. Analizamos las fuerzas y debilidades de dichas aproximaciones contraponiéndolas a resultados bien conocidos del sistema. Finalmente utilizamos el método de Lanczos y tratamos de juzgar las ventajas y desventajas de las aproximaciones obtenidas a través de él, a la luz de los resultados anteriores. A lo largo del capítulo introducimos varios parámetros, de la misma forma que fue hecho en los capítulos anteriores, por lo que se consideró conveniente fijar en el operador (5.2) a  $m^2 = 1$ .

<sup>1</sup>veáse por ejemplo <http://www.asergeev.com>

### 5.3. Caso I. Base del Oscilador Armónico.

Como primer ataque, usamos una base fija de eigenfunciones del oscilador armónico simple para encontrar una representación matricial del problema de eigenvalores. Dicha base es, por simplicidad, solo de eigenfunciones pares, lo cual nos limita a un estudio de los estados pares del espectro. Explícitamente, la base esta dada por el conjunto:

$$\left\{ \psi_n(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}} \right\} \quad (5.3)$$

con  $n$  un entero par,  $n = 0, 2, 4, 6, \dots$ . A partir de esta base, y con el operador Hamiltoniano correspondiente al oscilador anarmónico, definido como:

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 + g x^4, \quad (5.4)$$

construimos los elementos de matriz definidos como:

$$\begin{aligned} h_{n,m} &\equiv \langle \psi_m(x), \hat{H} \psi_n(x) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) \hat{H} \psi_n(x) dx. \end{aligned}$$

Evaluar los elementos de matriz  $h_{m,n}$  resulta bastante sencillo. Notamos que el operador (5.4) puede ser dividido en 2 partes:

$$\hat{H} \equiv \hat{H}_{\text{armon.}} + g x^4,$$

donde definimos:

$$\hat{H}_{\text{armon.}} \equiv -\frac{d^2}{dx^2} + x^2,$$

que no es sino la parte del oscilador armónico simple. Luego los elementos de matriz  $h_{m,n}$  se pueden escribir como:

$$\begin{aligned} h_{m,n} &= \langle \psi_m, \hat{H} \psi_n \rangle \\ &= \langle \psi_m, \hat{H}_{\text{armon.}} \psi_n \rangle + g \langle \psi_m, x^4 \psi_n \rangle \end{aligned} \quad (5.5)$$

Aprovechando que la base (5.3) es la misma base de eigenfunciones del operador  $\hat{H}_{\text{armon.}}$ , el primer sumando en (5.5) es igual a:

$$\langle \psi_m, \hat{H}_{\text{armon.}} \psi_n \rangle = (2n + 1) \delta_{m,n}. \quad (5.6)$$

Se puede demostrar analíticamente que el segundo sumando en (5.5) es igual a:

$$\begin{aligned}
 g \langle \psi_m, x^4 \psi_n \rangle = \frac{g}{\sqrt{m! n! 2^{m+n}}} & \left( 2^n (n+4)! \delta_{m,n+4} \right. \\
 & + 2^n (n+2)! (2n+3) \delta_{m,n+2} \\
 & + 2^{n-2} n! (6n^2 + 6n + 3) \delta_{m,n} \\
 & + 2^m (m+2)! (2m+3) \delta_{m+2,n} \\
 & \left. + 2^m (m+4)! \delta_{m+4,n} \right). \quad (5.7)
 \end{aligned}$$

Sustituyendo (5.6) y (5.7) en (5.5) obtenemos que los elementos de matriz son:

$$\begin{aligned}
 h_{m,n} = & (2n+1) \delta_{m,n} + \frac{g}{\sqrt{m! n! 2^{m+n}}} \left( 2^n (n+4)! \delta_{m,n+4} \right. \\
 & + 2^n (n+2)! (2n+3) \delta_{m,n+2} + 2^{n-2} n! (6n^2 + 6n + 3) \delta_{m,n} \\
 & \left. + 2^m (m+2)! (2m+3) \delta_{m+2,n} + 2^m (m+4)! \delta_{m+4,n} \right), \quad (5.8)
 \end{aligned}$$

donde, debemos recordarlo,  $m$  y  $n$  son números enteros pares positivos que corren a partir de cero. Puede verse fácilmente en (5.8) una invarianza en  $h_{m,n}$  bajo el intercambio  $m \leftrightarrow n$ . Esto indica que la matriz es simétrica, como era de esperarse.

En particular el elemento

$$h_{0,0} = 1 + \frac{3}{4}g, \quad (5.9)$$

nos da la energía del estado base con la primera corrección perturbativa.

Por ejemplo, la matriz Hamiltoniana en la aproximación  $4 \times 4$  tiene la forma explícita:

$$\mathbf{H}_{4 \times 4} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{3g}{4} & \frac{3g}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{3}{2}}g & 0 \\ \frac{3g}{\sqrt{2}} & 5 + \frac{39g}{4} & 7\sqrt{3}g & 3\sqrt{\frac{5}{2}}g \\ \sqrt{\frac{3}{2}}g & 7\sqrt{3}g & 9 + \frac{123g}{4} & 11\sqrt{\frac{15}{2}}g \\ 0 & 3\sqrt{\frac{5}{2}}g & 11\sqrt{\frac{15}{2}}g & 13 + \frac{255g}{4} \end{pmatrix}.$$

Podemos inferir varias cosas rápidamente de la forma de los elementos de matriz (y más claramente aún, de la forma explícita de la matriz). Podemos ver

que en el límite  $g \rightarrow 0$ , la matriz hamiltoniana será diagonal, y en la diagonal principal solo sobrevivirá el sumando que corresponde a la energía del oscilador armónico simple. Esto es totalmente consistente con el planteamiento original del problema, ya que al hacer  $g \rightarrow 0$  en el operador (5.4), obtenemos el problema del oscilador armónico simple, del cual tomamos sus eigenfunciones para construir nuestra representación matricial actual. Así pues, esperamos que las energías como funciones de  $g$  en sus distintas aproximaciones tomen los valores de las energías del oscilador armónico cuando  $g \rightarrow 0$ .

La energía del estado base como función de la constante de acoplamiento  $g$  en las aproximaciones desde  $1 \times 1$  hasta  $4 \times 4$  se muestran en la figura (5.1). De aquí se puede observar que la *convergencia* es mas lenta para valores grandes de la constante de acoplamiento.

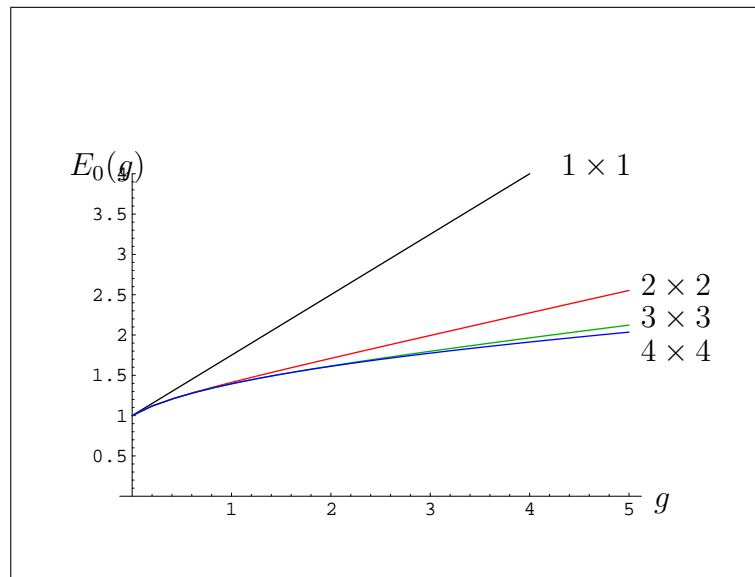


Figura 5.1: Energía del estado base del oscilador anarmónico como función de la constante de acoplamiento  $g$  para diferentes aproximaciones en la base del oscilador armónico.

En la figura (5.2) se muestra la energía del estado base en sus distintas aproximaciones, comparada con la energía del primer estado excitado, para



$$\mathbf{H} = g \begin{pmatrix} \ddots & & & \\ b_n & \frac{a_n}{g} + d_n & c_n & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots \end{pmatrix},$$

y si hacemos  $g \rightarrow \infty$ , obtenemos:

$$\mathbf{H} \approx g \begin{pmatrix} \ddots & & & \\ b_n & d_n & c_n & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots \end{pmatrix},$$

donde tomamos  $\frac{a_n}{g} \approx 0$ . Así, en este límite la matriz Hamiltoniana puede ser representada como:

$$\mathbf{H} = g \mathbf{A},$$

donde  $\mathbf{A}$  es una matriz puramente numérica. Así, la ecuación matricial de eigenvalores es:

$$g \mathbf{A}v = \lambda v,$$

ó:

$$\mathbf{A}v = \frac{\lambda}{g} v,$$

de tal forma que, al resolver,  $\frac{\lambda}{g}$  tendrá un valor puramente numérico, i.e.  $\lambda$  tiene una dependencia lineal en  $g$ , para valores grandes del mismo parámetro. Quizás mas importante es el hecho de que esta dependencia lineal en  $g$  se presenta para todas las aproximaciones en la base del oscilador armónico. Esto, sin embargo, está en desacuerdo con los resultados conocidos, que indican que, para valores grandes de  $g$ , la energía del estado base tiene una dependencia asintótica del tipo:

$$\lambda \approx 1,061 g^{\frac{1}{3}}. \quad (5.10)$$

Así, vemos que la base del oscilador armónico no incorpora las propiedades físicas del sistema en el límite asintótico  $g \rightarrow \infty$ . En este sentido podemos concluir que esta base no es muy adecuada.

Sin embargo, aunque nuestra base resulte inapropiada para una descripción del problema para valores grandes de  $g$ , resulta ser buena para valores de  $g$  cercanos a cero. En efecto, esto resulta lógico considerando que cuando  $g$  tiende a cero, nuestro problema se reduce al oscilador armónico simple, del

que nuestra base resulta ser solución exacta. Más aún: como estamos utilizando una base completa desde el inicio, podemos asumir que, para regiones donde  $g \rightarrow 0$ , conforme aumentemos de grado nuestra matriz, la aproximación a cada estado será cada vez mejor. Podemos hacer una comparación cualitativa entre las energías que obtuvimos contra alguna estimación confiable en esa región. Efectivamente, por teoría perturbativa, la energía del estado base del operador (5.4) es, a primer orden alrededor de  $g = 0$ :

$$E_0 \approx 1 + \frac{3}{4} g.$$

Comparando esta estimación con la aproximación correspondiente a la matriz de  $4 \times 4$ , vemos en la figura (6.3) que hay plena coincidencia en región  $g \rightarrow 0$ .

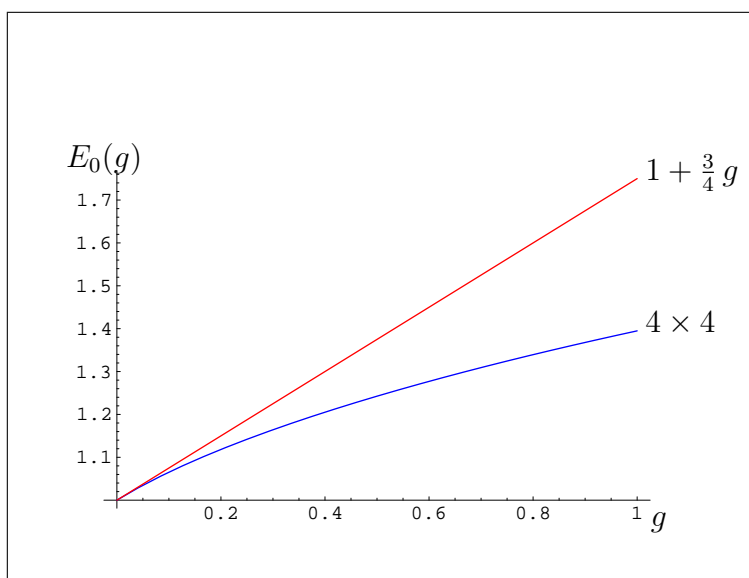


Figura 5.3: Comparación entre los resultados de la aproximación ( $4 \times 4$ ) para el estado base contra la estimación perturbativa a primer orden.

Como una conclusión, podemos decir que hemos obtenido aproximaciones buenas a la energía en la región  $g \rightarrow 0$ . El hecho de que nos sea disponible la forma explícita de cualquier elemento de matriz nos proporciona facilidad de cálculo. Sin embargo, ninguna aproximación reproduce el comportamiento asintótico de la energía del estado base para valores grandes de la constante



de acoplamiento  $g \rightarrow \infty$ . Pensamos que una base que si reproduzca este comportamiento asintótico tendra mejores propiedades de convergencia.

## 5.4. Caso II. Procedimiento de Lanczos: Primera Prueba.

Utilizamos ahora el método de Lanczos, tomando como función inicial la eigenfunción del estado base del oscilador armónico de frecuencia  $\omega = 1/\alpha$ :

$$\psi_0^{\mathcal{L}}(x) \equiv \frac{1}{(\pi \alpha)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}, \quad (5.11)$$

(c.f. fórmula (3.11)) donde  $\alpha$  es un parámetro (variacional) real positivo.

A causa de la complejidad de los resultados del cálculo, nuestro estudio del espectro está limitado solo a los tres primeros niveles de energía<sup>2</sup>. Sin embargo, estos resultados son suficientes y mucho puede ser dicho aún a este nivel. Procedemos en las líneas siguientes a hacer algunas observaciones sobre las funciones de Lanczos mismas. A continuación mostramos la primera función de Lanczos (en su forma no-normalizada, por simplicidad). Recordamos que dicha función está dada en general por:

$$\phi_1^{\mathcal{L}}(x) = \hat{H}\psi_0^{\mathcal{L}} - \langle \psi_0^{\mathcal{L}}, \hat{H}\psi_0^{\mathcal{L}} \rangle \psi_0^{\mathcal{L}},$$

de tal forma que la función está dada explícitamente por<sup>3</sup>:

$$\phi_1^{\mathcal{L}} = \left( -\frac{1}{4\alpha}(-2 + \alpha^2(2 + 3g\alpha)) + (1 - \frac{1}{\alpha^2})x^2 + gx^4 \right) e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}. \quad (5.12)$$

Ahora, como el operador (5.4) es invariante ante el cambio  $x \leftrightarrow -x$ , es decir, es invariante ante transformaciones de paridad, y como nuestra función inicial (5.11) tiene paridad par, tendremos entonces que nuestras funciones de

<sup>2</sup>Estos tres niveles obtenidos por el procedimiento, funciones de los parámetros  $\alpha$  y  $g$ , muestran consistencia con el sistema, ya que cuando se les evalúa en  $g = 1$  y  $\alpha = 1$  obtenemos los valores exactos correspondientes a las energías de los estados base, primero y segundo excitados del oscilador armónico simple respectivamente, como es de esperarse.

<sup>3</sup>Hacemos notar en este punto que la estructura de la función (5.12) se repite para todas las funciones de Lanczos subsiguientes: siempre están compuestas por el producto de la función inicial con una parte polinomial.

Lanczos conservan esta misma paridad. Esperamos entonces que, para poder obtener una base completa para nuestro problema, las funciones de Lanczos recorran una a una en su parte polinomial todos los grados pares, de tal forma que la primera función de Lanczos tuviera una parte polinomial de segundo grado, la segunda función una parte polinomial de cuarto grado, etc<sup>4</sup>. Sin embargo, la primera función (5.12) tiene una parte polinomial de cuarto grado, aunque debemos recordar que lo mas importante es la naturaleza y número de nodos de las funciones de la base.

Podemos estudiar esto con más detenimiento. Considerando la forma explícita de (5.12), podemos encontrar los ceros de  $\phi_1^L$  resolviendo su parte polinomial como una ecuación de segundo grado en la variable  $x^2$ :

$$(x^2)_\pm = \frac{1}{2g} \left( \left( \frac{1}{\alpha^2} - 1 \right) \pm \sqrt{\left( \frac{1}{\alpha^2} - 1 \right)^2 + \frac{1}{\alpha} (-2 + \alpha^2(2 + 3g\alpha))g} \right). \quad (5.13)$$

Así, obtenemos dos soluciones  $(x^2)_+$  y  $(x^2)_-$ . Ahora bien, si hacemos una gráfica del radical que aparece en (5.13) vemos que para valores positivos de  $\alpha$  y  $g$ , la expresión dentro del radical es positiva y por lo tanto las raíces  $(x^2)_\pm$  son reales (y  $(x^2)_+ > (x^2)_-$ ). Tenemos de esta forma las siguientes opciones:

- Si  $(x^2)_+ > 0$  y  $(x^2)_- > 0 \Rightarrow$  Tenemos 4 nodos reales.
- Si  $(x^2)_+ > 0$  y  $(x^2)_- = 0 \Rightarrow$  Tenemos 3 nodos reales, uno de ellos en  $x = 0$ .
- Si  $(x^2)_+ > 0$  y  $(x^2)_- < 0 \Rightarrow$  Tenemos 2 nodos reales.

Podemos preguntarnos ahora sobre las condiciones necesarias para tener dos nodos. Viendo la forma de (5.13), solo basta que el segundo sumando dentro de la raíz cuadrada sea positivo para que  $(x^2)_-$  sea negativo. Esto es:

$$\frac{1}{\alpha} (-2 + \alpha^2(2 + 3g\alpha))g > 0,$$

lo que lleva a:

$$g > \frac{2}{3\alpha} \left( \frac{1}{\alpha^2} - 1 \right).$$

---

<sup>4</sup>Si deseamos hacer un estudio de los niveles impares del espectro, debemos escoger entonces una función inicial impar.

Tendremos 3 nodos si:

$$\frac{1}{\alpha} (-2 + \alpha^2(2 + 3g\alpha)) g = 0,$$

es decir, si:

$$g = \frac{2}{3\alpha} \left( \frac{1}{\alpha^2} - 1 \right), \quad (5.14)$$

en cuyo caso tendremos que:

$$\begin{aligned} (x^2)_+ &= \frac{1}{g} \left( \frac{1}{\alpha^2} - 1 \right), \\ (x^2)_- &= 0. \end{aligned}$$

De forma análoga se puede observar que si se cumple:

$$g < \frac{2}{3\alpha} \left( \frac{1}{\alpha^2} - 1 \right),$$

entonces habrá 4 nodos. En la figura (6.4) se pueden observar las distintas regiones en el plano  $(g-\alpha)$  donde la primera función de Lanczos tiene 2, 3 y 4 nodos. La curva mostrada en la figura está dada por la ecuación (5.14).

Es en este punto donde podemos aplicar la lección aprendida con el Oscilador de Morse (Capítulo 5). A continuación, se puede proceder a obtener las eigenfunciones correspondientes a la matriz Hamiltoniana del grado que se desee. En nuestro caso particular, y por simplicidad solo se ha podido obtener el eigenvector correspondiente a la matriz  $2 \times 2$ , lo cual, sin embargo, resulta suficiente para llegar a algunas conclusiones importantes.

Así pues, tenemos las dos eigenfunciones correspondientes a esta matriz  $2 \times 2$ . Ambas eigenfunciones tienen una parte polinomial de grado cuatro en la variable  $x$ , con una dependencia explícita en los parámetros  $\alpha$  y  $g$ . Sin embargo, al igual que en la discusión líneas arriba sobre la primera función de Lanczos en nuestro caso actual, puede ser que algunos de los nodos de dichas funciones sean complejos para ciertas combinaciones de  $\alpha$  y  $g$ , saliendo así del dominio de definición de nuestro sistema. Ahora, nosotros esperamos, en analogía con todos los problemas estudiados anteriormente, que dichas eigenfunciones de la matriz Hamiltoniana tengan una correspondencia directa con los niveles

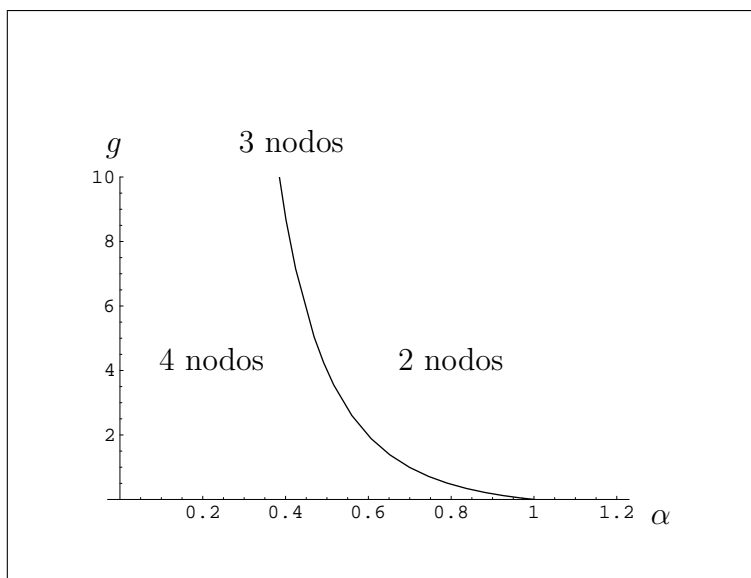


Figura 5.4: Distribución de Nodos en la primera función de Lanczos generada por la función inicial (5.11).

excitados del sistema. En nuestro caso actual, dichos niveles excitados serían, como hemos argumentado arriba, los niveles pares. De esta forma, esperamos que una de las dos eigenfunciones corresponda al estado base del problema, y que la otra corresponda al segundo estado excitado. A su vez, esto nos lleva a buscar una eigenfunción de la matriz Hamiltoniana sin nodos reales, y otra con 2 nodos reales. El análisis de los nodos de las dos eigenfunciones es, a pesar nuestro y aún el caso  $2 \times 2$ , demasiado complejo para llevarse a cabo analíticamente. En cambio, se procedió primero obteniendo la localización general de los nodos como funciones de  $\alpha$  y  $g$ , y después evaluándolos numéricamente en varios valores de los mismos parámetros. La evaluación fue llevada a cabo sobre amplias cuadrículas en el plano  $(\alpha - g)$ , localizadas sobre distintas regiones, desde lugares muy cercanos al origen, hasta la región alrededor de los valores  $\alpha = g = 100$ . Los resultados obtenidos de esta forma son los siguientes. Una de las funciones tiene siempre dos nodos reales y dos imaginarios, sin importar la región de puntos donde fueron evaluados sus nodos. La otra función, sin embargo, tiene en alguna región 2 nodos y en otra región cercana al origen 4, estando separada una región de otra, se adivina, de una manera similar a la mostrada en la figura (5.4). De esta forma,

aunque un poco al tanteo, se puede ver que por medio de la diagonalización *no* se pueden obtener dos eigenfunciones correspondientes al estado base y al segundo estado excitado respectivamente. Esto es muy importante pues quiere decir que el método de Lanczos por sí mismo no nos garantiza que podamos describir los estados mas bajos de manera correcta. Por esta razón es muy importante elegir adecuadamente la función inicial en el procedimiento. Dicho en otras palabras, que el método de Lanczos no nos garantiza construir una base completa para todos los valores del parámetro  $g$ . La consecuencia más importante de carecer de una base completa es, por supuesto, el hecho que el estudio del espectro no puede ser completo. Como hemos visto, existen regiones de  $(\alpha - g)$  donde no podremos tener funciones correspondientes a ciertos niveles excitados. La carencia de esas funciones particulares nos impide a su vez estudiar adecuadamente las energías correspondientes a esos niveles. Sin embargo, existe una función correspondiente a un nivel particular que siempre se encuentra presente en nuestra base de Lanczos: a saber, la función correspondiente al estado base. La primera aproximación a la energía del estado base está dada por el eigenvalor de la matriz Hamiltoniana de grado  $1 \times 1$ . Posteriormente podemos construir una base de funciones de Lanczos que puede ser completa o no, pero que de cualquier manera, al utilizarse para el estudio del espectro, siempre contribuye con una corrección a la energía del estado base, el cual siempre se encuentra representado en la base de funciones obtenida hasta ese momento.

Así pues, podemos iniciar un análisis cualitativo de nuestras aproximaciones a la energía del estado base. En la región  $g \rightarrow 0$  sabemos que la función del estado base debe ser parecida al estado base del oscilador armónico simple, así que, como primer intento al menos, podemos poner  $\alpha = 1$  en las funciones de energía del estado base obtenidas a través del procedimiento, y graficar con respecto al parámetro  $g$ . Esto se muestra en la figura (5.5), desde la aproximación  $1 \times 1$  hasta  $3 \times 3$ .

Podemos ver en la figura (5.5) que cada una de las aproximaciones, al igual que en el caso anterior, tienen un comportamiento líneal en  $g$  conforme el parámetro aumenta. Esto se debe a que nuestra función inicial, correspondiente a estado base, no tiene el comportamiento asintótico requerido por el problema, lo cual no está en concordancia con nuestra función inicial (5.11), de tal forma que en nuestro acercamiento particular no podemos esperar un comportamiento asintótico correcto cuando  $g \rightarrow \infty$ .

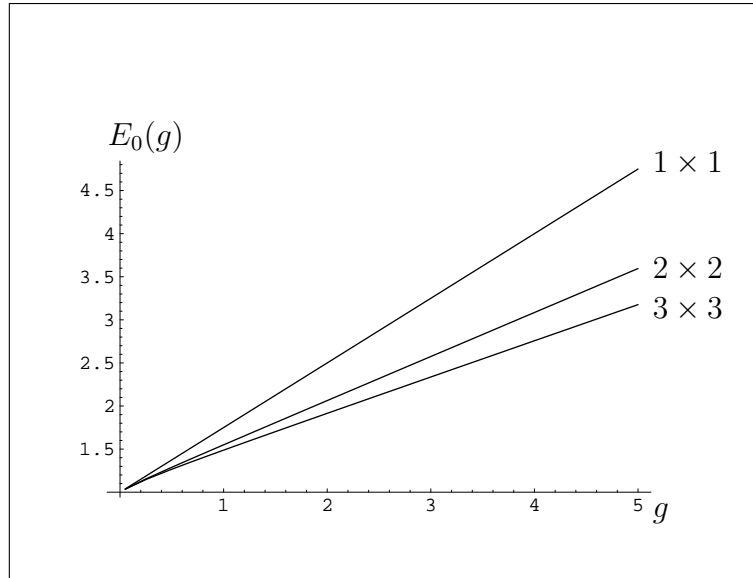


Figura 5.5: Distintas aproximaciones al estado base.

Podemos explicar este punto con más detalle. Consideremos la región donde  $g \rightarrow \infty$ . En esta región, podemos aproximar la ecuación de Schrödinger (5.2) como:

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + gx^4\psi = E\psi, \quad (5.15)$$

donde la parte cuadrática del potencial es despreciable contra la parte cuártica. Si solo estudiamos la función del estado base, y suponemos que tiene la forma:

$$\psi_0(x) = e^{-\phi(x)},$$

entonces, sustituyendo en (5.15) y simplificando obtenemos la siguiente ecuación<sup>5</sup> para  $\phi(x)$ :

$$\phi''(x) - (\phi'(x))^2 = E - gx^4. \quad (5.16)$$

Debemos buscar alguna forma de la función  $\phi(x)$  que nos permita tener cierta consistencia con el lado derecho de (5.16), que es un

<sup>5</sup>Esta es una ecuación diferencial no-lineal del tipo Ricatti.

polinomio de grado 4 en  $x$ . Si hacemos  $\phi(x) \equiv \gamma x^3$ , con  $\gamma$  un número real puesto por generalidad, y sustituimos en la ecuación anterior (5.16), obtenemos:

$$E - 6\gamma x + (9\gamma^2 - g)x^4 = 0, \quad (5.17)$$

la cual debe ser válida también para valores donde  $x \rightarrow \infty$ . En esas regiones de la variable  $x$  podemos quedarnos solo con el término cuártico en (5.17):

$$(9\gamma^2 - g)x^4 = 0,$$

de tal forma que obtenemos consistencia si hacemos:

$$\alpha = \frac{1}{3} \sqrt{g}.$$

Así, esperamos que en el límite asintótico  $g \rightarrow \infty$  la función del estado base sea del tipo:

$$\psi_0(x) \approx e^{-\frac{\sqrt{g}}{3} x^3},$$

Sin embargo, como comentamos antes, podemos considerar que nuestras aproximaciones son más o menos apropiadas para la región donde  $g \rightarrow 0$ . De la figura (5.6) podemos observar que la aproximación  $4 \times 4$  del caso I es mejor que la aproximación  $7 \times 7$ , con  $\alpha = 1$ , del caso actual conforme el parámetro  $g$  aumenta. Pero, podemos en este punto valer nos de nuestro parámetro  $\alpha$ , ya no dejándolo fijo, sino tratándolo como un parámetro variacional. La motivación de cómo se procederá es como sigue. Consideremos en este momento la energía del estado base, para nuestro caso actual, en la aproximación  $2 \times 2$  solo por claridad. Grafiquemos dicha energía, ahora como función de  $\alpha$  para un valor de  $g$  constante. En ese caso se encontrará que la energía tiene un mínimo sobre  $\alpha$  que va desplazándose conforme el valor de  $g$  cambia. En la figura (5.7) se muestra esta evolución del mínimo con respecto a  $g$ . Podemos ver que, para valores de  $g$  cercanos a cero, el mínimo se encuentra alrededor de  $\alpha = 1$ , lo cual es de esperarse, pues cuando  $g = 0$ , la función inicial es eigenfunción del operador solo si  $\alpha = 1$ . Conforme el

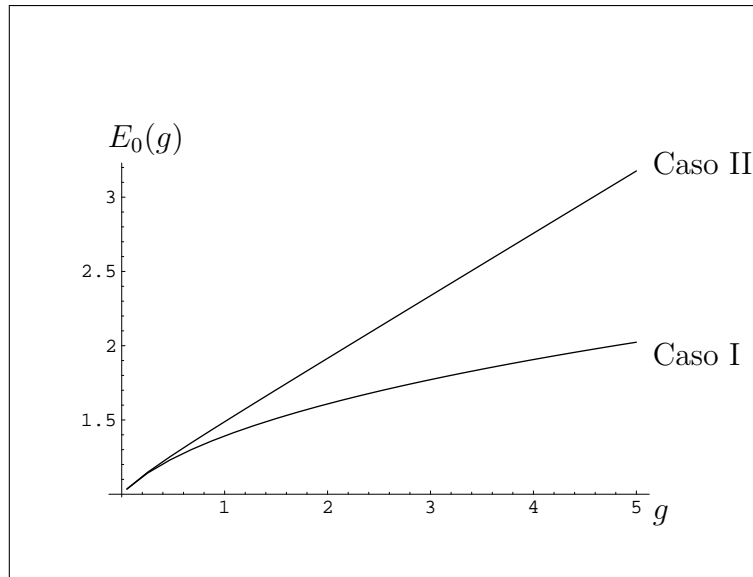


Figura 5.6: Comparación de la energía del estado base del oscilador anarmónico. Caso I: en la base del oscilador armónico en la aproximación  $4 \times 4$ , Caso II: en la base de Lanczos en la aproximación  $7 \times 7$ , con  $\alpha = 1$  usando una función inicial de la forma del estado base del oscilador armónico.

parámetro  $g$  aumenta de valor, el mínimo de la energía se desplaza cada vez más hacia valores más pequeños de  $\alpha$ , acercándose a  $\alpha = 0$ .

Luego, viendo que para cada valor de  $g$  hay un valor de  $\alpha$  que minimiza la energía, construimos una nueva gráfica. Es una gráfica de la energía del estado base contra  $g$ , solo que para cada punto sobre  $g$  tomamos el valor mínimo que la energía tome sobre  $\alpha$ . Esto significa dejar de tomar  $\alpha$  fija y desplazarse sobre los valores de  $\alpha$  que minimicen la energía. En la figura (5.8) se muestra una comparación entre esta nueva gráfica *variacional*, usando la función de energía correspondiente a la aproximación  $3 \times 3$  de nuestro caso actual, contra la función correspondiente a la aproximación  $7 \times 7$  del caso anterior. Podemos ver que hay una notable mejoría conforme el valor de  $g$  aumenta, a tal punto que, aun en un valor relativamente grande como  $g = 5$ , la nueva gráfica de la energía se vuelve casi indistinguible de la gráfica correspondiente al caso  $7 \times 7$  del caso anterior.

En este punto podemos concluir el caso actual, haciendo hincapié en que,



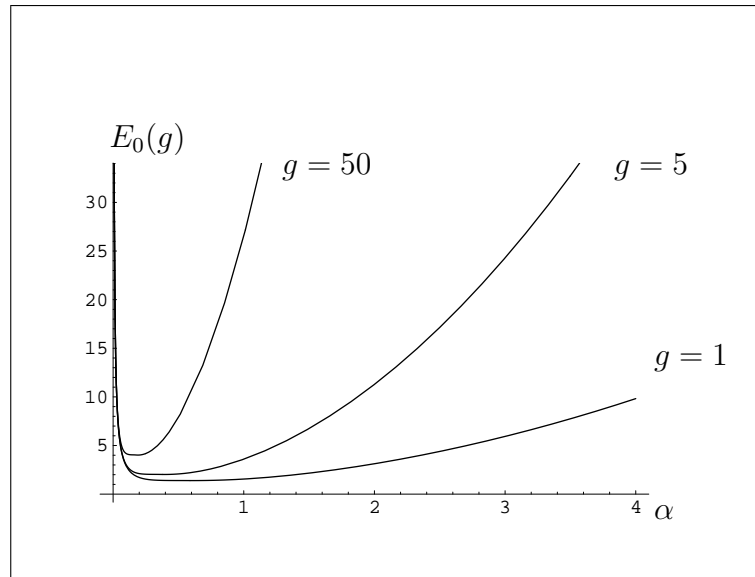


Figura 5.7: Energía del estado base en aproximación  $(2 \times 2)$  como función del parámetro variacional  $\alpha$ .

aunque no pudimos obtener una base completa de funciones de Lanczos ni siquiera después de la diagonalización de la matriz Hamiltoniana. A su vez, dicha aproximación en la base de Lanczos fue mejorada notablemente a través de usar el parámetro  $\alpha$  de la función inicial como parámetro variacional para cada valor fijo de la constante de acoplamiento  $g$ . Dicha forma de proceder será repetida en el caso siguiente.

## 5.5. Caso III. Procedimiento de Lanczos: Segunda Función de Prueba.

Utilizamos a continuación el método de Lanczos, tomando como función inicial a:

$$\phi_0^{\mathcal{L}} = e^{-\frac{1}{3g}(1+gx^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad (5.18)$$

donde la normalización no se muestra explícitamente, ya que (5.18) no puede ser normalizada analíticamente. La integral involucrada solo puede evaluarse

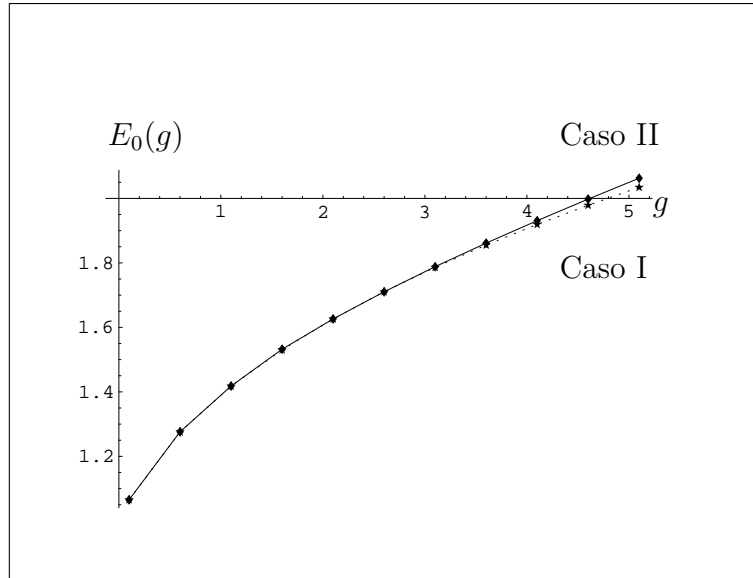


Figura 5.8: Comparación de la energía del estado base del oscilador anarmónico. Caso I: en la base del oscilador armónico en la aproximación  $7 \times 7$ , Caso II: en la base de Lanczos en la aproximación  $3 \times 3$ , con el parámetro  $\alpha$  elegido variacionalmente para cada valor fijo de la constante de acoplamiento  $g$ .

de forma numérica. Dicha función, como se muestra en el Apéndice B, es consistente con el sistema cuando se toman los límites  $x \rightarrow 0$  y  $x \rightarrow \infty$ . Esta función inicial no contiene parámetros adicionales. A continuación hacemos algunas estimaciones de la energía en ambos límites.

Cerca de  $x \rightarrow 0$ , el exponente de la función (5.18) puede ser expandido por el teorema del binomio:

$$-\frac{1}{3g} (1 + g x^2)^{\frac{3}{2}} \approx -\frac{1}{3g} - \frac{x^2}{2},$$

donde solo nos quedamos por el momento con los términos a primer orden en  $g x^2$ . Sustituyendo este resultado en (5.18) podemos obtener la función normalizada:

$$\psi_{0, x \rightarrow 0}^{\mathcal{L}} = \frac{e^{\frac{x^2}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}},$$

que no es sino la eigenfunción del estado base del oscilador armónico simple. Como ya sabemos, al evaluar la energía de la primera función de Lanczos obtenemos correctamente la energía del estado base con la primera corrección en teoría de perturbaciones:

$$h_{00} = \langle \psi_0^{\mathcal{L}}, \hat{H} \psi_0^{\mathcal{L}} \rangle_{x \rightarrow 0} = 1 + \frac{3g}{4}.$$

Hagamos ahora el análisis asintótico cuando  $x \rightarrow \infty$ . En esa región, el exponente de (5.18) puede simplificarse de la forma:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{3g} (1 + g x^2)^{\frac{3}{2}} &\approx -\frac{1}{3g} (g x^2)^{\frac{3}{2}} \\ &= -\frac{\sqrt{g}}{3} x^3. \end{aligned}$$

Sustituyendo el resultado anterior en (5.15) obtenemos la función normalizada:

$$\psi_{0; x \rightarrow \infty}^{\mathcal{L}} = \frac{\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{1}{3}} g^{\frac{1}{12}}}{\sqrt{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}} e^{-\frac{\sqrt{g}}{3} x^3}.$$

Si calculamos la energía del sistema con esta función obtenemos:

$$E_0 = h_{00; x \rightarrow \infty} = \frac{\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{2}{3}}}{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)} \frac{1}{g^{\frac{1}{3}}} + \frac{6^{\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{5}{6}\right)}{\sqrt{\pi}} g^{\frac{1}{3}}.$$

Si además evaluamos dicha energía en la región  $g \rightarrow \infty$  obtenemos:

$$\begin{aligned} E_{0; g \rightarrow \infty} = h_{00; x \rightarrow \infty; g \rightarrow \infty} &= \frac{6^{\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{5}{6}\right)}{\sqrt{\pi}} g^{\frac{1}{3}} \\ &= 1,1572 g^{\frac{1}{3}}, \end{aligned}$$

la cual tiene la dependencia en  $g$  que sabemos es correcta. De esta forma, nuestra función inicial cumple con los límites del problema.

A continuación podemos implementar el método de Lanczos con la función inicial (5.18). Por cuestiones de cómputo, nos limitamos a obtener las primeras dos funciones de Lanczos y, por lo tanto, trabajar con una matriz Hamiltoniana de grado  $3 \times 3$  a lo más. Hacemos notar además que, al igual

que en el Caso II, la función inicial empleada tiene paridad par, de tal forma que solo podemos esperar obtener información sobre los estados pares del espectro. Sin embargo, al igual que en los dos casos anteriores, nos limitamos simplemente al estudio de la energía de los estados mas bajos, y en particular al estado base, para lo cual una matriz  $3 \times 3$  resulta ser suficiente.

Podemos empezar por observar el número de nodos de las funciones. Por supuesto, la función inicial tiene cero nodos, correspondiendo al estado base. La primera función de Lanczos tiene siempre 2 nodos, para cualquier valor de  $g$ , lo cual la hace corresponder al segundo estado excitado, como esperábamos. Esto la pone por encima de la primera función de Lanczos en el caso II. La segunda función de Lanczos tiene cuatro nodos solamente hasta aproximadamente el valor  $g = 1,07$ . Para valores mayores de  $g$  la función tiene 6 nodos. En este punto, para solucionar esto, podemos hacer la diagonalización de la matriz Hamiltoniana  $3 \times 3$  para así obtener tres eigenfunciones correspondientes a la misma matriz. El resultado es que siguen obteniéndose funciones correspondientes al estado base (sin nodos) y al segundo estado excitado (con dos nodos) para todos los valores de  $g$ . Sin embargo, para la eigenfunción del cuarto estado excitado, se repite el mismo fenómeno que con la segunda función de Lanczos: la función tiene 2 nodos extra, con la pequeña diferencia de que ahora los nodos adicionales surgen a partir de aproximadamente  $g = 1,03$ .

Podemos ahora proceder al estudio del estado base. A continuación mostramos en la figura (5.9) una comparación de las tres primeras aproximaciones sucesivas a la energía del estado base en este caso, es decir, la aproximación  $1 \times 1$ ,  $2 \times 2$  y  $3 \times 3$ . Ya en este punto podemos observar algo importante: las aproximaciones  $2 \times 2$  y  $3 \times 3$  son prácticamente indistinguibles aun para valores  $g \simeq 5$ . Esto significa, por supuesto, que la convergencia de la energía es muy rápida. En este punto podemos comparar la aproximación  $3 \times 3$  del caso presente con la aproximación variacional  $3 \times 3$  del caso II. El resultado se muestra en la figura (5.10).

Podemos ver de la figura (5.10) que conforme  $g$  aumenta, el valor del estado base en la aproximación  $3 \times 3$  de nuestro caso va haciéndose cada vez menor que el de la aproximación  $3 \times 3$  variacional del caso II, y por lo tanto, es mejor. Esto ocurre sin duda por que las aproximaciones a la energía de los casos I y II solo eran buenas para una región del parámetro  $g$  cercanas al

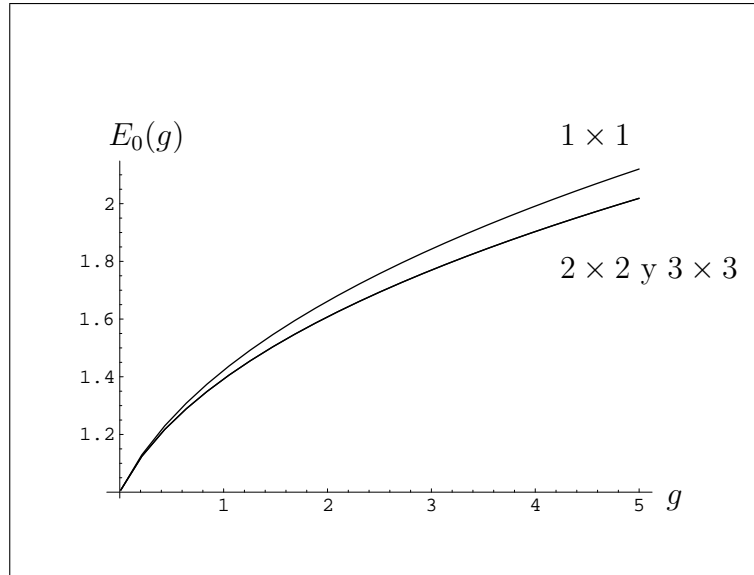


Figura 5.9: Comparación de la energía del estado base, para distintas aproximaciones del Caso III.

origen, mientras que las aproximaciones en el caso III tienen validez para una región más amplia de valores de  $g$  ya que las funciones de Lanczos tienen un comportamiento asintótico adecuado.

Podemos ahora estudiar al estado base en regiones donde el parámetro  $g$  es muy grande. Probaremos la región  $1000 < g < 1100$ . El comportamiento del estado base en esa regiones se muestra en la figura (5.11).

Podemos ajustar dichas gráficas a un comportamiento del tipo  $g^{\frac{1}{3}}$ . Los resultados para las distintas aproximaciones, cuando se tomó  $10000 < g < 10100$ , son los siguientes:

$$\begin{aligned} E_{0,g \rightarrow \infty}^{1 \times 1} &= 1,15762 g^{\frac{1}{3}} \\ E_{0,g \rightarrow \infty}^{2 \times 2} &= 1,06828 g^{\frac{1}{3}} \\ E_{0,g \rightarrow \infty}^{3 \times 3} &= 1,06705 g^{\frac{1}{3}}, \end{aligned}$$

donde claramente podemos ver que se obtiene un valor muy cercano al valor más preciso:  $E_0 = 1,061 g^{\frac{1}{3}}$ .

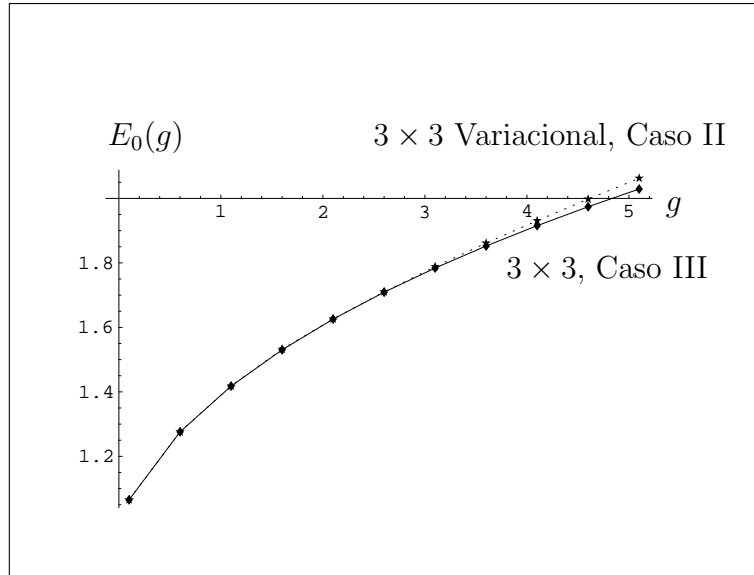


Figura 5.10: Comparación de la energía del estado base, en la aproximación  $3 \times 3$  de la base de Lanczos (Caso II y el Caso III).

Podemos ahora, en analogía con el caso anterior, proponer la aparición de un parámetro variacional  $\alpha$  en la función inicial, de la forma siguiente:

$$\phi_0^{\mathcal{L}} = e^{-\frac{1}{\alpha g}(1+g x^2)^{\frac{3}{2}}},$$

donde  $\alpha$  es un número real positivo. Ahora los elementos de matriz y las distintas energías son funciones de los parámetros  $g$  y  $\alpha$ . Al igual que en el caso anterior, para cada valor de  $g$  hay un valor de  $\alpha$  que minimiza la energía. Se realizaron gráficas de estas energías variacionales, con respecto al parámetro  $g$ .

En la figura (5.12) se compara la energía del estado base en su forma no-variacional contra la forma variacional. El resultado es que ambas gráficas son prácticamente idénticas, al menos en la región  $0 < g < 5$ . El hecho de que ambas gráficas sean iguales en esta región nos da una idea de qué tan buena es la aproximación no-variacional: tanto como para no ser superada al aplicar el enfoque variacional.

Al hacer una comparación entre la energía de la aproximación  $1 \times 1$  variacional contra la aproximación  $3 \times 3$  variacional puede observarse que, al menos en la

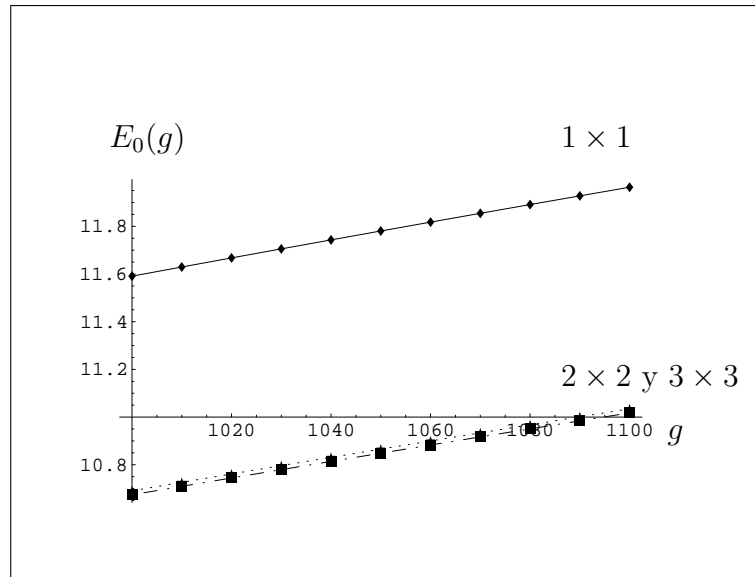


Figura 5.11: Comparación de la energía del estado base, para las primeras tres aproximaciones del Caso III.

región  $0 < g < 5$ , son idénticas las dos gráficas. Así, podemos concluir que la aproximación  $3 \times 3$  es la mejor aproximación posible a la energía del estado base usando el enfoque variacional con esa función de prueba, al menos en la región  $0 < g < 5$ . Además, como argumentamos líneas arriba, es de esperarse que dicho enfoque variacional sea mejor que el enfoque no-variacional del caso presente y que todos los casos anteriores. Para hacer palpable esto, podemos hacer una comparación entre la energía del estado base en su aproximación  $3 \times 3$  variacional del caso II (la mejor aproximación de dicho caso), contra la aproximación  $3 \times 3$  variacional del caso presente. El resultado se muestra en la figura (5.13). En dicha figura se puede observar que ya para valores del parámetro cercanos a  $g = 5$ , la aproximación  $3 \times 3$  variacional es ligeramente mejor. Dicha mejora esperamos sea de mayor peso para valores más grandes de  $g$ .

En este punto solo queda ver si la aproximación variacional a la energía del estado base es buena cuando  $g \rightarrow \infty$ . Evaluaremos la energía en su aproximación  $3 \times 3$  variacional en la región  $10000 < g < 10100$ . El ajuste nos

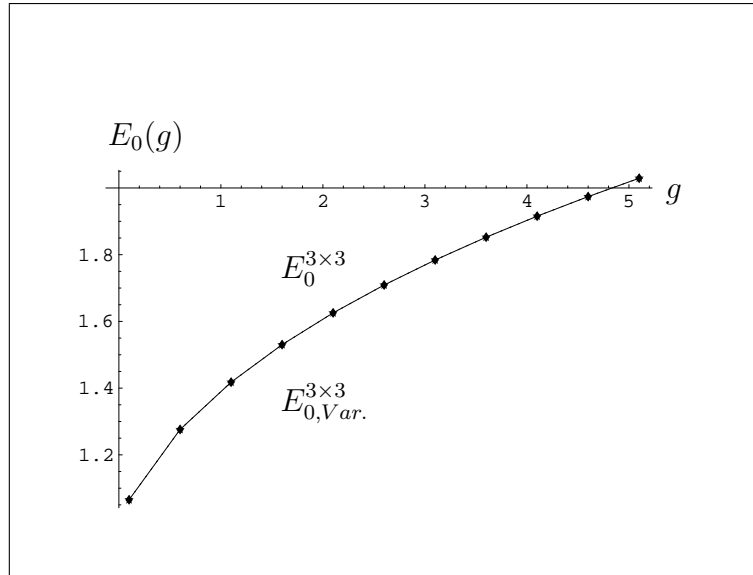


Figura 5.12: Energía del estado base en aproximaciones  $3 \times 3$  para los casos no-variacional y variacional.

da como resultado lo siguiente:

$$E_{0,g \rightarrow \infty}^{3 \times 3, Var.} = 1,0631 g^{\frac{1}{3}},$$

lo cual es muy cercano al valor asintótico más preciso:  $E_{0,g \rightarrow \infty} = 1,061 g^{\frac{1}{3}}$ . Podemos concluir entonces que el método variacional nos proporciona una muy buena aproximación de la energía del estado base sobre todo el dominio de  $g$ .

## 5.6. Conclusiones.

En el presente capítulo hemos puesto a prueba la capacidad del método de Lanczos para obtener resultados numéricos en el estudio de los niveles más bajos del espectro de energía del oscilador anarmónico; más específicamente, del estado base del sistema. Hemos estudiado 3 casos:

- Caso I, donde se ha usado una base completa de eigenfunciones pares del oscilador armónico simple. Dicho enfoque nos da buenos resultados



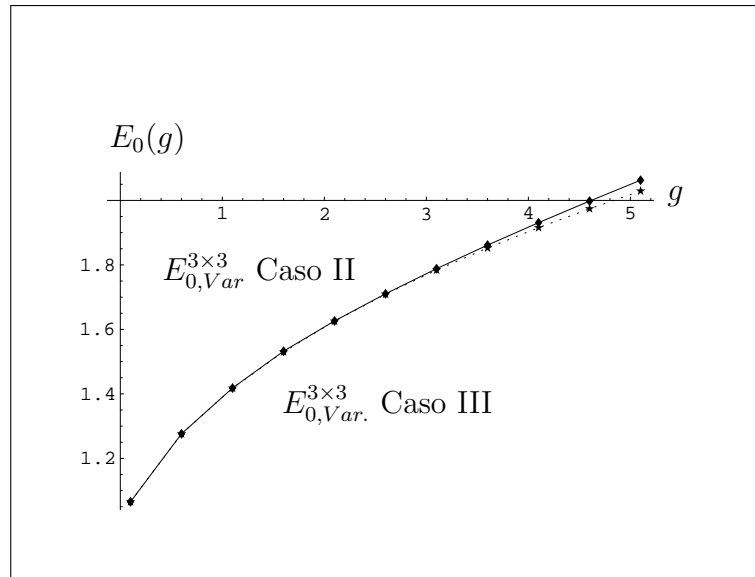


Figura 5.13: Energía del estado base en aproximaciones  $(3 \times 3)$  variacionales para los casos II y III.

para la región del espectro  $g \rightarrow 0$ . Sin embargo las funciones de la base no reproducen el comportamiento asintótico correcto de la eigenfunción del estado base para valores grandes de la constante de acoplamiento  $g$  y en consecuencia este enfoque requiere de bases mas grandes para obtener una buena precisión en dicha región.

- Caso II, donde se usó el método de Lanczos a partir de una función inicial de la forma de una eigenfunción del estado base del oscilador armónico de frecuencia  $\omega = 1/\alpha$ , con  $\alpha$  un parámetro variacional. En este caso la secuencia de funciones de Lanczos no tienen un ordenamiento en el número de nodos y por tanto no forman una base completa. A pesar de ello la descripción numérica es apropiada para la región del espectro  $g \rightarrow 0$ . Las funciones de esta *base* de Lanczos no reproducen el comportamiento asintótico correcto de la eigenfunción del estado base. Sin embargo, considerando al parámetro  $\alpha$  como un parámetro variacional, la convergencia de la energía del estado base es superior a la del caso I. Esto se debe sin duda al hecho de que el procedimiento de Lanczos hace que la base de funciones creadas a través de él se herede

información del sistema.

- Caso III, donde se usó el método de Lanczos a partir de una función inicial con propiedades correctas en los límites  $g \rightarrow 0$  y  $g \rightarrow \infty$ . La secuencia de las tres primeras funciones de Lanczos resultó apropiada para describir la región del espectro  $g \rightarrow 0$  y  $g \rightarrow \infty$ , mejorando notablemente las aproximaciones de los casos I y II arriba mencionados. Más aún, al momento de comparar los casos II y III, se puede observar que la convergencia es mucho más rápida en el caso III para regiones  $g \rightarrow 0$ . Esto se debe sin duda a que la función inicial utilizada en el caso III fue diseñada para resultar buena aproximación al estado base del sistema en una región mayor del sistema. De esta forma, las aproximaciones a la energía obtenidas resultan ser más consistentes que en las obtenidas por el caso II. Es justo mencionar que en la construcción de la secuencia de funciones de Lanczos tampoco se puede garantizar que la base sea completa.

# Capítulo 6

## Conclusión

A lo largo del presente trabajo se han realizado algunos ejercicios aplicando el método de Lanczos a problemas cuánticos simples en una dimensión, enfocandonos principalmente en algunas propiedades analíticas de las primeras funciones base y del espectro de eigenvalores que se obtienen por el método. El propósito principal fue tratar de identificar, en estos problemas simples, algunas situaciones que pudieran tener relevancia en la solución de problemas físicos mas complejos.

Con esto en mente se intentó poner a prueba al procedimiento tanto en el aspecto analítico como en el numérico. Se aplicó el método a algunos problemas exactamente o cuasi-exactamente solubles, de tal forma que se pudiera disponer de un punto de comparación o de referencia al momento de evaluar los resultados obtenidos por medio del método de Lanczos.

Así, después de este pequeño breviarario acerca de las motivaciones y aspiraciones del presente trabajo, y sin poner interés en resumir los métodos usados dado que se encuentran mejor reseñados a lo largo de los capítulos precedentes, podemos decir que la conclusión principal reside en hacer notar que aunque la elección de la función inicial es, en principio, arbitraria, dicha elección tiene una importancia fundamental en el procedimiento.

Efectivamente, como hemos visto en los casos menos triviales del oscilador de Morse y del oscilador anarmónico, solo un adecuado diseño de la función inicial nos ha llevado a reproducir comportamientos correctos o esperados de las soluciones físicas.

Es por lo tanto importante realizar de antemano, en la medida de lo posible, un análisis de las propiedades físicas y analíticas generales del sistema, para tener así una guía para la elección adecuada de la función inicial.

Como los mismos ejemplos nos revelan, la elección de función inicial no es una tarea simple, resultando ser un proceso en el que muchas consideraciones entran en juego. Más aún, hemos visto que al no utilizar una función inicial apropiada, el método puede presentar fenómenos indeseables, como el hecho de que la secuencia de funciones de Lanczos no genere una base completa de funciones, o que conduzca a una gran complejidad en los cálculos numéricos, por ejemplo.

La elección adecuada de la función inicial es la base para obtener información que refleje las propiedades reales del sistema y la simplicidad en el cálculo numérico. Es en este sentido que podemos decir que una guía conveniente consiste en elegir como función inicial una función variacional para el estado fundamental que sea eigenfunción exacta de un potencial que reproduzca las características principales del sistema (criterio de Turbiner).

# Apéndice A

## Transición de Problema Espectral a Problema de Álgebra Lineal en la resolución de la Ecuación de Schrödinger.

Consideremos el problema de eigenvalores dado por la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle , \quad (\text{A-1})$$

para un sistema arbitrario descrito por el operador Hamiltoniano  $\hat{H}$ . Cualquier solución  $|\psi\rangle$  de (A-1) puede ser expandida en términos de una base completa de funciones ortonormales  $\{\phi_j | j = 1, 2, \dots, \infty\}$ . Dicha base es infinita como consecuencia de ser completa. Así, la expansión toma la forma siguiente:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} C_j |\phi_j\rangle , \quad (\text{A-2})$$

donde  $C_j = \langle \phi_j | \psi \rangle$ , y  $\langle \phi_j | \phi_k \rangle = \delta_{j,k}$ . Sustituyendo (A-2) en (A-1) obtenemos:

$$\sum_{j=1}^{\infty} \hat{H} |\phi_j\rangle C_j = \sum_{j=1}^{\infty} E C_j |\phi_j\rangle .$$

Multiplicando por la izquierda por la función  $\langle \phi_k |$  a ambos lados de la ecuación obtenemos:

$$\sum_{j=1}^{\infty} \langle \phi_k | \hat{H} | \phi_j \rangle C_j = \sum_{j=1}^{\infty} E \langle \phi_k | \phi_j \rangle C_j , \quad (\text{A-3})$$

donde  $\langle \phi_k | \phi_j \rangle = \delta_{k,j}$  y  $k = 1, 2, \dots, \infty$ .



sobre una base completa e infinita de funciones. Esto sin embargo daría como resultado una matriz Hamiltoniana de orden infinito, para la cual no es posible encontrar sus eigenvalores por medio de la resolución de su ecuación secular, excepto para el caso particular en que la matriz Hamiltoniana fuera diagonal. Dicho caso, sin embargo, implica que el problema es exactamente soluble, por lo que la aplicación del presente ataque resulta superfluo.





# Apéndice B

## Teoría de Matrices Tridiagonales.

En este apéndice introducimos algunas definiciones y teoremas referentes a las matrices tridiagonales. La teoría referente a dichas matrices es vasta y profunda, por lo que solo nos limitamos a mencionar algunos teoremas elementales que tienen relación directa con nuestro objeto de estudio.

**Definición .1** *Matriz Tridiagonal.* Una matriz  $\mathbf{A}$  de orden  $n$  con elementos  $a_{i,j}$  es llamada tridiagonal si cumple que  $a_{i,j} = 0$  cuando  $i+1 \leq j$  ó  $j+1 \leq i$ .

Una matriz tridiagonal tiene la forma explícita:

$$\mathbf{A}_{n \times n} = \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & a_{32} & a_{33} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & a_{n-2,n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} \end{pmatrix}.$$

Como convención, nos referiremos a los elementos  $a_{i,i}$  como *diagonales*, y a los elementos  $a_{i,j}$ , donde  $i \neq j$ , como *no-diagonales*.

**Definición .2** *Matriz de Jacobi.* Una matriz tridiagonal  $\mathbf{A}_{n \times n}$  es una matriz de Jacobi si es una matriz real, simétrica y con elementos no-diagonales positivos.

Así, por la definición de una matriz de Jacobi, los elementos  $a_{i,j}$  de dicha matriz deben de cumplir:

- $a_{i,j} = 0$ , si  $i + 1 \leq j$  ó  $j + 1 \leq i$
- $a_{i,j} \in \mathfrak{R}$
- $a_{i,j} = a_{j,i}$
- $a_{i,j} > 0$ , si  $i > j$  ó  $j > i$

Resulta claro que, al ser real y simétrica, una matriz de Jacobi es por lo tanto hermitiana, y tiene entonces un espectro real.

Los siguientes teoremas tratan sobre transformaciones de equivalencia entre matrices tridiagonales.

**Teorema .1** *Sea  $\mathbf{T}$  una matriz tridiagonal de orden  $n$  real, con la forma explícita:*

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} a_1 & b_2 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ c_2 & a_2 & b_3 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & b_4 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & c_4 & a_4 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & b_n \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & c_n & a_n \end{pmatrix},$$

donde además se satisface  $b_i c_j > 0$ . Entonces dicha matriz  $\mathbf{T}$  es equivalente a la matriz:

$$\tilde{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} a_1 & |b_2| & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ |c_2| & a_2 & |b_3| & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & |c_3| & a_3 & |b_4| & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & |c_4| & a_4 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & |b_n| \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & |c_n| & a_n \end{pmatrix},$$

es decir, la matriz resultante de tomar el valor absoluto de los elementos no-diagonales.

**Demostración:** La demostración será por construcción. Sea  $\mathbf{M}$  una matriz de orden  $n$ , diagonal y real, con elementos  $\{\alpha_i\}_{i=1}^n$  distintos de cero. Así,  $\mathbf{M}$  y su inverso  $\mathbf{M}^{-1}$  tienen la forma explícita:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \alpha_2 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \alpha_3 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha_1} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \frac{1}{\alpha_2} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \frac{1}{\alpha_3} & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{1}{\alpha_n} \end{pmatrix}.$$

Definamos ahora la matriz equivalente  $\tilde{\mathbf{T}}$  de la forma:

$$\tilde{\mathbf{T}} \equiv \mathbf{M}^{-1}\mathbf{T}\mathbf{M} = \begin{pmatrix} a_1 & \frac{\alpha_2}{\alpha_1} b_2 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\alpha_1}{\alpha_2} c_2 & a_2 & \frac{\alpha_3}{\alpha_2} b_3 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \frac{\alpha_2}{\alpha_3} c_3 & a_3 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{\alpha_n}{\alpha_{n-1}} b_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{\alpha_{n-1}}{\alpha_n} c_n & a_n \end{pmatrix}.$$

Es fácil ver que la matriz  $\tilde{\mathbf{T}}$  comparte el mismo espectro con la matriz  $\mathbf{T}$ . Si la matriz original cumple con la ecuación de eigenvalores:

$$\mathbf{T}x = \lambda x,$$

donde  $x$  es un eigenvector de  $\mathbf{T}$ . Si definimos ahora el vector:

$$y \equiv \mathbf{M}^{-1}x,$$

entonces el vector  $y$  cumple con la ecuación de eigenvalores:

$$\tilde{\mathbf{T}}y = \lambda y,$$

con  $\lambda$  eigenvalor de  $\mathbf{T}$ . Esto es porque:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{T}}y &= \mathbf{M}^{-1}\mathbf{T}\mathbf{M}\mathbf{M}^{-1}x \\ &= \mathbf{M}^{-1}\mathbf{T}x \\ &= \lambda\mathbf{M}^{-1}x \\ &= \lambda y. \end{aligned}$$

Así, los elementos de matriz de  $\tilde{\mathbf{T}}$  son de la forma:

$$\tilde{T}_{i,i} = a_i, \quad \tilde{T}_{i-1,i} = \frac{\alpha_i}{\alpha_{i-1}} b_i, \quad \tilde{T}_{i,i-1} = \frac{\alpha_{i-1}}{\alpha_i} c_i.$$

Ahora, nosotros podemos definir los elementos de  $\mathbf{M}$  como  $\alpha_i = \pm 1$ . de tal forma que  $\mathbf{T}$  sea la matriz resultante de cambiar en  $\mathbf{T}$  los signos de los elementos no-diagonales. Luego, la matriz con elementos:

$$T_{i,i} = a_i, \quad T_{i-1,i} = b_i, \quad T_{i,i-1} = c_i,$$

tiene los mismos eigenvalores que la matriz:

$$\tilde{T}_{i,i} = a_i, \quad \tilde{T}_{i-1,i} = |b_i|, \quad \tilde{T}_{i,i-1} = |c_i|.$$

*QED.*

**Teorema .2** *Sea  $\mathbf{T}$  una matriz tridiagonal de orden  $n$  real, definida como en el teorema (B.1). Entonces dicha matriz  $\mathbf{T}$  tiene un espectro real.*

**Demostración:** Definamos a la matriz equivalente  $\tilde{\mathbf{T}}$  como en el teorema (B.1) en su forma más general; es decir, con elementos:

$$\tilde{T}_{i,i} = a_i, \quad \tilde{T}_{i-1,i} = \frac{\alpha_i}{\alpha_{i-1}} b_i, \quad \tilde{T}_{i,i-1} = \frac{\alpha_{i-1}}{\alpha_i} c_i.$$

Ahora, deseamos que  $\tilde{\mathbf{T}}$  sea simétrica. Esto implica que:

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{i-1,i} &= \tilde{T}_{i,i-1} \\ \frac{\alpha_i}{\alpha_{i-1}} b_i &= \frac{\alpha_{i-1}}{\alpha_i} c_i \\ \left( \frac{\alpha_i}{\alpha_{i-1}} \right)^2 &= \frac{c_i}{b_i} \\ \frac{\alpha_i}{\alpha_{i-1}} &= \sqrt{\frac{c_i}{b_i}} \end{aligned}$$

Finalmente tenemos la relación de recurrencia:

$$\alpha_i = \alpha_{i-1} \sqrt{\frac{c_i}{b_i}}. \quad (\text{B-1})$$

Debemos notar que si deseamos que la matriz sea real simétrica, debemos cumplir que:  $\frac{c_i}{b_i} \geq 0$ , lo cual a su vez implica que  $b_i c_i \geq 0$ .

Para empezar la relación de equivalencia (B-1), definimos:

$$\alpha_0 \equiv 1.$$

Así, los primeros miembros de la relación son:

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \sqrt{\frac{c_1}{b_1}}, \\ \alpha_2 &= \alpha_1 \sqrt{\frac{c_2}{b_2}} = \sqrt{\frac{c_1 c_2}{b_1 b_2}},\end{aligned}$$

y en general:

$$\alpha_k = \sqrt{\prod_{i=1}^k \frac{c_i}{b_i}}.$$

De esta forma, sustituyendo en los elementos de matrices de  $\tilde{\mathbf{T}}$ :

$$\begin{aligned}\tilde{T}_{i-1,i} &= \frac{\alpha_i}{\alpha_{i-1}} b_i = \sqrt{\frac{c_i}{b_i}} b_i = \sqrt{c_i b_i}, \\ \tilde{T}_{i,i-1} &= \frac{\alpha_{i-1}}{\alpha_i} c_i = \sqrt{\frac{b_i}{c_i}} c_i = \sqrt{c_i b_i}.\end{aligned}$$

Finalmente, la matriz  $\tilde{\mathbf{T}}$  tiene la forma explícita:

$$\tilde{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} a_1 & \sqrt{b_2 c_2} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \sqrt{b_2 c_2} & a_2 & \sqrt{b_3 c_3} & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \sqrt{b_3 c_3} & a_3 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{b_n c_n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{b_n c_n} & a_n \end{pmatrix},$$

y como  $\tilde{\mathbf{T}}$  es una matriz real simétrica, tiene eigenvalores reales. Luego  $\mathbf{T}$  tiene espectro real.

*QED.*

**Corolario .1** *Toda matriz tridiagonal real de la forma definida en el teorema (B.1), es decir, que cumpla que  $b_i c_i > 0$ , es equivalente a una matriz de Jacobi.*

**Demostración:** Es consecuencia directa del teorema (B.2).

Los teoremas anteriores muestran la importancia de las matrices de Jacobi en el estudio de matrices tridiagonales<sup>1</sup>. El siguiente teorema trata sobre

<sup>1</sup>Teoremas análogos al anterior existen para el caso en que se desee tomar matrices complejas, pero estos se encuentran fuera los propósitos de este trabajo.

algunas de las propiedades generales de la ecuación característica o secular de las matrices de tridiagonales.

**Teorema .3** Sea  $\mathbf{T}_n$  una matriz tridiagonal real, con la forma explícita:

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} a_1 & b_2 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ c_2 & a_2 & b_3 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & b_4 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & c_4 & a_4 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & b_n \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & c_n & a_n \end{pmatrix},$$

y sea  $\phi_n(\lambda)$  la ecuación secular de dicha matriz de grado  $n$ , definida como

$$\phi_n(\lambda) \equiv \det |\mathbf{T}_n - \lambda \mathbf{I}_n| ,$$

entonces, dicha ecuación secular cumple con la relación de recurrencia:

$$\phi_n(\lambda) = (a_n - \lambda)\phi_{n-1}(\lambda) - c_n b_n \phi_{n-2}(\lambda) ,$$

donde  $\phi_{n-1}(\lambda)$  es la ecuación secular de la submatriz resultante de quitar a  $\mathbf{T}_n$  la última columna y el último renglón, y  $\phi_{n-2}(\lambda)$  es la ecuación secular de la submatriz resultante de quitar a  $\mathbf{T}_n$  las últimas 2 columnas y los últimos 2 renglones. Además, por consistencia se define:

$$\phi_0(\lambda) \equiv 1 .$$

**Demostración:** La demostración se hará por inducción, haciendo desarrollo del determinante por menores.

### **Base de Inducción.**

Caso  $n = 1$ :

Trivial:

$$\phi_1(\lambda) = a_i - \lambda .$$

Caso  $n = 2$  :

$$\begin{aligned}\phi_2(\lambda) &= (a_1 - \lambda)(a_2 - \lambda) - b_2 c_2 \\ &= (a_2 - \lambda)\phi_1(\lambda) - b_2 c_2 \phi_0(\lambda).\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\phi_3(\lambda) &= (a_3 - \lambda)\phi_2(\lambda) - c_3 \begin{vmatrix} a_1 - \lambda & 0 \\ c_2 & b_3 \end{vmatrix} \\ &= (a_3 - \lambda)\phi_2(\lambda) - b_3 c_3 (a_1 - \lambda) \\ &= (a_3 - \lambda)\phi_2(\lambda) - b_3 c_3 \phi_1(\lambda).\end{aligned}$$

Caso  $n = 4$ :

$$\begin{aligned}\phi_4(\lambda) &= (a_4 - \lambda)\phi_3(\lambda) - c_4 \begin{vmatrix} a_1 - \lambda & b_2 & 0 \\ c_2 & a_2 - \lambda & 0 \\ 0 & c_3 & b_4 \end{vmatrix} \\ &= (a_4 - \lambda)\phi_3(\lambda) - b_4 c_4 \begin{vmatrix} a_1 - \lambda & b_2 \\ c_2 & a_2 - \lambda \end{vmatrix} \\ &= (a_4 - \lambda)\phi_3(\lambda) - b_4 c_4 \phi_2(\lambda).\end{aligned}$$

**Hipótesis de Inducción:** Supongamos que se cumple que:

$$\phi_n(\lambda) = (a_n - \lambda)\phi_{n-1}(\lambda) - b_n c_n \phi_{n-2}(\lambda),$$

entonces, queda por demostrar que:

$$\phi_{n+1}(\lambda) = (a_{n+1} - \lambda)\phi_n(\lambda) - b_{n+1} c_{n+1} \phi_{n-1}(\lambda).$$

*Demostración:* La demostración es directa a partir de la expansión de los determinantes. Por simplicidad procederemos de la siguiente manera. Denotaremos el determinante de la matriz de orden  $(n + 1)$ ,  $\mathbf{T}_{n+1}$ , como:

$$\Delta_{n+1} \equiv \det | \mathbf{T}_{n+1} |.$$

Igualmente, denotaremos al determinante de la matriz resultante de quitar las últimas  $k$  filas y  $k$  columnas a  $\mathbf{T}_{n+1}$  como  $\Delta_{n+1-k}$ . Así, podemos expandir

por menores a  $\Delta_{n+1}$ , siempre a partir de la fila inferior:

$$\begin{aligned}
 \Delta_{n+1} &= \begin{vmatrix} a_1 & b_2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ c_2 & a_2 & b_3 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & b_{n+1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & c_{n+1} & a_{n+1} \end{vmatrix} \\
 &= a_{n+1} \Delta_n - b_{n+1} \begin{vmatrix} a_1 & b_2 & 0 & \cdots & 0 \\ c_2 & a_2 & b_3 & \cdots & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & c_n & b_{n+1} \end{vmatrix} \\
 &= a_{n+1} \Delta_n - b_{n+1} c_{n+1} \Delta_{n-1} .
 \end{aligned}$$

Finalmente, si hacemos la sustitución:

$$a_k \rightarrow a_k - \lambda ,$$

en los elementos diagonales de la matriz, obtenemos el resultado deseado:

$$\phi_{n+1}(\lambda) = (a_{n+1} - \lambda)\phi_n(\lambda) - b_{n+1} c_{n+1} \phi_{n-1}(\lambda) .$$

*Q.E.D.*

Hacemos notar que se procedió de tal forma en la última parte de la demostración anterior, con el fin de mostrar que algunas de las propiedades de la ecuación secular son consecuencia directa de las propiedades, más generales, de los determinantes de las matrices tridiagonales.



# Apéndice C

## Una Demostración.

Sea el operador  $\hat{H}$  definido como:

$$\hat{H} \equiv -\frac{d^2}{dx^2} + x^2$$

y supongamos que para este operador y la función inicial:

$$\psi_0^{\mathcal{L}} = (\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}$$

la n-ésima función de Lanczos esta dada por:

$$\psi_n^{\mathcal{L}}(x) = \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}} H_{2n}\left(\frac{x}{\sqrt{\alpha}}\right)$$

con norma:

$$N_n = \sqrt{\frac{(2n)!}{(2n-2)!}} \frac{(\alpha^2 - 1)}{2\alpha}.$$

A lo largo de las líneas siguientes preferimos trabajar, por simplicidad, con la nueva variable  $y$ , definida como:

$$y \equiv \frac{x}{\sqrt{\alpha}}.$$

En esta nueva variable, la n-ésima función queda como:

$$\psi_n^{\mathcal{L}}(y) = \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} e^{\frac{y^2}{2}} H_{2n}(y).$$

Luego, debemos demostrar que la función  $n+1$  será:

$$\psi_{n+1}^{\mathcal{L}}(y) = \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n+2}(2n+2)!}} e^{\frac{y^2}{2}} H_{2n+2}(y).$$

Para hacerlo, usamos principalmente las siguientes relaciones para los polinomios de Hermite:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \quad (\text{C-1})$$

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x), \quad (\text{C-2})$$

$$H'_n(x) = 2xH_n(x) - H_{n+1}(x). \quad (\text{C-3})$$

Debemos considerar además los cambios sufridos por el operador Hamiltoniano al hacer el cambio de variable. En efecto, el operador derivada cambia como:

$$\frac{d}{dx} = \alpha^{-\frac{1}{2}} \frac{d}{dy},$$

por lo que el operador hamiltoniano se escribe como:

$$\hat{H} = -\frac{1}{\alpha} \frac{d^2}{dy^2} + \alpha y^2$$

Así pues, la siguiente función de Lanczos (aun sin normalizar) estará dada por:

$$\phi_{n+1}^{\mathcal{L}} = \hat{H}\psi_n^{\mathcal{L}} - h_{nn}\psi_n^{\mathcal{L}} - N_n\psi_{n-1}^{\mathcal{L}}. \quad (\text{C-4})$$

Luego, debemos determinar primero  $\hat{H}\psi_n$ . Evaluamos la primera derivada:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_n^{\mathcal{L}}}{dx} &= \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}\alpha^{-\frac{1}{2}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} \frac{d}{dy} (e^{-\frac{y^2}{2}} H_{2n}(y)) \\ &= \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}\alpha^{-\frac{1}{2}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} e^{-\frac{y^2}{2}} (H'_{2n}(y) - yH_{2n}(y)) \\ &= \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}\alpha^{-\frac{1}{2}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} e^{-\frac{y^2}{2}} (4nH_{2n-1}(y) - yH_{2n}(y)) \end{aligned}$$

donde se utilizó (C.1) para llegar a la última ecuación. La segunda derivada será:

$$\frac{d^2\psi_n^{\mathcal{L}}}{dx^2} = \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} \frac{1}{\alpha} e^{-\frac{y^2}{2}} (4nH'_{2n-1}(y) + (y^2-1)H_{2n}(y) - yH'_{2n}(y) - 4nyH_{2n-1}(y))$$

y usando (C.3) y (C.2) para sustituir  $H'_{2n-1}$  y  $H'_{2n-1}$  respectivamente, desarrollando obtenemos:

$$\frac{d^2 \psi_n^{\mathcal{L}}}{dx^2} = \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} \frac{1}{\alpha} (y^2 - 4n - 1) e^{-\frac{y^2}{2}} H_{2n}(y).$$

Luego, sustituyendo tenemos:

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_n^{\mathcal{L}} &= \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} \left( \frac{4n+1-y^2}{\alpha} + \alpha y^2 \right) e^{-\frac{y^2}{2}} H_{2n}(y) \\ &= \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} \frac{1}{\alpha} (4n+1 + (\alpha^2 - 1)y^2) e^{-\frac{y^2}{2}} H_{2n}(y). \end{aligned}$$

Con esta expresión podemos evaluar el elemento de matriz  $h_{nn} = \langle \psi_n, \hat{H}\psi_n \rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle \psi_n^{\mathcal{L}}, \hat{H}\psi_n^{\mathcal{L}} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{\mathcal{L}}(x) \hat{H}\psi_n^{\mathcal{L}}(x) dx = \alpha^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{\mathcal{L}}(y) \hat{H}\psi_n^{\mathcal{L}}(y) dy \\ &= \frac{\alpha^{\frac{1}{2}} (\pi\alpha)^{-\frac{1}{2}}}{2^{2n}(2n)!} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\alpha} (4n+1 + (\alpha^2 - 1)y^2) e^{-y^2} H_{2n}^2(y) dy \\ &= \frac{1}{2^{2n}(2n)! \sqrt{\pi} \alpha} \left( (4n+1)(2^{2n}(2n)! \sqrt{\pi}) + (\alpha^2 - 1)(2^{2n}(2n)! \sqrt{\pi})(2n + \frac{1}{2}) \right) \\ &= \frac{(4n+1)(\alpha^2 + 1)}{2\alpha} \end{aligned}$$

donde se usó:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} H_n^2(x) dx = \sqrt{\pi} 2^n n! (n + \frac{1}{2})$$

Luego, sustituyendo directamente estos resultados en la ecuación (C.4) obtenemos, después de simplificar:

$$\phi_{n+1}^{\mathcal{L}} = \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} \frac{(\alpha^2 - 1)}{2\alpha} ((2y^2 - (4n+1))H_{2n}(y) - 2(2n)(2n-1)H_{2n-2}(y)) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

En este punto tratamos de simplificar la parte polinomial de esta última ecuación. Consideremos las siguientes variaciones de la ecuación (C.1):

$$H_{2n}(x) = 2xH_{2n-1}(x) - 2(2n-1)H_{2n-2}(x) \quad (\text{C-5})$$

$$H_{2n+1}(x) = 2xH_{2n}(x) - 2(2n)H_{2n-1}(x) \quad (\text{C-6})$$

$$H_{2n+2}(x) = 2xH_{2n+1}(x) - 2(2n+1)H_{2n}(x) \quad (\text{C-7})$$

Así, de (C.5):

$$H_{2n-1}(x) = \frac{1}{2x} (H_{2n}(x) + 2(2n-1)H_{2n-2}(x))$$

y sustituyendo en (C.6):

$$H_{2n+1}(x) = \frac{1}{2x} ((4x^2 - 2(2n))H_{2n}(x) + 4(2n)(2n-1)H_{2n-2}(x))$$

y a su vez sustituyendo esta última ecuación en (C.7):

$$H_{2n+1}(x) = (4x^2 - 2(4n+1))H_{2n}(x) + 4(2n)(2n-1)H_{2n-2}(x)$$

i.e.

$$\frac{1}{2} H_{2n+2}(x) = (2x^2 - (4n+1))H_{2n}(x) - 2(2n)(2n-1)H_{2n-2}(x) \quad (\text{C-8})$$

Luego, si sustituimos (C.8) en nuestra última expresión para  $\phi_{n+1}$  obtenemos:

$$\phi_{n+1}^{\mathcal{L}}(y) = \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} \frac{(\alpha^2 - 1)}{4\alpha} e^{-\frac{y^2}{2}} H_{2n+2}(y).$$

Su norma es:

$$\begin{aligned} N_{n+1}^2 &= \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{2}}}{2^{2n}(2n)!} \frac{(\alpha^2 - 1)^2}{16\alpha^2} \alpha^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_{2n+2}^2(y) dy \\ &= \frac{1}{2^{2n}(2n)! \sqrt{\pi}} \frac{(\alpha^2 - 1)^2}{16\alpha^2} (2n+2)! 2^{2n+2} \sqrt{\pi} \\ &= \frac{(2n+2)!}{(2n)!} \frac{(\alpha^2 - 1)^2}{(2\alpha)^2} \end{aligned}$$

esto es:

$$N_{n+1} = \sqrt{\frac{(2n+2)!}{(2n)!} \frac{(\alpha^2 - 1)}{2\alpha}}$$

Así, la función  $n+1$  es:

$$\psi_{n+1}^{\mathcal{L}}(y) = \frac{\phi_{n+1}^{\mathcal{L}}(y)}{N_{n+1}} = \frac{(\pi\alpha)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{2n+2}(2n+2)!}} e^{-\frac{y^2}{2}} H_{2n+2}(y)$$

que es lo que deseabamos demostrar.

# Apéndice D

## Deducción de la Función de Prueba.

En las siguientes líneas mostramos los argumentos que nos llevaron a elegir la función de prueba (6.15) en la aplicación del método de Lanczos al oscilador anarmónico cuártico. Consideremos la ecuación de Schrödinger unidimensional:

$$-\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (\text{D-1})$$

Deseamos ahora calcular una forma aproximada del estado base para un potencial  $V(x)$  dado. Una forma de atacar el problema es suponer una forma particular de la función del estado base, por ejemplo:

$$\psi_0(x) \equiv e^{-\phi(x)}, \quad (\text{D-2})$$

donde la función  $\phi(x)$  debe de cumplir con la condición:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi(x) = \infty,$$

para que  $\psi_0(x)$  sea normalizable. Sustituyendo (D-2) en (D-1) obtenemos:

$$\phi''(x) - (\phi'(x))^2 = E - V(x). \quad (\text{D-3})$$

Si definimos la función:

$$y(x) \equiv \phi'(x),$$

entonces al ecuación (D-3) queda como:

$$y'(x) - y^2(x) = E - V(x), \quad (\text{D-4})$$

que no es sino la *ecuación de Riccati* correspondiente a la ecuación de Schrödinger.

Sustituyendo en la ecuación de Riccati el potencial del oscilador anarmónico cuártico (en general), se tiene:

$$y'(x) - y^2(x) = E - m^2x^2 - gx^4. \quad (\text{D-5})$$

De la ecuación (D-5) podemos deducir algo sobre la función  $y(x)$ . Observemos que bajo el cambio  $x \rightarrow -x$ , el lado derecho de (D-5) permanece invariante. Claramente el lado izquierdo debe de cumplir con la misma invarianza, y para hacerlo se debe cumplir a su vez que  $y'(-x) = y'(x)$ . Esto implica que<sup>2</sup>:

$$y(-x) = -y(x),$$

es decir,  $y(x)$  tienen paridad impar. Podemos asumir entonces que  $y(x)$  tiene la forma:

$$y(x) = xf(x^2). \quad (\text{D-6})$$

En este punto comenzamos un análisis asintótico de la función  $y(x)$ . Todo lo anterior puede considerarse válido para valores de  $x$  cercanos a cero, ya que en esa región todos los términos del potencial tienen igual relevancia. Supongamos, en acuerdo con (D-6), que la función  $y(x)$  tiene la expansión cerca del origen.

$$y(x) = a_0x + a_1x^3 + a_2x^5 + \dots,$$

luego, sustituyendo en (D-5) y quedándonos con los términos de  $x$  hasta orden 4, obtenemos:

$$(a_0 - E) + (3a_1 - a_0^2 + m^2)x^2 + (5a_2 - 2a_0a_1 + g)x^4 + \dots = 0.$$

---

<sup>2</sup>Podemos argumentar de la siguiente manera. Consideremos la primera derivada de  $y(x)$  y definamos

$$f(x) \equiv \frac{dy(x)}{dx}.$$

Claramente cumple con  $f(-x) = f(x)$ . Si además definimos  $y(x) \equiv F(x)$  entonces tenemos:

$$F(x) = \int f(x)dx.$$

Si ahora definimos la variable  $z = -x$ , entonces:

$$F(x) = \int f(x)dx = - \int f(z)dz = - \int f(z)dz = -F(z) = -F(-x),$$

esto es:

$$y(-x) = y(x).$$

Esto implica:

$$\begin{aligned} a_0 &= E \\ a_1 &= \frac{E^2 - m^2}{3} \\ a_2 &= \frac{2}{15}E(E^2 - m^2) - \frac{1}{5}g. \end{aligned}$$

Así,  $y(x)$  tiene la expansión cerca de cero:

$$y(x) = Ex + \frac{E^2 - m^2}{3}x^3 + \left( \frac{2}{15}E(E^2 - m^2) - \frac{1}{5}g \right) x^5 + \dots, \quad (\text{D-7})$$

Consideremos ahora una expansión asintótica cuando  $x$  es muy grande. Podemos suponer que solo un término en esa región es relevante. Podemos suponer, por ejemplo, que  $y(x)$  tiene la forma explícita:

$$y(x) = a x^\alpha.$$

Luego, sustituyendo en (D-5) y solo considerando el término cuártico:

$$a \alpha x^{\alpha-1} - a^2 x^{2\alpha} = -g x^4.$$

Si hacemos  $\alpha = 2$ , podemos obtener consistencia:

$$\begin{aligned} -g x^4 &= 2ax - a^2 x^4 \\ &\approx -a^2 x^4. \end{aligned}$$

Luego, obtenemos:

$$a = \sqrt{g}.$$

Podemos ahora seguir construyendo y suponer que existe otro sumando de orden menor en  $x$ :

$$y(x) = \sqrt{g}x^2 + a x^\alpha.$$

Sustituyendo en (D-5):

$$\begin{aligned} 2\sqrt{g}x + \alpha a x^{\alpha-1} - gx^4 - 2a\sqrt{g}x^{\alpha+2} - a^2 x^{2\alpha} &= -gx^4 - m^2 x^2 \\ 2\sqrt{g}x + \alpha a x^{\alpha-1} - 2a\sqrt{g}x^{\alpha+2} - a^2 x^{2\alpha} &= -m^2 x^2. \end{aligned}$$

En este caso, si hacemos  $\alpha = 0$  obtenemos consistencia:

$$\begin{aligned} -m^2 x^2 &= 2\sqrt{g}x - 2a\sqrt{g}x^2 - a^2 \\ &\approx -2a\sqrt{g}x^2, \end{aligned} \tag{D-8}$$

lo cual da como resultado:

$$a = \frac{m^2}{2\sqrt{g}}.$$

Finalmente, obtenemos como expansión aproximada de  $y(x)$  para valores grandes de  $x$ :

$$y(x) = \sqrt{g}x^2 + \frac{m^2}{2\sqrt{g}} + \dots, \tag{D-9}$$

donde, por supuesto, el término dominante es el primer sumando.

Ahora, deseamos encontrar una función que, al expandirla para valores de  $x$  cerca de cero y cerca de  $\infty$ , reproduzca las características más importantes de (D-7) y (D-9) respectivamente. Dicha función en efecto existe:

$$y(x) = x(m^2 + g x^2)^{\frac{1}{2}}, \tag{D-10}$$

la cual, si consideramos la región  $x \rightarrow \infty$ , entonces:

$$\begin{aligned} y(x) = x(m^2 + g x^2)^{\frac{1}{2}} &= m x \left(1 + \frac{g}{m^2} x^2\right)^{\frac{1}{2}} \\ &\approx m x \left(\frac{g}{m^2} x^2\right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \sqrt{g} x^2. \end{aligned}$$

Igualmente, cuando  $x \rightarrow 0$ , expandiendo (D-10):

$$y(x) = m x + \frac{g}{2m} x^3 - \frac{g^2}{8m^3} x^5 + \dots,$$

expansión que, si bien no reproduce los coeficientes de (D-7), nos da al menos la potencia correcta en  $x$  para cada sumando.

Solo resta integrar (D-10):

$$\begin{aligned} \phi(x) = \int y(x) dx &= \int x(m^2 + g x^2)^{\frac{1}{2}} dx \\ &= \frac{1}{3g} (m^2 + g x^2)^{\frac{3}{2}}. \end{aligned} \tag{D-11}$$



Finalmente, sustituyendo (D-11) en (D-2) obtenemos como función aproximada al estado base del oscilador anarmónico cuártico:

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{1}{3g}(m^2 + gx^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (\text{D-12})$$

# Referencias

- [1] C. Lanczos. J. Res. Nat. Bur. Standards. 45, 255, (1950).
- [2] L. D. Landau, E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics (Nonrelativistic Theory)* (Segunda Edición); Addison-Wesley, Reading, Mass, (1965).
- [3] A. Messiah. *Quantum Mechanics*; Dover Publications, (2000).
- [4] S. Flügge. *Practical Quantum Mechanics*; Springer, (1998).
- [5] Joel N. Franklin. *Matrix Theory*; Dover Publications, (2000).
- [6] J. K. Cullum, R. A. Willoughby. *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations. Volume 1: Theory*, (Primera Edición); Soc. for Industrial and Applied Math, (2002).
- [7] Turbiner, A. V., *Perturbation theory and variational principle in quantum mechanics*, Zh. Eksp. Teor. Fiz., **79**, 1719 (1980) *Soviet Phys.-JETP* **52**, 868-876 (1980) (English Translation)
- [8] Turbiner, A. V., *The eigenvalue spectrum in quantum mechanics and the nonlinearization procedure*, Usp. Fiz. Nauk., **144**, 35-78, (1984) *Soviet Phys. – Uspekhi* **27**, 668 (1984) (English Translation)
- [9] Turbiner, A. V., *Analytic Methods in the Strong Coupling Regime (large perturbation) in Quantum Mechanics*, Doctor of Sciences Thesis, ITEP-Moscow, (1989)
- [10] J. V. Uspensky. *Theory of Equations*; McGraw-Hill, (1948).
- [11] M. Abramowitz, I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*; Dover Publications, (1965).

- 
- [12] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series, and Products* (Sexta Edición); Academic Press, (2000).
- [13] N. N. Lebedev. *Special Functions and Their Applications*; Dover Publications, (1972).
- [14] G. B. Arfken, H. J. Weber. *Mathematical Methods for Physicists* (Quinta Edición); Academic Press, (2000).
- [15] F.A. Berezin, M.A. Shubin. *The Schrödinger Equation*; Springer, (1991).
- [16] V. I. Arnold. *Ordinary Differential Equations*; The MIT Press, (1979).
- [17] R. Courant, D. Hilbert. *Methods of Mathematical Physics; Vol. I y II*, Wiley, (1989)
- [18] J. E. Marsden, M. J. Hoffman. *Basic Complex Analysis* (Tercera Edición); W. H. Freeman, (1998).
- [19] E. C. Titchmarsh. *The Theory of Functions* (Segunda Edición); Oxford University Press, (1976).
- [20] L. Ahlfors. *Complex Analysis* (Tercera Edición); McGraw-Hill, (1979).
- [21] A. P. M. Morse. Phys. Rev. 34, 57, (1929).
- [22] C. M. Bender, T. T. Wu, *Anharmonic Oscillator*, Phys. Rev. 184, 1231 (1969); *Anharmonic Oscillator II*, Phys. Rev. **D**, 7, 1620, (1973).
- [23] C. M. Bender and A. Turbiner , *Analytic Continuation of Eigenvalue Problems*, Phys. Lett. **A 173**, 442 (1993)
- [24] A. V. Turbiner. *Anharmonic oscillator and double-well potential: approximating eigenfunctions*; Lett.Math.Phys. 74, 169-180, (2005)
- [25] Marshall H. Stone, *Linear transformations in Hilbert space and their applications to analysis*, New York, The American Mathematical Society, 1932