# Eigenvalores de la energía de un pozo asimétrico unidimensional

N. Aquino

Departamento de Física, Universidad Autnoma Metropolitana-Iztapalapa Apartado postal 55-534, 09340 México, D.F., Mexico

G. Campoy

Centro de Investigacin en Física, Universidad de Sonora Apartado postal A-88, Hermosillo, Sonora, Mexico

#### H. Yee-Madeira

Departamento de Física, Escuela Superior de Física y Matemticas, Instituto Politécnico Nacional Edificio 9, Unidad Prof. "ALM", Col. Lindavista, 07738 México, D.F., Mexico

Recibido el 23 de julio de 1999; aceptado el 15 de noviembre de 1999

En este trabajo estudiamos el espectro de energía de una partícula cuántica sujeta a la acción del potencial asimétrico  $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + e^{-\gamma x}$ . El primer enfoque que utilizamos es la bien conocida teoría de perturbaciones, al calcular la energía del estado base con correcciones hasta de segundo orden, encontramos que esta serie perturbativa es divergente. Para evitar este problema, y al mismo tiempo dar una solución sencilla, desarrollamos la exponencial en serie de Taylor reteniendo términos hasta orden  $\gamma^4$ , con lo cual el potencial original se convierte en el de un oscilador anarmónico cuártico, el cual se trata con teoía de perturbaciones a primero y segundo orden para obtener energías aproximadas. En un segundo enfoque, y con el fin de poder comparar la solución perturbativa, tratamos el problema con el método de la diagonalización directa del hamiltoniano en la base del oscilador armónico. Este método puede considerarse exacto cuando se utiliza la consistencia de tamaño, que consiste en tomar un número lo suficientemente grande de funciones base que aseguren que los cálculos han convergido. La teoría de perturbaciones a primer orden indica que todas las curvas de energía de los diferentes estados son funciones crecientes del parámetro  $\gamma$ . La corrección a segundo orden muestra que la energía del estado base es decreciente en el intervalo  $0 \le \gamma \le 1$ , mientras que las curvas de los estados excitados son funciones crecientes de  $\gamma$  en este mismo intervalo. La diagonalización directa del hamiltoniano confirma el comportamiento predicho por la corrección a segundo orden, además nos muestra que la teoría de perturbaciones predice de manera aceptable la energía hasta valores de  $\gamma \approx 0.4$ 

Descriptores: Mecánica cuántica; soluciones variacionales

We study the energy spectrum of a quantum particle under the action of the asymmetric potential  $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + e^{-\gamma x}$ . Our first approach is the well known perturbation theory; we calculate the ground state energy with corrections up to second order, and we found that the perturbation series is divergent. To avoid this problem and to obtain a simple solution, we expand the exponential term in a Taylor series up to terms in  $\gamma^4$ , thus obtaining a quantum anharmonic oscillator. This approximated potential can be properly handled with perturbation theory, first and second order, to obtain approximate energies. In order to be able to compare the perturbation solutions, we treat the problem by direct diagonalization of the hamiltonian of the exponential potential. This method can be considered exact when size consistency is used, *i.e.* when taking a sufficiently large number of functions of a basis set, the calculation converges. First order perturbation theory indicates that all the energy curves of all the different states are increasing functions of the parameter  $\gamma$ . The second order corrections shows that the energy of the ground state is a decreasing function of  $\gamma$  in the interval  $0 \le \gamma \le 1$ , while those of the excited states are increasing functions of  $\gamma$  in the at same interval. The direct diagonalization of the hamiltonian confirms the predicted behaviors by the second order correction. Besides it shows that perturbation theory predicts acceptable energy values up to  $\gamma \approx 0.4$ .

Keywords: Quantum mechanics; varational solutions

PACS: 03.65

# 1. Introducción

En la mayoría de los cursos de mecánica cuántica a nivel licenciatura los métodos más empleados para encontrar soluciones aproximadas a la ecuación de Schrödinger en una dimensión son el método WKB, el método variacional y la teoría de perturbaciones. Cada uno de ellos tiene sus ventajas, rango de aplicación y limitaciones.

En gran número de estos cursos enseñamos a nuestros alumnos la teoría de perturbaciones, aplicándola a problemas sencillos, donde, en general, la serie perturbativa de la energía converge rápidamente. Sin embargo, pocas veces discutimos problemas en los cuales estas series no son convergentes; un ejemplo que muestra el carácter divergente de las series perturbativas lo podemos encontrar en el estudio del oscilador anarmónico cuártico [1, 2], en el cual la serie perturbativa para el estado base es divergente para cualquier valor del parámetro de pequeñez.

En el presente trabajo analizamos el espectro de energía del potencial  $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + e^{-\gamma x}$  en función del parámetro r. La aplicación directa de la teoría de perturbaciones a este potencial presenta dos inconvenientes: el primero es que el

número de elementos de matriz diferentes de cero es infinito y el segundo es que la serie perturbativa de segundo orden para el estado base es divergente. Con la finalidad de obtener una aproximación para los eigenvalores de la energía y evitar los problemas antes señalados, desarrollamos la exponencial en serie de potencias hasta cuarto orden, transformando el potencial original ál de un oscilador anarmónico cuártico con asimetría. Existen otros método para calcular los eigenvalores de este problema de manera muy precisa, éstos son la diagonalización directa del hamiltoniano en la base del oscilador armónico o por el método del elemento finito o diferencias finitas. Estos métodos no forman parte de los cursos elementales de mecánica cuántica, sin embargo, existe la creciente necesidad de incorporarlos a nuestros cursos con el fin de poder tratar algunas aplicaciones y problemas más atractivos para los estudiantes. En este trabajo haremos uso de la diagonalización directa del hamiltoniano en la base del oscilador armónico.

La organización de este trabajo es la siguiente: en la Sec. 2 presentamos el problema y sus soluciones exactas para dos casos límite. En la Sec. 3 aplicamos la teoría de perturbaciones directamente al potencial V(x), a continuación en la 4 transformamos el potencial V(x) al de un oscilador anarmónico cuártico y damos su solución con teoía de perturbaciones. En la Sec. 5 aplicamos el método de la diagonalización directa del hamiltoniano en la base del oscilador armónico y finalmente presentamos nuestras conclusiones.

## 2. El problema

El hamiltoniano de una partícula sujeta al potencial V(x) es

$$H = \frac{1}{2}p^2 + V(x).$$
 (1)

El potencial está dado por

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + e^{-\gamma x},$$
 (2)

que es un potencial asimétrico, donde el parámetro de asimetía  $\gamma \ge 0$ , y  $-\infty < x < \infty$ , en unidades en la cuales  $\hbar = m = \omega = 1$ .

La ecuación de Schrödinger para estados estacionarios a resolver es

$$H\psi_n = E_n\psi_n.$$

Existen dos casos límite para los cuales la correspondiente ecuación de Schrödinger tiene solución exacta, éstos son  $\gamma = 0$  y  $\gamma \rightarrow \infty$ . En el primer caso ( $\gamma = 0$ ) tenemos el oscilador armónico desplazado en una unidad de energía

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + 1.$$
 (3a)

Las eigenfunciones de este hamiltoniano son las mismas que las del oscilador armónico:



FIGURA 1. Gráfica del potencial asimétrico  $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + e^{-\gamma x}$ para  $\gamma = 0, 0.1, 1.0$ . El potencial es simétrico para  $\gamma = 0$ , siendo este el de un oscilador armónico, para  $\gamma = 0.1$  se vuelve ligeramente asimétrico, mientras que para  $\gamma = 1$  la asimetría es evidente.

$$\psi_n(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{-x^2}{2}\right) H_n(x),$$
  
$$n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (3b)$$

donde  $H_n(x)$  es el enésimo polinomio de Hermite. Los eigenvalores de la energía son simplemente.

$$E_n = n + \frac{1}{2} + 1 = n + \frac{3}{2}.$$
 (3c)

En el segundo caso, cuando  $\gamma \to \infty$ , el potencial se convierte en una barrera infinita para x < 0, mientras que para x > 0 se convierte en el potencial del oscilador armónico, es decir tenemos el problema de medio oscilador armónico [3]. Ya que la partícula no puede penetrar en la región x < 0, las eigenfunciones deben de ser cero en esta región y en x = 0. Para la región x > 0 las eigenfunciones son las mismas que las del oscilador armónico (3b) con paridad impar, ya que son las únicas funciones que se hacen cero en x = 0. Por lo tanto, las energías de los diferentes niveles energéticos están dadas por

$$E_n = n + \frac{1}{2}, \qquad n = 1, 3, 5, \dots$$
 (4)

Desafortunadamente para otros valores de  $\gamma$  la correspondiente ecuación de Schrödinger no tiene soluciones tan sencillas.

En la Fig. 1 hemos graficado V(x) para tres valores de  $\gamma$  para mostrar la asimetría del potencial. A medida que  $\gamma$  aumenta la asimetría se vuelve más evidente y el mínimo del potencial se desplaza hacia la derecha a  $x_m$ , donde  $x_m$  satisface la ecuación  $x_m - \gamma e^{-yx_m} = 0$ . Por ejemplo, para  $\gamma = 0.1, x_m = 0.099$  y  $V(x_m) = 0.995$ .

#### 3. Teoría de perturbaciones

Para aplicar la teoría de perturbaciones independiente del tiempo [4–7] es conveniente escribir el hamiltoniano (1) en la siguiente forma:

$$H = H_0 + H', \tag{5}$$

donde  $H_0 = \frac{1}{2}(p^2 + x^2)$  es el hamiltoniano no perturbado del oscilador armónico, con eigenvalores  $E_n^{(0)} = n + \frac{1}{2}$  y eigenfunciones  $|n\rangle$  dadas por (3b); mientras que la perturbación esta dada por.

$$H' = \exp(-\gamma x). \tag{6}$$

En el marco de la teoría de perturbaciones las energías se expresan como una serie

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \text{correcciones de orden superior,} \quad (7a)$$

donde  $E_n^{(1)}$  y  $E_n^{(2)}$  son las correcciones a primero y segundo orden, las cuales están dadas por

$$E_n^{(1)} = \langle n | H' | n \rangle, \tag{7b}$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k | H' | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$
 (7c)

La aplicación directa de las Ecs. (7) a la perturbación presenta dos inconvenientes

 El número de elementos de matriz diferentes de cero es infinito, esto puede verse fácilmente de la expresión de los elementos de matriz [8]

$$i|e^{-\gamma x}|j\rangle = (2^{j-i}j!/i!)^{1/2}e^{\gamma^{2/4}}(-\gamma)^{i-j}$$
$$\times \sum_{k=0}^{j} \frac{i!\gamma^{2k}}{2^{k}k!(k+i-j)!(j-k)!}, \quad i \ge j.$$
(8a)

Este resultado se obtiene al desarrollar la exponencial en términos de los polinomios de Hermite, utilizando las reglas de recurrencia entre éstos y posteriormente integrando.

2. La serie perturbativa a segundo orden para el estado base diverge para cualquier  $\gamma > 0$ . Para probar esto evaluemos la energía del estado base con correcciones hasta segundo orden (7a), esto es,

$$E_0 = E_0^0 + \langle 0|e^{-\gamma x}|0\rangle - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|\langle k|e^{yx}|0\rangle|^2}{k}.$$
 (8b)

Sustituyendo los elementos de matriz dados en (8a) tenemos

$$E_0 = \frac{1}{2} + e^{\gamma^2/4} - e^{\gamma^2/2} - \sum_{k=1}^{\infty} a_k.$$
 (8c)

en donde

$$a_k = (k-1)! \left(\frac{\gamma^2}{2}\right)^k \tag{8.d}$$

es el término general de la serie.

A continuación utilizamos el bien conocido teorema de cálculo [9] que establece que si una serie converge, entonces el término general debe de aproximarse a cero cuando  $k \to \infty$ , de lo contrario la serie diverge. De (8d) podemos ver que para un valor fijo de  $\gamma$  (pero arbitrario) el término general no tiende a cero cuando  $k \to \infty$ , por lo tanto la serie diverge.

Este resultado no es sorprendente, ya que la teoría de perturbaciones funciona bien sólo cuando el potencial perturbativo es pequeño comparado con el no perturbado, pero éste no es el caso, ya que para una  $\gamma$  fija, a medida que x se hace negativo el potencial exponencial crece mucho más rápido que el potencial del oscilador armónico, por lo que H' no puede considerarse exactamente como una perturbación.

### 4. La aproximación de oscilador anarmónico

Con el propósito de dar una aproximación a los eigenvalores de la energía del hamiltoniano (1) y evitar los problemas expuestos en la sección anterior haremos una consideración adicional. Supondremos que  $\gamma x \ll 1$ , y desarrollamos la exponencial hasta cuarto orden en  $\gamma x$ , con lo cual obtenemos una aproximación para H':

$$H' = e^{-\gamma x} \approx 1 - \gamma x + \frac{\gamma^2 x^2}{2} - \frac{\gamma^3 x^3}{6} + \frac{\gamma^4 x^4}{24}.$$
 (9)

De esta manera transformamos el problema original en el de un oscilador anarmónico.

En la Fig. 2 hemos graficado ambos potenciales  $e^{-\gamma x}$ (línea continua) y su aproximación (línea discontinua) dada por la expresión (9), para  $\gamma = 0.1, 0.4, 0.7$  y 1.0. Para los dos primeros valores de  $\gamma$  las gráficas son muy semejantes en el intervalo que se muestra, mientras que para los valores 0.7 y 1.0 la diferencia se vuelve evidente.

Para evaluar las correcciones de la energía a primero y segundo orden necesitamos conocer los elementos de matriz de  $\langle k | x^{\ell} | n \rangle$ , con  $\ell = 1, 2, 3, 4$ . Estos elementos de matriz ya han sido calculados con anterioridad y se encuentran reportados en la literatura [10]. Mediante esta aproximación se resuelven los dos problemas mencionados en la sección anterior, porque el número de elementos de matriz diferentes de cero ahora es finito y la serie perturbativa de segundo orden se transforma en una suma que involucra sólo unos cuantos términos.

Las energías que incluyen correcciones hasta de primer orden están dadas por

$$E'_{n} = E^{(0)}_{n} + E^{(1)}_{n} = \left(n + \frac{3}{2}\right) + \frac{\gamma^{2}}{2}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\gamma^{4}}{16}\left(n^{2} + n + \frac{1}{2}\right), \qquad n = 0, 1, 2, \dots \quad (10)$$

Rev. Mex. Fís. 46 (2) (2000) 201-206



FIGURA 2. Gráfica del potencial exponencial  $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + e^{-\gamma x}$ (línea continua) y su aproximación (línea discontinua). El eje horizontal representa x, mientras que el vertical es el potencial. Para valores pequeños del parámetro  $\gamma$  ambas curvas son muy similares, pero a medida que este aumenta la diferencia es muy clara.



FIGURA 3. Curvas de la energía para el estado base como función  $\gamma$ , predichas por la aproximación a primer y segundo orden, así como la curva exacta calculada por el método variacional lineal.

Esta fórmula muestra que todos los niveles de energía como función de  $\gamma$  son crecientes.

Las energías que incluyen correcciones hasta de segundo orden  $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$  se obtienen fácilmente. A continuación se muestran las expresiones para el estado base y los dos primeros estados excitados:

$$\begin{split} E_0^{''} &= \frac{3}{2} - \frac{1}{4}\gamma^2 - \frac{9}{32}\gamma^4 - \frac{35}{288}\gamma^6 - \frac{41}{1152}\gamma^8, \\ E_1^{''} &= \frac{5}{2} + \frac{\gamma^2}{4} - \frac{25}{32}\gamma^4 - \frac{29}{72}\gamma^6 - \frac{165}{4608}\gamma^8, \\ E_2^{''} &= \frac{7}{2} + \frac{3}{4}\gamma^2 - \frac{37}{32}\gamma^4 - \frac{77}{72}\gamma^6 - \frac{205}{1536}\gamma^8. \end{split}$$
(11)

De la primera de las fórmulas resulta evidente que en esta aproximación la curva de energía del estado base es una función decreciente de  $\gamma$  para  $\gamma \approx 0$ , lo cuál es contrario a lo que predice la corrección a primer orden (10). En la siguiente sección veremos cual es el comportamiento real de estas curvas. En las Figs. 3, 4 y 5 se muestran las curvas de energía en fun-



FIGURA 4. Curvas de la energía para el primer estado excitado como función  $\gamma$ , predichas por la aproximación a primer y segundo orden, así como la curva exacta calculada por el método variacional lineal.



FIGURA 5. Curvas de la energía para el segundo estado excitado como función  $\gamma$ , predichas por la aproximación a primer y segundo orden, así como la curva exacta calculada por el método variacional lineal.

ción de para los tres estados más bajos en la aproximación a primero y segundo orden, en donde se puede observar cómo estas aproximaciones se separan rápidamente. Además, se muestra la curva de energía exacta calculada por el método que expondremos en la siguiente sección. En la Tabla II se encuentran reportadas las energías para los tres primeros estados para algunos valores del parámetro  $\gamma$ . De esta tabla podemos apreciar que las fórmulas (11) predicen con un error de centésimas a las energías exactas para  $\gamma = 0.5$ ; para valores menores de  $\gamma$ , la aproximación es aún mejor.

#### 5. Diagonalización directa del hamiltoniano

En esta sección formularemos y encontraremos la solución de la ecuación de Schrödinger mediante el método variacional lineal. Las eigenfunciones  $\psi$  de (1) pueden desarrollarse en términos de la base de funciones del oscilador armónico  $|n\rangle$  en la siguiente forma:

$$\psi = \sum_{0}^{\infty} a_n |n\rangle.$$
 (12)

Para aplicar el cálculo variacional debemos calcular la integral  $\int \psi^* H \psi \, dx$  y minimizarla sujeta a la restricción  $\int \psi^* \psi \, dx = 1$ , es decir,

$$\delta\left(\int\psi^*H\psi\,dx-\lambda\int\psi^*\psi\,dx\right)=0.$$
 (13)

Como  $\psi$  es lineal en los coeficientes  $a_n$ , la Ec. (13) es equivalente a diagonalizar la matriz  $\|\int \psi^* H \psi \, dx\|$ , cuyos elementos son

$$H_{ij} = \left(i + \frac{1}{2}\right)\delta_{ij} + \langle i|e^{-\gamma x}|j\rangle.$$
(14)

Los elementos de matriz  $\langle i|e^{-\gamma x}|j\rangle$  están dados de manera anaítica por la expresión (8a).

La diagonalización numérica de la matriz hamiltoniana se realizó mediante el método de Jacobi [11, 12]. Hicimos un cálculo de consistencia de tamaño incrementando paulatinamente el número de funciones base y encontramos que para  $\gamma$ cercanas a cero basta con 5 funciones base para obtener una buena convergencia en la energía en los tres primeros estados. Para  $\gamma \approx 1$ , 18 funciones de base son suficientes para obtener una convergencia en el sexto decimal en las energías de los tres primeros estados. Estos resultados se muestran en la Tabla I para algunos valores de  $\gamma$ , en donde N representa el número de funciones base empleadas en la diagonalización del hamiltoniano.

Los eigenvalores convergidos se muestran en la Tabla II, todos ellos son correctos hasta la sexta cifra decimal, además hemos incluido los valores obtenidos mediante la teoría de perturbaciones a segundo orden (Ecs. 11). Podemos observar que para valores muy pequeños de  $\gamma$ , ambos métodos producen resultados que difieren poco entre sí, pero a medida que  $\gamma$ 

TABLA I. Los primeros tres estados del pozo asimétrico unidimen-
sional para tres diferentes valores de y, N representa el número de
funciones de base (ver el texto) con las que se realiza la diagona-
lización del hamiltoniano. Las energías están en unidades de $\hbar\omega$ .

N	$\gamma = 0.1$	$\gamma = 0.5$	$\gamma = 1.0$		
	es	tado base			
5	1.497522	1.448358 1.360110			
10	1.497522	1.448358	1.360081		
15	1.497522	1.448358	1.360081		
18	1.497522	1.448358 1.360081			
	primer	estado excitado			
5	2.502472	2.549386	2.549386 2.629947		
10	2.502472	2.549380	2.628790		
15	2.502472	2.549380	2.628790		
18	2.502472	2.549380	2.628790		
	segundo	estado excitado			
5	3.507435	3.654234	3.924003		
10	3.507435	3.654178 3.91302			
15	3.507435	3.654178	3.913018		
18	3.507435	3.654178	78 3.913018		

aumenta esta diferencia se vuelve más notable. La razón de ello es que la teoría de perturbaciones sólo produce resultados aceptables cuando el parámetro perturbativo ( $\gamma$ ) es muy pequeño.

## 6. Conclusiones

En las Figs. 3, 4 y 5 mostramos las curvas de la energía a primer orden  $E'_n$  y segundo orden  $E''_n$ , así como la energía exacta para los tres primeros estados como función del parámetro  $\gamma$ . Estos resultados muestran que la aproximación a primer orden es muy burda, y en el caso del estado base muestra un

n	$\gamma = 0.05$		$\gamma = 0.10$		$\gamma = 0.20$	
	Pertur.	Var.	Pertur.	Var.	Pertur.	Var.
0	1.49937	1.499376	1.49747	1.499522	1.48954	1.490336
1	2.50062	2.500623	2.50242	2.502472	2.50872	2.509573
2	3.50187	3.501871	3.50738	3.507435	3.52808	3.528987
$\gamma =$ Pertur.	0.50	$\gamma =$	0.80	$\gamma =$	: 1.00	
	Pertur.	Var.	Pertur.	Var.	Pertur.	Var.
0	1.41788	1.448358	1.18697	1.394508	0.81163	1.360081
1	2.50723	2.549380	2.22840	2.597925	1.53016	2.628790
2	3.59800	3.654178	3.20366	3.812401	1.89084	3.913018

TABLA II. Eigenvalores de la energía de k potencial asimétrico (Ec. 2) calculados mediante teoría de perturbaciones a segundo orden (11) y mediante la diagonalización del hamiltoniano en la base del oscilador armónico.

comportamiento equivocado. La aproximación a segundo orden proporciona una mejor estimación de la energía y en el caso del estado base el comportamiento cualitativo es el correcto, es decir, la energía decrece como función del parámetro  $\gamma$ . El que la aproximación a segundo orden funcione bien para valores pequeños de  $\gamma$  se puede entender a partir de que la aproximación del potencial exponencial mediante el potencial polinomial (9) es muy buena (en el rango en que se muestra en la Fig. 2) y es precisamente para estos valores de  $\gamma$  en el que la aplicación de la teoría de perturbaciones brinda buenos resultados. Para valores de  $\gamma > 0.4$  el potencial exponencial no se aproxima suficientemente bien por el potencial polinomial y por lo tanto los eigenvalores de ambos potenciales serán diferentes, esto puede verse principalmente en los estados más excitados.

En la Tabla II mostramos los valores de las energías obtenidas con la corrección perturbativa a segundo orden (11) y los resultados de la diagonalización del hamiltoniano en la base del oscilador armónico. Debe notarse que valores de  $\gamma$ hasta 0.2 el error que se comete al usar las ecuaciones (11) es del orden de 1 milésimo o menos, para  $\gamma = 0.5$  este error es del orden de las centésimas y a partir de aquí el error aumenta con mayor rapidez. En este trabajo hemos mostrado un ejemplo de un problema en el cual no es posible aplicar directamente la teoría de perturbaciones estándar. Con el fin de darle solución a este problema seguimos dos caminos distintos: 1) se desarrolla el potencial perturbativo en una serie de Taylor y se aplica nuevamente el método de perturbaciones; 2) empleamos el método variacional lineal.

El método variacional lineal es un método muy robusto que nos permite obtener eigenvalores y eigenfunciones con un alto grado de precisión y nos da la posibilidad de abordar problemas más interesantes para nuestros cursos, algunos de los cuales son difíciles de resolver con teoría de perturbaciones.

En este trabajo hemos visto que el número de funciones base necesarias para la convergencia de los eigenvalores depende del valor de  $\gamma$ . A medida que  $\gamma$  aumenta se necesita un número mayor de funciones base para asegurar la convergencia de los eigenvalores.

## Agradecimientos

Deseamos agradecer los valiosos comentarios de E. Castaño y de F. Barrera.

- 1. C.M. Bender and T.T. Wu, Phys. Rev. 184 (1969) 1231.
- 2. B. Simon, Ann. Phys. 58 (1970) 76.
- F. Constantinescu and E. Magyari, Problems in Quantum Mechanics, Vol. II, (John Wiley and Sons, New York, 1982) p. 28.
- P.W. Atkins, Molecular Quantum Mechanics, An Introduction to Quantum Chemistry, (Clarendon Press, Oxford, 1970).
- 5. D.S. Saxon, *Elementary Quantum Mechanics*, (Holden-Day, San Francisco, 1968).
- C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Vol. II (John Wiley and Sons, New York, 1977).
- J.L. Powell and B. Crasemann, *Quantum Mechanics* (Addison-Wesley Publishing Co., Massachusetts, 1965).

- J.L. López, P. Portillo, N. Aquino, and J. Morales, *ContactoS* No. 8 (1993) 60.
- I.S. Sokolnikoff and R.M. Redhenffer, *Mathematics of Physics* and Modern Engineering, 2nd edition (McGraw-Hill Kogakusha, Tokyo, 1966) p. 9.
- S. Flügge, Practical Quantum Mechanics, (Springer, Berlin, 1971) p. 80.
- S. Nakamura, Métodos numéricos aplicados con software, (Prentice-Hall Latinoamericana, México, 1992).
- W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolski, and W.T. Vetterling, *Numerical Recipes: The art of Scientific Computing*, (Cambridge University Press, New York, 1986).