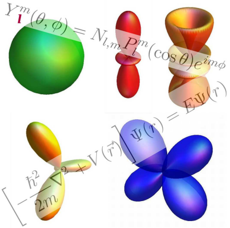
Resolviendo la Ecuación de Schrödinger: Las funciones especiales

Renato Álvarez-Nodarse



FISMAT2015, Sevilla, 29 de junio – 10 de julio de 2015

Contenidos

La ecuación hipergeométrica y los polinomios ortogonales clásicos

Definición: La ecuación diferencial lineal

$$\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0,$$

la denominaremos ecuación hipergeométrica (EH) y sus soluciones serán las funciones de tipo hipergeométrico (FtH).

Definición: La ecuación diferencial lineal

$$\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0,$$

la denominaremos ecuación hipergeométrica (EH) y sus soluciones serán las funciones de tipo hipergeométrico (FtH).

Teorema: Todas las derivadas $y^{(m)} \equiv y_m$ de una FtH también son funciones FtH, además

$$\sigma(x)y_m'' + \tau_m(x)y_m' + \mu_m y_m = 0,$$

$$\tau_m(x) = \tau(x) + m\sigma'(x), \quad \mu_m = \lambda + m\tau'(x) + \frac{m(m-1)}{2}\sigma''(x)$$

Esta propiedad la llamaremos de *hipergeometricidad* (PH)

Derivamos la Ec. $\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0$

$$\sigma y_1'' + [\tau(x) + \sigma'(x)]y_1' + (\lambda + \tau')y_1 = 0.$$

Derivamos la Ec. $\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0$

$$\sigma y_1'' + [\tau(x) + \sigma'(x)]y_1' + (\lambda + \tau')y_1 = 0.$$

Sea $\tau_1(x) = \tau(x) + \sigma'(x)$ & $\mu_1 = \lambda + \tau'$, $\Longrightarrow$

$$\sigma y_1'' + \tau_1(x)y_1' + \mu_1 y_1 = 0, \quad \deg \sigma \leq 2, \ \deg \tau_1 \leq 1.$$

Derivamos la Ec. $\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0$

$$\sigma y_1'' + [\tau(x) + \sigma'(x)]y_1' + (\lambda + \tau')y_1 = 0.$$

Sea $\tau_1(x) = \tau(x) + \sigma'(x)$ & $\mu_1 = \lambda + \tau'$, $\Longrightarrow$

$$\sigma y_1'' + \tau_1(x)y_1' + \mu_1 y_1 = 0, \quad \deg \sigma \leq 2, \ \deg \tau_1 \leq 1.$$

Sup. y_{m-1} satisface $\sigma(x)y_{m-1}'' + \tau_{m-1}(x)y_{m-1}' + \mu_{m-1}y_{m-1} = 0$.
Derivando

$$\sigma(x)y_m'' + \tau_m(x)y_m' + \mu_m y_m = 0,$$

$$\tau_m(x) = \tau_{m-1}(x) + \sigma'(x), \quad \mu_m = \mu_{m-1} + \tau_{m-1}'.$$

Derivamos la Ec. $\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0$

$$\sigma y_1'' + [\tau(x) + \sigma'(x)]y_1' + (\lambda + \tau')y_1 = 0.$$

Sea $\tau_1(x) = \tau(x) + \sigma'(x)$ & $\mu_1 = \lambda + \tau'$, $\Longrightarrow$

$$\sigma y_1'' + \tau_1(x)y_1' + \mu_1 y_1 = 0, \quad \deg\sigma \le 2, \ \deg\tau_1 \le 1.$$

Sup. y_{m-1} satisface $\sigma(x)y_{m-1}'' + \tau_{m-1}(x)y_{m-1}' + \mu_{m-1}y_{m-1} = 0$.
Derivando

$$\sigma(x)y_m'' + \tau_m(x)y_m' + \mu_m y_m = 0,$$

$$\tau_m(x) = \tau_{m-1}(x) + \sigma'(x), \quad \mu_m = \mu_{m-1} + \tau_{m-1}'.$$

$$\tau_m(x) = \tau_{m-1}(x)+\sigma'(x) = \tau_{m-2}(x)+2\sigma'(x) = \cdots = \tau_0(x)+m\sigma'(x), \ \ \tau_0(x) =$$

$$\mu_m - \mu_{m-1} = \tau_{m-1}', \qquad \Longrightarrow \quad \sum_{k=1}^{m}(\mu_k - \mu_{k-1}) = \sum_{k=1}^{m}\tau_{k-1}' \quad \Longrightarrow$$

Derivamos la Ec. $\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0$

$$\sigma y_1'' + [\tau(x) + \sigma'(x)]y_1' + (\lambda + \tau')y_1 = 0.$$

Sea $\tau_1(x) = \tau(x) + \sigma'(x)$ & $\mu_1 = \lambda + \tau'$, $\Longrightarrow$

$$\sigma y_1'' + \tau_1(x)y_1' + \mu_1 y_1 = 0, \quad \deg\sigma \leq 2, \ \deg\tau_1 \leq 1.$$

Sup. y_{m-1} satisface $\sigma(x)y_{m-1}'' + \tau_{m-1}(x)y_{m-1}' + \mu_{m-1}y_{m-1} = 0$.
Derivando

$$\sigma(x)y_m'' + \tau_m(x)y_m' + \mu_m y_m = 0,$$

$$\tau_m(x) = \tau_{m-1}(x) + \sigma'(x), \quad \mu_m = \mu_{m-1} + \tau_{m-1}'.$$

$$\tau_m(x) = \tau_{m-1}(x)+\sigma'(x) = \tau_{m-2}(x)+2\sigma'(x) = \cdots = \tau_0(x)+m\sigma'(x), \quad \tau_0(x) =$$

$$\mu_m - \mu_{m-1} = \tau_{m-1}', \qquad \Longrightarrow \quad \sum_{k=1}^{m}(\mu_k - \mu_{k-1}) = \sum_{k=1}^{m}\tau_{k-1}' \quad \Longrightarrow$$

$$\mu_m - \mu_0 = \sum_{k=1}^{m}\tau_{k-1}', \qquad \mu_0 = \lambda, \quad \tau_{k-1}' = \tau' + (k-1)\sigma''$$

La EH se puede escribir en forma simétrica (o autoadjunta)

$$[\sigma(x)\rho(x)y']' + \lambda\rho(x)y = 0, \quad [\sigma(x)\rho_m(x)y_m']' + \mu_m\rho_m(x)y_m = 0,$$

donde ρ y ρ_m son soluciones de la EDO de Pearson:

$$[\sigma(x)\rho(x)]' = \tau(x)\rho(x), \quad [\sigma(x)\rho_m(x)]' = \tau_m(x)\rho_m(x).$$

La EH se puede escribir en forma simétrica (o autoadjunta)

$$[\sigma(x)\rho(x)y']' + \lambda\rho(x)y = 0, \quad [\sigma(x)\rho_m(x)y_m']' + \mu_m\rho_m(x)y_m = 0,$$

donde ρ y ρ_m son soluciones de la EDO de Pearson:

$$[\sigma(x)\rho(x)]' = \tau(x)\rho(x), \quad [\sigma(x)\rho_m(x)]' = \tau_m(x)\rho_m(x).$$

Como $\tau_m(x) = \tau(x) + m\sigma'(x) \Longrightarrow \rho_m(x) = \sigma^m(x)\rho(x)$.

Teorema: Las soluciones polinómicas de EH son t.q.

$$P_n^{(m)}(x) = \frac{A_{nm}B_n}{\rho_m(x)}\frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}}[\rho_n(x)], \quad B_n = P_n^{(n)}/A_{nn}$$

where $A_{nm} = A_m(\lambda)\Big|_{\lambda=\lambda_n} = \dfrac{n!}{(n-m)!}\displaystyle\prod_{k=0}^{m-1}[\tau' + \tfrac{1}{2}(n+k-1)\sigma'']$ and

$$\mu_m = \mu_m(\lambda_n) = -(n-m)[\tau' + \tfrac{1}{2}(n+m-1)\sigma''].$$

Corolario: Las soluciones polinómicas de EH se pueden caclular mediante la fómula de Rodrigues:

$$P_n(x) = \frac{B_n}{\rho(x)} \frac{d^n}{dx^n}[\rho_n(x)], \quad B_n = P_n^{(n)}/A_{nn}$$

donde

$$\lambda := \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''.$$

Corolario: Las soluciones polinómicas de EH se pueden caclular mediante la fómula de Rodrigues:

$$P_n(x) = \frac{B_n}{\rho(x)}\frac{d^n}{dx^n}[\rho_n(x)], \quad B_n = P_n^{(n)}/A_{nn}$$

donde

$$\lambda := \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''.$$

Si $n = 1$

$$P_1(x) = \frac{B_1}{\rho(x)}[\sigma(x)\rho(x)]' = B_1\tau(x), \quad \Longrightarrow \quad \deg\tau = 1.$$

Si calculamos el pol. de grado 1 utilizando la FR y usamos Pearson

$$P_1(x) = \frac{B_1}{\rho(x)}[\sigma(x)\rho(x)]' = B_1\tau(x).$$

Luego $\deg\tau = 1$. Obviamente $P_1(s)$ y $\tau(x)$ tienen la misma raíz.

Teorema

$$\textit{Si} \quad x^k\sigma(x)\rho(x)\Big|_a^b = 0, \qquad \textit{para todo } k \geq 0.$$

Entonces las soluciones polinómicas de $\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0$ *constituyen una sucesión de polinomios ortogonales (SPO) respecto a la función peso* ρ *definida por*

la ecuación de Pearson

$$[\sigma(x)\rho(x)]' = \tau(x)\rho(x)$$

$$\int_a^b P_n(x)P_m(x)\rho(x)dx = \delta_{n,m}d_n^2,$$

donde $\delta_{n,m}$ *es el símbolo de Kronecker y* d_n *la norma de* P_n.

Teorema

$$Si \quad x^k\sigma(x)\rho(x)\Big|_a^b = 0, \qquad para\ todo\ k \geq 0.$$

Entonces las soluciones polinómicas de $\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0$ *constituyen una sucesión de polinomios ortogonales (SPO) respecto a la función peso* ρ *definida por*

la ecuación de Pearson

$$[\sigma(x)\rho(x)]' = \tau(x)\rho(x)$$

$$\int_a^b P_n(x)P_m(x)\rho(x)dx = \delta_{n,m}d_n^2,$$

donde $\delta_{n,m}$ *es el símbolo de Kronecker y* d_n *la norma de* P_n.

Análogamente: $\displaystyle\int_a^b P_n^{(k)}(x)P_m^{(k)}(x)\rho_k(x)dx = \delta_{n,m}d_{kn}^2.$

Theorem

Los polinomios ortogonales satisfacen una relación de recurrencia a tres términos de la forma

$$xP_n(x) = \alpha_n P_{n+1}(x) + \beta_n P_n(x) + \gamma_n P_{n-1}(x),$$

donde

$$\alpha_n = \frac{a_n}{a_{n+1}}, \quad \beta_n = \frac{b_n}{a_n} - \frac{b_{n+1}}{a_{n+1}}, \quad \gamma_n = \frac{a_{n-1}}{a_n}\frac{d_n^2}{d_{n-1}^2},$$

donde a_n, b_n son los coef. del desarrollo $P_n(x) = a_n x^n + b_n x^{n-1} + \cdots$, y d_n es la norma de los polinomios.

Theorem

Los polinomios ortogonales satisfacen una relación de recurrencia a tres términos de la forma

$$xP_n(x) = \alpha_n P_{n+1}(x) + \beta_n P_n(x) + \gamma_n P_{n-1}(x),$$

donde

$$\alpha_n = \frac{a_n}{a_{n+1}}, \quad \beta_n = \frac{b_n}{a_n} - \frac{b_{n+1}}{a_{n+1}}, \quad \gamma_n = \frac{a_{n-1}}{a_n}\frac{d_n^2}{d_{n-1}^2},$$

donde a_n, b_n son los coef. del desarrollo $P_n(x) = a_n x^n + b_n x^{n-1} + \cdots$, y d_n es la norma de los polinomios.

Ejercicio: Prueba que: $d_n^2 = B_n(-1)^n n! a_n \int_a^b \sigma^n(x)\rho(x)dx.$

A partir de la RRTT se puede probar el siguiente

Teorema

Supongamos que $\rho(x)$ es positiva en el interior del intervalo (a, b). Entonces:

1. *Todos los ceros de P_n son reales, simples y están localizados en (a, b).*
2. *Dos polinomios consecutivos P_n y P_{n+1} no pueden tener ningún cero en común.*
3. *Sean $x_{n,j}$ los ceros del polinomio P_n, (consideraremos que $x_{n,1} < x_{n,2} < \cdots < x_{n,n}$). Entonces:*

$$x_{n+1,j} < x_{n,j} < x_{n+1,j+1},$$

es decir, los ceros de P_n y P_{n+1} entrelazan unos con otros.

Nota

Si queremos que la función peso sea positiva e integrable en el interior del intervalo de ortogonalidad y suponemos que $\sigma(x) > 0$ en dicho intervalo se puede comprobar que el polinomio τ ha de cumplir dos propiedades importantes:

1. *En primer lugar la derivada de τ ha de ser negativa. Esto es particularmente importante en los casos cuando $\sigma = 1$ y $\sigma = x$, que corresponden a intervalos de ortogonalidad no acotados,*
2. *τ ha de anularse en el interior del intervalo de ortogonalidad. Ello es consecuencia de que $P_1(x) = B_1\tau(x)$ y de las propiedades de los ceros.*

$P_n(x)$	$H_n(x)$	$L_n^\alpha(x)$	$P_n^{\alpha,\beta}(x)$
$\sigma(x)$	1	x	$1-x^2$
$\tau(x)$	$-2x$	$-x+\alpha+1$	$-(\alpha+\beta+2)x+\beta-\alpha$
λ_n	$2n$	n	$n(n+\alpha+\beta+1)$
$\rho(x)$	e^{-x^2}	$x^\alpha e^{-x}$ $\alpha>-1$	$(1-x)^\alpha(1+x)^\beta$ $\alpha,\beta>-1$
B_n	$\dfrac{(-1)^n}{2^n}$	$(-1)^n$	$\dfrac{(-1)^n}{(n+\alpha+\beta+1)_n}$

$$H_n(x) = \begin{cases} (-1)^m \left(\frac{1}{2}\right)_m {}_1F_1\left(\begin{matrix} -m \\ \frac{1}{2} \end{matrix} \middle| x^2 \right), & n = 2m \\ (-1)^m \left(\frac{3}{2}\right)_m x \, {}_1F_1\left(\begin{matrix} -m \\ \frac{3}{2} \end{matrix} \middle| x^2 \right), & n = 2m+1 \end{cases}$$

$$L_n^\alpha(x) = \frac{(-1)^n \Gamma(n+\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+1)} {}_1F_1\left(\begin{matrix} -n \\ \alpha+1 \end{matrix} \middle| x \right),$$

$$P_n^{\alpha,\beta}(x) = \frac{2^n (\alpha+1)_n}{(n+\alpha+\beta+1)_n} {}_2F_1\left(\begin{matrix} -n, n+\alpha+\beta+1 \\ \alpha+1 \end{matrix} \middle| \frac{1-x}{2} \right).$$

$$H_n(x) = \begin{cases} (-1)^m \left(\frac{1}{2}\right)_m {}_1\mathrm{F}_1\left(\begin{matrix} -m \\ \frac{1}{2} \end{matrix} \middle| x^2 \right), & n = 2m \\ (-1)^m \left(\frac{3}{2}\right)_m x\, {}_1\mathrm{F}_1\left(\begin{matrix} -m \\ \frac{3}{2} \end{matrix} \middle| x^2 \right), & n = 2m+1 \end{cases}$$

$$L_n^{\alpha}(x) = \frac{(-1)^n \Gamma(n+\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+1)} {}_1\mathrm{F}_1\left(\begin{matrix} -n \\ \alpha+1 \end{matrix} \middle| x \right),$$

$$P_n^{\alpha,\beta}(x) = \frac{2^n(\alpha+1)_n}{(n+\alpha+\beta+1)_n} {}_2\mathrm{F}_1\left(\begin{matrix} -n, n+\alpha+\beta+1 \\ \alpha+1 \end{matrix} \middle| \frac{1-x}{2} \right).$$

$${}_p\mathrm{F}_q\left(\begin{matrix} a_1, a_2, \dots, a_p \\ b_1, b_2, \dots, b_q \end{matrix} \middle| x \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a_1)_k (a_2)_k \cdots (a_p)_k}{(b_1)_k (b_2)_k \cdots (b_q)_k} \frac{x^k}{k!}.$$

$$(a)_0 = 1, \quad (a)_k = a(a+1)\cdots(a+k-1), \; k = 1, 2, 3, \dots \; .$$

Teorema

Los polinomios de tipo hipergeométricos (clásicos) $p_n(x)$ son las únicas soluciones de la ecuación hipergeométrica

$$\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0$$

tales que las funciones

$$\psi_n(x) = \sqrt{\rho(x)}p_n(x),$$

donde $\rho(x)$ es la función peso con respecto a la cual los p_n son ortogonales, son **acotadas y de cuadrado integrable** *en (a, b), siendo (a, b) el soporte de la función peso.*

Resolviendo la ecuación de Schrödinger

El método de Nikiforov-Uvarov

La ecuación hipergeométrica generalizada

$$u''(z) + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} u'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} u(z) = 0,$$

siendo $\widetilde{\tau}(z)$ un polinomio de grado a lo más uno y $\sigma(z)$ y $\widetilde{\sigma}(z)$ polinomios de grado a lo más dos.

La ecuación hipergeométrica generalizada

$$u''(z) + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}u'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}u(z) = 0,$$

siendo $\widetilde{\tau}(z)$ un polinomio de grado a lo más uno y $\sigma(z)$ y $\widetilde{\sigma}(z)$ polinomios de grado a lo más dos.

Hagamos el cambio $u(z) = \phi(z)y(z)$,

$$y''(z)+\left(2\frac{\phi'(z)}{\phi(z)}+\frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}\right)y'(z)+\left(\frac{\phi''(z)}{\phi(z)}+\frac{\phi'(z)\widetilde{\tau}(z)}{\phi(z)\sigma(z)}+\frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}\right)y(z)=0.$$

El objetivo del cambio es convertir la ecuación anterior en una más sencilla –o por lo menos menos complicada– que (16). Comparando ambas:

$$u''(z) + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}u'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}u(z) = 0$$

$$y''(z)+\left(2\frac{\phi'(z)}{\phi(z)}+\frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}\right)y'(z)+\left(\frac{\phi''(z)}{\phi(z)}+\frac{\phi'(z)\widetilde{\tau}(z)}{\phi(z)\sigma(z)}+\frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}\right)y(z) = 0.$$

debemos tener

El objetivo del cambio es convertir la ecuación anterior en una más sencilla –o por lo menos menos complicada– que (16). Comparando ambas:

$$u''(z) + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}u'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}u(z) = 0$$

$$y''(z)+\left(2\frac{\phi'(z)}{\phi(z)}+\frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}\right)y'(z)+\left(\frac{\phi''(z)}{\phi(z)}+\frac{\phi'(z)\widetilde{\tau}(z)}{\phi(z)\sigma(z)}+\frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}\right)y(z) = 0.$$

debemos tener

$$2\frac{\phi'(z)}{\phi(z)} + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} = \frac{\tau(z)}{\sigma(z)}, \quad \text{o} \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\tau(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2\sigma(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)},$$

siendo τ un polinomio de grado a lo más uno y, por tanto, π polinomio de grado a lo más uno.

Es decir la ecuación original

$$u''(z) + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} u'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} u(z) = 0$$

se transforma en una equivalente

$$y''(z) + \frac{\tau(z)}{\sigma(z)} y'(z) + \frac{\overline{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} y(z) = 0,$$

$$\tau(z) = \widetilde{\tau}(z) + 2\pi(z),$$

$$\overline{\sigma}(z) = \widetilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi[\widetilde{\tau}(z) - \sigma'(z)] + \pi'(z)\sigma(z).$$

Es decir la ecuación original

$$u''(z) + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} u'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} u(z) = 0$$

se transforma en una equivalente

$$y''(z) + \frac{\tau(z)}{\sigma(z)} y'(z) + \frac{\overline{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} y(z) = 0,$$

$$\tau(z) = \widetilde{\tau}(z) + 2\pi(z),$$

$$\overline{\sigma}(z) = \widetilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi[\widetilde{\tau}(z) - \sigma'(z)] + \pi'(z)\sigma(z).$$

¿Cómo usamos esto para resolver la ecuación original?

Como $\overline{\sigma}$ es un polinomio de grado dos a lo sumo, impongamos que sea proporcional al propio σ, es decir que

$$\overline{\sigma}(z) = \lambda\sigma(z)$$

Como $\overline{\sigma}$ es un polinomio de grado dos a lo sumo, impongamos que sea proporcional al propio σ, es decir que

$$\overline{\sigma}(z) = \lambda\sigma(z)$$

Ello es posible pues $\overline{\sigma}$ tiene dos coeficientes indeterminados –los coeficientes del polinomio π– y λ es una constante a determinar, lo que nos conduce a tres ecuaciones –al igualar los coeficientes de $\overline{\sigma}$ y σ– con tres incógnitas.

Como $\overline{\sigma}$ es un polinomio de grado dos a lo sumo, impongamos que sea proporcional al propio σ, es decir que

$$\overline{\sigma}(z) = \lambda\sigma(z)$$

Ello es posible pues $\overline{\sigma}$ tiene dos coeficientes indeterminados –los coeficientes del polinomio π– y λ es una constante a determinar, lo que nos conduce a tres ecuaciones –al igualar los coeficientes de $\overline{\sigma}$ y σ– con tres incógnitas.

Hecho esto, nuestra ecuación se transforma en

la ecuación hipergeométrica

$$\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0.$$

Pasemos a calcular π y λ. Como $\overline{\sigma} = \lambda\sigma(z)$, entonces

$$\widetilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi[\widetilde{\tau}(z) - \sigma'(z)] + \pi'(z)\sigma(z) = \lambda\sigma(z),$$

o, equivalentemente,

$$\pi^2(z) + [\widetilde{\tau}(z) - \sigma(z)]\pi(z) + \{\widetilde{\sigma}(z) - [\lambda - \pi'(z)]\sigma(z)\} = 0.$$

Pasemos a calcular π y λ. Como $\overline{\sigma} = \lambda\sigma(z)$, entonces

$$\widetilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi[\widetilde{\tau}(z) - \sigma'(z)] + \pi'(z)\sigma(z) = \lambda\sigma(z),$$

o, equivalentemente,

$$\pi^2(z) + [\widetilde{\tau}(z) - \sigma(z)]\pi(z) + \{\widetilde{\sigma}(z) - [\lambda - \pi'(z)]\sigma(z)\} = 0.$$

Supongamos que $k = \lambda - \pi'(z)$ es conocido, entonces tenemos una ecuación de segundo orden para $\pi(z)$. Luego

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)},$$

pero $\pi(z)$ ha de ser un polinomio de grado a lo sumo uno, por tanto el polinomio

$$\Upsilon(z) = \left(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)$$

ha de ser un cuadrado perfecto, es decir su discriminante debe ser cero, lo que nos conduce a una ecuación para encontrar k. El k encontrado lo sustituimos en (21) y obtenemos $\pi(z)$, el cual nos conduce directamente a $\lambda = \pi'(z) + k$.

Partimos de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi(x)=E\Psi(x), \qquad x\in\mathbb{R}.$$

Partimos de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi(x)=E\Psi(x), \qquad x\in\mathbb{R}.$$

Haciendo el cambio $x=\sqrt{\hbar/(m\omega)}$, $E=\hbar\omega\varepsilon/2$, se transforma en la ecuación

$$\Psi''(\xi)+(\varepsilon-\xi^2)\Psi(\xi)=0,$$

que obviamente es del tipo hipergeométrico generalizado

$$u''(z)+\frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}u'(z)+\frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}u(z)=0$$

con $\widetilde{\tau}(\xi)=0$, $\sigma(\xi)=1$ y $\widetilde{\sigma}(\xi)=\varepsilon-\xi^2$.

$\widetilde{\tau}(\xi) = 0$, $\sigma(\xi) = 1$ y $\widetilde{\sigma}(\xi) = \varepsilon - \xi^2$

$$k = \lambda - \pi'(z), \quad \tau(z) = \widetilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)}$$

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}$$

$\widetilde{\tau}(\xi) = 0$, $\sigma(\xi) = 1$ y $\widetilde{\sigma}(\xi) = \varepsilon - \xi^2$

$$k = \lambda - \pi'(z), \quad \tau(z) = \widetilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)}$$

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}$$

$$\Psi(\xi) = \sqrt{\frac{2^n}{\sqrt{\pi}\, n!}}\, e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \qquad \varepsilon = 2n+1, \quad n = 0, 1, 2, \ldots .$$

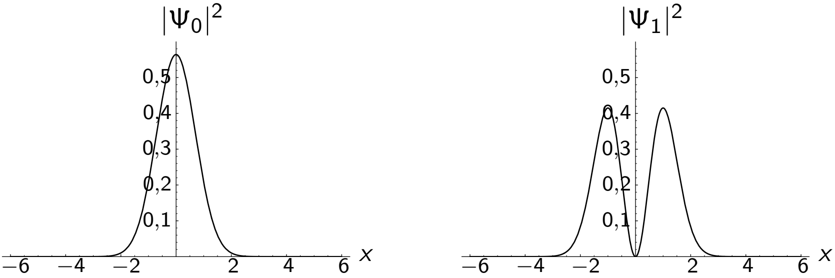


Figura: Estado fundamental Ψ_0 y excitado Ψ_1 del oscilador armónico.

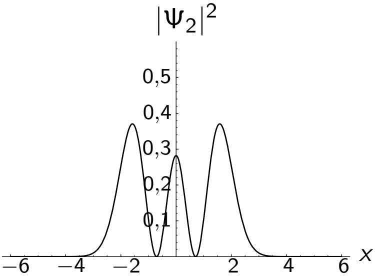


Figura: Estados excitados Ψ_n, $n = 2$ y $n = 10$ del oscilador armónico.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r,\theta,\phi)+V(r)\Psi(r,\theta,\phi)=E\Psi(r,\theta,\phi),$$

con $V(r)=-\alpha/r$, m la masa del electrón, $\phi\in[0,2\pi)$, $\theta\in[0,\pi]$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r,\theta,\phi)+V(r)\Psi(r,\theta,\phi)=E\Psi(r,\theta,\phi),$$

con $V(r)=-\alpha/r$, m la masa del electrón, $\phi\in[0,2\pi)$, $\theta\in[0,\pi]$.

$$\Delta=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r,\theta,\phi)+V(r)\Psi(r,\theta,\phi)=E\Psi(r,\theta,\phi),$$

con $V(r)=-\alpha/r$, m la masa del electrón, $\phi\in[0,2\pi)$, $\theta\in[0,\pi]$.

$$\Delta=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right),$$

o bien

$$\Delta=\Delta_r+\frac{1}{r^2}\Delta_{\sphericalangle},$$

donde

$$\Delta_r=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right),\quad \Delta_{\sphericalangle}=\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

denotan a los laplacianos radial y angular respectivamente.

$$\left[\Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\sphericalangle}\right]\Psi(r,\theta,\phi) + [\varepsilon - v(r)]\Psi(r,\theta,\phi) = 0,$$

donde $v(r) = 2m/\hbar^2 V(r)$ y $\varepsilon = -2m/\hbar^2 E$.

Separando las variables $\Psi(r,\theta,\phi) = F(r)Y(\theta,\phi)$

$$\Delta_{\sphericalangle} Y(\theta,\phi) + \mu Y(\theta,\phi) = 0, \quad \Delta_r F(r) + \left[\varepsilon - v(r) - \frac{\mu}{r^2}\right] F(r) = 0,$$

donde μ es cierta constante a determinar.

$$\left[\Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\triangleleft}\right]\Psi(r,\theta,\phi) + [\varepsilon - v(r)]\Psi(r,\theta,\phi) = 0,$$

donde $v(r) = 2m/\hbar^2 V(r)$ y $\varepsilon = -2m/\hbar^2 E$.

Separando las variables $\Psi(r,\theta,\phi) = F(r)Y(\theta,\phi)$

$$\Delta_{\triangleleft} Y(\theta,\phi) + \mu Y(\theta,\phi) = 0, \quad \Delta_r F(r) + \left[\varepsilon - v(r) - \frac{\mu}{r^2}\right] F(r) = 0,$$

donde μ es cierta constante a determinar.

Comencemos por la primera. Sea (SV) $Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$

$$\Phi''(\phi) + \nu\Phi(\phi) = 0,$$

$$\operatorname{sen}\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta \frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) + [\mu \operatorname{sen}^2\theta - \nu]\Theta(\theta) = 0,$$

donde ν es cierta constante.

$$\text{Así} \quad \Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad \nu = m^2, \quad m \in \mathbb{Z}.$$

$$\text{Así} \quad \Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad \nu = m^2, \quad m \in \mathbb{Z}.$$

La segunda ecuación en (27) es

$$\operatorname{sen}\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta \frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) + [\mu \operatorname{sen}^2\theta - m^2]\Theta(\theta) = 0,$$

Haciendo el cambio $x = \cos\theta$, entonces
$d/d\theta = dx/d\theta \cdot d/dx = -\operatorname{sen}\theta d/dx$, y $\operatorname{sen}\theta = \sqrt{1-x^2}$)

$$(1-x^2)\frac{d}{dx}\left((1-x^2)\frac{\partial\Theta(x)}{\partial x}\right) + [\mu(1-x^2) - m^2]\Theta(x) = 0 \quad \Longrightarrow$$

$$\Theta''(x) - \frac{2x}{1-x^2}\Theta'(x) + \frac{\mu(1-x^2) - m^2}{(1-x^2)^2}\Theta(x) = 0.$$

Esta ecuación es del tipo

$$u''(z) + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}u'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}u(z) = 0$$

con

$$\widetilde{\tau}(x) = -2x, \quad \widetilde{\sigma}(x) = \mu(1-x^2) - m^2, \quad \sigma = 1 - x^2,$$

$$\widetilde{\tau}(x) = -2x, \quad \widetilde{\sigma}(x) = \mu(1-x^2) - m^2, \quad \sigma = 1 - x^2,$$

$$k = \lambda - \pi'(z), \quad \tau(z) = \widetilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)}$$

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}$$

$$\widetilde{\tau}(x) = -2x, \quad \widetilde{\sigma}(x) = \mu(1-x^2) - m^2, \quad \sigma = 1 - x^2,$$

$$k = \lambda - \pi'(z), \quad \tau(z) = \widetilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)}$$

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}$$

$$\left(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma(z) = (\mu - k)x^2 + (k - \mu) + m^2$$

$$\widetilde{\tau}(x) = -2x, \quad \widetilde{\sigma}(x) = \mu(1-x^2) - m^2, \quad \sigma = 1 - x^2,$$

$$k = \lambda - \pi'(z), \quad \tau(z) = \widetilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)}$$

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}$$

$$\left(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma(z) = (\mu - k)x^2 + (k - \mu) + m^2$$

1. $k = \mu \quad \Longrightarrow \quad \pi(x) = \pm m \quad \Longrightarrow \quad \tau(x) = -2(x \mp m),$
   $m = 0, 1, 2, \ldots,$
2. $k = \mu - m^2 \quad \Longrightarrow \quad \pi(x) = \pm m x \quad \Longrightarrow \quad \tau(x) = -2(\mp m + 1)x,$
   $m = 0, 1, 2, \ldots.$

De las cuatro opciones elegimos: $\tau(x) = -2(m+1)x$, i.e., $\pi(x) = -mx$, $k = \mu - m^2$, $\lambda = k + \pi' = \mu - m(m+1)$. Luego

$$y(x) = P_{l-m}^{m,m}(x),$$

y la solución de la EHG es

$$\Theta_{l\,m}(x) = C_{lm}(1-x^2)^{m/2} P_{l-m}^{m,m}(x).$$

De las cuatro opciones elegimos: $\tau(x) = -2(m+1)x$, i.e., $\pi(x) = -mx$, $k = \mu - m^2$, $\lambda = k + \pi' = \mu - m(m+1)$. Luego

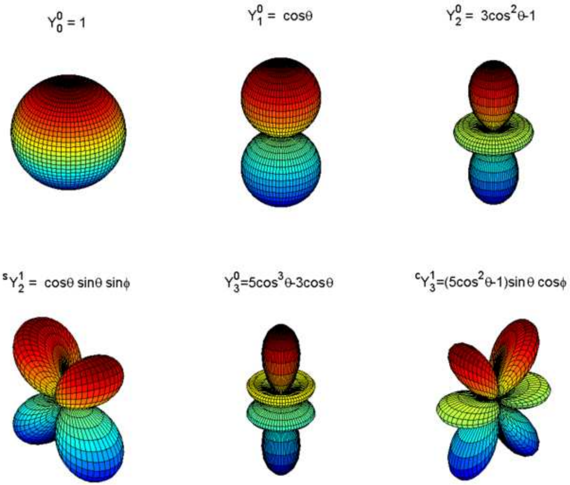
$$y(x) = P_{l-m}^{m,m}(x),$$

y la solución de la EHG es

$$\Theta_{l\,m}(x) = C_{lm}(1-x^2)^{m/2} P_{l-m}^{m,m}(x).$$

Luego la parte angular tiene como solución los *armónicos esféricos*

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \Theta_{l\,m}(\cos\theta), \quad l = 0,1,2,\ldots, \quad m = -l, -l+1, \ldots,$$


$Y_0^0 = 1$
$Y_1^0 = \cos\theta$
$Y_2^0 = 3\cos^2\theta\text{-}1$
${}^sY_2^1 = \cos\theta \sin\theta \sin\phi$
$Y_3^0 = 5\cos^3\theta\text{-}3\cos\theta$
${}^cY_3^1 = (5\cos^2\theta\text{-}1)\sin\theta \cos\phi$

Finalmente la parte radial tiene la forma

$$\Delta_r F(r) + \left[\varepsilon - v(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] F(r) = 0, \quad \Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right)$$

Como $\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial F(r)}{\partial r}\right) = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}[rF(r)]$, hacemos $F(r) = R(r)/r$

$$R''(r) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{\alpha}{r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R(r) = 0.$$

Haciendo el cambio $\zeta = r/a_0$, donde $a_0 = \hbar^2/(m\alpha)$ obtenemos

$$R''(\zeta) + \left[2\left(\varepsilon + \frac{1}{\zeta}\right) - \frac{l(l+1)}{\zeta^2}\right] R(\zeta) = 0.$$

$$R''(\zeta) + \left[2\left(\varepsilon + \frac{1}{\zeta}\right) - \frac{l(l+1)}{\zeta^2}\right] R(\zeta) = 0.$$

Esta ecuación es del tipo

$$u''(z) + \frac{\widetilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} u'(z) + \frac{\widetilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} u(z) = 0$$

con

$$\sigma(\zeta) = \zeta, \quad \widetilde{\sigma}(\zeta) = 2\varepsilon\zeta^2 + 2\zeta - l(l+1), \quad \widetilde{\tau}(\zeta) = 0.$$

$$\sigma(\zeta) = \zeta, \quad \widetilde{\sigma}(\zeta) = 2\varepsilon\zeta^2 + 2\zeta - l(l+1), \quad \widetilde{\tau}(\zeta) = 0.$$

$$k = \lambda - \pi'(z), \quad \tau(z) = \widetilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)}$$

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}$$

$$\sigma(\zeta)=\zeta,\quad \widetilde{\sigma}(\zeta)=2\varepsilon\zeta^2+2\zeta-l(l+1),\quad \widetilde{\tau}(\zeta)=0.$$

$$k=\lambda-\pi'(z),\quad \tau(z)=\widetilde{\tau}(z)+2\pi(z),\quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)}=\frac{\pi(z)}{\sigma(z)}$$

$$\pi(z)=\frac{\sigma'(z)-\widetilde{\tau}(z)}{2}\pm\sqrt{\left(\frac{\sigma'(z)-\widetilde{\tau}(z)}{2}\right)^2-\widetilde{\sigma}(z)+k\sigma(z)}$$

$$\varepsilon:=\varepsilon_{n,l}=-\frac{1}{2(n+l+1)^2},\qquad n,l=0,1,2,\dots$$

Fijados n y l, la solución es $x=2\sqrt{-2\varepsilon_{n,l}}\zeta$

$$R_{n\,l}(\zeta)=\sqrt{\frac{1}{(n+l+1)^2 n!(2n+l+1)!}}\,x^{l+1}e^{-x/2}L_n^{2l+1}(x),$$

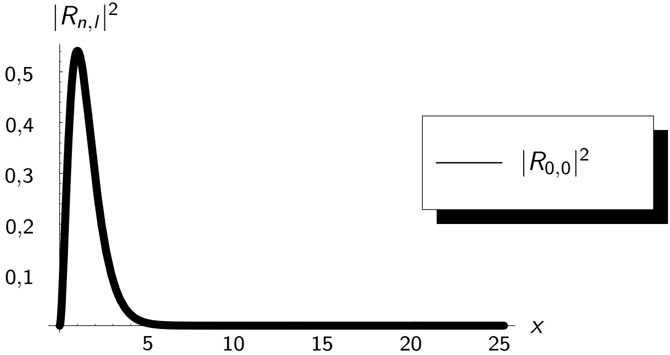


Figura: Estado fundamental del átomo de Hidrógeno.

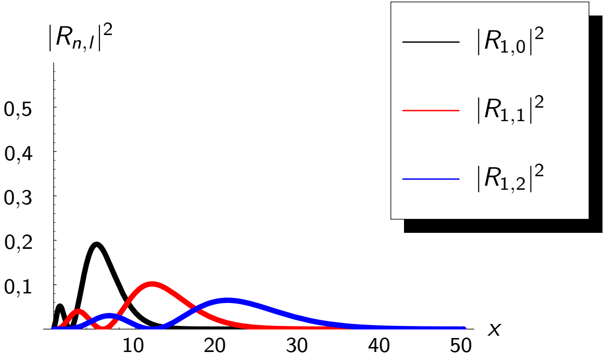


Figura: Estados excitados $n = 1,\ l = 0, 1, 2$ del átomo de Hidrógeno.

- R. Álvarez-Nodarse, *Polinomios hipergemétricos y q-polinomios*. Monografías del Seminario Matemático "García de Galdeano" Vol. **26**. Prensas Universitarias de Zaragoza, Zaragoza, 2003.

  Versión corregida de nov. 2014 en:

  `http://euler.us.es/~renato/q-libro/`

- A. F. Nikiforov y V. B. Uvarov, *Special Functions of Mathematical Physics.* Birkhäuser Verlag, Basilea, 1988.