



**INSTITUTO POTOSINO DE INVESTIGACIÓN
CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA, A.C.**

POSGRADO EN NANOCIENCIAS Y MATERIALES

**Supersimetría lineal aplicada a potenciales diatómicos
y redes bidimensionales**

Tesis que presenta

Josué Domingo de la Cruz Díaz

Para obtener el grado de

Doctor en Nanociencias y Materiales

Codirectores de la Tesis:

Dr. Haret-Codratian Rosu

Dr. José Salomé Murguía Ibarra

San Luis Potosí, S.L.P, Diciembre de 2023



Constancia de aprobación de la tesis

La tesis **Supersimetría lineal aplicada a potenciales diatómicos y redes bidimensionales** presentada para obtener el Grado de Doctor en Nanociencias y materiales fue elaborada por **Josué Domingo de la Cruz Díaz** y aprobada el **01 de diciembre de 2023** por los suscritos, designados por el Colegio de Profesores de la División de Materiales Avanzados del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

Dr. Haret-Codratián Rosu
Codirector

Dr. José Salomé Murguía Ibarra
Codirector

Dr. Eric Campos Cantón
Sínodal

Dr. Maximino Pérez Maldonado
Sínodal



Créditos Institucionales

Esta tesis fue elaborada en la División de Materiales avanzados del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., bajo la codirección de los doctores Dr. Haret-Codratian Rosu y Dr. José Salomé Murguía Ibarra.

Durante la realización del trabajo el autor recibió una beca académica del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (cvu 764804).

(Página en Blanco que se va a utilizar para colocar la copia del acta de examen.)

Dedicatoria

A todas las personas involucradas en mi formación, especialmente a la población que mantiene la investigación nacional a través de sus impuestos.

Agradecimientos

A mi familia, amigos, coasesores y miembros del comité tutorial.

El desarrollo de este trabajo fue apoyado parcialmente por el proyecto CONAHCyT **CB 2017-2018 A1-S-45697**.

Al equipo del LINAN por su inalcanzable labor en pro de los estudiantes del IPICyT y por los servicios prestados en mi formación.

Índice general

Índice de figuras	XV
Índice de cuadros	XIX
1. Introducción y marco teórico	4
1.1. Mecánica cuántica supersimétrica de primer orden	4
1.1.1. Deformaciones isoespectrales	5
1.2. Mecánica cuántica no Hermitiana	9
1.2.1. Simetría \mathcal{PT}	10
1.3. Transformada wavelet continua	10
1.3.1. Algunas propiedades	12
1.4. Momentos de desvanecimiento	13
1.5. Regularidad Lipschitz local y dimensión fractal	13
2. Aplicaciones de la transformada wavelet continua al estudio de potenciales deformados isoespectralmente	15
2.1. Regiones singulares de los potenciales con deformación isoespectral	15
2.2. Comportamiento del potencial en la vecindad de la singularidad	17
2.3. Caracterización con exponentes de Hölder de la familia $V(x; \gamma)$ y $\Psi_0(x; \gamma)$	19
2.3.1. Convergencia al potencial original	19
2.3.2. Desvanecimiento del segundo pozo	21
2.4. Resultados y discusión	26
2.5. Conclusiones	29
3. Mecánica cuántica supersimétrica en el caso de los potenciales moleculares diatómicos	30
3.1. Introducción	30
3.2. Características de un potencial de interacción diatómico	30
3.3. Potencial de Kratzer	33
3.3.1. Compañeros supersimétricos	35
3.3.2. Deformación paramétrica	41
3.3.3. Eigenfunciones para el compañero supersimétrico y para el potencial deformado	44
3.4. Potencial de Morse	46
3.4.1. Compañeros supersimétricos	47
3.4.2. Potencial Morse con deformación paramétrica	52

3.4.3. Eigenfunciones para el compañero supersimétrico y para el potencial deformado	57
3.5. Modelo exactamente soluble generado con el superpotencial polygama y su convergencia al potencial de Morse q -deformado	58
3.5.1. Superpotenciales	59
3.5.2. Caso $m = 0$ y el potencial triangular	59
3.5.3. Caso $w = \psi(x; m)$, m par	61
3.5.4. Convergencia al potencial de Morse q -deformado	63
3.5.5. Regularidad de Hölder y análisis multifractal	65
3.5.6. Potencial zeta de Hurwitz	66
3.6. Conclusiones del capítulo	67
4. El método de factorización como generador de Hamiltonianos invariantes bajo el operador \mathcal{PT}.	69
4.1. Familia de Hamiltonianos para potenciales tipo x^n con simetría \mathcal{PT} .	70
4.1.1. Simulaciones para los eigenvalores.	70
4.2. Familia de potenciales hiperbólicos.	72
4.3. Eigenvalores y límites en n elevado.	74
4.3.1. Convergencia de los potenciales $Im[v_-^{\mathcal{PT}}(n, x)]$ y $v_-(n, x)$ para valores elevados de n .	75
4.3.2. Comportamiento de los eigenvalores en función del parámetro n	76
4.3.3. Escalogramas y espectros multifractal para el potencial $v_-(n, x)$ y la parte imaginaria de su versión \mathcal{PT} simétrica.	78
4.3.4. Análisis multifractal	80
4.4. Efecto de confinamiento en una red con simetría \mathcal{PT}	81
4.4.1. Caso bidimensional	83
4.5. Conclusiones	89
Anexos	91
A. Demostración propiedad ν	91
A.1. Caso $\alpha \notin \mathbb{N}$	92
B. Representación en el plano complejo de algunos potenciales no Hermtianos y con simetría \mathcal{PT}	94
Bibliografía	98

Índice de figuras

2.1.1 Gráficos para la función $I(x; \gamma)$ con su región sombreada hasta el eje x .	17
2.2.1 Comportamiento de los potenciales deformados indicados en la vecindad de la singularidad, puede apreciarse la aparición del pozo profundo y del doble pozo de menor profundidad.	18
2.3.1 Potencial y regularidad local cerca de la singularidad.	20
2.3.2 Potencial y regularidad local lejos de la singularidad.	21
2.3.3 Función de onda para el estado base y regularidad local cerca de la singularidad.	23
2.3.4 Función de onda para el primer estado excitado y regularidad local cerca de la singularidad.	24
2.3.5 Función de onda para el segundo estado excitado y regularidad local cerca de la singularidad.	25
2.4.1 En color rojo se presentan los valores obtenidos para el valor del mínimo global y en negro la función $D(\gamma)$ para los potenciales estudiados.	27
2.4.2 Gráficos de la función $V_{min} - D(\gamma)$ se observa que conforme aumenta el valor del parámetro de deformación la diferencia es cero.	28
3.2.1 Curva de energía potencial para una molécula diatómica (verde) y potenciales de atracción-repulsión que la forman (rojo-azul).	32
3.3.1 Potencial de Kratzer con los valores indicados de a y una energía de disociación $D_e = 1$.	34
3.3.2 Compañeros supersimétricos puramente atractivos ($\beta < 1$) $V_-(r; a, D_e)$ con $D_e = 1$ y los valores indicados de a .	37
3.3.3 Compañero supersimétrico $V_-(r; a, D_e)$ para el caso $D_e = 1$ y los valores indicados de a , tal que se generen potenciales tipo interacción diatómica ($\beta > 1$).	37
3.3.4 Compañero supersimétrico $V_+(r; a, D_e)$ para el caso $D_e = 1$ y los valores indicados de a , en las cuales los potenciales de interacción presentan una profundidad de pozo reducida respecto al potencial de Kratzer original.	40
3.3.5 Región singular para el potencial de Kratzer deformado con $D_e = 1$.	42
3.3.6 Potenciales obtenidos cuando a toma valores en la región puramente atractiva.	43
3.3.7 Región singular para el potencial de Kratzer deformado.	43
3.3.8 Derivada del potencial de Kratzer deformado y región ampliada.	43
3.3.9 Constante de fuerza k_e y r_e en función de γ para el caso $a = 2$.	44
3.3.10 Estado base para el compañero supersimétrico $V_-(r; a)$ y los valores indicados de a .	45

3.4.1 Gráfica de contorno para la función $v(\gamma; r)$ que muestra la región singular en color blanco.	52
3.4.2(a) Potencial deformado $v(\gamma; r)$ con γ cerca de la región de singularidad, (b) región expandida para los mismos valores del parámetro de deformación mostrando un nuevo pozo.	53
3.4.3 Derivada para $v(\gamma; r)$, los cruces con cero en el eje r están relacionados con máximos locales. Para $\gamma \approx 0.077$ solo aparece un máximo esto implica que el segundo pozo desaparece.	54
3.4.4 Para valores pequeños del parámetro de deformación γ el desplazamiento r_e aumenta.	54
3.4.5(a) Energía de disociación en función del parámetro de deformación en el intervalo $0.01 \leq \gamma \leq 1$ tomando particiones de 0.01, la energía de disociación converge a la original $D = -2.25$	55
3.4.6 Convergencia del potencial deformado al compañero supersimétrico $v_-(r)$ relacionado con el de Morse cuando se incrementa el valor de γ	56
3.4.7 Constante de fuerza k_e en función de γ	57
3.5.1 Potenciales $V_{\pm}(x; 0)$ con eigenfunciones normalizadas y eigenvalores.	60
3.5.2 Eigenvalores para los compañeros supersimétricos (a) y esquema de escalera (b).	60
3.5.3 Estado base y los primeros dos estados excitados, se puede observar el desplazamiento producido por el parámetro m	62
3.5.4 Potencial $V_-(x; m, k = 1)$ para algunos valores de m , el mínimo se desplaza a la derecha en función del parámetro m , que también ocasiona que la profundidad del pozo varíe.	63
3.5.5 Potenciales para diferentes valores del parámetro m con $k = 1$	66
3.5.6 Espectro multifractal para los dos potenciales con diferentes valores del parámetro m con $k = 1$	66
4.1.1 Eigenvalores para los potenciales $V_{\pm}(x)$	72
4.2.1 Parte real e imaginaria de los potenciales $v_-^{\mathcal{PT}}(n, x)$ y $\mathcal{PT} v_-(n, x)$ para los valores indicados de n	73
4.3.1 Potenciales $v_-(n, x)$ e $Im[v_-^{\mathcal{PT}}(n, x)]$ para los valores indicados de n	76
4.3.2 Eigenvalores para los valores indicados del parámetro n	77
4.3.3 Espectros multifractal.	81
4.4.1 Caso unidimensional de una familia de potenciales periódicos invariantes bajo la acción del operador \mathcal{PT}	83
4.4.2 Parte imaginaria del potencial $V_-(\alpha, x)$ para los valores indicados de α	84
4.4.3 Parte imaginaria del potencial $V_-(\alpha, x)$ para los valores indicados de α	85
4.4.4 Parte real de los compañeros supersimétricos $V_{\pm}(\alpha, x)$ para los valores indicados de α	86
4.4.5 Parte imaginaria del potencial $V_-(n, x)$ para los valores indicados de n	87
4.4.6 Parte imaginaria del potencial $V_-(\alpha, x)$ para los valores indicados de α	88
4.4.7 Parte real de los compañeros supersimétricos $V_{\pm}(\alpha, x)$ para los valores indicados de α	89

B.0.1 Gráficos en el plano complejo para los potenciales de la sección 3, capítulo 4.	95
B.0.2 Gráficos en el plano complejo para los potenciales de la sección 3, capítulo 5.	96
B.0.3 Gráficos en el plano complejo para los potenciales de la sección 3, capítulo 5.	97

Índice de tablas

2.1.1 Cotas inferiores y superiores para el parámetro de deformación para los potenciales deformados indicados.	17
2.4.1 Valores de los parámetros ($\min(V_-(x))$, a , b) utilizados para calcular la función del mínimo global de algunos potenciales deformados.	26
3.3.1 Tipo de potenciales obtenidos al variar los parámetros D_e y a	36
3.3.2 Comparación de las propiedades espectroscópicas r_{min} , D_e y k_e para los potenciales $V_k(r; a, D_e)$ y los compañeros supersimétricos $V_{\mp}(r; a, D_e)$	41
3.4.1 Variación de la energía de disociación para el compañero supersimétrico $V_+(r_e, \alpha, D_e)$, para valores pequeños de α la energía de disociación incrementa respecto a la del potencial sin deformación supersimétrica.	50
3.4.2 Variación de la constante de fuerza para el compañero supersimétrico $V_+(r_e, \alpha, D_e)$, se observa que para valores de α menores a $2\sqrt{D_e}$ la constante de fuerza es de signo positivo mientras que para valores mayores es negativa.	51
3.4.3 Comparación de las propiedades espectroscópicas r_e , D_e y k_e para los potenciales $V_M(r; r_e, \alpha, D_e)$ y los compañeros supersimétricos $V_{\mp}(r; r_e, \alpha, D_e)$	51
3.5.1 Posición del pozo para $V_-(r; m, k)$ y el valor de $q(m, k)$ relacionado para algunos valores de m y k . Puede apreciarse que tomando un m fijo la energía de disociación incrementa en función del parámetro k	65
3.5.2 Exponente de Hölder $\alpha(m, k)$ y su localización X_0 . Podemos apreciar que para $m = 100$ el exponente de Hölder converge hasta dos decimales.	66
4.3.1 Primer eigenvalor para los valores indicados de n	74
4.3.2 Segundo eigenvalor para los valores indicados de n	74
4.3.3 Tercer eigenvalor para los valores indicados de n	74
4.3.4 Cuarto eigenvalor para los valores indicados de n	74
4.3.5 Quinto eigenvalor para los valores indicados de n	75
4.3.6 Dominios de la señal y particiones del intervalo utilizados para calcular los espectros multifractal.	80

Resumen.

El presente documento contiene los resultados de la investigación emanada del proyecto doctoral que lleva por título; "Supersimetría lineal aplicada a potenciales diatómicos y redes bidimensionales" y fue elaborada bajo la dirección de los doctores Haret Codratian Rosu Barbus adscrito a la división de materiales avanzados del IPICYT y José Salomé Murguía Ibarra de la facultad de ciencias de la UASLP en el período que abarca 4 años comprendidos desde agosto de 2019 a octubre de 2023 y aborda algunas aplicaciones de mecánica cuántica supersimétrica en diversas áreas de la ciencia de materiales, como lo son las moléculas diatómicas y los cristales bidimensionales.

Es un dato conocido que en el campo de la física que en el estudio clásico de la mecánica cuántica solo existen algunos potenciales con solución analítica, como lo son el oscilador armónico, el átomo de hidrógeno y el potencial de Morse. Sin embargo, si se da un tratamiento especial a esos potenciales a través del método de factorización se pueden encontrar parejas de nuevos potenciales con espectros iguales, tal método consiste en tomar una pareja de operadores cuya parte no operatorial es el negativo de la derivada logarítmica de la solución del Hamiltoniano original.

En ese sentido la meta final de este trabajo de tesis es encontrar versiones supersimétricas e isoenergéticas de potenciales comunes en el campo de física molecular y en redes periódicas que aparece en el estudio teórico de moléculas diatómicas y en cristales, respectivamente. Para complementar algunos de los resultados obtenidos se emplea la transformada wavelet continua y análisis multifractal.

El documento final se divide en 4 capítulos, el primer capítulo corresponde a la introducción y marco teórico necesario para entender los capítulos subsecuentes, el capítulo 2 sirve para justificar el uso de la transformada wavelet continua en el área de supersimetría, mientras que en el capítulo 3 se encuentran algunas aplicaciones del método supersimétrico a potenciales diatómicos como lo son el potencial de Morse y el de Kratzer y se introduce un nuevo potencial conformado por secuencias de funciones polygamma. Finalmente en el capítulo 4 se aplica el método de factorización en potenciales con simetría no Hermitiana.

Abstract.

This document presents the results of the research stemming from the doctoral project titled "Supersimetría lineal aplicada a potenciales diatómicos y redes bidimensionales" carried out under the supervision of Dr. Haret Codratian Rosu Barbus, affiliated at the Division of Advanced Materials at IPICYT, and Dr. José Salomé Murguía Ibarra from the Faculty of Sciences at UASLP. The research spanned a period of 4 years, from August 2019 to October 2023, and explores various applications of supersymmetric quantum mechanics in different areas of materials science, such as diatomic molecules and two-dimensional crystals.

It is well-known in the field of physics that in classical quantum mechanics, only a few potentials have analytical solutions, such as the harmonic oscillator, the hydrogen atom, and the Morse potential. However, by applying a special treatment to these potentials through the factorization method, pairs of new potentials with identical spectra can be found. This method involves a pair of factorization operators, the non-operator part of which is the negative of the logarithmic derivative of the original Hamiltonian's solution.

The ultimate goal of this thesis work is to find supersymmetric and isospectral versions of common potentials in the fields of molecular physics and periodic lattices. To complement some of the obtained results, the continuous wavelet transform and multifractal analysis are employed.

The final document is divided in four chapters. The first chapter provides an introduction and the necessary theoretical framework to understand the subsequent chapters. Chapter 2 justifies the use of the continuous wavelet transform in the field of supersymmetry, while Chapter 3 discusses some applications of the supersymmetric method to diatomic potentials, such as the Morse's and Kratzer's potentials and introduces a new potential composed of sequences of polygamma functions. Finally, in Chapter 4, the factorization method is applied to non-Hermitian symmetric potentials.

Capítulo 1

Introducción y marco teórico

A finales del siglo *XX* un grupo de investigadores liderados por Carl Bender encontró un Hamiltoniano especial con espectro puramente real. Este resultado no causa mucha impresión en primera instancia ya que dada la condición de Hermiticidad para todos los Hamiltonianos estudiados en mecánica cuántica estándar se tiene esa propiedad. Sin embargo, el Hamiltoniano propuesto por Bender y Orszag en 1999 contiene un potencial no Hermitiano es decir un potencial que no es invariante bajo la operación de conjugación compleja. Tal descubrimiento dio inicio a una importante rama de investigación que actualmente cuenta con comprobaciones experimentales.

Algunos años después se realizaron trabajos donde se compatibiliza la teoría de Bender con la mecánica cuántica supersimétrica mostrando que se pueden generar potenciales supersimétricos invariantes bajo los operadores de paridad y tiempo, sin embargo la rama de estudio de la simetría \mathcal{PT} se dirigió al campo de la óptica dejando de lado la búsqueda de potenciales isoenergéticos con las características de los potenciales \mathcal{PT} simétricos.

1.1. Mecánica cuántica supersimétrica de primer orden

Dada la pequeña cantidad de potenciales exactamente solubles en mecánica cuántica, como lo son el oscilador armónico, el átomo de hidrógeno y las barreras de potencial. La mecánica cuántica supersimétrica se presenta como una forma de construir nuevos potenciales exactamente solubles generados a partir de la solución de un Hamiltoniano conocido, en esta área se utiliza una función llamada superpotencial que regularmente se expresa como $w(x)$ y es una función del estado base de un potencial ya conocido.

$$w = -\frac{\psi'_0}{\psi_0} \quad (1.1.1)$$

Esta función se utiliza para definir los llamados compañeros potenciales fermiónico $V_-(x)$ y bosónico $V_+(x)$ utilizando la siguiente relación

$$V_{\pm}(x) = w^2 \pm w' \quad (1.1.2)$$

El resultado anterior también puede obtenerse si utilizamos la versión con operadores diferenciales de primer orden, primero proponemos 2 operadores de factorización \hat{a} y \hat{a}^\dagger

con el superpotencial w como termino no operatorial

$$\hat{a} = D_x + w \quad (1.1.3)$$

$$\hat{a}^\dagger = -D_x + w \quad (1.1.4)$$

al aplicar el operador conjunto $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ sobre una función arbitraria $f(x)$ obtendremos el Hamiltoniano fermiónico, que tiene $V_-(x)$ como potencial

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \hat{a} f(x) &= \hat{a}^\dagger (f'(x) + w f(x)) \\ &= -f''(x) - w' f(x) - w f'(x) + w f'(x) + w^2 f(x) \\ &= -f''(x) - w' f(x) + w^2 f(x) \\ &= [-D_x^2 + w^2 - w'] f(x) = H_-(x) f(x), \end{aligned}$$

por lo tanto $\hat{a}^\dagger \hat{a} = H_-(x)$.

El caso $\hat{a} \hat{a}^\dagger$ nos dará el Hamiltoniano compañero supersimétrico $H_+(x)$

$$\begin{aligned} \hat{a} \hat{a}^\dagger f(x) &= \hat{a} (-f'(x) + w f(x)) \\ &= -f''(x) + w' f(x) + w f'(x) - w f'(x) + w^2 f(x) \\ &= -f''(x) + w' f(x) + w^2 f(x) \\ &= [-D_x^2 + w^2 + w'] f(x) = H_+(x) f(x), \end{aligned}$$

Cabe destacar que ambos Hamiltonianos tienen solución exacta y aún más, una de las propiedades más importantes de esta pareja de Hamiltonianos $H_\pm(x)$ es que resultan ser isoenergéticos, es decir que la escalera de eigenvalores correspondientes son equivalentes (supersimetría no rota). En caso de que no lo sean hay un cambio en la energía del estado base y se dice que la supersimetría está rota. Otra característica importante de esta pareja de Hamiltonianos es que aunque la supersimetría este rota la separación entre los niveles de energía para cada compañero supersimétrico será la misma.

En el libro de Cooper [1] se encuentra una tabla donde con una compilación de los superpotenciales más comunes.

1.1.1. Deformaciones isoenergéticas

Como acabamos de mencionar, la mecánica cuántica supersimétrica nos permite generar nuevos potenciales exactamente solubles a partir de uno conocido [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9], sin embargo se puede interpretar como un límite de una teoría paramétrica [10, 11], que si bien, involucra nociones de supersimetría tiene una relación más estrecha con las ecuaciones de tipo Riccati y puede abordarse con el teorema de Darboux o con el método de Mielnik. En ambos casos vamos a generar potenciales con deformaciones en la forma del potencial. La estructura matemática de tal fenómeno esta contenida en el teorema de Darboux [12, 13, 14] que enunciamos a continuación.

Se comienza con una ecuación diferencial de orden 2 tipo Schrödinger;

$$-\psi_{xx} + U\psi = \lambda\psi \quad (1.1.5)$$

para la cuál se propone la solución $\psi_1 = \psi_1(x, \lambda_1)$ y con $\sigma_1 = \psi_{1x}\psi_1^{-1}$.
este ansatz nos permite definir la transformada Darboux como:

$$\psi_1 = \left(\frac{d}{dx} - \sigma_1 \right) \psi = \psi_x - \frac{\psi_{1x}}{\psi_1} \psi \quad (1.1.6)$$

Teorema 1 (Teorema de Darboux). *La función ψ_1 satisface la ecuación diferencial*

$$-\psi_{xx1} + U_1\psi_1 = \lambda\psi_1$$

,

$$u_1 = u - 2\sigma_{1x} = u - 2\frac{d^2}{dx^2} \ln \psi_1$$

El teorema de Darboux declara que la ecuación Sturm-Liouville (1.1.5) es covariante bajo la acción de la transformada Darboux.

A su vez, Mielnik propone en 1984 [10] una condición sobre los espectros de dos Hamiltonianos conocida como condición de isoenergía con la cual se obtiene el mismo resultado de Darboux. La idea de Mielnik es tomar una ecuación de Riccati del tipo $w^2 \pm w' = F(x)$, aquí es importante notar que la parte izquierda de la ecuación es el potencial para los Hamiltonianos compañeros supersimétricos $H_{\pm}(x)$ y si tomamos $F(x) = 0$ tendremos la ecuación de Schrödinger homogénea. Pero, ¿que sucede si no se tiene el caso homogéneo?

Consideremos los dos operadores de factorización \hat{a}, \hat{a}^\dagger

$$[\hat{a}\hat{a}^\dagger]f(x) = -f''(x) + Ff(x), \quad (1.1.7)$$

la idea de Mielnik, en este punto es construir otro Hamiltoniano con superpotencial desconocido para llevarlo a la forma de mecánica cuántica supersimétrica. Los operadores que utiliza son,

$$\begin{aligned} \hat{b} &= D_x + \beta(x) \\ \hat{b}^\dagger &= -D_x + \beta(x) \end{aligned}$$

Al utilizar estos dos operadores de manera análoga a los a 's obtendremos la siguiente pareja de Hamiltonianos

$$H'_{\pm}(x)f(x) = [-D_x^2 + \beta^2 \pm \beta']f(x) \quad (1.1.8)$$

Una vez construida el operador F lo sustituimos en (1.1.7) y obtenemos la condición de isoenergía para los Hamiltonianos $H_{\pm}(x)$ y $H'_{\pm}(x)$, que en forma operatorial;

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{b}\hat{b}^\dagger \quad (1.1.9)$$

y como ecuación de Riccati para $\beta(x)$

$$w^2 + w' = \beta^2 + \beta' \quad (1.1.10)$$

A primera vista se observa que la solución particular para la ecuación anterior es $\beta(x) = w$, mientras que la solución general es algo más compleja;

$$\beta_g(x) = \beta_p(x) + \phi(x), \quad \phi(x) \in \mathbb{R}.$$

Al sustituir $\beta_g(x)$ en la ecuación (1.1.10) y recordando que $\beta_p(x) = w$,

$$w^2 + w' = w^2(x) + 2w(x)\phi(x) + \phi^2(x) + w(x) + \phi'(x) \quad (1.1.11)$$

$$2w(x)\phi(x) + \phi^2(x) + \phi'(x) = 0 \quad (1.1.12)$$

Se realiza el cambio de variable $y = \frac{1}{\phi(x)}$, $y' = -\frac{\phi'(x)}{\phi^2(x)}$, de tal forma que la ecuación (1.1.12) se transforma a una ecuación lineal de primer orden;

$$y' - 2wy - 1 = 0 \quad (1.1.13)$$

con solución

$$y(x) = \frac{\gamma + \int_0^x \mu(x') dx'}{\mu(x)}, \quad \gamma \in \mathbb{R}, \quad (1.1.14)$$

en la ecuación anterior $\mu(x) = e^{-\int_0^x 2w(x') dx'}$ es el factor integrante de (1.1.13)

De esta manera la solución general para la ecuación de Riccati (1.1.10) será:

$$\beta(x) = w + \frac{\mu(x)}{\gamma + \int_0^x \mu(x') dx'} \quad (1.1.15)$$

De aquí en adelante tomaremos un camino diferente al de Mielnik en su artículo de 1984 [10] que da un resultado igual hasta un paso antes de llegar al potencial deformado de Mielnik, ya que el último paso elimina la existencia del compañero supersimétrico y toma solo la parte cuadrada del superpotencial.

Una ventaja del algebraico sin conmutadores es que se puede construir el Hamiltoniano deformado $H'(x)$ solo calculando la acción del operador conjunto $\hat{b}^\dagger \hat{b}$ sobre una función arbitraria $f(x)$;

$$\begin{aligned} \hat{b}^\dagger \hat{b} f(x) &= \hat{b}^\dagger [f' + wf + \phi f] \\ &= -f'' - w'f - wf' - \phi'f - \phi f' + wf' + w^2f + w\phi f + \phi f' + \phi wf + \phi^2 f \\ &= -f'' - w'f - \phi'f + w^2f + 2w\phi f + \phi^2 f \end{aligned}$$

y así

$$H'(x) = -D_x^2 - w' + w^2 - \phi' + 2w\phi + \phi^2 \quad (1.1.16)$$

con

$$\begin{aligned}\phi'(x) &= \frac{(\gamma + \int_0^x \mu dx')\mu' - \mu^2}{(\gamma + \int_0^x \mu dx')^2} = \frac{\mu'}{\gamma + \int_0^x \mu dx'} - \left(\frac{\mu}{\gamma + \int_0^x \mu dx'} \right)^2 \\ &= -2w\phi - \phi^2\end{aligned}\quad (1.1.17)$$

Por lo tanto el Hamiltoniano deformado es;

$$H'(x; \gamma) = -D_x^2 - w' + w^2 + 4w\phi + 2\phi^2 \quad (1.1.18)$$

$$H'(x) = -D_x^2 + w' + w^2 - 2w \frac{e^{-\int_0^x 2w(x') dx'}}{\gamma + \int_0^x e^{-\int_0^{x'} 2w(x'') dx''} dx'} \quad (1.1.19)$$

Antes de llegar a la forma descrita por Gandopadhyaya [3] debemos recalcar una cosa más sobre el factor integrante $\mu(x)$ y es que se puede expresar como el cuadrado de la solución para el Hamiltoniano $H_-(x)$;

$$e^{-\int_0^x 2w(x') dx'} = \left(e^{-\int_0^x w(x') dx'} \right)^2 = \psi_0^2(x). \quad (1.1.20)$$

Una parte relevante de la mecánica cuántica supersimétrica con deformación paramétrica es que cuando la constante de integración γ tiende a infinito la deformación desaparece y el Hamiltoniano deformado $H'(x)$ converge al original $H_-(x)$. Sin embargo, cuando toma valores cercanos a cero aparecen singularidades, ya que el parámetro puede tomar valores positivos y negativos. La acción del parámetro se va a tratar con más detalle en el capítulo 2, en el cuál analizamos algunos de los potenciales típicos que admiten una deformación paramétrica.

$$H'_-(x) = -D_x^2 + V_-(x) - 2 \frac{d^2}{dx^2} \ln \left[\int_0^x \psi_0^2(x') dx' + \gamma \right] \quad (1.1.21)$$

una forma extra y más sencilla de obtener el resultado es solo calculando los compañero supersimétricos en la forma estándar $V_-(x; \gamma) = w_g^2 - w'_g$;

$$V_-(x; \gamma) = (w + \phi)^2 - w' - \phi' \quad (1.1.22)$$

$$= w^2 + 2w\phi + \phi^2 - w' + 2w\phi + \phi^2 \quad (1.1.23)$$

$$= w^2 - w' - 2\phi' \quad (1.1.24)$$

Sobre las soluciones para los potenciales deformados se encuentran aplicando el operador de aniquilación \hat{b} sobre el estado base y después se iguala a cero la ecuación resultante;

$$\begin{aligned}\hat{b}\Psi_0(x) &= 0 \\ &= \Psi'_0(x) + w\Psi_0(x) + \phi\Psi_0(x) \\ \frac{\Psi'_0(x)}{\Psi_0(x)} &= -(w + \phi) \rightarrow \Psi_0(x) = e^{-\int_0^x (w+\phi) dx'}\end{aligned}$$

$$\Psi_0(x) = \frac{e^{-\int_0^x w dx'}}{\gamma + \int_0^x e^{-2\int_0^{x'} w dx''} dx'} \quad (1.1.25)$$

O en términos de la función de onda para el estado base del Hamiltoniano $H_-(x)$;

$$\Psi_0(x) = \frac{\psi_0(x)}{\gamma + \int_0^x \psi_0^2(x') dx'} \quad (1.1.26)$$

El último paso para completar la teoría es el de normalizar la función anterior, para hacerlo utilizaremos la igualdad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |A_0 \Psi_0(x)| dx = 1, \quad A_0 \in \mathbb{R}, \quad (1.1.27)$$

$$A_0^2 \int_{-l}^{\infty} \left| \frac{\psi_0(x)}{\gamma + \int_l^x \psi_0^2(x') dx'} \right| dx = 1, \quad A_0 \in \mathbb{R}, \quad (1.1.28)$$

donde l , el límite inferior de la integral, es tomado para los problemas de semilínea y $-\infty$ para problemas de línea completa y $\psi_0(x)$ es el modo zero original del potencial no pararmétrico, se asume como normalizado, es decir que se cumple la igualdad; $\int_l^{\infty} \psi_0^2(x) dx = 1$. Finalmente se realiza otro cambio de variable $X(x) = \int_l^x \psi_0^2(x') dx'$ que transforma la ecuación anterior en la siguiente:

$$\int_0^1 A_0^2 \frac{dX}{(\gamma + X)^2} = 1. \quad (1.1.29)$$

El resultado de la integral anterior nos da el valor de la constante de normalización para el estado base A_0 :

$$A_0 = \sqrt{\gamma(\gamma + 1)}. \quad (1.1.30)$$

Por lo que la eigenfunción para el estado base de un Hamiltoniano con deformación isoespectral queda como:

$$\Psi_0(x; \gamma) = \sqrt{\gamma(\gamma + 1)} \frac{e^{-\int_0^x w dx'}}{\gamma + \int_0^x e^{-2\int_0^{x'} w dx''} dx'} \quad (1.1.31)$$

Los métodos supersimétricos han mostrado una capacidad sin precedentes para generar nuevos potenciales con solución analítica, aunque regularmente se presentan para casos unidimensionales como lo son los trabajos fundamentales de Mielnik y Fernández [10, 11].

1.2. Mecánica cuántica no Hermitiana

Uno de los requerimientos fundamentales de la mecánica cuántica estándar es de la Hermiticidad de los Hamiltonianos, es decir, que el operador Hamiltoniano sea invariante bajo la conjugación compleja $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ tal propiedad asegura que el espectro sea real y por

ende, que los observables de los operadores puedan medirse hasta el límite del principio de incertidumbre de Heisenberg. Sin embargo, pueden construirse Hamiltonianos que no son invariantes bajo la conjugación compleja y que tengan un espectro definido en el campo de los números complejos. Una explicación de los eigenvalores complejos nos indica que la parte imaginaria del potencial está relacionada con pérdidas y la parte real con ganancias [15, 16, 17, 19, 20].

1.2.1. Simetría \mathcal{PT}

A finales del siglo *XX* se descubrió que la Hermiticidad de los Hamiltonianos que describen un sistema no es una condición necesaria para asegurar un espectro real.

Bender publica el estudio para un potencial $v(x) = x^2(ix)^\nu$, $\nu \geq 0$ y mediante un procedimiento numérico encuentran que el espectro es puramente real [21]. En este punto de la historia comienza de manera formal la rama de estudio de los Hamiltonianos con simetría \mathcal{PT} .

Los Hamiltonianos con simetría \mathcal{PT} deben cumplir con dos condiciones:

- $\mathcal{P}H(x) = H(-x)$
- $\mathcal{T}H(x) = H^\dagger(x)$

Si el Hamiltoniano estudiado es invariante bajo la acción del operador conjunto \mathcal{PT} se dice que el Hamiltoniano tiene simetría \mathcal{PT} , aunque no es suficiente para asegurar que el espectro es real es un indicador confiable de que tendremos un Hamiltoniano no Hermitiano [18], la simetría puede presentarse como rota cuando el espectro de eigenvalores se presenta como complejos conjugados y no rota cuando es puramente real, este es el caso del Hamiltoniano de Bender-Boettcher de 1998 [21].

1.3. Transformada wavelet continua

Para el análisis vía transformada wavelet de la función $f(t)$ se introduce una función base de forma análoga con la transformada de Fourier F_T , $g(t)$ es la función denominada wavelet madre o función de análisis, la cual mediante las operaciones de desplazamiento y escalamiento en el tiempo, generan una familia de funciones wavelet [22, 23]

$$g(t, a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} g\left(\frac{t-b}{a}\right) \quad (1.3.1)$$

Cabe mencionar que un conjunto de funciones base de wavelets son un ejemplo de un subespacio Hilbert H , denominado espacio de Lebesgue \mathbb{L}^2 , relacionado directamente con el espacio de señales de energía. Esta propiedad auxilia para que la transformada wavelet mapee de un espectro de energía a uno de frecuencias $\mathbb{L}^2 \rightarrow \mathbb{L}^2$.

Donde a es un parámetro de escalamiento y b es de desplazamiento, la función de la wavelet madre evoluciona en el tiempo, es decir $g = g(t)$, el factor $a^{-1/2}$ es una constante de normalización que implica que la norma de $\psi_{a,b}(t)$ es invariante en $\mathbb{L}^2(\mathbb{R})$

Para deducir la forma explícita de la transformada wavelet de una función $f(t) \in \mathbb{L}^2$ vamos a considerar primero su transformada de Fourier y su transformada inversa:

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt, \quad f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega. \quad (1.3.2)$$

Por otro lado, tenemos que para analizar la función $f(t)$ con wavelets debemos introducir la wavelet $g(t, a, b)$ por lo que la transformada wavelet de la función $f(t)$, es:

$$W(t, a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \bar{g}\left(\frac{t-b}{a}\right) dt, \quad (1.3.3)$$

Usando \bar{g} como el complejo conjugado de g .

Aplicando la identidad de Parseval con $F(\omega) \bar{G}\left(\frac{\omega-b}{a}\right)$, transformadas de Fourier de f, \bar{g} , se llega a una relación entre las variables de frecuencia y de tiempo:

$$\frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \bar{g}\left(\frac{t-b}{a}\right) dt = \frac{1}{2\pi\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \bar{G}\left(\frac{\omega-b}{a}\right) d\omega = W(a, b). \quad (1.3.4)$$

$$2\pi \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \bar{g}\left(\frac{t-b}{a}\right) dt = \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \bar{G}\left(\frac{\omega-b}{a}\right) d\omega. \quad (1.3.5)$$

De este resultado podemos llegar a una relación directa entre la transformada wavelet, y la transformada inversa de la wavelet:

$$W(a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \bar{g}\left(\frac{t-b}{a}\right) dt = \frac{1}{2\pi\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \bar{G}\left(\frac{\omega-b}{a}\right) d\omega. \quad (1.3.6)$$

Para encontrar la forma explícita de la transformada Fourier de la función $g\left(\frac{t-b}{a}\right)$ se procede como se indica en los próximos renglones.

$$G(\omega, a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} g\left(\frac{t-b}{a}\right) e^{-i\omega t} dt. \quad (1.3.7)$$

Para simplificar los resultados posteriores, proponemos un cambio de variables para $\left(\frac{t-b}{a}\right)$, tal que $\tau = \left(\frac{t-b}{a}\right) \Rightarrow t = a\tau + b$.

Sustituyendo en la ecuación [1.3.7](#) llegamos a:

$$G(\omega, a, b) = a \int_{-\infty}^{\infty} g(\tau) e^{-i\omega a\tau + b} d\tau = a e^{-i\omega b} \int_{-\infty}^{\infty} g(\tau) e^{-i\omega a\tau} d\tau.$$

Finalmente, reescribimos el último resultado de la forma:

$$G(\omega, a, b) = a G(a\omega) e^{-i\omega b} \quad (1.3.8)$$

Ahora sustituimos este resultado en la expresión obtenida en la ecuación [1.3.6](#), para $W(a, b)$,

$$W(a, b) = \frac{a}{2\pi\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \bar{G} e^{i\omega b} d\omega = \frac{1}{2\pi} \sqrt{a} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \bar{G} e^{i\omega b} d\omega. \quad (1.3.9)$$

1.3.1. Algunas propiedades

Sobre el factor de admisibilidad y sus consecuencias en el promedio cero de la wavelet aparecen las siguientes relaciones, la tercera parte de este teorema esta relacionada con la conservación de la energía .

Teorema 2. [24]

Sea $\psi(t)$ una función que pertenece a $\mathbb{L}^2(\mathbb{R})$, una función con valores reales tal que:

$$C_\psi = \int_0^\infty \frac{|\psi(\omega)|^2}{\omega} d\omega < \infty, \quad (1.3.10)$$

Se verifica que

$$f(t) = \frac{1}{C_\psi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty Wf(a, b) \frac{1}{\sqrt{a}} \psi\left(\frac{t-b}{a}\right) db \frac{da}{a^2}. \quad (1.3.11)$$

y

$$\int_{-\infty}^\infty |f(t)|^2 dt = \frac{1}{C_\psi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty |Wf(a, b)|^2 db \frac{da}{a^2}. \quad (1.3.12)$$

La ecuación (1.3.10) es conocida como la condición de admisibilidad, que implica que la función wavelet tenga promedio cero.

Teorema 3. Propiedades.

(i) Linealidad; dados los escalares reales α y β .

$$W_\psi([\alpha f + \beta g])(a, b) = \alpha(W_\psi f)(a, b) + \beta(W_\psi g)(a, b), \quad (1.3.13)$$

(ii) Traslación; dado el operador de translación $T_c f(t) = f(t - c)$, $c \in \mathbb{R}$.

$$(W_\psi(T_c f))(a, b) = (W_\psi f)(a, b - c), \quad (1.3.14)$$

(iii) Dilatación; sea D_c un operador de dilatación, $D_c f(t) = \frac{1}{c} f\left(\frac{t}{c}\right)$, $c > 0$.

$$(W_\psi(D_c f))(a, b) = \frac{1}{\sqrt{c}} (W_\psi f)\left(\frac{a}{c}, \frac{b}{c}\right) c > 0, \quad (1.3.15)$$

(iv) Simetría

$$(W_\psi f)(a, b) = (W_f \psi)\left(\frac{1}{a}, -\frac{b}{a}\right) a \neq 0, \quad (1.3.16)$$

(v) Relación entre derivadas¹

$$W_{g_m}^{f^{(n)}}(a, b) = \left(-\frac{1}{a}\right)^\alpha W_{g_{m+\alpha}}^{f^{(n-\alpha)}}(a, b), \quad \alpha = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (1.3.17)$$

¹Consultar la demostración en el apéndice A.

1.4. Momentos de desvanecimiento

Los momentos de desvanecimiento de una wavelet, es una propiedad bastante importante, ya que nos permite conocer la versatilidad de la wavelet para analizar funciones o señales de carácter polinomial de orden entero n .

Dada la propiedad de Lipschitz nos dice que se puede aproximar una señal o función f con un polinomio de grado ν (P_ν) en la vecindad de ν :

$$f(t) = P_\nu(t) + \epsilon_\nu(t), \quad |\epsilon_\nu(t)| \leq K|t - \nu|^\alpha \quad (1.4.1)$$

Se dice que una wavelet tiene n momentos de desvanecimiento, la cual se denotara como ψ_n , si y solo si cumple con

$$\int_{-\infty}^{\infty} t^k \psi_n(t) dt = 0, \quad 0 \leq k < n. \quad (1.4.2)$$

La ecuación anterior nos indica que una wavelet que cuenta con n momentos de desvanecimiento es ortogonal a polinomios de orden $n - 1$. Dado que $\alpha < n$ se cumple entonces que el polinomio P_ν tiene un grado máximo de $n - 1$.

Si realizamos el cambio de variable $t' = \frac{(t-u)}{s}$

$$W p_\nu(a, b) = \int_{-\infty}^{\infty} P_\nu(t) \frac{1}{\sqrt{a}} \psi\left(\frac{t-b}{a}\right) dt = 0 \quad (1.4.3)$$

Dado la propiedad de Lipschitz $f = P_\nu + \epsilon_\nu$ se obtiene que

$$W f(a, b) = W \epsilon_\nu(a, b) \quad (1.4.4)$$

1.5. Regularidad Lipschitz local y dimensión fractal

Teorema 4. (Jaffard [\[24\]](#))

Si $f \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R})$ es Lipschitz n en ν , entonces existe una constante A tal que:

$$\forall (t_0, a) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \quad |W_{a,t_0} f(x)| \leq A a^{n+\frac{1}{2}} \left(1 + \left|\frac{t_0 - \nu}{a}\right|^n\right).$$

Demo.

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} [f(t) - p_n(t)] \frac{1}{\sqrt{a}} \psi\left(\frac{t-t_0}{a}\right) dt \right| \leq \int_{-\infty}^{\infty} A |t - \nu|^n \frac{1}{\sqrt{a}} \left| \psi\left(\frac{t-t_0}{a}\right) \right| dt \quad (1.5.1)$$

tomando el cambio de variable

$$\tau \rightarrow \frac{t-t_0}{a}, \quad a d\tau = dt$$

la desigualdad [\(1.5.1\)](#) se transforma a:

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \frac{1}{\sqrt{a}} \psi\left(\frac{t-t_0}{a}\right) dt \right| \leq A a^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} |a\tau + x_0 - \nu|^n |\psi(\tau)| d\tau$$

ahora desarrollaremos la parte derecha de la desigualdad dado que en la izquierda se tiene que $\left| \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \frac{1}{\sqrt{a}} \psi\left(\frac{t-t_0}{a}\right) dt \right| = |W_{a,x_0} f(t)|$:

$$\begin{aligned} &= Aa^{1/2} \left(\int_{-\infty}^{\infty} |a\tau|^n |\psi(\tau)| d\tau + |t_0 - v|^n \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\tau)| d\tau \right) \\ &= Aa^{n+1/2} \left(\int_{-\infty}^{\infty} |\tau|^n |\psi(\tau)| d\tau + \left| \frac{t_0 - v}{a} \right|^n \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\tau)| d\tau \right) \end{aligned}$$

finalmente y dado que la función $\psi(\tau)$ es de cuadrado integrable se obtiene la relación del teorema a probar:

$$|W_{a,x_0} f(t)| \leq Aa^{n+1/2} \left(1 + \left| \frac{t_0 - v}{a} \right|^n \right).$$

Usando la definición del cono de influencia en el punto v : $|t_0 - v| \leq Ca$

Podemos reescribir la cota para la transformada de $f(t)$, $|W_{a,t_0} f(t)| \leq \dot{A}a^{n+1/2}$, $\dot{A} = A \left(1 + \left| \frac{t_0 - v}{a} \right|^n \right)$

Solo queda despejar n de la ecuación para tener una relación para el comportamiento de los exponentes [24].

$$\log |W_{a,t_0} f(t)| \leq \log A + \left(n + \frac{1}{2} \right) \log(a). \quad (1.5.2)$$

La regularidad de Hölder para una función $f(x)$ en el punto $x = x_0$ esta dada por la pendiente de la ecuación anterior [25].

$$n = \frac{\log |W_{a,t_0} f(t)|}{\log(a)} - \frac{1}{2}. \quad (1.5.3)$$

mientras que la dimensión fractal viene dada por

$$D(n) = - \frac{\log N_n(s)}{\log s} \quad (1.5.4)$$

Con N_n indica el número de intervalos de tamaño s que intersectan el conjunto S_n donde la función es Hölder continua.

Capítulo 2

Aplicaciones de la transformada wavelet continua al estudio de potenciales deformados isoespectralmente

En el preámbulo se construyo el Hamiltoniano deformado considerando el método de Gandopadhyaya [3], en este capítulo usaremos la fórmula para la función $\phi(x; \gamma)$ con la finalidad de obtener los potenciales deformados $V'(x; \gamma)$. Que como recordaremos son deformaciones isoespectrales del potencial compañero supersimétrico $V_-(x)$.

Las deformaciones isoespectrales generan una deformación extra a la generada debido a la transformación supersimétrica, por lo cuál los potenciales paramétricos se relacionan con un potencial sin deformación que regularmente son problemas clásicos en la literatura de mecánica cuántica [10, 11, 28].

2.1. Regiones singulares de los potenciales con deformación isoespectral

El Hamiltoniano deformado $H'(w; \gamma)$ para un superpotencial w dado es

$$H'(x) = -D_x^2 - w' + w^2 - 2 \frac{d}{dx} \frac{e^{-\int_0^x 2w(x') dx'}}{\gamma + \int_0^x e^{-\int_0^{x'} 2w(x'') dx''} dx'} \quad (2.1.1)$$

el Hamiltoniano obtenido contiene una función $\phi(x; \gamma)$ cuya aportación al compañero supersimétrico $H_-(x)$ desaparece en el límite cuando el parámetro de deformación tiende a infinito.

$$\begin{array}{ccc} & \xrightarrow{\text{def}} & \\ H_-(x) & & H'_-(x; \gamma) \\ & \xleftarrow{\gamma \rightarrow \pm\infty} & \end{array} \quad (2.1.2)$$

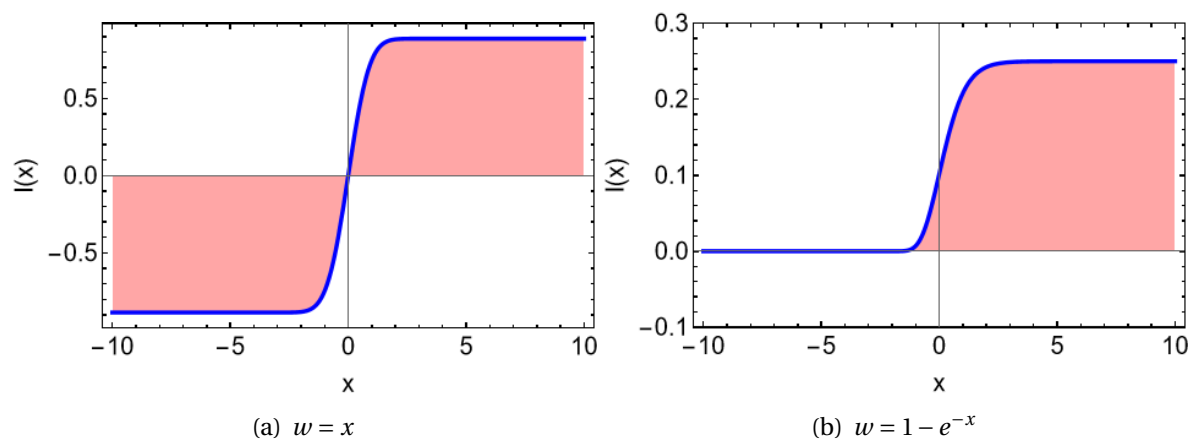
en primer instancia no esta definida de manera estricta ninguna restricción para los valores del parámetro de deformación, sin embargo y considerando que son potenciales

con aplicación y generados desde mecánica cuántica la eigenfunción ψ_0 debe estar acotada superior e inferiormente. Aunado a eso debe ser asintóticamente cero. Por lo cual la integral que aparece en el divisor $\int_0^x e^{-\int_0^{x'} 2w(x'') dx''} dx'$ de la función $\phi(x; \gamma)$ debe estar acotada para asegurar que el potencial no contiene singularidades.

Por las razones enunciadas anteriormente nos vemos en la necesidad de introducir una restricción sobre los valores del parámetro de deformación γ para evitar que tome valores negativos de la función $\int_0^x e^{-\int_0^{x'} 2w(x'') dx''} dx'$. Una manera de obtener la región singular para el potencial deformado es graficando la función de interés $I(x) = \int_0^x e^{-\int_0^{x'} 2w(x'') dx''} dx'$ y eliminando el rango de la función de los valores aceptados para el parámetro de deformación, esto nos asegura que el divisor nunca sea cero. En la figura (2.4) se presentan algunas gráficas de la función $I(x)$.

En color azul se presentan las funciones $I(x)$ de algunos superpotenciales mientras que en rojo se presenta la región cuyo rango define la magnitud de los valores prohibidos para el parámetro de deformación.

El parámetro de deformación γ no puede tomar el negativo del rango de la función $I(x)$ que están en esa región ya que el potencial tendría una singularidad del tipo $\frac{\mu}{0}$, también debemos destacar que la región no es siempre simétrica respecto al eje de las abscisas (x en este capítulo).



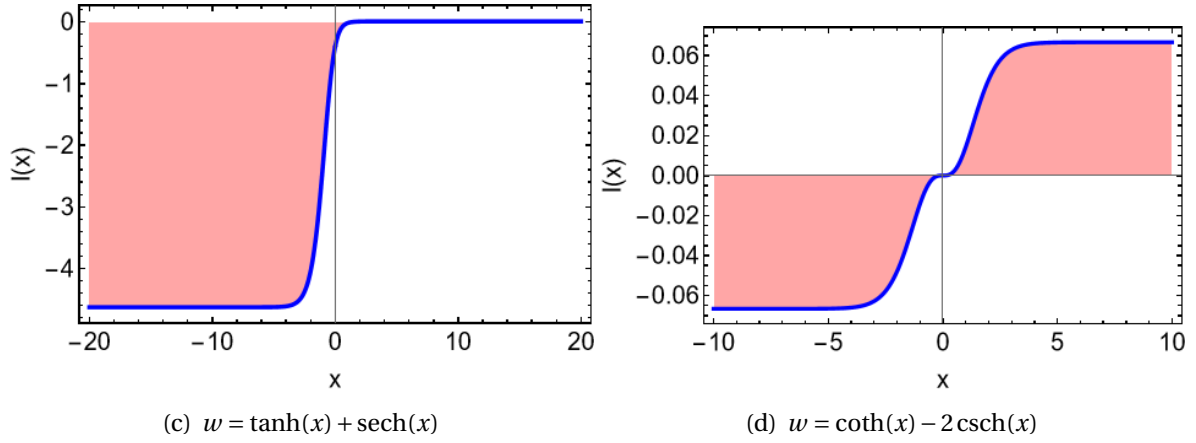


Figura 2.1.1: Gráficos para la función $I(x; \gamma)$ con su región sombreada hasta el eje x .

Para obtener potenciales no singulares el parámetro de deformación debe estar fuera de la región delimitada por el límite superior e inferior de la integral que aparece en el divisor de la función $\phi(x; \gamma)$

En la tabla 2.1.1 se muestran las cotas inferior y superior que delimitan la región prohibida para los potenciales deformados generados con los superpotenciales indicados.

$$\gamma \in \left\{ \left(-\infty, -\max \left(\int_0^x \psi_0^2(x') dx' \right) \right) \cup \left(-\min \left(\int_0^x \psi_0^2(x') dx' \right), \infty \right) \right\}, \quad (2.1.3)$$

o escrito como valores críticos;

$$\gamma \in \{(-\infty, \gamma_{c_-}) \cup (\gamma_{c_+}, \infty)\} \quad (2.1.4)$$

Potencial	$W(x)$	γ_{c_-}	γ_{c_+}
Oscilador armónico	x	$-\sqrt{\pi}/2$	$\sqrt{\pi}/2$
Morse	$1 - e^{-x}$	-0.25	0
Pöschl-Teller	$\operatorname{coth}(x) - 2\operatorname{csch}(x)$	-0.0666	0.0666
Rosen-Morse II	$3 \tanh(x) + \frac{1}{3}$	-1.114	0
Scarf II	$3 \tanh(x) + \operatorname{sech}(x)$	0	1.473
Oscilador 3D	$x - \frac{1}{x}$	-0.443	0.443

Tabla 2.1.1: Cotales inferiores y superiores para el parámetro de deformación para los potenciales deformados indicados.

2.2. Comportamiento del potencial en la vecindad de la singularidad

En la sección anterior discutimos que el potencial deformado es una función continua solo cuándo el parámetro de deformación toma valores fuera de la región singular delimitada por los valores prohibidos del parámetro de deformación γ , sin embargo el

comportamiento en la vecindad tiene características relevantes como la aparición de un pozo como se aprecia en la figura (2.4). La aparición del segundo pozo permite que el Hamiltoniano admita estados ligados para eigenestados cuyos eigenvalores están sobre el mínimo del pozo generado por la deformación isoespectral.

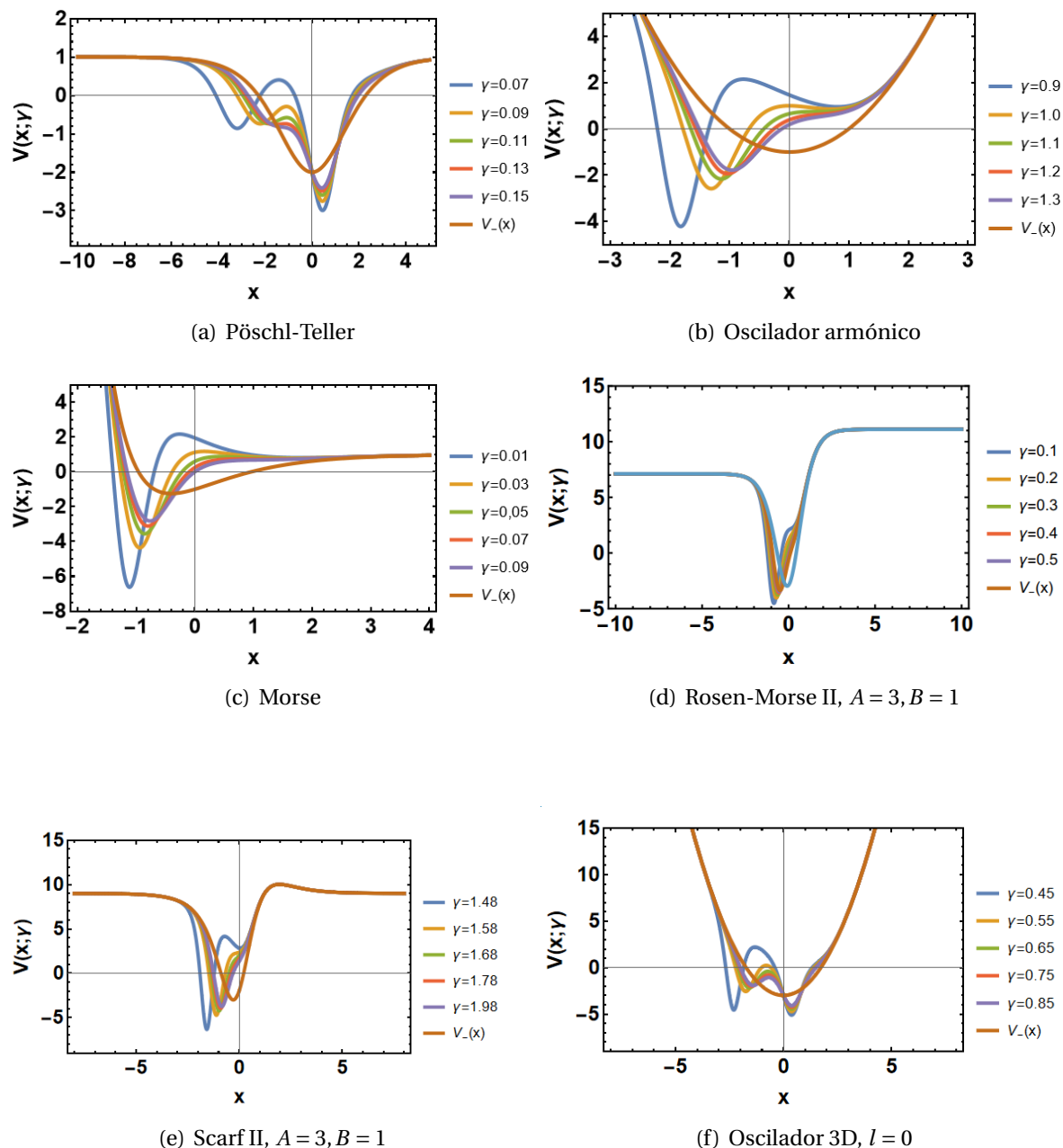


Figura 2.2.1: Comportamiento de los potenciales deformados indicados en la vecindad de la singularidad, puede apreciarse la aparición del pozo profundo y del doble pozo de menor profundidad.

Debido al comportamiento de los potenciales con deformación isoespectral como el de Pöschl Teller hiperbólico (2.4) (a) y el de Morse (2.4) (d), que trataremos con detalle en

el capítulo 4 se han utilizado en experimentos de confinamiento en algunos trabajos de física nuclear por el grupo de Chakrabarti [29]. Con este tipo de potenciales donde surge un pozo extra al potencial original surgen 2 preguntas de interés que aplican para todos los potenciales generados con el método de deformación isoespectral;

- Para que valor de γ se recupera $V_-(x)$.
- Para que valores del parámetro de deformación desaparecen el segundo pozo y los estados ligados.

2.3. Caracterización con exponentes de Hölder de la familia

$V(x; \gamma)$ y $\Psi_0(x; \gamma)$

Para responder a la pregunta obtenida en la sección anterior vamos a utilizar la técnica de módulos máximos de la transformada wavelet (WTMM) por sus siglas en inglés. El método consiste en determinar la coordenada (x_0, α) donde x_0 es la posición de la singularidad y α es el exponente de Hölder.

En los potenciales con deformación isoespectral el exponente de Hölder y su posición son funciones del parámetro de deformación γ , por lo tanto el potencial $V_-(x)$ va a tener un conjunto de exponentes característicos distinto al de los deformados, sin embargo, podemos calcular los exponentes para una familia de potenciales deformados para diferentes valores de γ y acercarnos al valor donde converge con el potencial $V_-(x)$.

Por otro lado, también nos interesa el comportamiento del potencial deformado en la vecindad de la singularidad. Específicamente el valor en el cuál desaparece el pozo generado por la deformación, este punto es importante porque cuando desaparece también lo hacen los estados ligados en el potencial estudiado. Para encontrar tal valor vamos a utilizar los escalogramas y las líneas máximas de la transformada wavelet.

2.3.1. Convergencia al potencial original

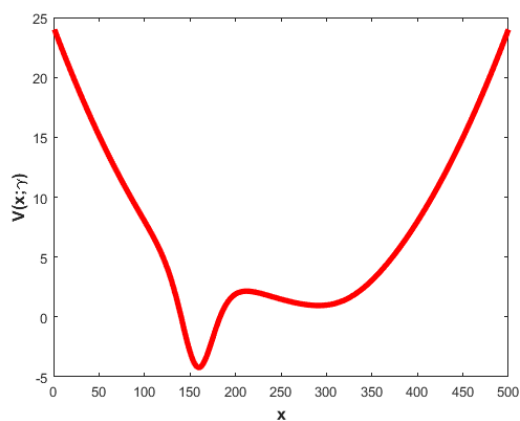
El primer problema que trataremos es el de la convergencia hacia el potencial original $V_-(x)$ partiendo del potencial de deformación $V_-(x; \gamma)$, para responder a la interrogante vamos a asumir que el potencial y las eigenfunciones son funciones continuas, dado que están fuera de la región singular y también que para algún valor de γ la contribución del potencial de deformación $\phi'(x; \gamma)$ es despreciable.

Como ya se mencionó en el preámbulo de la sección vamos a aplicar el método de los módulos máximos de la transformada wavelet, con la finalidad de encontrar el valor para γ en el cual las 2 señales $V_-(x)$ y $V_-(x; \gamma)$ tienen el mismo espectro de singularidades, es decir que tengan el mismo número de ellas y que estén ubicadas en la misma posición con el mismo exponente de Hölder.

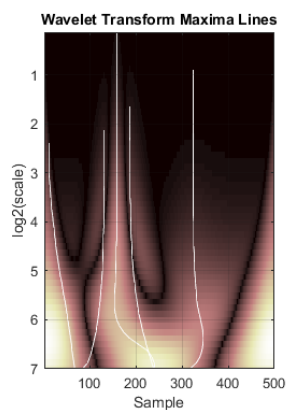
Con la finalidad de ver el comportamiento de las singularidades para el potencial deformado respecto al valor de γ vamos a revisar primero como se comportan para valores que se encuentran en la vecindad de la singularidad y después en valores alejados.

La figura (2.3.1) (a) consiste en una parábola deformada en donde cada singularidad se relaciona con un punto de inflexión, conforme aumenta el valor del parámetro de

deformación observamos que las singulares detectadas con los módulos máximos de la transformada van disminuyendo y tienden al valor de los momentos de desvanecimiento de la wavelet utilizada en el análisis (2.3.1) (b,d), lo que significa que la función se suaviza.

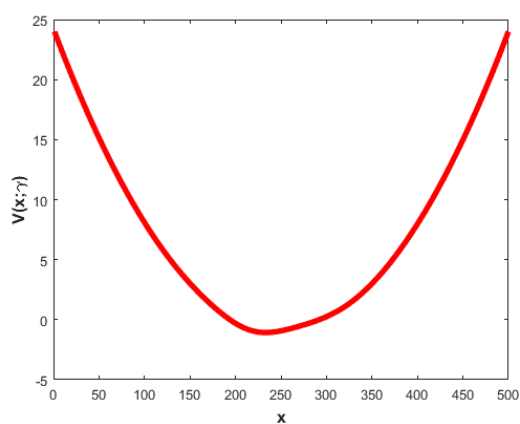


(a) $\gamma = 0.9$

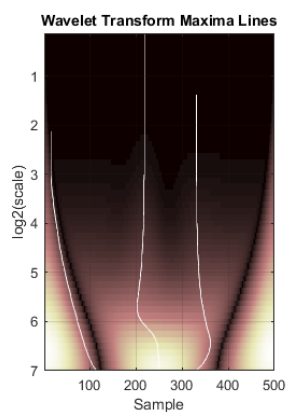


(b) $\gamma = 0.9$

	Sample	Holder Exponent
1	11	1.9994
2	131	1.5116
3	158	1.0547
4	186	1.4400
5	324	1.9235



(c) $\gamma = 5.0$



(d) $\gamma = 5.0$

	Sample	Holder Exponent
1	15	2.0000
2	218	1.8221
3	331	1.9627

Figura 2.3.1: Potencial y regularidad local cerca de la singularidad.

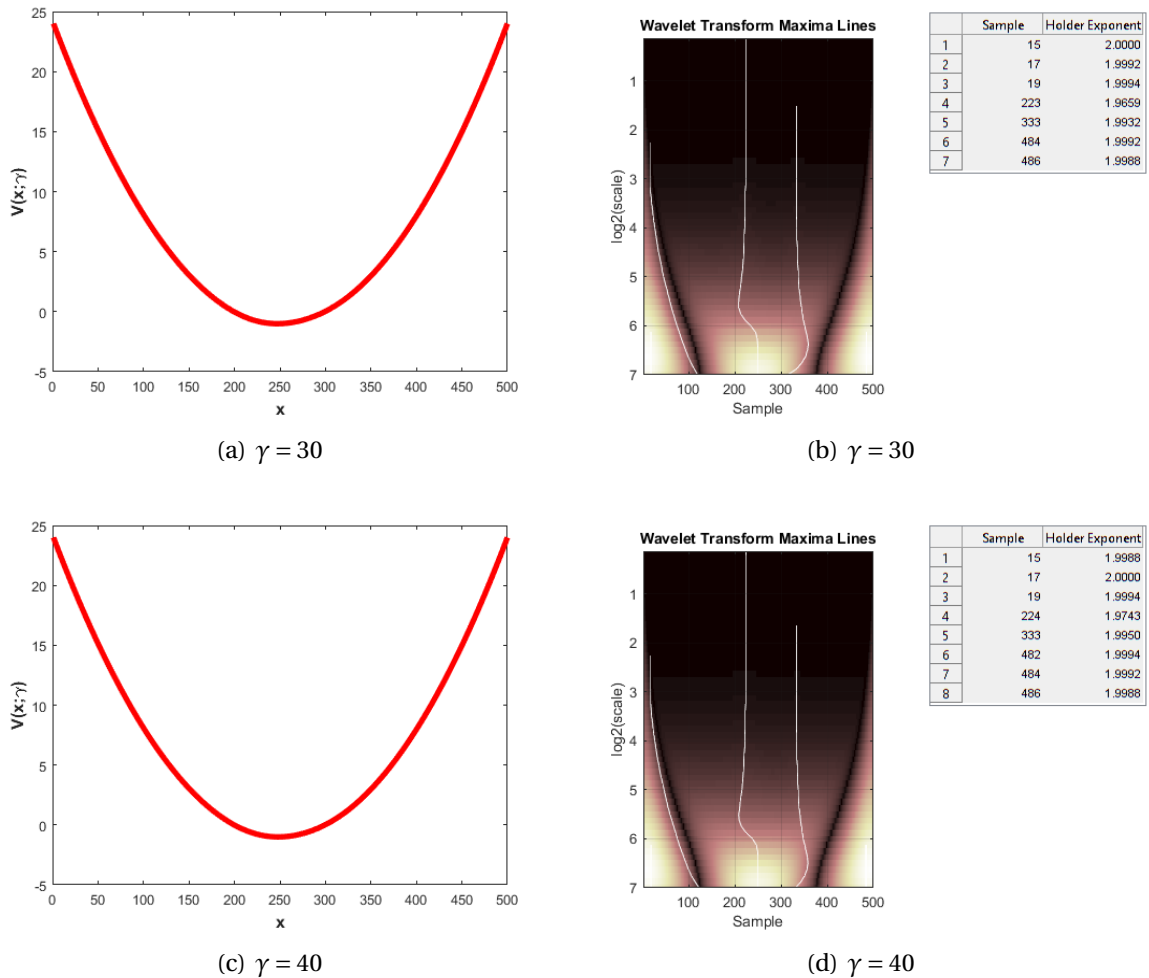


Figura 2.3.2: Potencial y regularidad local lejos de la singularidad.

2.3.2. Desvanecimiento del segundo pozo

En la figura (2.3.1) se muestra el potencial deformado para el oscilador armónico con valores cercanos a la región singular. Como ya se discutió con anterioridad se genera un segundo pozo en el potencial original $V_-(x)$ que permite la existencia de estados ligados y resonantes [29], en la parte derecha de cada potencial tenemos el escalograma generado con la wavelet sombrero mexicano y también se reporta una tabla que contiene los valores del exponente de Hölder en algunos valores de x , es importante observar que el valor del exponente tiende a 2 cuando la función es completamente regular, es decir, que no presenta singularidades como puntos de inflexión.

Es sabido que la deformación paramétrica genera un segundo pozo cuando el parámetro de deformación toma valores cercanos a los de la singularidad [3], sin embargo podemos deducir el valor aproximado para el cuál el segundo pozo desaparece, ya que la función estudiada debe presentar una singularidad menos que en el caso cuándo el pozo está presente, si bien, esto puede ser determinado igualando a cero la segunda derivada del potencial y tabulando algunos valores del parámetro de deformación de tal forma

que cuando desaparezca una pareja de intersecciones a través del eje de las ordenadas el segundo pozo ya no estará presente.

Por otro lado, tenemos que las funciones de onda también aparecen deformadas, como se presentó en el marco teórico. Tenemos que la función de onda para el estado base del Hamiltoniano deformado cumple que:

$$\Psi_0(x; \gamma) = \sqrt{\gamma(\gamma + 1)} \frac{\psi_0^2(x)}{\gamma + \int_0^x \psi_0^2(x') dx'} \quad (2.3.1)$$

donde $\psi_0(x)$ es la eigenfunción para el estado base del Hamiltoniano no deformado. Los gráficos para el estado base del Hamiltoniano deformado con distintos valores de γ cerca de la vecindad de la singularidad se muestran en la figura (2.3.2) mientras que en la (2.3.2) se muestra para valores lejanos a tal.

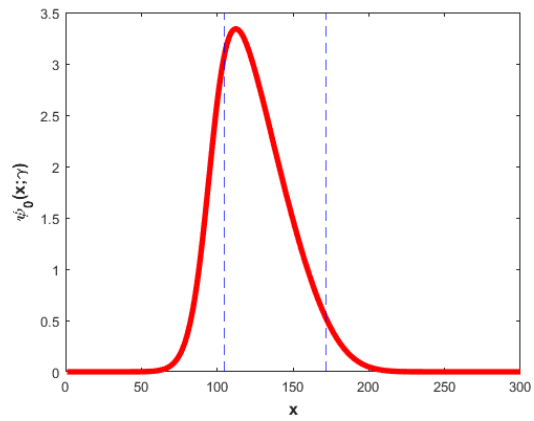
Podemos apreciar que la línea relacionada con la posición del máximo de la función de onda se desplaza al centro conforme aumenta en valor del parámetro de deformación. Lo que nos indica que de la misma manera que el comportamiento del potencial, la función de onda converge a la función del estado no deformado.

La razón fundamental por la cuál es complicado determinar el valor en el cuál desaparece el segundo pozo partiendo solo del potencial es que el cambio en la forma del potencial es muy ligero tomando un valor de γ y otro cercano. Por tal razón debemos estudiar alguna función que presente deformaciones más sensibles al valor de γ como lo son los estados excitados.

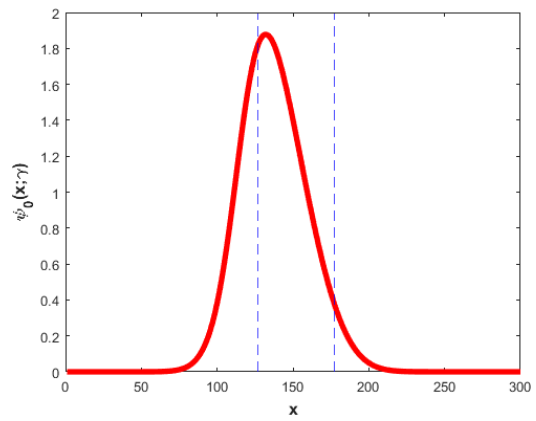
La figura (2.3.2) se muestra el primer estado excitado para el Hamiltoniano de Mielnik para diferentes valores del parámetro de deformación, podemos apreciar que cuando $\gamma = 0.9$ se tienen 4 singularidades, mientras que para $\gamma = 2$ se obtienen solo 2.

Por otro lado tenemos la figura (2.3.2) donde se muestra la eigenfunción para el segundo estado excitado. En esta eigenfunción la diferencia entre la figura (2.3.2) (a) y (2.3.2) (b) se vuelve evidente y desaparece una singularidad alrededor de $x = 300$ si continuamos observando la evolución de la eigenfunción nos percatamos que para el valor de $\gamma = 1.1$ ya solo contamos con 4 singularidades, lo que nos indica que la función se está suavizando, finalmente, en la figura (2.3.2) (d) se tiene el caso $\gamma = 2$ en esta figura tenemos 4 singularidades igual que en el caso $\gamma = 1.1$. La diferencia principal es que para $\gamma = 2$ las singularidades aparecen desplazadas en relación a las de $\gamma = 1.1$ la razón de este desplazamiento radica en que las eigenfunciones para el Hamiltoniano sin deformación están centradas respecto al eje x y cuándo se consideran valores elevados del parámetro de deformación estas recuperan su forma original, esto incluye su posición en el potencial sin deformación.

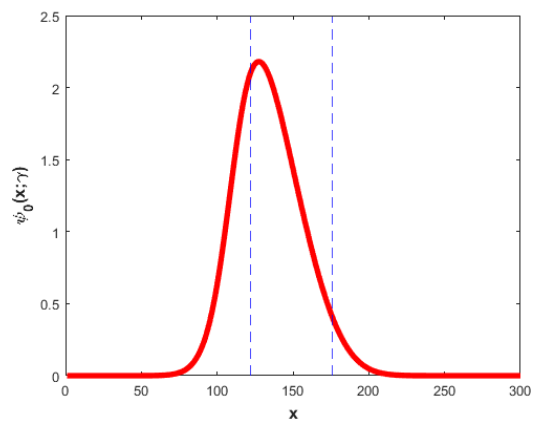
Dado que el número de singularidades permanece constante después del caso $\gamma = 1.1$ podemos deducir que el segundo pozo desaparece en el intervalo $1 < \gamma < 1.1$.



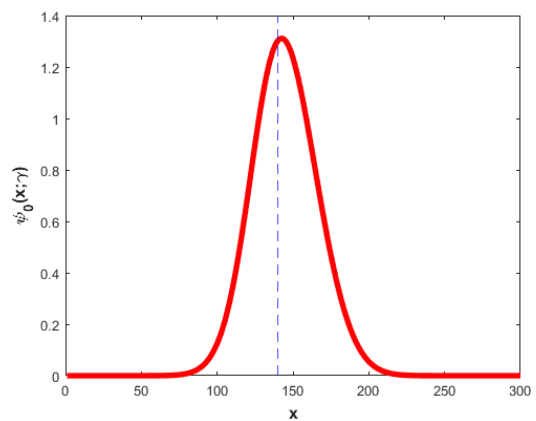
(a) $\gamma = 0.9$



(b) $\gamma = 1.0$

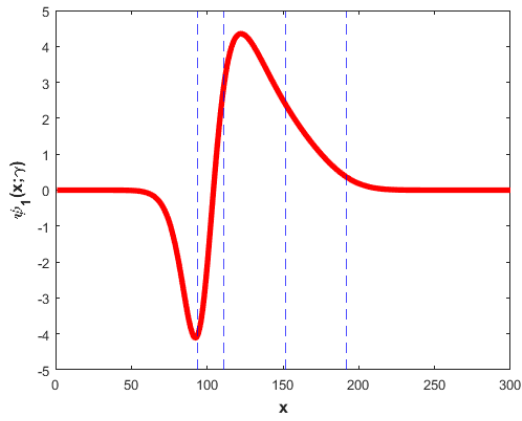


(c) $\gamma = 1.1$

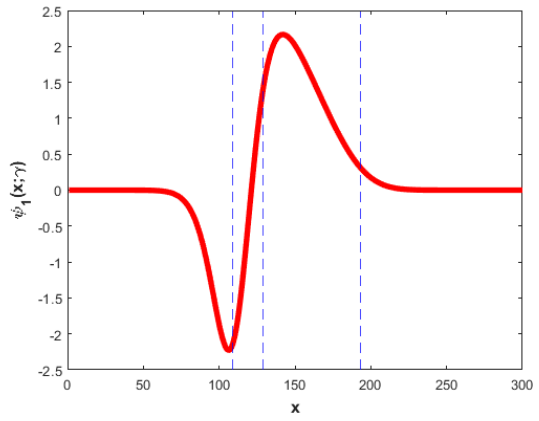


(d) $\gamma = 2.0$

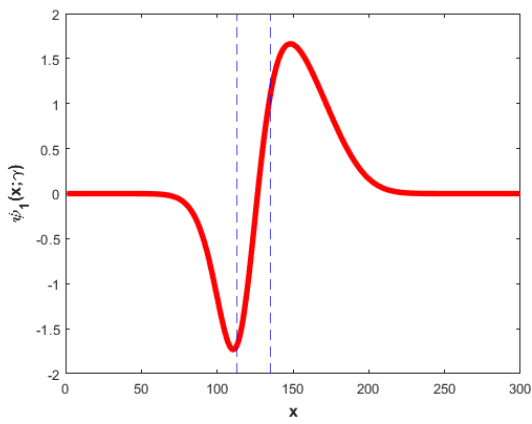
Figura 2.3.3: Función de onda para el estado base y regularidad local cerca de la singularidad.



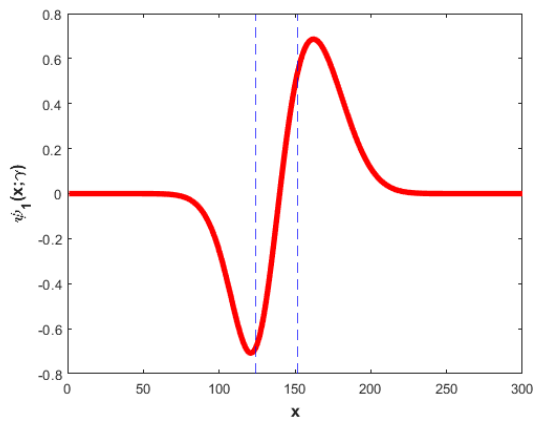
(a) $\gamma = 0.9$



(b) $\gamma = 1.0$



(c) $\gamma = 1.1$



(d) $\gamma = 2.0$

Figura 2.3.4: Función de onda para el primer estado excitado y regularidad local cerca de la singularidad.

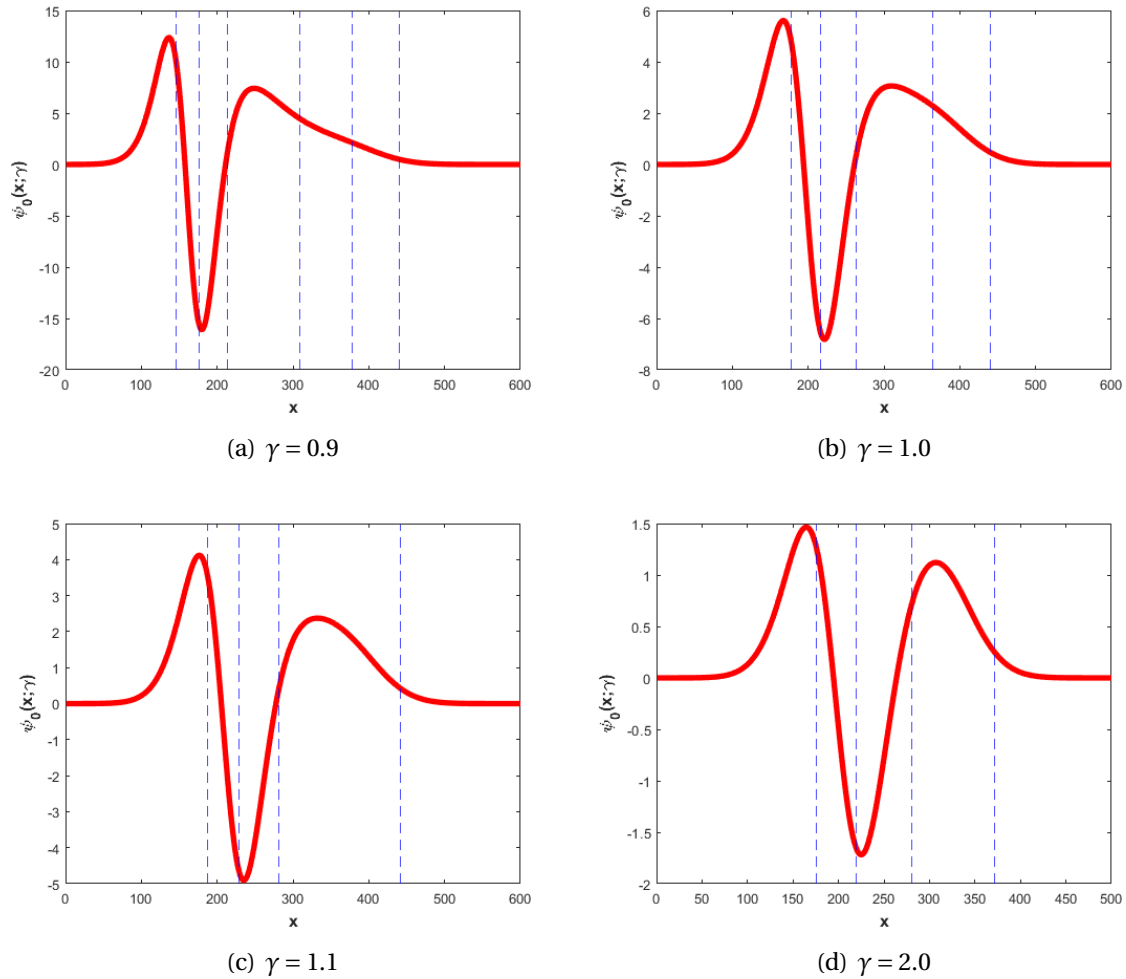


Figura 2.3.5: Función de onda para el segundo estado excitado y regularidad local cerca de la singularidad.

Se puede apreciar que el comportamiento del mínimo global es similar en todos los casos estudiados razón por la cuál buscamos una una función que describa el comportamiento. Tal función nos ayudará a obtener un valor en el cuál el potencial deformado $V_-(x; \gamma)$ converge al potencial original $V_-(x)$. La idea es obtener el valor de los mínimos para algunos valores del parámetro de deformación y después ajustarlos a una función, sin embargo las raíces de la ecuación $\frac{d}{dx} V_-(x; \gamma) = 0$ que nos dan la posición del mínimo no se pueden encontrar analíticamente por lo cuál recurrimos al método gráfico, que consiste en calcular la derivada y evaluarla en algunos valores de γ para después proceder a localizar los cruces con el eje de abscisas. Finalmente sustituimos los valores obtenidos en el potencial deformado $V_-(x; \gamma)$ para obtener el mínimo global para el γ correspondiente.

La ecuación (2.3.2) corresponde a la derivada del potencial general, al igualarla a cero puede notarse que no es posible calcular las raíces correspondientes en función del parámetro de deformación.

$$V'_-(x; \gamma) = V'_-(x) - 2 \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{e^{-2 \int_0^x w dx'}}{\gamma + \int_0^x e^{-2 \int_0^{x'} w dx''} dx'} \right) = 0. \quad (2.3.2)$$

El intervalo utilizado para el análisis fue; $\gamma_{c_+} + 0.01 \leq \gamma \leq 15$, el valor mínimo nos asegura que estaremos fuera de la región singular y el máximo una convergencia aproximada al valor del mínimo del potencial $V_-(x)$, la partición para el intervalo fue:

$$\gamma_{n+1} = \gamma_{c_+} + 0.01 + 0.1n. \quad (2.3.3)$$

2.4. Resultados y discusión

Si bien, existen métodos de procesamiento de señales tales como los que aplican la transformada wavelet continua que han mostrado una gran eficiencia comparando la similitud entre dos señales [60] y que podrían aplicarse para cada potencial deformado analizado en este estudio consideramos importante indagar sobre la dinámica de la convergencia, es decir, en como se comporta el mínimo global para un determinado valor del parámetro de deformación.

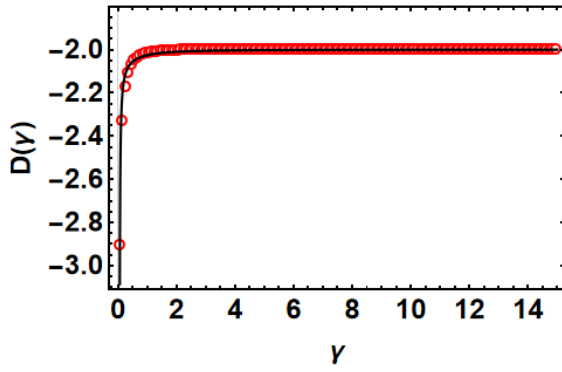
Una vez que obtuvimos los valores para los mínimos ajustamos los puntos para obtener una función que aproxime el comportamiento, el resultado del ajuste nos arroja que la profundidad del pozo depende de 3 parámetros constantes para cada potencial, uno de los parámetros es el mínimo global de $V_-(x)$. El comportamiento asintótico de la función $D(\gamma)$ nos indica que cuando tiende a infinito se recupera la profundidad del potencial original. El dominio de la función esta dado por los valores positivos del parámetro γ que están fuera de la región singular.

$$D(\gamma) = \min(V_-(x)) + a \tan\left(\frac{1}{(\gamma + b)^2}\right), \quad \forall \gamma > \gamma_{c_+}. \quad (2.4.1)$$

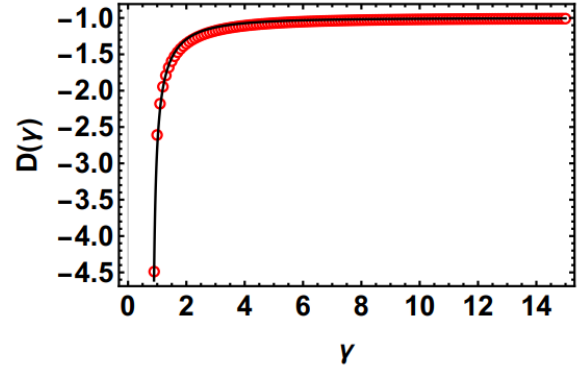
En la tabla 2.4.1 se muestran los valores obtenidos para los parámetros de la función (2.4.1) para cada uno de los potenciales analizados y en la figura (2.4) los gráficos del mínimo global vs la función $D(\gamma)$.

Potencial	$W(x)$	$\min(V_-(x))$	a	b
Oscilador armónico	x	-1	-1.15	0
Morse	$1 - e^{-x}$	-1.2	-0.72	0.83
Pöschl-Teller	$\coth(x) - 2 \operatorname{csch}(x)$	-2	-0.075	0.75
Rosen-Morse II	$3 \tanh(x) + \frac{1}{3}$	-2.97	-0.45	0.75
Scarf II	$3 \tanh(x) + \operatorname{sech}(x)$	-3.01	-0.85	-0.6
Oscilador 3D	$x - \frac{1}{x}$	-3	-2.8	0.75

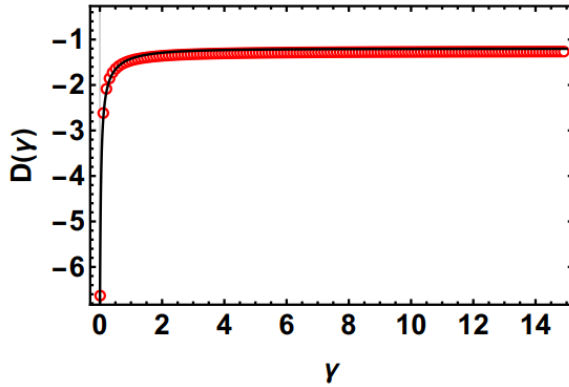
Tabla 2.4.1: Valores de los parámetros ($\min(V_-(x))$, a , b) utilizados para calcular la función del mínimo global de algunos potenciales deformados.



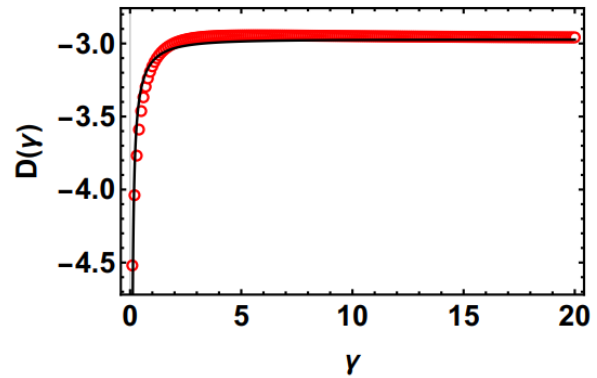
(a) Pöschl-Teller



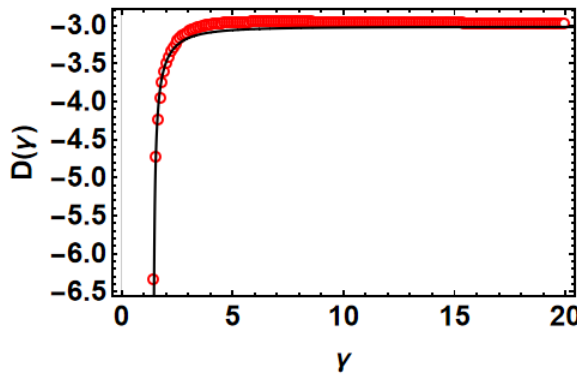
(b) Oscilador armónico



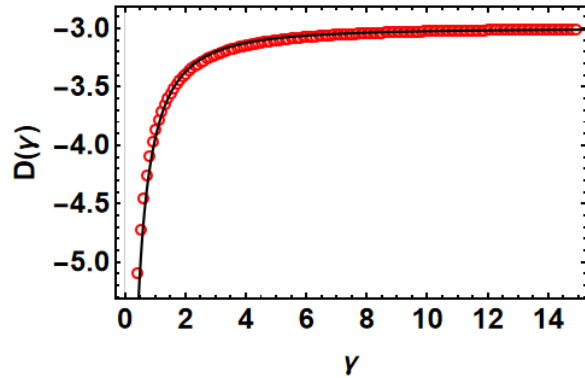
(c) Morse



(d) Rosen-Morse II, $A = 3, B = 1$



(e) Scarf II, $A = 3, B = 1$



(f) Oscilador 3d, $l = 0$

Figura 2.4.1: En color rojo se presentan los valores obtenidos para el valor del mínimo global y en negro la función $D(\gamma)$ para los potenciales estudiados.

Para validar la fórmula obtenida despejamos la función $a \tan\left(\frac{1}{(\gamma+b)^2}\right)$ y analizamos su comportamiento, el cual debe ir a cero conforme el parámetro de deformación toma valores elevados. En la figura (2.4) se muestra la representación gráfica para los potenciales indicados y en ella se puede apreciar que las gráficas tienden a cero. Esto nos indica que la función $D(\gamma)$ es un buen modelo para calcular la profundidad del pozo principal generado

con la deformación paramétrica ya que en el límite $\gamma \rightarrow \infty$ el potencial deformado converge al compañero $V_-(x)$ y por ende el valor del mínimo también.

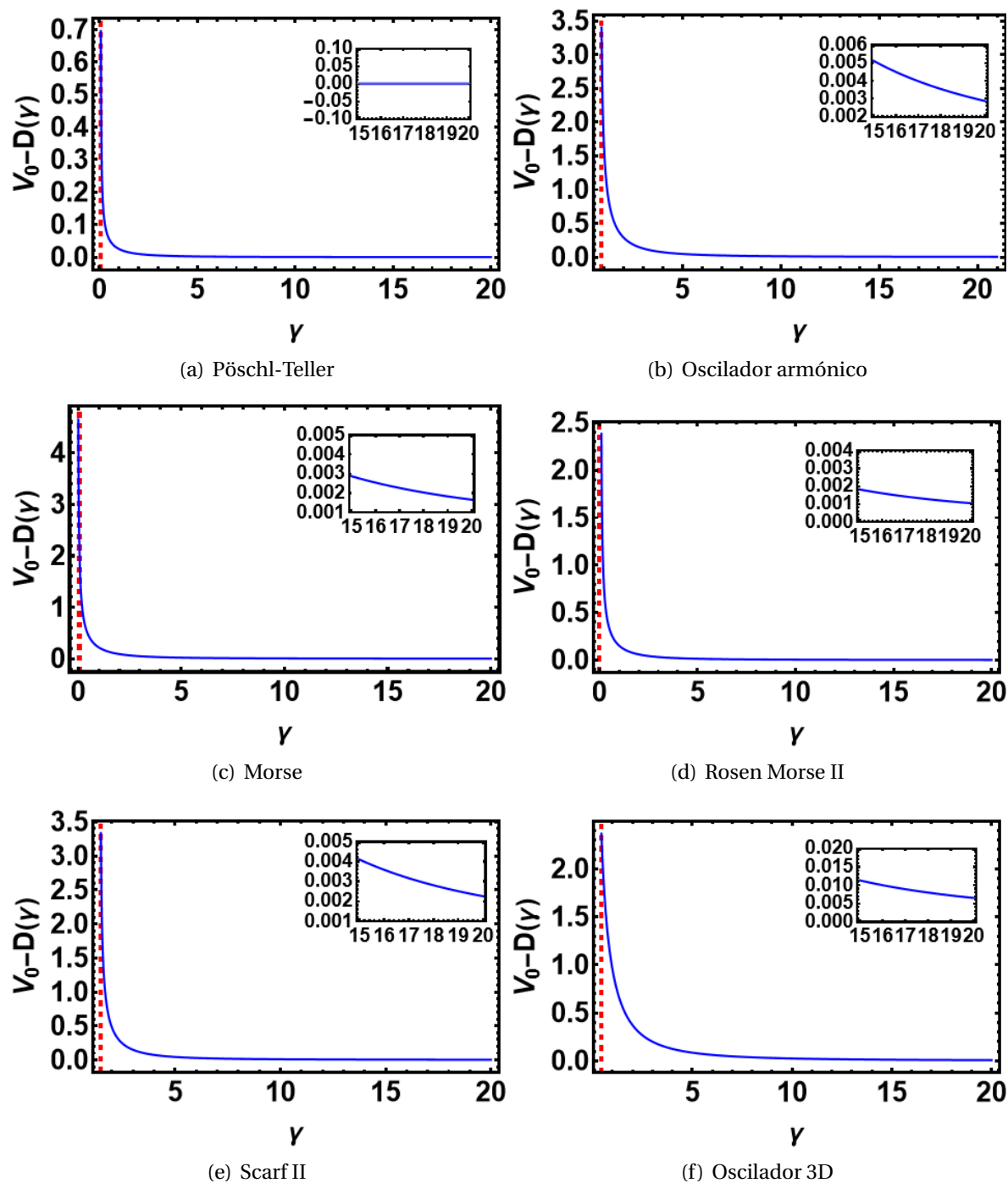


Figura 2.4.2: Gráficos de la función $V_{min} - D(\gamma)$ se observa que conforme aumenta el valor del parámetro de deformación la diferencia es cero.

Una de las posibles aplicaciones de la fórmula presentada es en el área de estudio de estados resonantes generados con potenciales deformados isoenergéticamente ya que

podemos localizar el punto en el cual el potencial no presenta deformaciones y por lo tanto se obtienen estados no deformados ni desplazados debido a la acción del pozo profundo.

2.5. Conclusiones

En este capítulo se muestra una aplicación de la transformada wavelet continua a potenciales con deformaciones isoespectrales, en particular del uso de los módulos máximos de la transformada wavelet. Se obtienen resultados que nos hablan acerca de la regularidad de una función, en nuestro caso del potencial deformado y de las eigenfunciones asociadas al Hamiltoniano deformado paramétricamente.

El método se aplicó con la finalidad de encontrar el valor aproximado para el parámetro de deformación en el cual se recupera la forma del potencial no deformado y también para encontrar el valor en el cuál desaparece el segundo pozo, es claro que la eficiencia del método para encontrar la similitud entre dos funciones es más clara y se encuentra de manera más rápida que localizar el valor para el cuál desaparece el pozo.

Para el problema ejemplificado (oscilador armónico cuántico) encontramos que el segundo pozo desaparece cuando el parámetro de deformación se encuentra en el dominio $1 < \gamma < 1.1$, para encontrarlo aplicamos el método de módulos máximos al primer y segundo estado excitado ya que la forma de las eigenfunciones tiene una variación mayor para valores pequeños del parámetro y esto nos permite dar la distribución de singularidades de una manera más precisa.

Finalmente y con la meta de obtener una expresión analítica para el comportamiento del mínimo global se presenta una fórmula que nos permite calcular la profundidad del pozo profundo generado por una deformación isoespectral, encontramos que la profundidad del pozo generado depende de la del potencial original y de dos parámetros (a, b) que son constantes para cada potencial.

La fórmula obtenida fue aplicada a 6 de los potenciales más comunes en el área de mecánica cuántica supersimétrica para los cuáles se dan los valores críticos para el parámetro de deformación y de los parámetros a y b obteniendo ajustes con un margen de error admisible en la región cercana a la singularidad y exacto en la región alejada por lo que es confiable para obtener el valor en el cuál el potencial deformado converge al compañero supersimétrico original.

Capítulo 3

Mecánica cuántica supersimétrica en el caso de los potenciales moleculares diatómicos

3.1. Introducción

El objetivo principal del capítulo es encontrar nuevos potenciales exactamente solubles a partir de algunos conocidos, todo esto en el marco de la mecánica cuántica supersimétrica. Los potenciales de interés son algunos de los modelos clásicos utilizados en el estudio de moléculas diatómicas como lo son el de Kratzer [26, 27] y Morse [28]. Mostraremos la relación existente entre el parámetro de deformación que aparece al realizar una deformación isoespectral [29, 30] o supersimétrica [31] con algunos parámetros espectroscópicos como la energía de disociación D_e , la distancia internuclear r_e , la constante de fuerza k_e y la longitud de enlace crítica r_c . También construiremos un nuevo potencial con el método supersimétrico utilizando la función especial polygama y mostramos su convergencia al modelo q deformado de Setare y Hatami [32] en un límite establecido.

Sobre este nuevo potencial y dado que las funciones utilizadas para generarlo son equivalentes a la función zeta de Hurwitz, finalmente se obtiene un potencial que puede escribirse en la forma de tales funciones. Recientemente se ha estudiado la relación de cierto potencial generado con supersimetría y los ceros de la función zeta de Riemann [33, 34] por lo que nuestro resultado entraría en la línea de investigación de Hamiltonianos con simetría xp en la cuál se relacionan funciones especiales y mecánica cuántica supersimétrica.

3.2. Características de un potencial de interacción diatómico

Para los potenciales utilizados en este capítulo tomaremos la definición de Pauling [35] de 1960 sobre el enlace químico; "*se dice que existe un enlace químico entre dos átomos o un grupo de átomos en el caso en el que las fuerzas que actúan sobre estos son tales que*

permiten la formación de un agregado con la estabilidad suficiente para ser considerado una especie molecular independiente."

En la literatura moderna existen una amplia cantidad de potenciales de interacción en todas las ramas de la física. En el campo de moléculas diatómicas no es la excepción, sin embargo, dada la naturaleza de las partículas involucradas en la formación de enlaces los potenciales utilizados deben de cumplir con algunas condiciones que nos permitirán evitar casos en los cuáles el sistema sea inestable. Estas condiciones, mencionadas por algunos autores clásicos como Lippincot y Frost [36, 37] fueron sintetizadas en un artículo tipo revisión publicado por Varshni a mediados del siglo pasado [38] y son las siguientes:

Condiciones de admisibilidad para potenciales moleculares según Varshni [38].

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} V(r) &= cte. \\ \left. \frac{dV(r)}{dr} \right|_{r=r_e} &= 0 \\ V(r)|_{r=0} &\rightarrow \infty \end{aligned}$$

La primera condición se utiliza para definir lo que se conoce como energía de disociación D_e que es la energía que se tiene que suministrar a un enlace para romperlo y se relaciona con la primera condición a través de una diferencia:

$$D_e = \lim_{r \rightarrow \infty} V(r) - V(r_e) \quad (3.2.1)$$

donde r_e es la distancia internuclear de equilibrio también conocida como longitud de enlace. Esta longitud es el valor en el eje r en el cuál se presenta el mínimo del potencial de interacción $V(r)$ (condición 2). La energía de disociación nos indica que para romper un enlace de una molécula diatómica se necesita una energía finita.

La condición de admisibilidad 3 nos asegura que los átomos que conforman la molécula diatómica no pueden traslaparse, nos indica que la distancia internuclear no puede ser cero ya que se obtendría el caso con una fuerza de repulsión infinita $V(r)|_{r=0} \rightarrow \infty$.

Algunos de los potenciales que cumplen los criterios, ordenados cronológicamente son los siguientes [39, 40, 41, 26, 27, 28, 38, 43, 44, 37, 45, 46]:

- Mie (1903)
- Kratzer (1920)
- Lennard-Jones (1924-1931)
- Fues (1926)
- Morse (1929)
- Rosen-Morse (1932)
- Kihara (1953)
- Frost (1954)

- Varshni (1958)
- Tietz (1963)
- Wang (2019)

La forma típica de estos potenciales puede observarse en la figura (3.2), en la cuál se aprecia que el potencial dado en color verde se forma sumando un potencial repulsivo r^{-2} con un potencial atractivo $-r^{-1}$. En la figura también se muestran algunos parámetros importantes en el estudio de este tipo de sistemas, como lo son la energía de disociación D_e , la distancia internuclear de equilibrio (longitud de enlace en equilibrio) r_e y la distancia de cruce r_c .

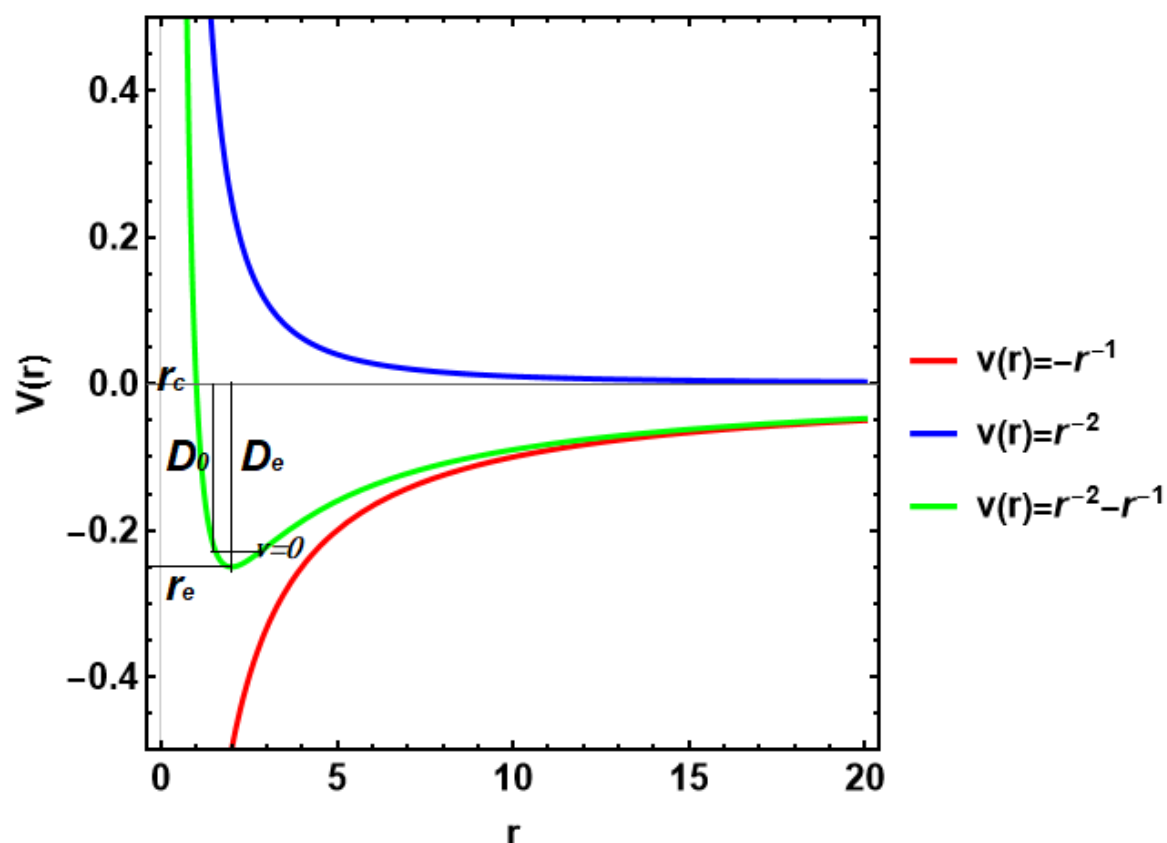


Figura 3.2.1: Curva de energía potencial para una molécula diatómica (verde) y potenciales de atracción-repulsión que la forman (rojo-azul).

Una vez que tenemos un potencial apto para estudiar interacciones diatómicas, es decir, que cumple con las condiciones antes mencionadas podemos calcular algunas propiedades espectroscópicas del potencial como la constante de fuerza del enlace. Que se define como la segunda derivada del potencial evaluada en el mínimo [38, 40].

$$\left. \frac{d^2}{dr^2} v(r) \right|_{r=r_e} = 4\pi^2 c^2 \mu \omega_e^2 = k_e \quad (3.2.2)$$

La relación anterior es obtenida al realizar una expansión en series de Taylor alrededor del mínimo, si se trunca en segundo orden lo que obtenemos es una parábola que puede considerarse una aproximación del potencial armónico para los niveles más bajos.

Cabe destacar que existe un potencial anterior a todos los enumerados anteriormente y es el potencial n, m de Mie [41] (3.2.3) que data del año 1903 ampliamente utilizado en el área de scattering a través del caso especial $n = 1, m = 2$ conocido como potencial de Lenard-Jones [42]

$$V_M(r; \sigma) = \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^m \right] \quad (3.2.3)$$

en el cuál el parámetro σ hace referencia al tamaño de la partícula y r da la distancia entre las dos partículas involucradas en la colisión.

Aunado a eso, la forma funcional del potencial de Kratzer-Fues puede obtenerse como un caso especial del Potencial de Mie cuándo $n = 1, m = 2$.

3.3. Potencial de Kratzer

Otro de los potenciales utilizados para modelar la interacción inter atómica en moléculas diatómicas es el potencial de Kratzer [47, 48, 49] que en su primera versión data de 1920 y en la versión cuántica de 1926 (Kratzer-Fues), sobre este último es importante recalcar que aparece 3 años antes que el potencial de Morse publicado en el año de 1929 y en el mismo año que la publicación de Schrödinger [50].

La forma estándar del potencial de Kratzer-Fues depende de 2 parámetros reales definidos positivos

$$V_k(r; a, D_e) = -2D_e \left(\frac{a}{r} - \frac{a^2}{2r^2} \right) \quad (3.3.1)$$

donde a es la longitud de enlace (r_e en el potencial de Morse) y D_e es la energía de disociación.

Si se compara con el potencial de Morse nos damos cuenta que existe una relación entre ambos potenciales si se realiza el cambio $r_K = e^{\alpha(r_M)}$, dónde r_K es la coordenada radial en el potencial de Kratzer y r_M en el de Morse y haciendo $a = e^{\alpha r_e}$

$$V_M(r) = -2D_e \left(\frac{e^{\alpha r_e}}{e^{\alpha r}} - \frac{e^{2\alpha r_e}}{2e^{2\alpha r}} \right) \quad (3.3.2)$$

En la figura (3.3) se muestra un conjunto de potenciales tipo Kratzer con longitudes de enlace distintas y una energía de disociación fija. Se puede apreciar que el parámetro a solo desplaza el mínimo del potencial hasta su propio valor (condición de Varshni) y la energía de disociación siempre permanece constante.

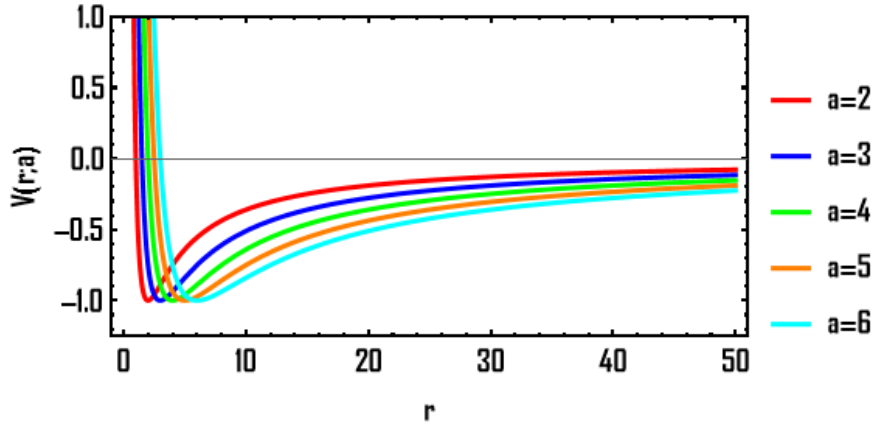


Figura 3.3.1: Potencial de Kratzer con los valores indicados de a y una energía de disociación $D_e = 1$.

En afán de corroborar que los mínimos del potencial de Kratzer aparecen en $r = a$ vamos a derivar el potencial e igualarlo a cero

$$V'(r; a, D_e) = 2D_e a \left(\frac{1}{r^2} - \frac{a}{r^3} \right) = 0 \quad (3.3.3)$$

si multiplicamos toda la ecuación por el factor r^3 ,

$$2D_e a (r - a) = 0 \quad (3.3.4)$$

cuya solución es $r = a$, y representa la posición del mínimo en el potencial.

Para obtener el valor del mínimo, es decir, la energía de disociación D_e se sustituye el valor de $r = a$ en el potencial:

$$V_k(r; a, D_e)|_{r=a} = -2D_e \left(\frac{a}{a} - \frac{a^2}{2a^2} \right) = -D_e \quad (3.3.5)$$

Otra distancia importante en el estudio de sistemas diatómicos es la distancia de cruce r_c , que nos da información sobre la estabilidad de la molécula, ya que al ser considerado un modelo de esferas rígidas existe un límite de compresibilidad para el enlace y viene dado por el valor de la distancia internuclear en la cuál el potencial es cero [51]. Este parámetro nos dice el valor longitud mínima del enlace, o bien, da información de la distancia más corta a la que pueden estar los átomos que constituyen la molécula.

$$-2D_e \left(\frac{a}{r_c} - \frac{a^2}{2r_c^2} \right) = 0 \quad (3.3.6)$$

$$-2D_e a \left(r_c - \frac{a}{2} \right) = 0 \quad (3.3.7)$$

la solución de la ecuación anterior contiene solo la raíz $r_c = \frac{a}{2}$

Para finalizar el cálculo de las constantes espectroscópicas de nuestro interés vamos a deducir la fórmula para la constante de fuerza k_e . Se obtiene al evaluar la segunda derivada del potencial en el mínimo

$$k_e = V''(r; a, D_e)|_{r=a} = 2D_e a \left(-\frac{2}{r^3} + \frac{3a}{r^4} \right) \Big|_{r=a} = \frac{2D_e}{a^2}. \quad (3.3.8)$$

3.3.1. Compañeros supersimétricos

En esta sección utilizaremos los operadores de factorización para generar los compañeros supersimétricos del potencial Kratzer $V_{\pm}(r; a, D_e)$ con la finalidad de encontrar una primera versión deformada del mismo y posteriormente poder calcular la familia de deformaciones paramétricas.

Como ya se trató en secciones anteriores para encontrar los compañeros supersimétricos asociados al un potencial, en este caso el de Kratzer vamos a proponer un superpotencial radial dependiente del parámetro a

$$w(r; a, D_e) = \sqrt{D_e} \left(\frac{r-a}{r} \right) \quad (3.3.9)$$

por lo que el compañero supersimétrico $V_-(r; a, D_e) = w^2 - w'$ es

$$V_-(r; a, D_e) = -2D_e \left(\frac{a}{r} - \frac{a^2}{2r^2} \right) - \frac{a\sqrt{D_e}}{r^2} + D_e. \quad (3.3.10)$$

Generalmente se desprecia el término escalar D_e que aparece sumando para hacer que en el límite cuándo $r \rightarrow \infty$ el potencial sea cero.

El potencial (3.3.10) es un potencial tipo Kratzer más un término extra que actúa como una barrera anticentrifugal y cuya acción es incrementar el ancho del pozo

$$V_-(r; a, D_e) = V_k - \frac{a\sqrt{D_e}}{r^2}. \quad (3.3.11)$$

Es un dato conocido que los potenciales utilizados en física molecular tienen una parte atractiva, modelada por funciones del tipo $-r^{-m}$ y repulsivas de tipo r^{-n} , para que el potencial de Kratzer supersimétrico sea considerado un potencial que cumple con las condiciones de potencial diatómico los parámetros de longitud de enlace y energía de disociación deben cumplir con la relación obtenida en el siguiente cálculo.

Empezaremos con el potencial $V_-(r; a, D_e)$ en su forma extendida y sin desplazamiento:

$$V_-(r; a, D_e) = -2D_e \left(\frac{a}{r} - \frac{a^2}{2r^2} \right) - \frac{a\sqrt{D_e}}{r^2} \quad (3.3.12)$$

al factorizar la ecuación anterior tomando coeficientes

$$V_-(r; a, D_e) = -2\frac{D_e a}{r} + \frac{1}{r^2} \left(a^2 D_e - a\sqrt{D_e} \right) \quad (3.3.13)$$

con el cambio de variable $a\sqrt{D_e} = \beta$ obtenemos

$$V_-(r; a, D_e) = -2\frac{\beta\sqrt{D_e}}{r} + \frac{1}{r^2} (\beta^2 - \beta) \quad (3.3.14)$$

revisando la parte derecha de la ecuación anterior nos percatamos de la existencia de 2 casos cruciales para el modelo supersimétrico del potencial de Kratzer, que nos permitirá

sentar las restricciones adecuadas que nos aseguren obtener potenciales de utilidad en el área de estudio.

Cuándo $\beta^2 - \beta = 0$ obtenemos que el potencial $V_-(r; a, D_e)$ es de tipo atractivo $-r^{-1}$, igual que para el caso $\beta^2 - \beta < 0$ ya que tiene la forma $-(r^{-1} + r^{-2})$ y finalmente para $\beta^2 - \beta > 0$ se obtiene un potencial de interés para potenciales diatómicos que cuenta con una parte repulsiva y otra atractiva $-r^{-1} + r^{-2}$. Estos resultados se presentan sintetizados en la tabla (3.3.1) en la cuál se indica si el potencial obtenido es de tipo atractivo o una combinación de repulsivo y atractivo.

Es claro que el caso puramente atractivo no puede obtenerse debido a que los parámetros a y D_e son definidos positivos, por lo cual el parámetro β lo es también. Por otro lado, el factor $\beta^2 - \beta$ tiene 2 raíces reales que pueden encontrarse al factorizar en la forma $\beta(\beta - 1)$, la raíz $\beta_1 = 0$ no debe considerarse ya que implica que la distancia inter atómica a sea igual a cero, o bien, que la energía de disociación lo sea. La otra raíz de la ecuación cuadrática es $\beta_2 = 1$, lo que nos lleva a una relación directa entre el valor de la energía de disociación y la longitud de enlace:

$$\beta_2 = 1 \tag{3.3.15}$$

$$a\sqrt{D_e} = 1 \tag{3.3.16}$$

$$\rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{D_e}} \tag{3.3.17}$$

por lo cuál si se quieren estudiar casos que contengan atracción-repulsión el parámetro a deberá ser mayor a $\frac{1}{\sqrt{D_e}}$.

$V_-(r)$ \ β	< 1	$= 1$	> 1
$-r^{-1}$		✓	
$-(r^{-1} + r^{-2})$	✓		
$-r^{-1} + r^{-2}$			✓

Tabla 3.3.1: Tipo de potenciales obtenidos al variar los parámetros D_e y a .

En la figura (3.3.1) se muestran algunos potenciales puramente atractivos para diferentes valores de a y D_e .

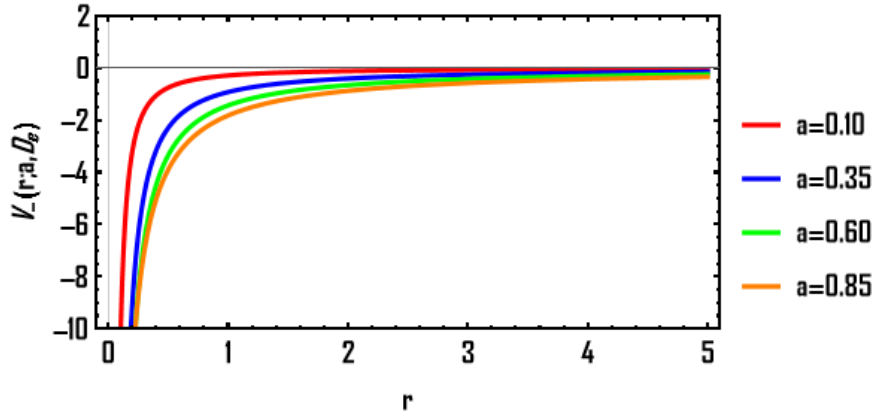


Figura 3.3.2: Compañeros supersimétricos puramente atractivos ($\beta < 1$) $V_-(r; a, D_e)$ con $D_e = 1$ y los valores indicados de a .

Si en el ejemplo anterior tomamos valores de a mayores a 1 estaremos en el caso en el cuál $\beta > 1$ y los potenciales obtenidos serían de tipo interacción diatómica. Algunos casos se presentan en la figura (3.3.1), en la cual notamos que el mínimo del potencial se desplaza hacia la izquierda y que el valor absoluto de la energía de disociación incrementa.

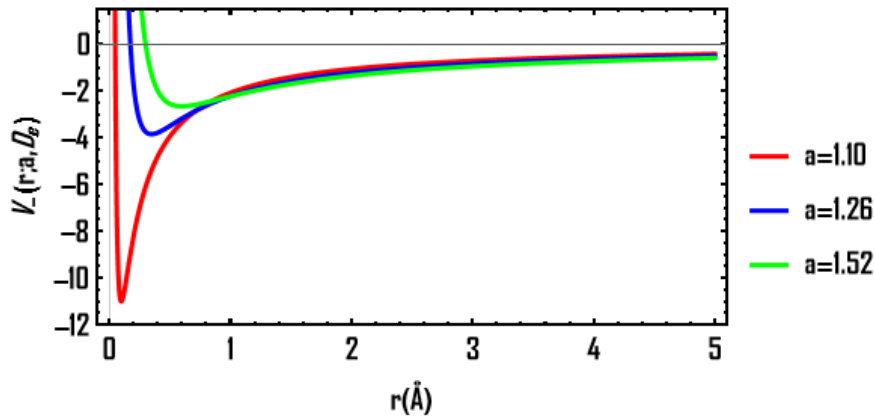


Figura 3.3.3: Compañero supersimétrico $V_-(r; a, D_e)$ para el caso $D_e = 1$ y los valores indicados de a , tal que se generen potenciales tipo interacción diatómica ($\beta > 1$).

Dada la forma del potencial vamos a calcular el valor del mínimo en función de los parámetros originales a y D_e , para hacerlo primero igualamos la primera derivada del potencial a cero y despejamos r .

$$V'_-(r; a, D_e) = 2\beta \left(\frac{\sqrt{D_e}}{r^2} - \frac{\beta - 1}{r^3} \right) = 0 \quad (3.3.18)$$

lo que nos lleva a que el mínimo para el potencial $V_-(r; a, D_e)$ que definiremos como a_- será una función de los parámetros del potencial original (a, D_e):

$$a_- = \frac{\beta - 1}{\sqrt{D_e}} = a - \frac{1}{\sqrt{D_e}} \quad (3.3.19)$$

está fórmula nos indica que la longitud de enlace se verá disminuida por acción de la deformación supersimétrica, o bien, que el mínimo se desplazara hacia la izquierda por un factor de $\frac{1}{\sqrt{D_e}}$. En este punto podemos relacionar este valor con el obtenido en la restricción para β de la fórmula (3.3.17) ya que si tomamos valores de a menores al factor de desplazamiento tendríamos que la longitud de enlace sería negativa y si lo tomamos $a = \frac{1}{\sqrt{D_e}}$ obtendríamos (teóricamente) el caso en el cuál los átomos están traslapados.

Para reforzar el comentario anterior vamos a utilizar el valor crítico de la longitud de enlace en el régimen de esferas rígidas r_c , ya que la distancia internuclear no puede ser menor a tal. Para calcularlo solo debemos encontrar el valor de la longitud de enlace que hace que el potencial $V_-(r; a, D_e)$ sea cero.

$$-\frac{2}{r_c} \beta \sqrt{D_e} + \frac{1}{r_c^2} (\beta^2 - \beta) = 0 \quad (3.3.20)$$

$$-2r_c \beta \sqrt{D_e} + \beta^2 - \beta = 0 \quad (3.3.21)$$

la solución de la ecuación anterior contiene solo la raíz $r_c = \frac{\beta-1}{2\sqrt{D_e}}$.

Regresando a las variables originales se obtiene que la distancia internuclear crítica será función de la distancia de equilibrio y la energía de disociación del sistema sin deformación supersimétrica

$$r_c = \frac{1}{2} \left(a - \frac{1}{\sqrt{D_e}} \right) = \frac{1}{2} a_-. \quad (3.3.22)$$

Dado que la longitud de enlace crítica en el modelo de esferas rígidas debe ser siempre mayor a cero obtenemos de nueva cuenta la restricción impuesta en la fórmula (3.3.17) que nos dice que los potenciales con término de atracción-repulsión solo pueden obtenerse si la distancia internuclear de equilibrio es mayor a $\frac{1}{\sqrt{D_e}}$.

Ahora que conocemos el valor del mínimo y los valores permitidos para la longitud del enlace estamos en posición de calcular la energía de disociación. La cuál encontramos de manera trivial al sustituir el valor de a_- en el potencial.

$$D_{e,-} = V_-(r; a, D_e)|_{r=a_-} = -\frac{\beta}{\beta-1} D_e. \quad (3.3.23)$$

Finalmente vamos a calcular la constante de fuerza para este potencial, de igual manera que como lo hicimos con el original sin deformación supersimétrica en (3.3.8).

$$k_{e,-} = v''|_{r=a_-} = -\frac{4\beta\sqrt{D_e}}{r^3} + \frac{6(\beta^2 - \beta)}{r^4} \Big|_{r=a_-} = \frac{2D_e^2\beta}{(\beta-1)^3}. \quad (3.3.24)$$

Con las fórmulas obtenidas podemos corroborar lo mencionado en la tabla (3.3.1) ya que cuando $\beta = 1$ la energía de disociación (3.3.23) y la constante de fuerza (3.3.24) tienden a $\mp\infty$, respectivamente. Mientras que para el caso restante $\beta < 1$ obtendremos que la energía de disociación tomará valores positivos, mientras que la constante de fuerza será negativa, aún más, el mínimo aparecerá en la región negativa de la coordenada r . Esta propiedad hace que el conjunto de potenciales obtenidos en esa región no sean aceptables en el estudio que realizamos en esta tesis.

Ahora revisaremos la estructura del compañero supersimétrico $V_+(r; a, D_e) = w^2 + w'$:

$$V_+(r; a, D_e) = -2D_e \left(\frac{a}{r} - \frac{a^2}{2r^2} \right) + \frac{a\sqrt{D_e}}{r^2} + D_e. \quad (3.3.25)$$

Siguiendo los pasos efectuados para el compañero $V_-(r; a, D_e)$ de párrafos anteriores al factorizar la ecuación anterior tomando el factor común r^{-2} se obtiene que el potencial puede reescribirse en términos de la variable β :

$$V_+(r; a, D_e) = -2 \frac{\beta\sqrt{D_e}}{r} + \frac{1}{r^2} (\beta^2 + \beta) \quad (3.3.26)$$

El potencial obtenido no presenta casos como su compañero supersimétrico ya que la función β es un número real mayor a cero por lo cuál el potencial obtenido será siempre de la forma $V(r) = -r^{-1} + r^{-2}$, es decir, serán siempre del tipo interacción diatómica.

La localización del mínimo del potencial nos da información acerca de la longitud de enlace de la molécula y en este caso se puede encontrar analíticamente calculando la derivada del potencial $V_+(r; a, D_e)$ y posteriormente igualándola a cero

$$V'_+(r; a, D_e) = 2\beta \left(\frac{\sqrt{D_e}}{r^2} - \frac{(\beta + 1)}{r^3} \right) \quad (3.3.27)$$

igualando a cero la ecuación anterior llegamos al valor en el cuál se encuentra el mínimo del potencial, es decir de la longitud de enlace depende de la energía de disociación del potencial de Kratzer sin deformación y de la posición de su mínimo:

$$a_+ = \frac{\beta + 1}{\sqrt{D_e}} = a + \frac{1}{\sqrt{D_e}} \quad (3.3.28)$$

dónde a_+ representa la posición del mínimo para el potencial $V_+(r; a, D_e)$, dada la forma de la fórmula para la posición podemos constatar que la acción del término extra que aparece debido a la deformación supersimétrica es la de aumentar la longitud del enlace respecto a la original, lo mismo sucede con la longitud de enlace crítica r_c , al calcularla nos damos cuenta que se desplaza por el mismo factor que el compañero $V_-(r; a, D_e)$ en dirección opuesta

$$-\frac{2}{r_c} \beta \sqrt{D_e} + \frac{1}{r_c^2} (\beta^2 + \beta) = 0 \quad (3.3.29)$$

$$-2r_c \beta \sqrt{D_e} + \beta^2 + \beta = 0 \quad (3.3.30)$$

la solución de la ecuación anterior contiene solo la raíz $r_{c,+} = \frac{\beta+1}{2\sqrt{D_e}}$.

Regresando a las variables originales se obtiene que la distancia internuclear crítica será también una función que depende de la distancia de equilibrio y la energía de disociación del sistema sin deformación supersimétrica

$$r_{c,+} = \frac{1}{2} \left(a + \frac{1}{\sqrt{D_e}} \right) = \frac{1}{2} a_+. \quad (3.3.31)$$

La energía de disociación también sufre un cambio respecto a la energía original y para encontrarla vamos a calcular el valor del potencial $V_+(r; a, D_e)$ cuándo el parámetro espacial r toma el valor del mínimo $r = a_+$:

$$D_{e,+} = V_+(r; a, D_e)|_{r=a_+} = -\frac{\beta}{\beta+1}D_e \quad (3.3.32)$$

dónde $D_{e,+}$ es la energía de disociación para el potencial $V_+(r; a, D_e)$, la cuál será siempre menor a la original por un factor $\frac{\beta}{\beta+1}$.

La figura siguiente muestra que si partimos de un potencial con una energía de disociación fija, como en el último ejemplo de la sección anterior el mínimo se desplaza hacia la derecha mientras la energía de disociación original decrece, por lo cuál la acción del parámetro $\frac{\beta}{r^2}$ sobre el potencial de Kratzer es que hace que la fuerza del enlace disminuya su valor respecto al potencial de Kratzer sin deformación supersimétrica y se necesite añadir una cantidad de energía menor para que ocurra la disociación.

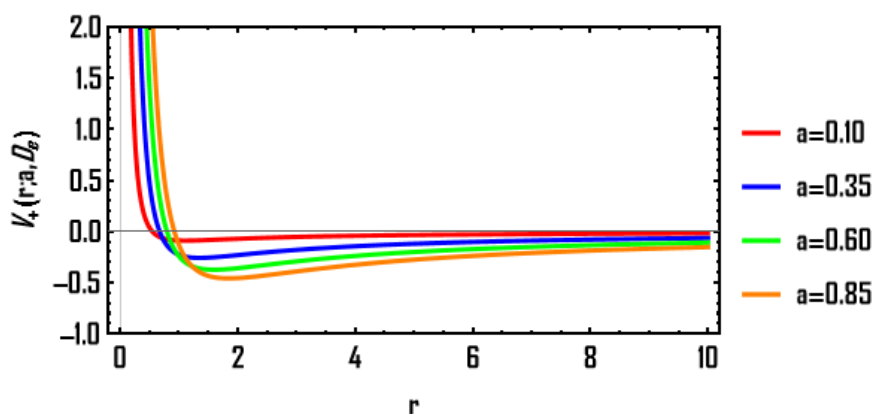


Figura 3.3.4: Compañero supersimétrico $V_+(r; a, D_e)$ para el caso $D_e = 1$ y los valores indicados de a , en las cuales los potenciales de interacción presentan una profundidad de pozo reducida respecto al potencial de Kratzer original.

Finalmente vamos a calcular la constante de fuerza para este potencial, de igual manera que como lo hicimos con el original sin deformación supersimétrica en (3.3.8) y con la del compañero supersimétrico (3.3.24).

$$k_{e,+} = v''|_{r=a_+} = -\frac{4\beta\sqrt{D_e}}{r^3} + \frac{6(\beta^2 + \beta)}{r^4} \Big|_{r=a_+} = \frac{2D_e^2\beta}{(\beta+1)^3} \quad (3.3.33)$$

dado que el coeficiente β es un número real positivo no se presenta ninguna singularidad en la fórmula para la constante de fuerza como en el caso del compañero supersimétrico $V_-(r; a, D_e)$.

En la tabla (3.3.1) se muestran las propiedades espectroscópicas obtenidas para el potencial de Kratzer y sus compañeros supersimétricos.

propiedad $V(r)$	r_{min}	D_e	k_e
$V_K(r; a, D_e)$	a	$-D_e$	$\frac{2D_e}{a^2}$
$V_-(r; a, D_e)$	$a - \frac{1}{\sqrt{D_e}}$	$-\frac{\beta}{\beta-1} D_e$	$\frac{2D_e^2\beta}{(\beta-1)^3}$
$V_+(r; a, D_e)$	$a + \frac{1}{\sqrt{D_e}}$	$-\frac{\beta}{\beta+1} D_e$	$\frac{2D_e^2\beta}{(\beta+1)^3}$

Tabla 3.3.2: Comparación de las propiedades espectroscópicas r_{min} , D_e y k_e para los potenciales $V_k(r; a, D_e)$ y los compañeros supersimétricos $V_{\mp}(r; a, D_e)$.

3.3.2. Deformación paramétrica

Para el potencial con deformación isoespectral utilizaremos la fórmula deducida para la función $\phi(w)$ que puede encontrarse en el libro de Gandopadhyaya [3]

$$\phi(r; a, D_e, \gamma) = \frac{e^{-2 \int_0^r \sqrt{D_e} \left(\frac{r'-a}{r'} \right) dr'}}{\gamma + \int_0^r e^{-2 \int_0^{r'} \sqrt{D_e} \left(\frac{r''-a}{r''} \right) dr''} dr'} \quad (3.3.34)$$

$$e^{-2 \int_0^r \sqrt{D_e} \left(\frac{r'-a}{r'} \right) dr'} = r^{2\sqrt{D_e}a} e^{-2\sqrt{D_e}r} \quad (3.3.35)$$

$$\int_0^r e^{-2 \int_0^{r'} \sqrt{D_e} \frac{r''-a}{r''} dr''} dr' = r^{1+2a\sqrt{D_e}} E_{-2a\sqrt{D_e}}(2\sqrt{D_e}r) \quad (3.3.36)$$

Regresando a la deformación paramétrica, la función $\phi(r; a, D_e, \gamma)$ depende de cuatro variables (r, a, D_e, γ) por lo que para observar la región singular ocuparemos un mapeo de tipo contornos de 3 dimensiones tomando una energía de disociación constante $D_e = 1$, por lo cuál los valores para el parámetro a serán solo los mayores a 1 con la finalidad de obtener potenciales aptos para el modelo de interacción tipo Kratzer.

Como puede apreciarse en la figura (3.3.2) (a) en la vista superior de la figura (3.3.2) (b) se aprecia que cuando el parámetro de longitud de enlace a se encuentra en la región $0 \leq a \leq 1$ los potenciales presentan una región singular fuera del origen para todo valor del parámetro γ a diferencia de los potenciales típicos en el área de interacciones diatómicas, por lo cuál no serán de utilidad para nuestro estudio.

En la figura (3.3.2) se muestra el caso para $a = 0.5$ y diferentes valores de γ .

Una vez que conocemos la región singular podemos ver como se comportan los potenciales regulares

Para valores cercanos a la singularidad se obtienen dobles pozos que desaparecen conforme se toman valores elevados del parámetro de deformación. La naturaleza de este tipo de potenciales ha sido reportados en la literatura por la acción de incluir potenciales de tipo Van der-Waals en el modelo de esferas rígidas [52].

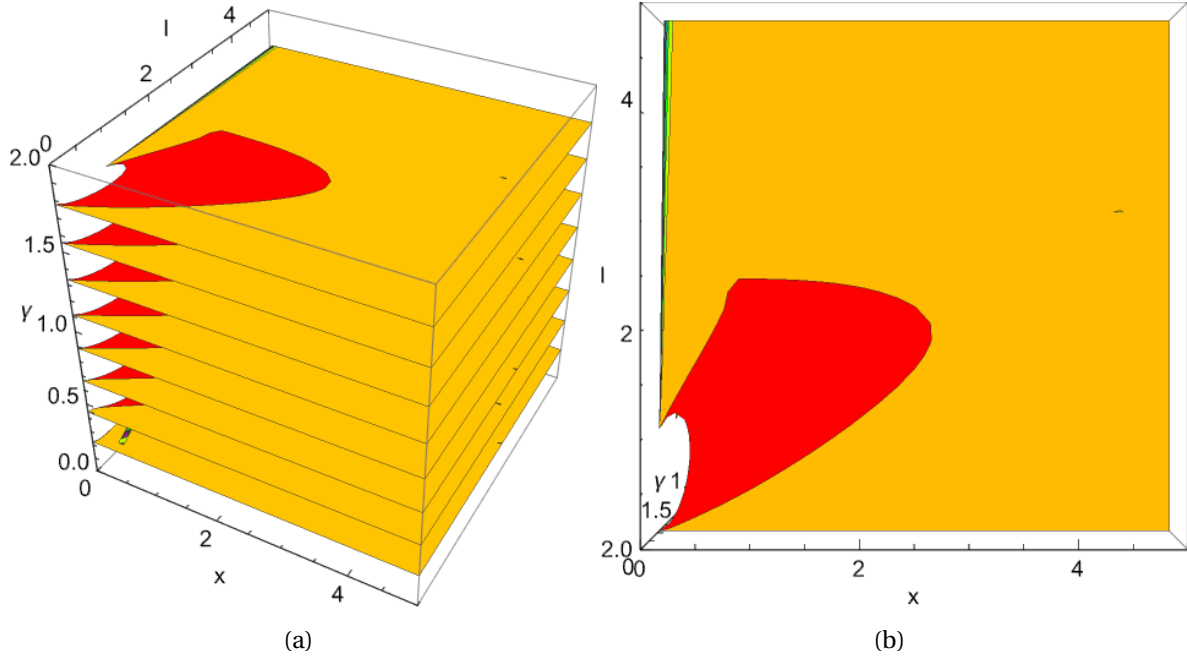


Figura 3.3.5: Región singular para el potencial de Kratzer deformado con $D_e = 1$.

Para el caso $a = 2$ se obtiene que el doble pozo desaparece cuando $\gamma \geq 1.1$ para corroborar esta información graficamos la derivada del potencial de Kratzer deformado y lo evaluamos en diversos valores del parámetro γ (3.3.2) (a), podemos notar que los casos con doble pozo deben presentar 3 intersecciones con el eje r mientras que los potenciales con solo un pozo solo presentan uno (3.3.2) (b), que corresponde al mínimo del potencial.

$$\begin{aligned}
 V'(r; 2, \gamma) = & -\frac{2(r-2)^2}{r^3} - \frac{2(r-2)}{r^3} + \frac{2(r-2)}{r^2} + \frac{2}{r^2} - 2 \left(\frac{2r^8 e^{-4r-2(r-2\log(r))}}{\left(\gamma - \frac{\Gamma(5,2r)}{32}\right)^3} \right. \\
 & - \frac{\left(-2\left(1 - \frac{2}{r}\right) - 2\right) r^4 e^{-2r-2(r-2\log(r))}}{\left(\gamma - \frac{\Gamma(5,2r)}{32}\right)^2} + \frac{2\left(1 - \frac{2}{r}\right) r^4 e^{-2r-2(r-2\log(r))}}{\left(\gamma - \frac{\Gamma(5,2r)}{32}\right)^2} \\
 & \left. - \frac{4r^3 e^{-2r-2(r-2\log(r))}}{\left(\gamma - \frac{\Gamma(5,2r)}{32}\right)^2} - \frac{4e^{-2(r-2\log(r))}}{r^2 \left(\gamma - \frac{\Gamma(5,2r)}{32}\right)} + \frac{4\left(1 - \frac{2}{r}\right)^2 e^{-2(x-2\log(r))}}{\gamma - \frac{\Gamma(5,2r)}{32}} \right)
 \end{aligned}$$

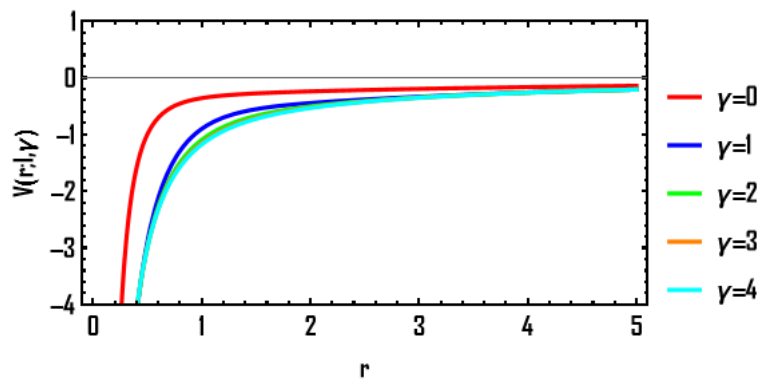


Figura 3.3.6: Potenciales obtenidos cuándo a toma valores en la región puramente atractiva.

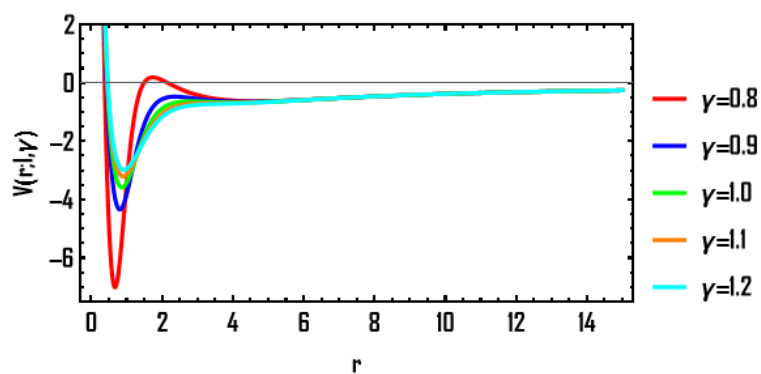


Figura 3.3.7: Región singular para el potencial de Kratzer deformado.

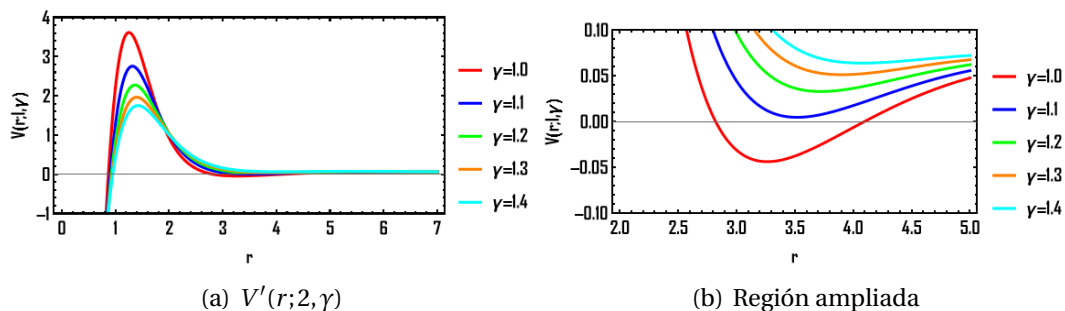


Figura 3.3.8: Derivada del potencial de Kratzer deformado y región ampliada.

La figura (3.3.2) se muestra la constante de fuerza y la longitud de enlace, podemos notar que cuándo la longitud del enlace es pequeña (γ cerca de la región singular) se tiene una constante de fuerza mayor en comparación con longitudes de enlace mayores, es decir el caso cuándo γ está lejos de la vecindad de la singularidad

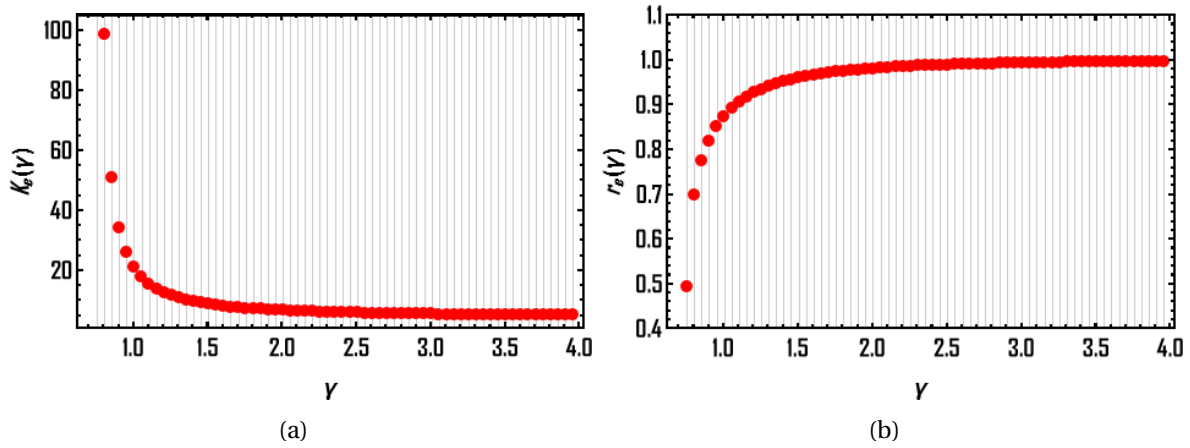


Figura 3.3.9: Constante de fuerza k_e y r_e en función de γ para el caso $a = 2$.

3.3.3. Eigenfunciones para el compañero supersimétrico y para el potencial deformado

La eigenfunción para el estado base del compañero supersimétrico $V_-(r; a)$ puede calcularse revisando la acción del operador de aniquilación \hat{a} sobre el estado fundamental $\psi_0(r; a)$ e igualando a cero:

$$\hat{a}\psi_0(r; a) = 0 \Rightarrow \frac{\psi_0'(r; a)}{\psi_0(r; a)} = -\frac{r-a}{r} \quad (3.3.37)$$

resolviendo la ecuación anterior para obtenemos la función de onda no normalizada para el estado base $\psi_0(r; a)$;

$$\psi_0(r; a) = r^a e^{-r} \quad (3.3.38)$$

la constante de normalización para el estado base

$$A_0 = \frac{1}{\sqrt{\int_0^\infty \psi_0^2(r; a) dr}} = \frac{1}{a 4^{-a} \Gamma[2a]} \quad (3.3.39)$$

por lo tanto la función de onda normalizada para el estado base con a arbitrario sería;

$$\psi_0(r; a) = \frac{1}{a 4^{-a} \Gamma[2a]} r^a e^{-r} \quad (3.3.40)$$

dado que tenemos un potencial radial las funciones de onda deben cumplir las siguientes condiciones que son satisfechas por la función (3.3.40) como se muestra en la figura (3.3.3)

$$\lim_{r \rightarrow 0} \psi_0(r; a) = 0 \quad (3.3.41)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_0(r; a) = 0 \quad (3.3.42)$$

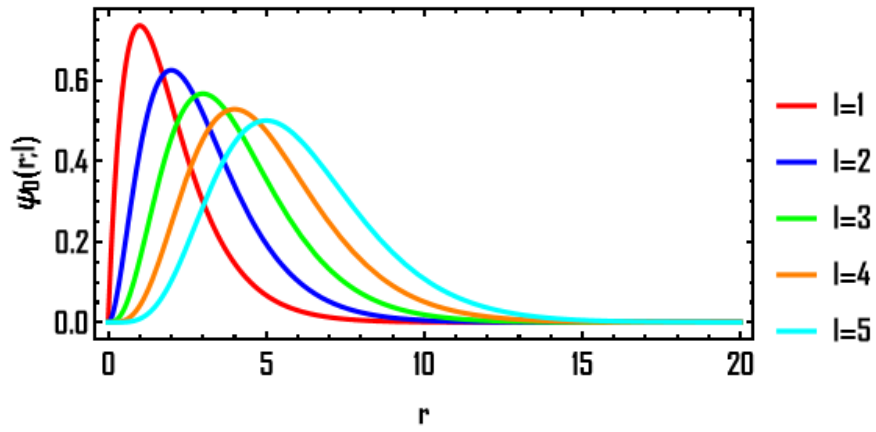


Figura 3.3.10: Estado base para el compañero supersimétrico $V_-(r; a)$ y los valores indicados de a .

Para el estado base del potencial deformado se debe aplicar el operador de aniquilación que contiene la solución general de la ecuación de Riccati $\hat{a} = D_r + w + \phi(r; a, \gamma)$

$$\psi_0(r; a, \gamma) = \frac{\psi_0(r; a)}{\gamma + \int \psi_0^2(r; a) dr}, \quad (3.3.43)$$

$$\psi_0(r; a, \gamma) = \frac{\psi_0(r; a)}{\gamma + r^{1+2a} E_{-2a}(2r)}. \quad (3.3.44)$$

3.4. Potencial de Morse

Uno de los potenciales clásicos para el modelado de sistemas diatómicos que se ha abordado bajo el formalismo de mecánica cuántica supersimétrica es el potencial de Morse [28] cuya primera aparición en la literatura es del año de 1929, 3 años después del artículo de Schrödinger [50] y de la publicación de Fues, en el que hace mención al potencial de Kratzer de 1920 [27].

Dada su eficiencia este potencial ha sido tomado como un candidato ideal para estudiar los efectos de distintas deformaciones en la interacción diatómica. Para una revisión histórica se puede revisar el artículo de revisión [40] y en general toda la bibliografía utilizada en él.

Entre las deformaciones del potencial Morse se encuentran la del potencial q deformado de Setare-Hatami [32], el doble Morse [53, 54] y la versión \mathcal{PT} simétrica de Znojil [55].

La forma funcional del potencial de Morse data del año 1929 [28] y tiene 3 parámetros escalares que se relacionan con propiedades espectroscópicas de la molécula a estudiar.

$$V(r; r_e, D_e, \alpha) = D_e (e^{-2\alpha(r-r_e)} - 2e^{-\alpha(r-r_e)}) \quad (3.4.1)$$

en la cual D_e es la energía de disociación, r_e es la longitud del enlace y α es un parámetro relacionado con la constante de fuerza del enlace k_e de la siguiente manera:

$$\alpha = \sqrt{\frac{k_e}{2D_e}} \quad (3.4.2)$$

donde k_e se refiere a la constante de fuerza.

De igual manera que se hizo con el potencial de Kratzer en la sección anterior vamos a calcular los parámetros espectroscópicos relacionados al potencial de Morse y después haremos lo mismo con sus compañeros supersimétricos.

Empezaremos calculando la posición del mínimo (r_e), para lo cuál primero derivaremos respecto a la longitud de enlace r la función (3.4.1):

$$V'(r; r_e, D_e, \alpha) = -2\alpha D_e (-e^{-\alpha(r-r_e)} - e^{-2\alpha(r-r_e)}) \quad (3.4.3)$$

ahora se iguala a cero y se despeja r

$$-2\alpha D_e (-e^{-\alpha(r-r_e)} + e^{-2\alpha(r-r_e)}) = 0 \quad (3.4.4)$$

$$-e^{-\alpha(r-r_e)} + e^{-2\alpha(r-r_e)} = 0 \quad (3.4.5)$$

$$e^{-\alpha(r-r_e)} = 1 \quad (3.4.6)$$

$$e^{-\alpha r} = e^{-\alpha r_e} \quad (3.4.7)$$

de la última ecuación obtenemos que $r = r_e$, lo cuál es un dato conocido en la literatura del tema.

Para la longitud de enlace crítica vamos a igualar el potencial a cero y despejamos r

$$D_e (e^{-2\alpha(r_c-r_e)} - 2e^{-\alpha(r_c-r_e)}) = 0 \quad (3.4.8)$$

$$e^{-\alpha r_c} = 2e^{-\alpha r_e} \quad (3.4.9)$$

$$r_c = r_e + \ln\left(\frac{1}{2\alpha}\right) \quad (3.4.10)$$

dado que la función logaritmo natural para números semi unitarios es siempre menor a 0 la longitud de enlace crítica aparece siempre a la izquierda de la longitud de enlace de equilibrio.

Ahora que conocemos la posición del mínimo vamos a corroborar el valor de la energía de disociación D_e sustituyendo el valor $r = r_e$ en el potencial original.

$$V(r; r_e, D_e, \alpha)|_{r=r_e} = D_e (e^{-2\alpha(r_e-r_e)} - 2e^{-\alpha(r_e-r_e)}) = -D_e \quad (3.4.11)$$

Para la constante de fuerza k_e calcularemos la segunda derivada y la evaluaremos en la posición del mínimo.

$$k_e = V''(r; r_e, D_e, \alpha)|_{r=r_e} = 2\alpha^2 D_e (2e^{-2\alpha(r-r_e)} - e^{\alpha(r-r_e)})|_{r=r_e} = 2\alpha^2 D_e \quad (3.4.12)$$

de la ecuación anterior se obtiene el valor del parámetro $\alpha = \sqrt{\frac{k_e}{2D_e}}$.

3.4.1. Compañeros supersimétricos

De manera análoga a la sección anterior vamos a calcular las fórmulas para los parámetros espectroscópicos de los compañeros supersimétricos del potencial de Morse, para lo cual tomaremos el superpotencial propuesto por Cooper [1] con coeficientes $A = B = 1$ y multiplicado por D_e para obtener el parámetro de energía de disociación en las fórmulas generales.

$$w = \sqrt{D_e} (1 - e^{-\alpha(r-r_e)}) \quad (3.4.13)$$

Los compañeros $V_{\pm}(r; r_e, \alpha, D_e)$ se obtienen con el método clásico de mecánica cuántica supersimétrica:

$$V_{\mp}(r; r_e, \alpha, D_e) = w^2 \mp w' = D_e (1 - 2e^{-\alpha(r-r_e)} + e^{-\alpha(r-r_e)}) \mp \alpha \sqrt{D_e} e^{-\alpha(r-r_e)} \quad (3.4.14)$$

la ecuación anterior puede reescribirse de una forma más conveniente si se factorizan las funciones exponenciales:

$$V_{\mp}(r; r_e, \alpha, D_e) = w^2 \mp w' = D_e e^{-2\alpha(r-r_e)} - \left(2D_e \pm \alpha \sqrt{D_e}\right) e^{-\alpha(r-r_e)} \quad (3.4.15)$$

Ahora que conocemos los compañeros supersimétricos del potencial de interés procederemos a calcular la posición del mínimo para los nuevos potenciales, para tal fin hay que derivar la ecuación (3.4.14) e igualarla a cero.

$$V'_{\mp}(r; r_e, \alpha, D_e) = -2\alpha D_e e^{-2\alpha(r-r_e)} + \alpha \left(2D_e \pm \alpha \sqrt{D_e}\right) e^{-\alpha(r-r_e)} = 0 \quad (3.4.16)$$

multiplicamos toda la derivada por un factor $e^{-\alpha(r-r_e)}$ para obtener una forma más compacta y después despejamos r

$$-2\alpha D_e e^{-\alpha(r-r_e)} + \alpha (2D_e \pm \alpha\sqrt{D_e}) = 0 \quad (3.4.17)$$

$$e^{-\alpha r} = \pm \frac{\alpha\sqrt{D_e} + 2D_e}{D_e} e^{-\alpha r_e} \quad (3.4.18)$$

despejando se obtiene que los mínimos de los potenciales compañeros supersimétricos serán funciones que dependen de la energía de disociación y de la longitud de enlace de equilibrio para el potencial sin deformación supersimétrica

$$r_{e,\mp} = r_e + \frac{1}{\alpha} \ln \left[\frac{2D_e}{2D_e \pm \alpha\sqrt{D_e}} \right] \quad (3.4.19)$$

para revisar el efecto de la deformación supersimétrica sobre el potencial de Morse revisaremos cada una de las distancias de equilibrio obtenidas por separado.

Para el compañero $V_-(r; r_e, \alpha, D_e)$ obtenemos que la posición del mínimo depende de la energía de disociación y del parámetro α y genera un desplazamiento del mínimo original hacia la izquierda, por lo que el efecto de la deformación supersimétrica sería de confinamiento

$$r_{e,-} = r_e + \frac{1}{\alpha} \ln \left[\frac{2D_e}{2D_e + \alpha\sqrt{D_e}} \right] \quad (3.4.20)$$

dado que α y D_e son definidos positivos el argumento de la función será siempre menor a 1, por lo que la longitud de enlace de equilibrio para el compañero supersimétrico será siempre menor a la del potencial de Morse sin deformación supersimétrica.

La longitud de enlace de equilibrio para el compañero supersimétrico $V_+(r_e, \alpha, D_e)$ de acuerdo a la fórmula (3.4.19) es

$$r_{e,+} = r_e + \frac{1}{\alpha} \ln \left[\frac{2D_e}{2D_e - \alpha\sqrt{D_e}} \right] \quad (3.4.21)$$

la longitud para este caso resulta de mayor complejidad que la del compañero $V_-(r_e, \alpha, D_e)$ dado que el argumento de la función \ln en (3.4.21) puede tomar valores que hacen que no esté definida, el primero de ellos es cuando el divisor es cero:

$$2D_e - \alpha\sqrt{D_e} = 0 \quad (3.4.22)$$

$$\alpha = 2\sqrt{D_e} \quad (3.4.23)$$

otra situación que debe considerarse ocurre cuando el divisor es menor a cero, ya que la función no está definida para valores negativos, por lo tanto los valores permitidos de α serán cuando esta es menor a $2\sqrt{D_e}$.

Si sustituimos el valor $\alpha = 2\sqrt{D_e}$ en el compañero supersimétrico $V_+(r_e, \alpha, D_e)$ obtendremos que el potencial se vuelve puramente repulsivo.

$$V_+(r; r_e, \alpha, D_e)|_{\alpha=2\sqrt{D_e}} = D_e e^{-4\sqrt{D_e}(r-r_e)} - (2D_e - 2D_e) e^{-\alpha(r-r_e)} \quad (3.4.24)$$

y para valores mayores también dado que la función $-(2D_e - \alpha\sqrt{D_e})e^{-\alpha(r-r_e)}$ sería siempre positiva.

Ahora vamos a calcular el valor de las longitudes de enlace críticas para cada potencial, la forma es igualar el potencial a cero y despejar el valor de $r_{(c,\mp)}$ que satisface la ecuación

$$D_e e^{-2\alpha(r_{(c,\mp)}-r_e)} - (2D_e \pm \alpha\sqrt{D_e}) e^{-\alpha(r_{(c,\mp)}-r_e)} = 0 \quad (3.4.25)$$

multiplicamos ambos lados de la ecuación por $e^{\alpha(r-r_e)}$

$$e^{-\alpha r_{(c,\mp)}} = \frac{(2D_e \pm \alpha\sqrt{D_e})}{D_e} e^{-\alpha r_e} \quad (3.4.26)$$

finalmente al despejar $r_{(c,\mp)}$ de la ecuación anterior encontramos que las fórmulas que describen la posición de la longitud de enlace crítica $r_{(c,\mp)}$ en los potenciales compañeros supersimétricos son funciones de los parámetros del potencial sin deformación r_e, α y D_e

$$r_{(c,\mp)} = r_e + \frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{D_e}{2D_e \pm \alpha\sqrt{D_e}} \right) \quad (3.4.27)$$

dada la forma de la fórmula para el valor crítico de la longitud de enlace, o bien, el cruce del potencial con el eje r se obtiene que la deformación supersimétrica hace que el valor crítico del potencial original sufra un desplazamiento hacia la izquierda o a la derecha en función de los valores asignados a los parámetros de energía de disociación y de longitud de enlace de equilibrio. Para el potencial $V_-(r; a, D_e)$ se tiene que para cualquier valor de a y D_e se cumple la relación $(2D_e + \alpha\sqrt{D_e}) > D_e$ y por lo tanto el valor de $r_{c,-}$ será siempre menor que el de la longitud de equilibrio r_e para el potencial sin deformación supersimétrica.

$$r_{c,-} = \ln \left(\frac{D_e}{2D_e + \alpha\sqrt{D_e}} \right) \quad (3.4.28)$$

Para el caso del compañero $V_+(r; a, D_e)$, de igual manera que para las posiciones de equilibrio se obtienen 2 casos de interés, el primero es cuando se cumple que $(2D_e - \alpha\sqrt{D_e}) > D_e$ se tiene el valor de r_c será siempre menor que el de la longitud de equilibrio r_e para el potencial sin deformación supersimétrica, el caso contrario $(2D_e - \alpha\sqrt{D_e}) < D_e$ se obtiene que r_c será mayor que r_e , el caso $2D_e = \alpha\sqrt{D_e}$ genera una longitud crítica indeterminada.

$$r_{c,+} = r_e + \ln \left(\frac{D_e}{2D_e - \alpha\sqrt{D_e}} \right) \quad (3.4.29)$$

Para obtener las fórmulas de la energía de disociación de los compañeros supersimétricos solo tenemos que sustituir las longitudes de equilibrio en el potencial correspondiente, comenzaremos con el potencial $V_-(r_e, \alpha, D_e)$

$$V_-(r; r_e, \alpha, D_e)|_{r=r_{(e,-)}} = D_e e^{-2\alpha(r-r_e)} - (2D_e + \alpha\sqrt{D_e}) e^{-\alpha(r-r_e)}|_{r=r_{(e,-)}} \quad (3.4.30)$$

$$= D_e e^{-2\alpha(r_e + \frac{1}{\alpha} \ln \left[\frac{2D_e}{2D_e + \alpha\sqrt{D_e}} \right] - r_e)} - (2D_e + \alpha\sqrt{D_e}) e^{-\alpha(r_e + \frac{1}{\alpha} \ln \left[\frac{2D_e}{2D_e + \alpha\sqrt{D_e}} \right] - r_e)} \quad (3.4.31)$$

$$= D_e e^{-2 \ln \left[\frac{2D_e}{2D_e + \alpha\sqrt{D_e}} \right]} - (2D_e + \alpha\sqrt{D_e}) e^{-\ln \left[\frac{2D_e}{2D_e + \alpha\sqrt{D_e}} \right]} \quad (3.4.32)$$

tomando el cambio de variable $\mu = 2D_e + \alpha\sqrt{D_e}$

$$V_-(r; r_e, \alpha, D_e)|_{r=r_{e,-}} = \frac{\mu^2}{4D_e} - \frac{\mu^2}{2D_e} \quad (3.4.33)$$

$$-\frac{\mu^2}{4D_e} = -\frac{1}{4}(2\sqrt{D_e} + \alpha)^2 \quad (3.4.34)$$

finalmente se obtiene que la energía de disociación para el potencial $V_-(r_e, \alpha, D_e)$ depende solo de los parámetros α y D_e del potencial no deformado

$$D_{e,-} = -D_e - \left(\sqrt{D_e}\alpha + \frac{\alpha^2}{4} \right) \quad (3.4.35)$$

la ecuación anterior nos indica que el valor absoluto de la energía de disociación para el compañero supersimétrico es mayor que la del potencial sin deformación por lo que se necesitará más energía para disociar el sistema sujeto a la deformación, al realizar los mismos cálculos para el caso del potencial $V_+(r; \alpha, D_e)$ se obtiene que la energía de disociación es

$$D_{e,+} = -\frac{1}{4}(-2\sqrt{D_e} + \alpha)^2 \quad (3.4.36)$$

revisando la fórmula anterior podemos percatarnos que si sustituimos el caso crítico $\alpha = 2\sqrt{D_e}$ obtenemos que la energía de disociación es cero, mientras que para valores menores se obtienen energías de disociación negativas (como debe presentarse para potenciales diatómicos), debemos recordar que los casos para $\alpha > 2\sqrt{D_e}$ no están dentro de los alcances de este trabajo ya que el potencial se vuelve puramente repulsivo. En la tabla 3.4.1 se muestran algunos casos permitidos.

α	$\frac{\sqrt{D_e}}{2}$	$\sqrt{D_e}$	$2\sqrt{D_e}$
D_e	$-\frac{9}{16}D_e$	$-\frac{D_e}{4}$	0

Tabla 3.4.1: Variación de la energía de disociación para el compañero supersimétrico $V_+(r_e, \alpha, D_e)$, para valores pequeños de α la energía de disociación incrementa respecto a la del potencial sin deformación supersimétrica.

Para finalizar la sección que aborda los compañeros supersimétricos del potencial de Morse calcularemos las constantes de fuerza k_e para ambos y discutiremos los casos críticos. Como ya se menciono se calcula evaluando la segunda derivada del potencial en el mínimo $r_{e,\mp}$

$$V''_{r_{e,\mp}} \Big| = 4\alpha^2 D_e e^{-2\alpha(r-r_e)} - \alpha^2 (D_e \pm \alpha\sqrt{D_e}) e^{-\alpha(r-r_e)} \Big|_{r_{e,\mp}} \quad (3.4.37)$$

los valores para $r_{e,\mp}$ se toman de la ecuación (3.4.19) y la ecuación anterior se reduce a una forma compacta que depende de los parámetros de energía de disociación y del parámetro α del potencial sin deformación

$$k_{\mp}(\alpha, D_e) = \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{D_e} (2D_e \pm \alpha \sqrt{D_e})^2 \quad (3.4.38)$$

el caso para k_- da

$$k_-(\alpha, D_e) = 2\alpha^2 D_e + 2\alpha^3 \sqrt{D_e} + \frac{\alpha^4}{2} \quad (3.4.39)$$

se puede apreciar que es mayor respecto a la constante de fuerza del potencial de Morse sin deformación supersimétrica dada por la ecuación (3.4.12).

Para el caso de k_+ se obtiene que depende también de los parámetros D_e y α , sobre los valores permitidos debemos recordar que solo deben ser considerados los valores de α menores a $2\sqrt{D_e}$

$$k_+(\alpha, D_e) = \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{D_e} (2D_e - \alpha \sqrt{D_e})^2 \quad (3.4.40)$$

si se toma el valor de $\alpha = 2\sqrt{D_e}$ para el caso de la constante de fuerza del potencial $V_+(r_e, \alpha, D_e)$ se obtiene que la fuerza de enlace es cero, desarrollando la ecuación y tomando valores de $\alpha > 2\sqrt{D_e}$ se obtiene que la constante de fuerza es negativa (3.4.2), situación sin validez física.

$$k_+(\alpha, D_e) = 2\alpha^2 D_e - 2\alpha^3 \sqrt{D_e} + \frac{\alpha^4}{2} \quad (3.4.41)$$

α	$\sqrt{D_e}$	$2\sqrt{D_e}$	$3\sqrt{D_e}$
k_+	$\frac{D_e^2}{2}$	0	$-\frac{31}{2} D_e^2$

Tabla 3.4.2: Variación de la constante de fuerza para el compañero supersimétrico $V_+(r_e, \alpha, D_e)$, se observa que para valores de α menores a $2\sqrt{D_e}$ la constante de fuerza es de signo positivo mientras que para valores mayores es negativa.

En la tabla (3.4.3) se muestran las propiedades espectroscópicas obtenidas para el potencial de Morse y sus compañeros supersimétricos.

propiedad	r_e	D_e	k_e
$V(r)$			
$V_M(r; a, D_e)$	r_e	$-D_e$	$2\alpha^2 D_e$
$V_-(r; a, D_e)$	$r_e + \frac{1}{\alpha} \ln \left[\frac{2D_e}{2D_e + \alpha \sqrt{D_e}} \right]$	$-\frac{\beta}{\beta-1} D_e$	$\frac{2D_e^2 \beta}{(\beta-1)^3}$
$V_+(r; a, D_e)$	$r_e + \frac{1}{\alpha} \ln \left[\frac{2D_e}{2D_e - \alpha \sqrt{D_e}} \right]$	$-\frac{\beta}{\beta+1} D_e$	$\frac{2D_e^2 \beta}{(\beta+1)^3}$

Tabla 3.4.3: Comparación de las propiedades espectroscópicas r_e, D_e y k_e para los potenciales $V_M(r; r_e, \alpha, D_e)$ y los compañeros supersimétricos $V_{\mp}(r; r_e, \alpha, D_e)$.

3.4.2. Potencial Morse con deformación paramétrica

El potencial con deformación paramétrica, tomando el superpotencial ya mencionado en la subsección anterior toma la siguiente forma

$$w_p = 1 - e^{-(r-r_e)}, \quad v(\gamma; r) = (1 - e^{-(r-r_e)})^2 - e^{-(r-r_e)} - 2 \frac{d}{dr} \left[\frac{e^{-2(e^{-(r-r_e)} + (r-r_e))}}{\gamma + e^{-2e^{-(r-r_e)}} \left(\frac{1}{4} + \frac{e^{-(r-r_e)}}{2} \right)} \right]$$

Para determinar el dominio de continuidad de la función $\phi(\gamma; r)$ despejamos γ en el divisor de $\phi(\gamma; r)$, no se considera el valor de r_e debido a que solo genera un desplazamiento

$$\gamma \neq e^{-2e^{-r}} \left(\frac{1}{4} + \frac{e^{-r}}{2} \right) \quad (3.4.42)$$

Dado que la función $f(r) = e^{-2e^{-(r-r_e)}} \left(\frac{1}{4} + \frac{e^{-(r-r_e)}}{2} \right)$ está acotado por $0 \leq r \leq 0.25$ entonces el parámetro de deformación no admite valores en este intervalo. Si γ toma valores en la región de singularidad, el potencial deformado se convierte en una figura divergente (3.4.2).

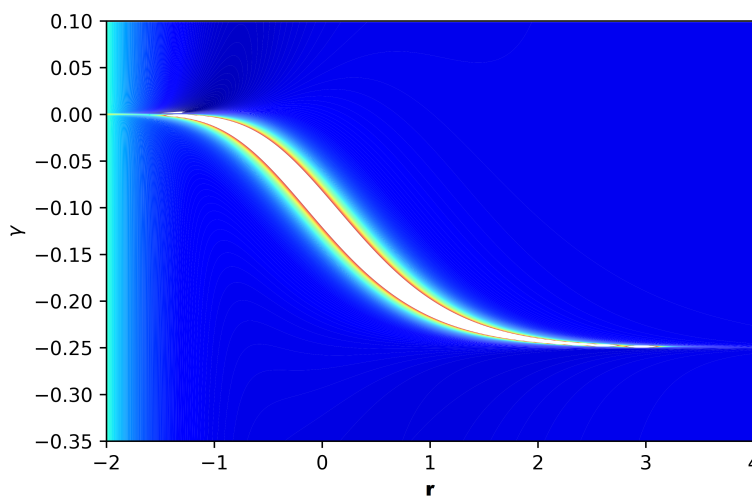


Figura 3.4.1: Gráfica de contorno para la función $v(\gamma; r)$ que muestra la región singular en color blanco.

La forma del potencial deformado depende fuertemente del parámetro de deformación cuando este toma valores cercanos a la región de singularidad. En este caso el potencial deformado es de tipo doble pozo como se muestra en la figura (3.4.2), para valores mayores a cierto punto crítico para el parámetro de deformación este doble pozo desaparece y toma la forma de $v_-(r)$ ha sido recuperado.

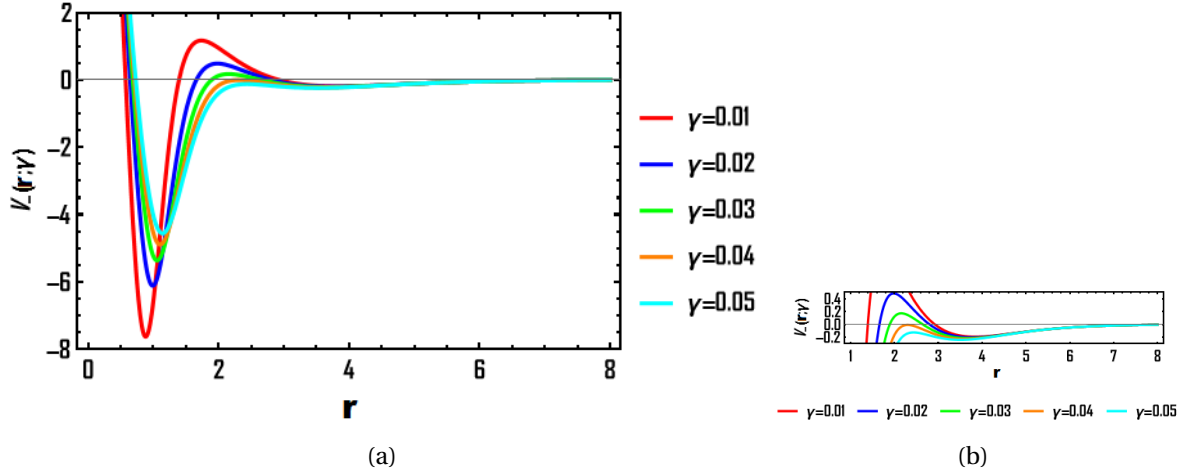


Figura 3.4.2: (a)Potencial deformado $v(\gamma; r)$ con γ cerca de la región de singularidad, (b) región expandida para los mismos valores del parámetro de deformación mostrando un nuevo pozo.

Para encontrar el valor cuando desaparece el segundo pozo calculamos la primera derivada del potencial deformado $v(\gamma; r)$ y resolvemos gráficamente la igualdad $v'(\gamma; r_c) = 0$ donde r_c es la ubicación de los puntos críticos de $v(\gamma; r)$ encontramos que en el caso $\gamma < 0.077$ hay tres puntos críticos relacionados con dos mínimos y un máximo, uno de estos mínimos y el máximo desaparece cuando $\gamma > 0.077$ figura (3.4.2). Este hecho sugiere que el doble pozo desaparece para esos valores y se recupera la forma clásica con un solo pozo del potencial de Morse o la pareja supersimétrica. Para valores elevados del parámetro de deformación el mínimo global converge a $r = -0.4$ como en el caso del compañero supersimétrico $v_-(r)$ del potencial de Morse (3.4.2).

$$v'(\gamma; r) = \frac{e^{-2r}}{(4\gamma e^{r+2e^{-r}} + e^r + 2)^3} \left(-16 + 256\gamma e^{2e^{-r}} - 8e^{3r} (2 + \gamma e^{2e^{-r}}) (1 + 4\gamma e^{2e^{-r}})^2 + \right. \\ \left. 3e^{4r} (1 + 4\gamma e^{2e^{-r}})^3 + 8e^{2r} (1 + 4\gamma e^{2e^{-r}}) (-3 + 34\gamma e^{2e^{-r}}) - 32e^r (1 + \gamma e^{2e^{-r}} (-5 + 16\gamma e^{2e^{-r}})) \right)$$

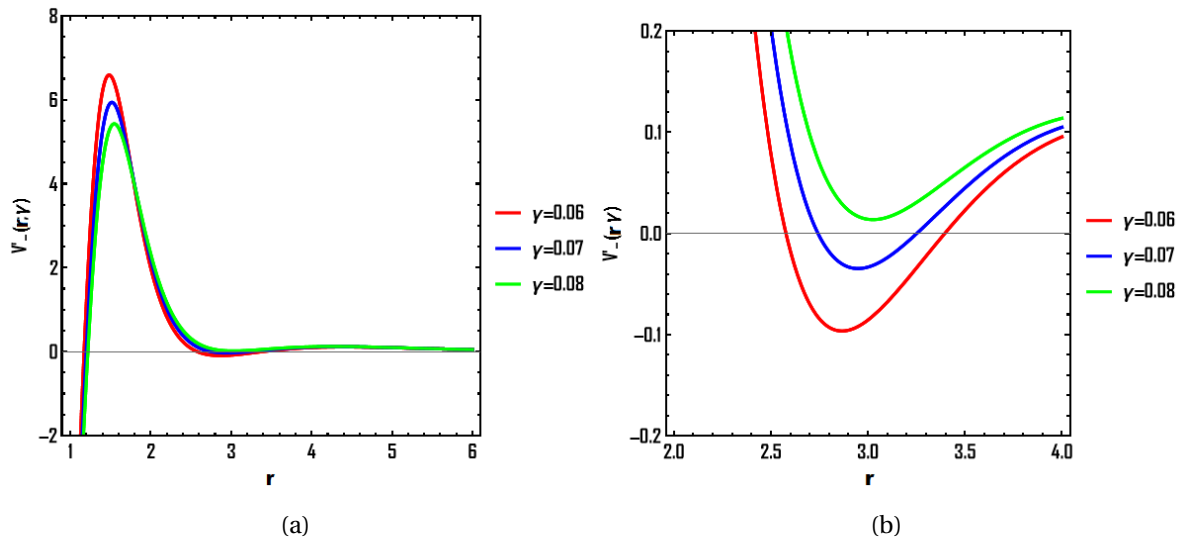


Figura 3.4.3: Derivada para $v(\gamma; r)$, los cruces con cero en el eje r están relacionados con máximos locales. Para $\gamma \approx 0.077$ solo aparece un máximo esto implica que el segundo pozo desaparece.

La acción de incluir el potencial de deformación $-2\frac{d}{dr}\phi(\gamma; r)$ en el compañero supersimétrico $v_-(r)$ para el potencial Morse genera un desplazamiento a lo largo del eje r (3.4.2), este desplazamiento puede estar relacionado con la duración de la vibración en una molécula diatómica, para valores pequeños de γ el desplazamiento aumenta y para valores grandes disminuye.

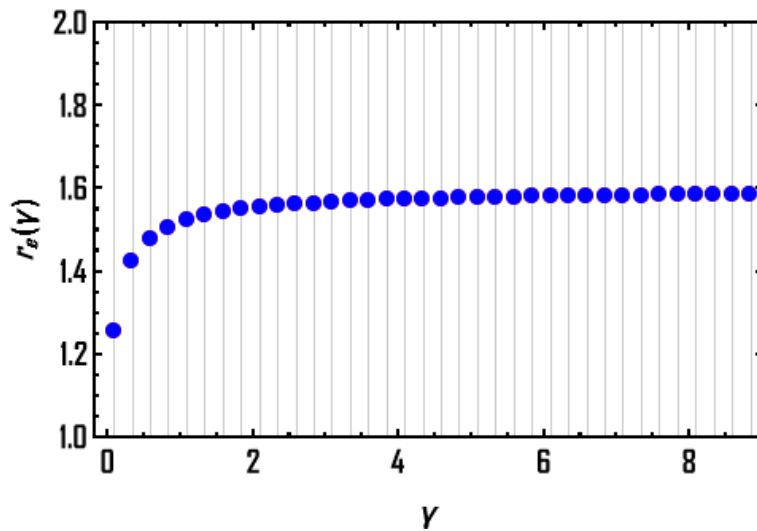


Figura 3.4.4: Para valores pequeños del parámetro de deformación γ el desplazamiento r_e aumenta.

Adicionalmente el mínimo global disminuye, esta propiedad es muy importante debido a que la profundidad del pozo está relacionada con la energía de disociación [56, 57] en la figura (3.4.2) mostramos gráficamente la relación entre la energía de disociación y

la parámetro de deformación, para valores grandes de γ la energía de disociación (o el mínimo global) converge a las originales y desaparece el desplazamiento en r , ver figura (3.4.2).

Los diferentes valores en la energía de disociación pueden interpretarse como el mínimo global en las curvas de los potenciales, esta energía es característica de todo potencial y puede estar relacionada con algunas moléculas diatómicas [58]. La profundidad del pozo ha sido calculada en función de γ , cerca de la región de singularidad el potencial deformado presenta los mayores valores en la profundidad y en el desplazamiento (3.4.2).

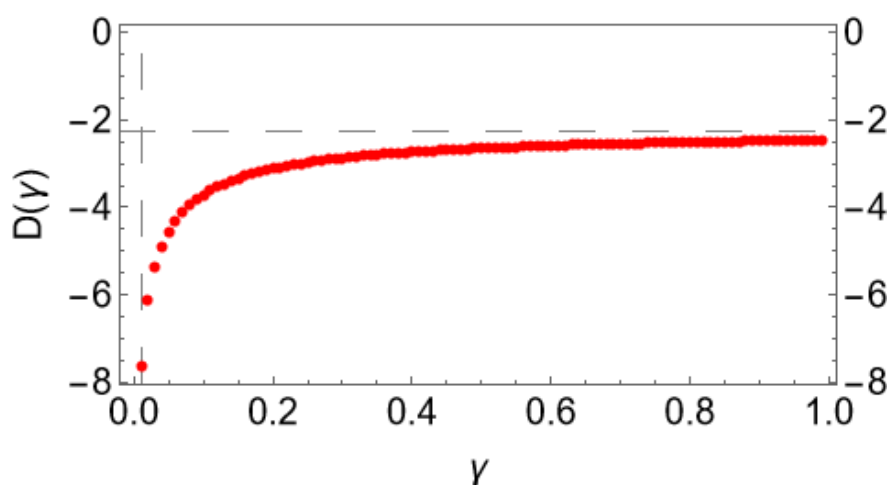


Figura 3.4.5: (a) Energía de disociación en función del parámetro de deformación en el intervalo $0.01 \leq \gamma \leq 1$ tomando particiones de 0.01, la energía de disociación converge a la original $D = -2.25$.

De acuerdo a la ecuación (3.4.43) tenemos que se recupera la pareja supersimétrica $v_-(r)$ del potencial Morse, adicionalmente en la última figura encontramos que para valores grandes del parámetro de deformación el máximo se desplaza a $r - 0.4$. El potencial completo se presenta en la figura (3.4.2).

$$\lim_{\gamma \rightarrow \pm\infty} v(\gamma; r) = (1 - e^{-(r-r_e)})^2 - e^{-(r-r_e)} \quad (3.4.43)$$

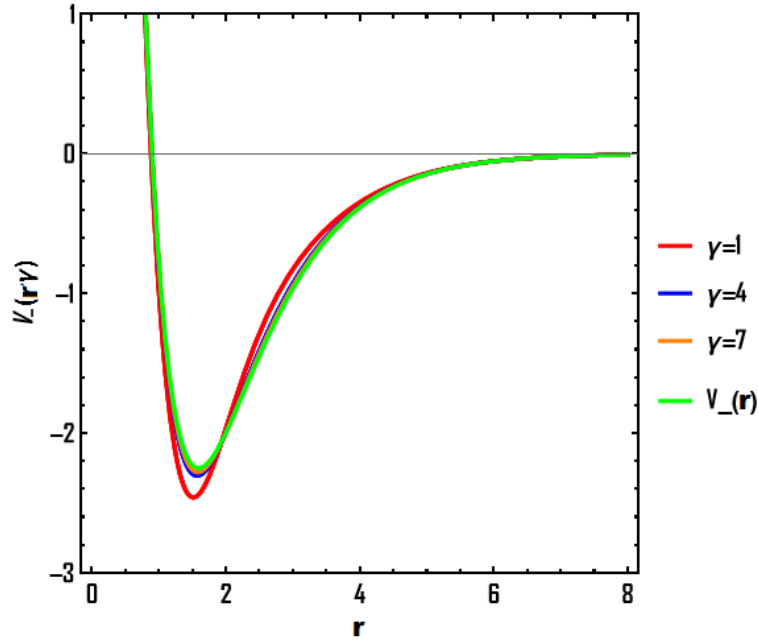


Figura 3.4.6: Convergencia del potencial deformado al compañero supersimétrico $v_-(r)$ relacionado con el de Morse cuando se incrementa el valor de γ .

En nuestro caso la constante de fuerza será una función del parámetro de deformación $K_e(\gamma)$ y está definida como la segunda derivada el potencial de interacción evaluada en el mínimo del potencial [59].

$$\left. \frac{d^2}{dr^2} V(r; l, \gamma) \right|_{r=r_e} = K_e(\gamma) \quad (3.4.44)$$

La figura (3.4.2) se muestra la constante de fuerza y la longitud de enlace, se puede notar que cuándo la longitud del enlace es pequeña se tiene una constante de fuerza mayor que para valores pequeños de la longitud de enlace, esto puede explicarse de la siguiente manera.

Cuando los átomos que forman la molécula diatómica están muy cerca, lo que equivale a decir que la longitud de enlace es pequeña, la fuerza del enlace debe ser muy grande debido a la repulsión que sienten los dos átomos, caso contrario a cuándo la longitud de enlace es mayor, ya que la fuerza del enlace disminuirá su valor.

Esto nos indica que la acción que ejerce el potencial de deformación $\phi(r'; \gamma)$ sobre el compañero supersimétrico $V_-(r')$ es del tipo confinamiento, tal confinamiento depende el valor del parámetro de deformación y sugiere que cuándo estamos cerca de la singularidad los dos átomos que conforman la molécula diatómica están más cercanos que con valores lejos de la región singular.

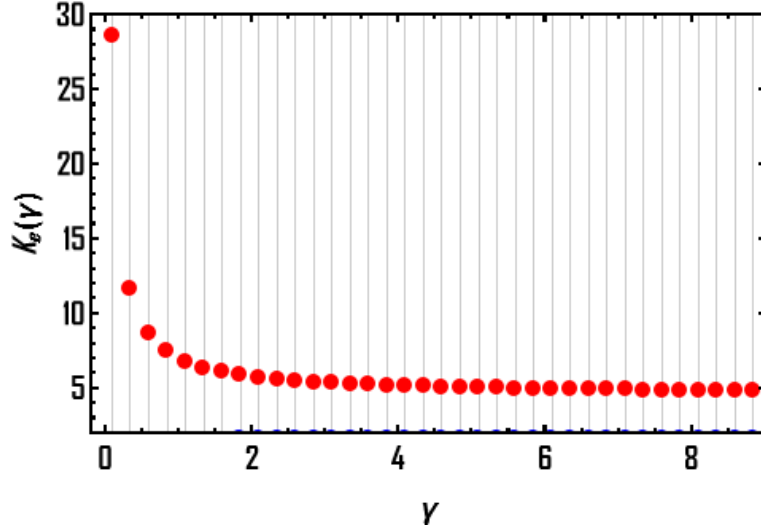


Figura 3.4.7: Constante de fuerza k_e en función de γ .

3.4.3. Eigenfunciones para el compañero supersimétrico y para el potencial deformado

Para calcular las eigenfunciones del compañero supersimétrico se utiliza la relación

$$w = -\frac{\psi'_0}{\psi_0} \quad (3.4.45)$$

para el caso de los compañeros supersimétricos del potencial de Morse utilizados en esta sección se utiliza el superpotencial $w = \sqrt{D_e}(1 - e^{\alpha(r-r_e)})$, por lo cuál la ecuación diferencial para el estado base será:

$$-\frac{\psi'_0}{\psi_0} = \sqrt{D_e}(1 - e^{\alpha(r-r_e)}) \quad (3.4.46)$$

que tiene como solución

$$\psi_0 = e^{-\frac{\sqrt{D_e}(\alpha r + e^{-\alpha(r-r_e)})}{\alpha}} \quad (3.4.47)$$

Las funciones propias para el potencial de Morse deformado se han calculado de acuerdo con el procedimiento de Gandopadhyaya [3], dependen del parámetro de deformación y son funciones singulares en la región en la cual el potencial deformado se vuelve divergente (3.4.50), para fines prácticos tomaremos $\alpha = D_e = 1, r_e = 0$.

$$b\psi_0 = 0 \quad (3.4.48)$$

$$(D_r + w_p + \phi)\psi_0 = 0 \quad (3.4.49)$$

$$\Psi_0 = e^{-\int_0^r (w_p(r') + \phi(r')) dr'} \quad (3.4.50)$$

tengamos en cuenta que $\int_0^r \phi(r') dr' = \log \left[\gamma + e^{-2e^{-r}} \left(\frac{1}{4} + \frac{e^{-r}}{2} \right) \right]$

La función propia del estado fundamental para el oscilador de Morse deformado

$$\Psi_0(r; \gamma) = A_0 \frac{e^{-(e^{-(r-r_e)} + r)}}{\gamma + e^{-2e^{-(r-r_e)}} \left(\frac{1}{4} + \frac{e^{-(r-r_e)}}{2} \right)}, \quad \forall \gamma > 0. \quad (3.4.51)$$

mientras que para los estados excitados

$$\hat{b}\psi_n(r) = \Psi_{n+1}(r; \gamma) \quad (3.4.52)$$

Donde $\psi(r)$ son las funciones propias para los potenciales V_- no deformados paramé-
tricamente y $\psi(r; \gamma)$ para los deformados.

3.5. Modelo exactamente soluble generado con el superpotencial polygama y su convergencia al potencial de Morse q -deformado

En esta sección y como como último caso de aplicación de los métodos de mecánica cuántica supersimétrica a potenciales tipo interacción diatómica vamos a mostrar como construir una familia de Hamiltonianos exactamente solubles tomando la función polygama de orden m con un desplazamiento k como superpotencial y veremos que la forma de la familia de potenciales estudiada $V_-(x; m, k)$ varía en relación del orden la función utilizada como superpotencial. En este sentido se obtiene que para valores pares de m el potencial toma la forma de un potencial de interacción que cumple con las condiciones de admisibilidad para potenciales diatómicos y además en cierto límite converge al potencial de Morse q -deformado estudiado por Setare y Hatami.

Con la finalidad de encontrar el valor aproximado para el valor de m en el cuál el potencial polygamma converge al de Setare-Hatami (Morse q -deformado) aplicamos la técnica de análisis multifractal y el análisis de regularidad de Hölder, este método lo hemos aplicado con anterioridad para potenciales bidimensionales [60].

Es importante resaltar que la función polygama tiene una relación directa con la función zeta de Hurwitz y el utilizarlas como superpotencial nos conducirá a tener un Hamiltoniano cuyo potencial y por ende, sus eigenfunciones involucrarán también estas funciones trascendentales.

La forma de hacer que el potencial polygamma construido con mecánica cuántica supersimétrica converja a un potencial tipo Morse q -deformado es variando los parámetros de energía de disociación D_e y de longitud de enlace r_0 que eventualmente se pueden escribir como funciones del parámetro m . De esta forma y para encontrar los valores precisos donde nuestro potencial polygamma recupera la forma del potencial de Setare-Hatami utilizamos análisis multifractal y los módulos máximos de la transformada wavelet ya que estas técnicas nos permiten estudiar en detalle la distribución de singularidades de una función [24] y nos permiten caracterizar la regularidad local de una señal o de una función. Este método lo aplicamos con anterioridad para encontrar un valor aproximado para el parámetro de deformación [10] en un potencial bidimensional deformado paramé-
tricamente obteniendo tres dígitos de precisión [60].

3.5.1. Superpotenciales

Supongamos que para cierto Hamiltoniano se tiene que la función gama recíproca $\phi_0(x) = 1/\Gamma(x)$ es la función de onda para el estado base. Por lo tanto podemos utilizarla para construir el superpotencial (solución particular de la ecuación de Riccati).

$$w(x;0) = -\frac{(1/\Gamma(x))'}{1/\Gamma(x)} + k = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x) + k = \psi(x;0) + k, \quad (3.5.1)$$

donde $\psi(x;0)$ es la función digamma. Partiendo del resultado anterior se pueden construir superpotenciales tipo polygamma de orden arbitrario.

$$w(x;m) = \psi(x;m) + k = \frac{d^m}{dx^m} \psi(x;0) + k = \frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}} \ln \Gamma(x) + k, \quad (3.5.2)$$

donde $\psi(x;m)$ es la función polygamma de orden m . Es importante recalcar que las funciones polygamma aparecen en la literatura en cálculos relacionados a teoría de scattering [61] y en estados no ligados [62]

Otra aplicación importante de la función polygamma es a través de la función zeta de Hurwitz, que es una generalización de la función zeta de Riemann, que aparece comúnmente en teoría de números [63].

$$\psi(x;m) = (-1)^{m+1} m! \zeta(x; m+1). \quad (3.5.3)$$

3.5.2. Caso $m = 0$ y el potencial triangular

En esta sección vamos a considerar el superpotencial $\psi(x;0)$ que se construye, como ya se mencionó tomando un Hamiltoniano cuya solución para estado base es la función gamma recíproca;

$$w = -\frac{\phi'}{\phi} = -\frac{(1/\Gamma)'}{1/\Gamma} = \psi(x;0) \quad (3.5.4)$$

una vez que tenemos la forma explícita del superpotencial $w(x;m,k)$ podemos generar los potenciales compañeros supersimétricos $V_{\pm}(x) = w^2 \pm w'$

$$v_-(x) = w^2 - w' = \psi^2(x;0) - \psi(x;1) \quad (3.5.5)$$

donde $\psi(x;1)$ es la función trigamma, dada por la primera la derivada de la función digamma $\psi(x;0)$ y el operador Hamiltoniano cuya solución es la gamma recíproca sería

$$H_-(x) = -D_x^2 + \psi^2(x;0) - \psi(x;1) \quad (3.5.6)$$

Dado que la parte no funcional de los operadores de factorización está dada por la solución particular de la ecuación de Riccati que aparece al considerar la condición de isoespectralidad el operador de creación $\hat{a} = -D_x + w$ y la eigenfunción para el estado base podemos generar los estados excitados aplicando de manera recurrente el operador sobre los estados inferiores $\hat{a}\phi_{n-1} = \phi_n$ o bien aplicar n veces el operador sobre el estado base $\hat{a}^n \phi_0 = \phi_n$. En la figura (3.5.2)(a) se muestran las eigenfunciones para el estado base y para algunos estados excitados, estas funciones fueron normalizadas numéricamente.

$$\phi_0(x;0) = \frac{1}{\Gamma(x)}, \quad (3.5.7)$$

$$\phi_1(x;0) = 2\psi(x;0)\phi(x;0), \quad (3.5.8)$$

$$\phi_2(x;0) = (4\psi^2(x;0) - 2\psi(x;1))\phi(x;0), \quad (3.5.9)$$

$$\phi_3(x;0) = (8\psi^3(x;0) - 12\psi(x;0)\psi(x;1) + 2\psi(x;2))\phi(x;0) \quad (3.5.10)$$

Para el compañero supersimétrico $V_+(x) = w^2 + w'$ se obtiene;

$$V_+(x) = w^2 + w' = \psi^2(x;0) + \psi(x;1) \quad (3.5.11)$$

que corresponde al Hamiltoniano $H_+(x)$

$$H_+(x) = -D_x^2 + \psi^2(x;0) + \psi(x;1) \quad (3.5.12)$$

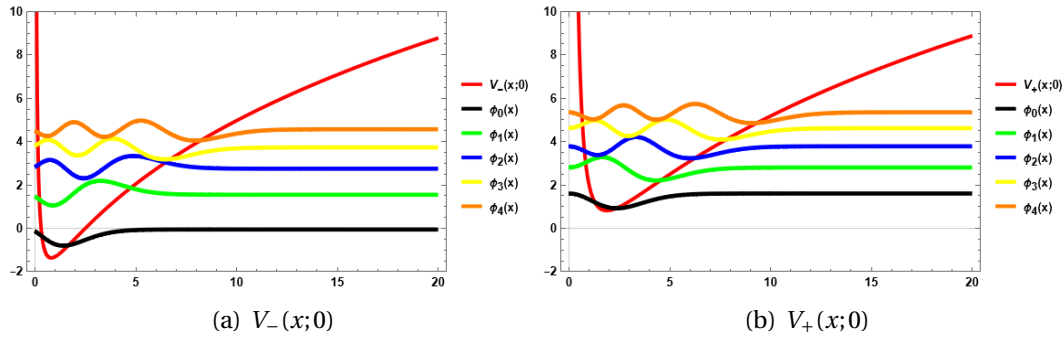


Figura 3.5.1: Potenciales $V_{\pm}(x;0)$ con eigenfunciones normalizadas y eigenvalores.

La relación entre los eigenvalores para los Hamiltonianos $\hat{H}_+(x;0)$ y su compañero supersimétrico $\hat{H}_-(x;0)$ se muestra en la figura (3.5.2) (a). Se puede apreciar que los eigenvalores de $\hat{H}_+(x;0)$ son los mismos que los eigenvalores (ϵ_{n+1}) para el Hamiltoniano $\hat{H}_-(x;0)$ (3.5.2) (b), lo que nos indica que la supersimetría está rota.

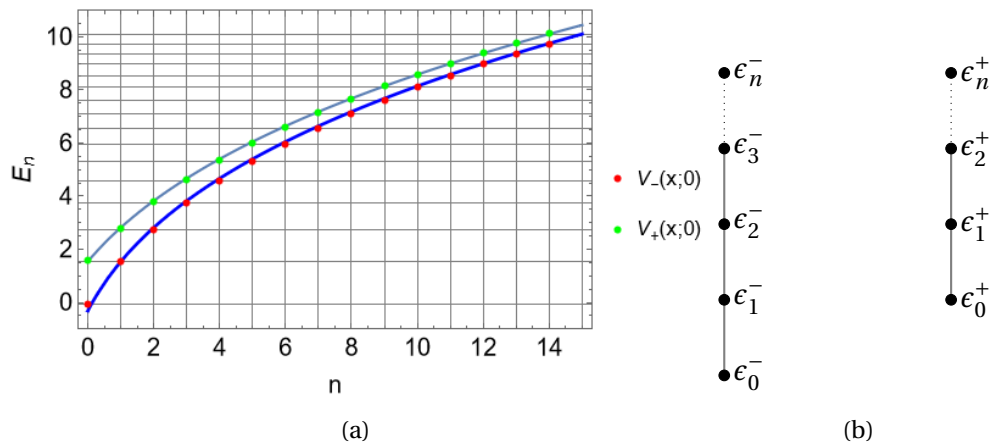


Figura 3.5.2: Eigenvalores para los compañeros supersimétricos (a) y esquema de escalera (b).

3.5.3. Caso $w = \psi(x; m)$, m par

El caso $m = 0$ se obtuvieron potenciales tipo triangular, ahora consideraremos la familia de superpotenciales $w = \psi(x; m)$ para m par que nos dará un potencial diatómico. De esta manera el nuevo potencial $V_{\pm}(x; m, k) = w^2 \pm w'$ será:

$$V_{\pm}(x; m, k) = w^2 \pm w' = \psi^2(x; m) + 2k\psi(x; m) \mp \psi(x; m+1) + k^2 - k^2. \quad (3.5.13)$$

$$H_{-}(x; m) = -D_x^2 + \psi^2(x; m) + 2k\psi(x; m) - \psi(x; m+1). \quad (3.5.14)$$

El estado base para el Hamiltoniano anterior se encuentra aplicando el operador de aniquilación sobre la eigenfunción para el estado base $\hat{a}\phi_0(x; m, k) = 0$

$$\phi_0(x; m, k) = e^{-\int_0^x w(x'; m) dx'} = e^{-kx - \psi(x; m-1)} \quad (3.5.15)$$

Los estados excitados pueden encontrarse aplicando el operador de creación sobre el estado base

$$\phi_n(x; m, k) = (\hat{a}^{\dagger})^n \phi_0(x; m, k) \quad (3.5.16)$$

Por ejemplo, los primeros tres estados excitados son dados por:

$$\phi_1(x; m, k) = (2\psi(x; m) + k) \phi_0(x; m, k) \quad (3.5.17)$$

$$\phi_2(x; m, k) = (4(k + \psi(x; m))^2 - 2\psi(x; m+1)) \phi_0(x; m, k) \quad (3.5.18)$$

$$\phi_3(x; m, k) = (8(k + \psi(x; m))^3 - 12(k + \psi(x; m))\psi(x; m+1) + 2\psi(x; m+2)) \phi_0(x; m, k) \quad (3.5.19)$$

En la figura [3.5.3](#) se muestran el estado base y los primeros 2 estados excitados, podemos apreciar el desplazamiento espacial hacia la derecha en función del parámetro m .

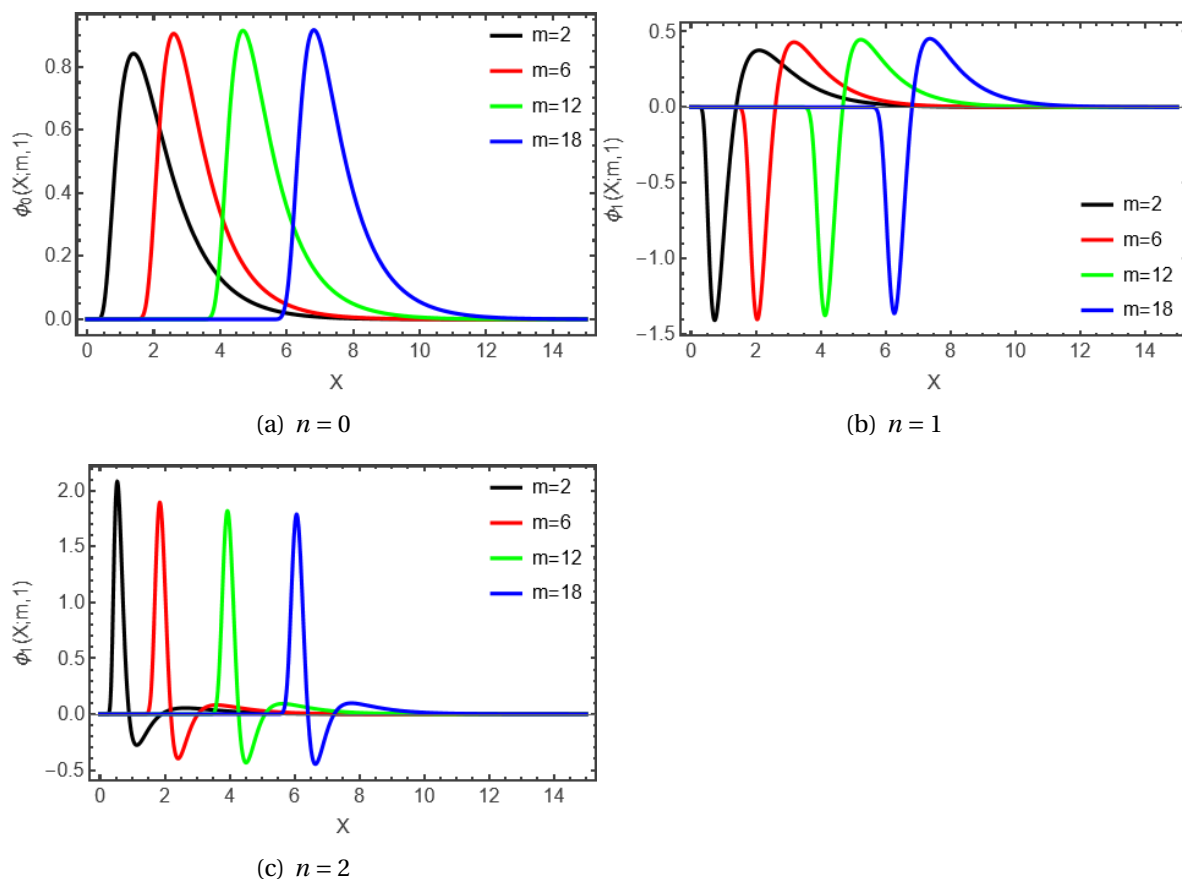


Figura 3.5.3: Estado base y los primeros dos estados excitados, se puede observar el desplazamiento producido por el parámetro m .

Dado que la función polygama y su equivalente, la función zeta de Hurwitz son funciones trascendentales usamos métodos numéricos para aproximar los datos reportados en esta sección, específicamente los relacionados con el mínimo de los potenciales $V_-(x; m, k)$. En la figura 3.5.4 se muestran los gráficos para los potenciales $V_-(x; m, k)$ para ciertos valores del parámetro m donde se observa que para valores pares el mínimo del potencial se desplaza a la derecha conforme se incrementa el valor de m .

En la tabla (3.5.1) se encuentran reportados algunos valores para la profundidad y el desplazamiento en el potencial $V_-(x; m, k)$ y los valores para el parámetro q , calculado con la ecuación (3.5.33).

Se puede apreciar que para valores grandes de m la profundidad del potencial $V_-(x; m, k)$ disminuye, esta información implica que la profundidad del pozo es una función que depende del parámetro m . En este punto, debemos recordar que en los potenciales tipo Morse la profundidad equivale a la energía de disociación D_e , una constante espectroscópica básica en el estudio de moléculas diatómicas [57, 64].

En los casos para valores pares de m los potenciales $V_-(x; m, k)$ son funciones de tipo exponencial decreciente que no son de interés para las metas de este artículo.

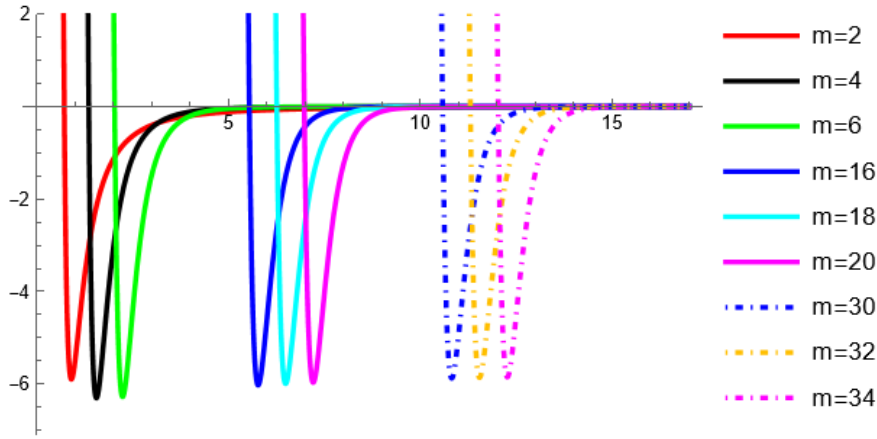


Figura 3.5.4: Potencial $V_-(x; m, k = 1)$ para algunos valores de m , el mínimo se desplaza a la derecha en función del parámetro m , que también ocasiona que la profundidad del pozo varíe.

3.5.4. Convergencia al potencial de Morse q-deformado

Como puede notarse en la gráfica (3.5.4) la forma de la familia de potenciales $V_-(x; m, k)$ se asemeja al potencial de Morse, por lo que en esta sección mostraremos las condiciones necesarias para afirmar que el potencial obtenido con el método supersimétrico equivale a un potencial de ese tipo para algunos valores del parámetro m .

Por otro lado y de acuerdo a [32], el potencial Morse q -deformado es un potencial exactamente soluble que puede obtenerse al tomar un caso deformado del potencial original de Morse al introducir un escalar arbitrario el potencial original.

$$V_q(r; r_e, D_e, \alpha) = D_e (q - e^{-\alpha(r-r_e)})^2 - D_e q^2 = D_e (e^{-2\alpha(r-r_e)} - 2q e^{-\alpha(r-r_e)}), \quad (3.5.20)$$

Vamos a caracterizar el potencial q deformado para obtener las constantes espectroscópicas relacionadas al mismo, empezando por calcular el parámetro r_c .

$$D_e (e^{-2\alpha(r_c-r_e)} - 2q e^{-\alpha(r_c-r_e)}) = 0 \quad (3.5.21)$$

multiplicamos la ecuación anterior por $e^{\alpha(r_c-r_e)}$

$$D_e (e^{-\alpha(r_c-r_e)} - 2q) = 0 \quad (3.5.22)$$

que tiene como solución una longitud de enlace que depende de los parámetros a, q y r_e

$$r_c = r_e + \frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{1}{2q} \right) \quad (3.5.23)$$

La posición del mínimo global, o bien, la longitud de enlace de equilibrio $r_{e,q}$ para el potencial de Morse con deformación q se obtiene derivando el potencial respecto a r e igualando a cero el resultado

$$D_e (e^{-2\alpha(r_{e,q}-r_e)} - 2q\alpha e^{-\alpha(r_{e,q}-r_e)}) = 0 \quad (3.5.24)$$

se obtiene que depende solo de de la longitud de equilibrio del potencial no deformado r_e y del parámetro α

$$r_{e,q} = r_e + \frac{1}{\alpha} \ln\left(\frac{1}{q}\right) \quad (3.5.25)$$

Respecto a la fuerza del enlace k_q para este potencial calcularemos la segunda derivada y la evaluaremos en la longitud de equilibrio dada en la ecuación anterior.

$$k_q = V_q''(r; r_e, D_e, \alpha) \Big|_{r=r_{e,q}} = D_e [4\alpha^2 e^{-2\alpha(r-r_e)} - 2\alpha q e^{-\alpha(r-r_e)}] \Big|_{r=r_{e,q}} \quad (3.5.26)$$

$$k_q(\alpha, D_e) = 2D_e \alpha^2 q^2 \quad (3.5.27)$$

o en términos de la constante de fuerza para el potencial de Morse (3.4.12):

$$k_q = k_M q^2 \quad (3.5.28)$$

la acción de tomar el parámetro q en el potencial de Morse da como resultado una deformación de la constante de fuerza que se recupera cuándo $q = 1$, además, gracias a la sencillez de la expresión para k_q escrita en (3.5.27) podemos obtener la fórmula para el parámetro α_q .

$$\alpha_q = \frac{1}{q} \sqrt{\frac{k_q}{2D_e}} \quad (3.5.29)$$

Para encontrar la fórmula para la energía de disociación de este potencial de Morse deformado sustituimos $r_{e,q}$ en el potencial, para obtener que dependerá de los parámetros

$$D_{e,q} = V_q(r; r_e, D_e, \alpha) \Big|_{r=r_{e,q}} \quad (3.5.30)$$

$$= D_e \left(e^{-2\alpha(r_e + \frac{1}{\alpha} \ln(\frac{1}{q}) - r_e)} - 2q e^{-\alpha(r_e + \frac{1}{\alpha} \ln(\frac{1}{q}) - r_e)} \right) \quad (3.5.31)$$

$$= -q^2 D_e \quad (3.5.32)$$

El término $-q^2 D_e$ en la ecuación (3.5.32) nos da el valor del mínimo del potencial para $V_q(r; r_e, D_e, \alpha)$ por lo tanto el parámetro q va a estar relacionado directamente con la profundidad del pozo del potencial. Dado que queremos revisar el límite en el cuál converge el potencial polygamma y el q deformado de Morse primero vamos a igualar los mínimos de ambos potenciales

$$D_{e,m} = q^2 D_{e,q}, \quad q = \sqrt{\frac{D_{e,m}}{D_{e,q}}} \quad (3.5.33)$$

Una vez que tenemos la relación de la profundidad entre los dos potenciales podemos ajustar los parámetros restantes, dado que para el potencial polygamma no puede encontrarse analíticamente la posición del mínimo, es decir la longitud de enlace de equilibrio

utilizamos métodos numéricos. Obteniendo que el desplazamiento en el potencial q deformado debe ser $r'_e = r_0 - 1/3$, donde r_e es la posición del mínimo para $V_-(r; m, k)$, mientras que el parámetro de ancho nos da $\alpha = 2.75$.

Por lo tanto el potencial q deformado que utilizaremos para comparar con los potenciales $V_-(r; m, k)$, será;

$$v(r; q, r'_e) = e^{-2\alpha(r-r'_e)} - 2q(m, k)e^{-\alpha(r-r'_e)} \quad (3.5.34)$$

En la tabla 3.5.1 se muestran algunos valores para la profundidad y la posición del pozo $V_-(r; m, k)$ en función de los parámetros m y k , además del valor de q para cada caso (3.5.33). Podemos notar que si tomamos un m fijo la profundidad del pozo aumenta en función del parámetro k , mientras que su desplazamiento respecto al origen va disminuyendo. Por otro lado, si tomamos un k fijo el efecto del parámetro m aparece más claramente en el desplazamiento del pozo, mientras que su efecto en la profundidad varía muy lentamente.

	m	2	4	6	8	10	50	100	150
$k = 0.5$	$r_e(m, k)$	0.6473	1.2875	1.9695	2.6652	3.3686	17.8207	36.0915	54.4122
	$D(m, k)$	-3.1185	-3.7193	-3.8037	-3.8076	-3.7931	-3.6023	-3.5462	-3.5228
	$q(m, k)$	1.7659	1.9285	1.9503	1.9513	1.9476	1.8979	1.8831	1.8769
$k = 1$	$r_e(m, k)$	0.5581	1.2103	1.8930	2.5883	3.2910	17.7374	36.0066	54.3266
	$D(m, k)$	-5.8955	-6.3008	-6.2746	-6.2117	-6.1525	-5.7816	-5.6948	-5.6601
	$q(m, k)$	2.4280	2.5101	2.5049	2.4923	2.4804	2.4044	2.3863	2.3790
$k = 1.5$	$r_e(m, k)$	0.4965	1.1519	1.8338	2.5280	3.2298	17.6703	35.9381	54.2575
	$D(m, k)$	-9.3544	-9.4663	-9.2997	-9.1556	-9.0433	-8.4669	-8.3464	-8.2993
	$q(m, k)$	3.0585	3.0767	3.0495	3.0258	3.0072	2.9098	2.88903	2.8808
$k = 2$	$r_e(m, k)$	0.4500	1.1052	1.7856	2.4785	3.1793	17.9642	35.6507	54.1996
	$D(m, k)$	-13.4654	-13.2023	-12.8702	-12.6329	-12.4604	-11.6571	-11.5005	-11.4401
	$q(m, k)$	3.0585	3.6335	3.5875	3.5542	3.5299	3.4142	3.3912	3.3823

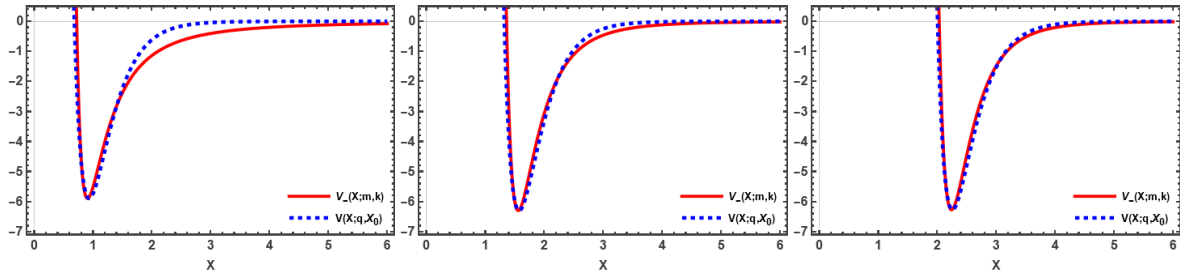
Tabla 3.5.1: Posición del pozo para $V_-(r; m, k)$ y el valor de $q(m, k)$ relacionado para algunos valores de m y k . Puede apreciarse que tomando un m fijo la energía de disociación incrementa en función del parámetro k .

3.5.5. Regularidad de Hölder y análisis multifractal

Con la finalidad de obtener el valor aproximado cuando el potencial polygama converge al q -deformado de Setare-Hatami utilizamos análisis multifractal, que ha probado ser un método asequible en el caso de similaridad en un conjunto de señales, donde la similitud entre ambas es establecida comparando los espectros multifractal y la localización de las singularidades junto a su exponente de Hölder. En este trabajo, aplicamos el análisis al potencial q -deformado y al potencial polygama (3.5.5).

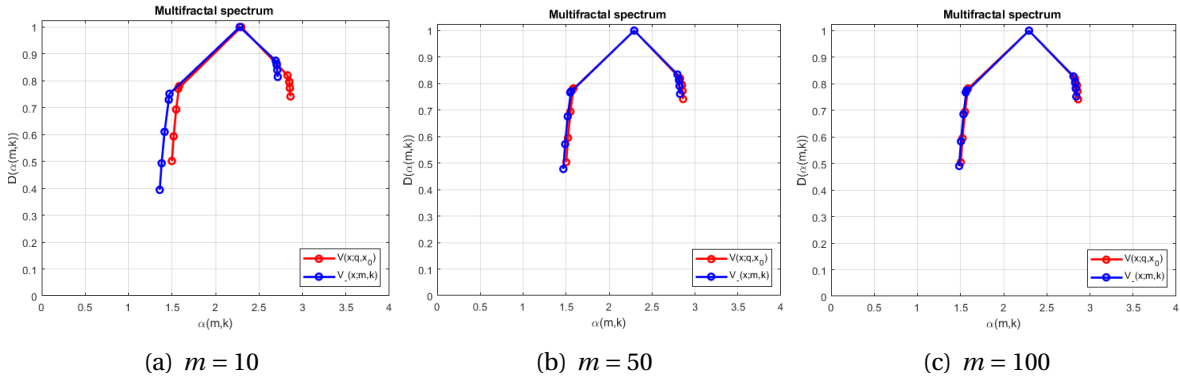
En este caso los exponentes Hölder dependen de los parámetros m y k .

El filtro utilizado para el análisis de los potenciales es el db2 debido a su estabilidad numérica en la caracterización de las 'señales' analizadas $V_-(r; m, k)$ y $V(r; q, r_e)$. En la figura 3.5.6 se presentan los espectros multifractal para las dos señales para el caso $k = 1$ y diferentes valores de m , donde podemos apreciar que el espectro multifractal de las dos señales converge conforme el valor de m se incrementa.



(a) $m = 2, q = 0.9529, r_e = 0.5581$ (b) $m = 4, q = 1.2491, r_e = 1.2103$ (c) $m = 6, q = 1.4976, r_e = 1.8930$

Figura 3.5.5: Potenciales para diferentes valores del parámetro m con $k = 1$.



(a) $m = 10$

(b) $m = 50$

(c) $m = 100$

Figura 3.5.6: Espectro multifractal para los dos potenciales con diferentes valores del parámetro m con $k = 1$.

$(X_0, \alpha(m, k))$			
m	10	50	100
$V_-(x; m, k)$	(7,1.1057), (278,1.9772)	(7,1.2151), (294,1.9833)	(7,1.2331), (298,1.9844)
$V(x; q, x_0)$	(7,1.2458), (302,1.9848)	(7,1.2385), (306,1.9842)	(7,1.2369), (306,1.9835)

Tabla 3.5.2: Exponente de Hölder $\alpha(m, k)$ y su localización X_0 . Podemos apreciar que para $m = 100$ el exponente de Hölder converge hasta dos decimales.

3.5.6. Potencial zeta de Hurwitz

Dada la relación $\psi(r; m) = (-1)^{m+1} m! \zeta(r; m+1)$ el potencial $V_-(r; m, k)$ puede escribirse como;

$$V_-(r; m, k) = \left((-1)^{m+1} m! \zeta(r; m+1) \right)^2 + 2k (-1)^{m+1} m! \zeta(r; m+1) - (-1)^{m+2} (m+1)! \zeta(r; m+2) \quad (3.5.35)$$

y las eigenfunciones

$$\begin{aligned}
\phi_0(r; m, k) &= e^{-kx - (-1)^m (m-1)! \zeta(r; m)} \\
\phi_1(r; m, k) &= (2(-1)^{m+1} (m)! \zeta(r; m+1) + k) \phi_0(r; m, k) \\
\phi_2(r; m, k) &= (4(k + (-1)^{m+1} (m)! \zeta(r; m+1)))^2 - 2(-1)^{m+2} (m+1)! \zeta(r; m+2)) \phi_0(r; m, k) \\
\phi_3(r; m, k) &= (8(k + (-1)^{m+1} (m)! \zeta(r; m+1))^3 - 12(k + (-1)^{m+1} (m)! \zeta(r; m+1)) \\
&\quad * (-1)^{m+2} (m+1)! \zeta(r; m+2) + 2(-1)^{m+3} (m+2)! \zeta(r; m+3)) \phi_0(r; m, k)
\end{aligned}$$

3.6. Conclusiones del capítulo

En este capítulo se calcularon las constantes espectroscópicas como la longitud de enlace de equilibrio r_e , energía de disociación D_e , constante de fuerza k y la longitud de enlace crítica r_c para los potenciales de Kratzer, Morse, Morse q deformado y los compañeros supersimétricos de cada uno.

Se encontró que para el compañero supersimétrico $V_-(r)$ se obtiene que la longitud de enlace de equilibrio disminuye respecto a la del potencial original $V(r)$, mientras que el valor absoluto de la energía de disociación supersimétrica aumenta, lo mismo sucede con la constante de fuerza.

Para el caso del compañero $V_+(r)$ se obtiene que existe un valor crítico para α que depende de la energía de disociación en el cuál se obtienen casos de potenciales estrictamente atractivos que no se estudian a detalle en el presente documento ya que no son de interés para los fines propuestos.

Además de eso se calcularon los potenciales con deformación paramétrica para los cuales se encontró que el potencial deformado presenta una estructura tipo doble pozo cuando el parámetro de deformación toma valores cercanos a los delimitados por la región singular que aparece cuándo el divisor de la función $\phi(r; \gamma)$ es cero. Mostramos que el segundo pozo desaparece cuando el valor del parámetro de deformación es mayor que 0.077. Para valores elevados del parámetro de deformación el potencial deformado converge al compañero supersimétrico del potencial compañero supersimétrico correspondiente $V_-(r)$.

Para todos los casos estudiados encontramos que existe una relación entre la energía de disociación (profundidad del pozo) y el parámetro de deformación γ , teniendo en cuenta que la profundidad del pozo está relacionada con la energía necesaria para disociar una molécula estos resultados implican que la derivada de la función $\phi(r; \gamma)$ que aparece en el potencial deformado es una función que se relaciona con tal energía. Cuando el parámetro de deformación toma valores pequeños la contribución de tal derivada es fuerte e introduce una notable deformación en el potencial socio supersimétrico su acción directa sobre el potencial $V_-(r)$ es incrementar la profundidad del pozo. En términos de moléculas diatómicas esto implica que la energía necesaria para disociar dos átomos aumenta, adicionalmente a esto tenemos que la longitud de enlace de equilibrio r_e se reduce cuando el potencial externo $2\phi'$ deforma el compañero supersimétrico.

Para valores pequeños del parámetro de deformación obtenemos grandes energías de disociación y longitudes de enlace pequeñas, mientras que para valores elevados la

profundidad se ve reducida y el desplazamiento aumenta. Estos datos sugieren que la función $\phi(r; \gamma)$ puede estar relacionada con un potencial externo y la interacción de estos con el compañero supersimétrico original está controlada por el parámetro de deformación.

Estudiando el comportamiento de la constante de fuerza y la longitud de enlace se pudo observar que cuándo la longitud del enlace es pequeña se tiene una constante de fuerza mayor que para valores pequeños de la longitud de enlace. Esto nos indica que la acción ejercida por el potencial de deformación $\phi(r'; \gamma)$ sobre el compañero supersimétrico $V_-(r')$ es del tipo confinamiento, el cual depende del valor elegido para el parámetro de deformación y sugiere que cuándo estamos cerca de la singularidad los dos átomos que conforman la molécula diatómica están más unidos que con valores mayores.

En la última sección se estudió un Hamiltoniano exactamente soluble cuyo potencial esta formado por funciones polygama de orden par y cero, tal Hamiltoniano se construyó con el método supersimétrico tomando la función polygama de orden m con un desplazamiento escalar k como superpotencial.

Para este potencial encontramos que para los casos pares se obtienen potenciales de tipo repulsivo similares a los utilizados en el modelado de moléculas diatómicas lo que nos permitió visualizar que en un cierto límite para el orden de la función polygama utilizada en el superpotencial que genera el compañero $V_-(r; m)$ este converge a un potencial de Morse deformado que fue estudiado por Setare y Hatami. Se encontró una relación directa entre la profundidad del pozo para el potencial q deformado y la del $V_-(r; m)$, con la finalidad de hacer que los dos potenciales sean equivalentes se ajustaron los valores para los parámetros de longitud de enlace entre el potencial de Setare y el nuestro para ajustar los mínimos.

Para tener una medición precisa del valor de m en el cuál convergen utilizamos la técnica de análisis multifractal y exponentes de Hölder. Con la información proporcionada calculamos hasta dos dígitos de precisión que el potencial generado con el superpotencial polygama converge al potencial de Morse q -deformado de Setare-Hatami (con parámetros ajustados) cuando el parámetro m toma valores mayores a 100.

Finalmente mostramos el caso $m = 0$ en el cuál se genera un potencial de tipo triangular, que aparece comúnmente en el área de física de semiconductores, la aproximación numérica de los eigenvalores realizada con el método de elemento finito nos muestra que existe una relación cercana entre el potencial triangular estándar y el desarrollado en este capítulo para el caso $m = 0$ y podría presentarse como una perturbación de tal.

Capítulo 4

El método de factorización como generador de Hamiltonianos invariantes bajo el operador \mathcal{PT} .

En este capítulo presentamos una generalización del método de factorización para obtener diversos potenciales con simetría \mathcal{PT} y daremos un conjunto de restricciones para su correcto funcionamiento.

Comenzaremos proponiendo una pareja arbitraria de operadores diferenciales con los que construiremos una familia de compañeros supersimétricos $\hat{H}_{\pm}(x)$ para después exigirles que sean invariantes bajo la acción de los operadores \mathcal{PT} y finalmente obtener las condiciones para que se cumpla tal exigencia.

Sean los operadores $\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}$ operadores de factorización y $f(x) \in \mathbb{R}$ una función arbitraria.

$$\hat{a}^{\dagger} = -D_x + i f(x), \quad (4.0.1)$$

$$\hat{a} = D_x + i f(x). \quad (4.0.2)$$

Al ser aplicados sobre una eigenfunción arbitraria $\psi(x)$ en el orden $\hat{a}^{\dagger} \hat{a} \psi(x) = \hat{H}_-(x) \psi(x)$ y $\hat{a} \hat{a}^{\dagger} \psi(x) = \hat{H}_+(x) \psi(x)$ se obtiene una familia de Hamiltonianos compañeros supersimétricos [4].

$$\hat{H}_{\pm}(x) = -D_x^2 \pm i f'(x) - f^2(x). \quad (4.0.3)$$

Al aplicar los operadores \mathcal{P} y \mathcal{T} sobre el Hamiltoniano anterior se obtienen las siguientes relaciones individuales (4.0.4), (4.0.5) y la del operador conjunto \mathcal{PT} (4.0.6).

$$\mathcal{P} H_{\pm}(x) = -D_x^2 \pm i f'(-x) - f^2(-x), \quad (4.0.4)$$

$$\mathcal{T} H_{\pm}(x) = -D_x^2 \mp i f'(x) - f^2(x), \quad (4.0.5)$$

$$\sqrt{\square} \mathcal{H} H_{\pm}(x) = -D_x^2 \mp i f'(-x) - f^2(-x). \quad (4.0.6)$$

Condiciones sobre $f(x)$ para obtener simetría \mathcal{PT} .

La igualdad (4.0.6) nos muestra que los potenciales obtenidos son invariantes bajo la acción de los operadores de paridad \mathcal{P} y el time reversal \mathcal{T} cuando el cuadrado de la función $f(x)$ resulta ser una función par y su primer derivada una función impar.

Algunas funciones que abarcan tal requerimiento son las potencias $\{x^n, n \text{ par}\}$ y las funciones trigonométricas $\{\cos(x), \sec(x)\}$.

4.1. Familia de Hamiltonianos para potenciales tipo x^n con simetría \mathcal{PT} .

En esta sección estudiaremos una familia de potenciales con la función $f(x) = x^n$ y corroboraremos la condición de paridad del parámetro n .

Sustituyendo la función $f(x)$ en los operadores de factorización (4.0.1) y (4.0.2) obtenemos la siguiente pareja de operadores diferenciales.

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger &= -D_x + ix^n, \\ \hat{a} &= D_x + ix^n.\end{aligned}$$

que generan una familia de Hamiltonianos con parte real e imaginaria invariantes bajo la acción de los operadores \mathcal{PT} cuando n es un número par:

$$\hat{H}_\pm(x) = -D_x^2 \pm inx^{n-1} - x^{2n}. \quad (4.1.1)$$

$$\mathcal{PT} H_\pm(x) = \mathcal{P}[-D_x^2 \mp inx^{n-1} - x^{2n}] = -D_x^2 \pm inx^{n-1} - x^{2n} = H_\pm(x). \quad (4.1.2)$$

4.1.1. Simulaciones para los eigenvalores.

La solución para la ecuación de eigenvalores de la ecuación de Schrödinger en una dimensión espacial con operadores Hermitianos arroja eigenvalores completamente reales, en nuestro caso los eigenvalores pueden ser una mezcla de valores complejos y reales puros. Esto sucede porque los eigenvalores asociados a cada una de las eigenfunciones del Hamiltoniano pueden no serlo del operador \mathcal{PT} [18].

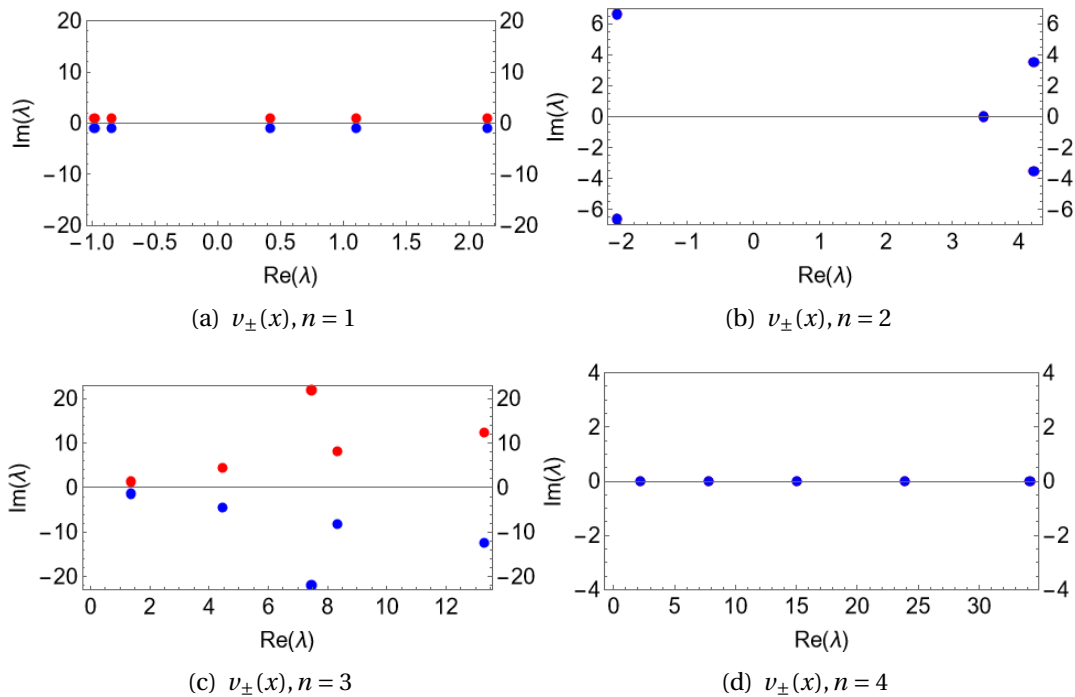
Los eigenvalores complejos para los casos donde se presenta transición de fase \mathcal{PT} aparecen como pares conjugados, en las gráficas podemos apreciar que los únicos potenciales que presentan transición de fase, es decir que existe un punto dónde se transita de una región con simetría \mathcal{PT} rota (eigenvalores complejos conjugados) a una dónde la simetría no presenta rompimiento y por ende los eigenvalores son reales es para los potenciales con n par. El caso con n par del que ya se ha hecho mención con anterioridad satisface la condición de invariancia del Hamiltoniano bajo la acción de los operadores \mathcal{P} y \mathcal{T} .

El análisis de los gráficos nos arroja también que para los Hamiltonianos con n par los potenciales resultan ser estrictamente isoespectrales. Esto se atribuye al método de generar las familias de Hamiltonianos y es una consecuencia directa de que los compañeros supersimétricos no presentan rompimiento de supersimetría.

$$\hat{H}_{\pm}(x)\psi(x) = (-D_x^2 + V_{\pm}(x))\psi(x) = \lambda_n\psi_{\pm}(x) \quad (4.1.3)$$

Las simulaciones para los eigenvalores de la ecuación (4.1.3) fueron realizadas en Mathematica con el método de elemento finito con un tamaño de malla de 0.0001 en el rango $-5 < x < 5$, el cuál fue elegido por la forma de los potenciales $V_{\pm}(x)$. Se corroboró el correcto funcionamiento del método calculando los eigenvalores dados por Bender para el potencial $v = -(ix)^N$ [17].

En la figura (4.1.1) se aprecia que para n par tenemos un punto crítico en el cuál los eigenvalores pasan de tener valores complejos a un una región donde son números reales.



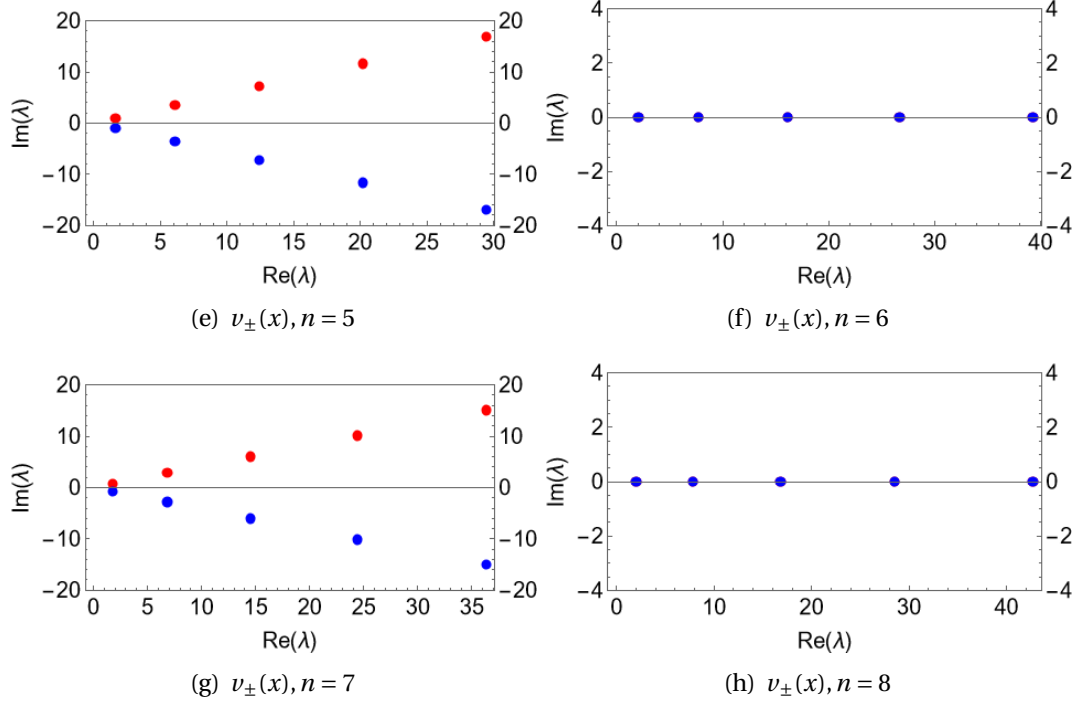


Figura 4.1.1: Eigenvalores para los potenciales $V_{\pm}(x)$.

Los casos con n impar muestran que los eigenvalores son números complejos (4.1.1), por lo tanto la simetría \mathcal{PT} esta rota, otra cosa relevante es que los eigenvalores para el potencial $V_+(x)$ y $V_-(x)$ son complejos conjugados de los correspondientes a su compañero supersimétrico $\lambda(V_+) = \lambda^*(V_-)$ [18].

4.2. Familia de potenciales hiperbólicos.

Al sustituir el superpotencial $w_n(x) = \text{sech}^n(x)$ obtenemos una familia de potenciales tipo Scarf II, utilizando $\text{sech}^n(-x) = \text{sech}^n(x)$ y $\tanh(-x) = -\tanh(x)$ encontramos que esa familia de potenciales resulta ser invariante bajo la acción del operador \mathcal{PT} .

$$\hat{H}_{\pm}(x) = -D_x^2 \mp in \text{sech}^{n+1}(x) \sinh(x) - \text{sech}^{2n}(x). \quad (4.2.1)$$

considerando que $\text{sech}^{n+1}(x) \sinh(x) = \text{sech}^n(x) \text{sech}(x) \sinh(x) = \text{sech}^n(x) \tanh(x)$,

$$\hat{H}_{\pm}(n, x) = -D_x^2 \mp in \text{sech}^n(x) \tanh(x) - \text{sech}^{2n}(x) = -D_x^2 + v_{\pm}(n, x). \quad (4.2.2)$$

$$\mathcal{PT} v_{\pm}(n, x) = \mathcal{PT} [\mp in \text{sech}^n(x) \tanh(x) - \text{sech}^{2n}(x)], \quad (4.2.3)$$

$$= \pm in \text{sech}^n(-x) \tanh(-x) - \text{sech}^{2n}(-x), \quad (4.2.4)$$

$$= \mp in \text{sech}^n(x) \tanh(x) - \text{sech}^{2n}(x). \quad (4.2.5)$$

El caso $n = 1$ es el potencial Scarf II \mathcal{PT} simétrico [70]. Todos los potenciales de la familia (4.2.2) se mantienen invariantes bajo la acción de los operadores de paridad y

tiempo como puede observarse en la ecuaciones (4.2.3) y (4.2.5) y gráficamente en la figura (4.2.1).

Sabemos que la invarianza del potencial bajo la acción de los operadores no es suficiente para afirmar que una familia de potenciales tiene simetría \mathcal{PT} ya que debe tener espectro real.

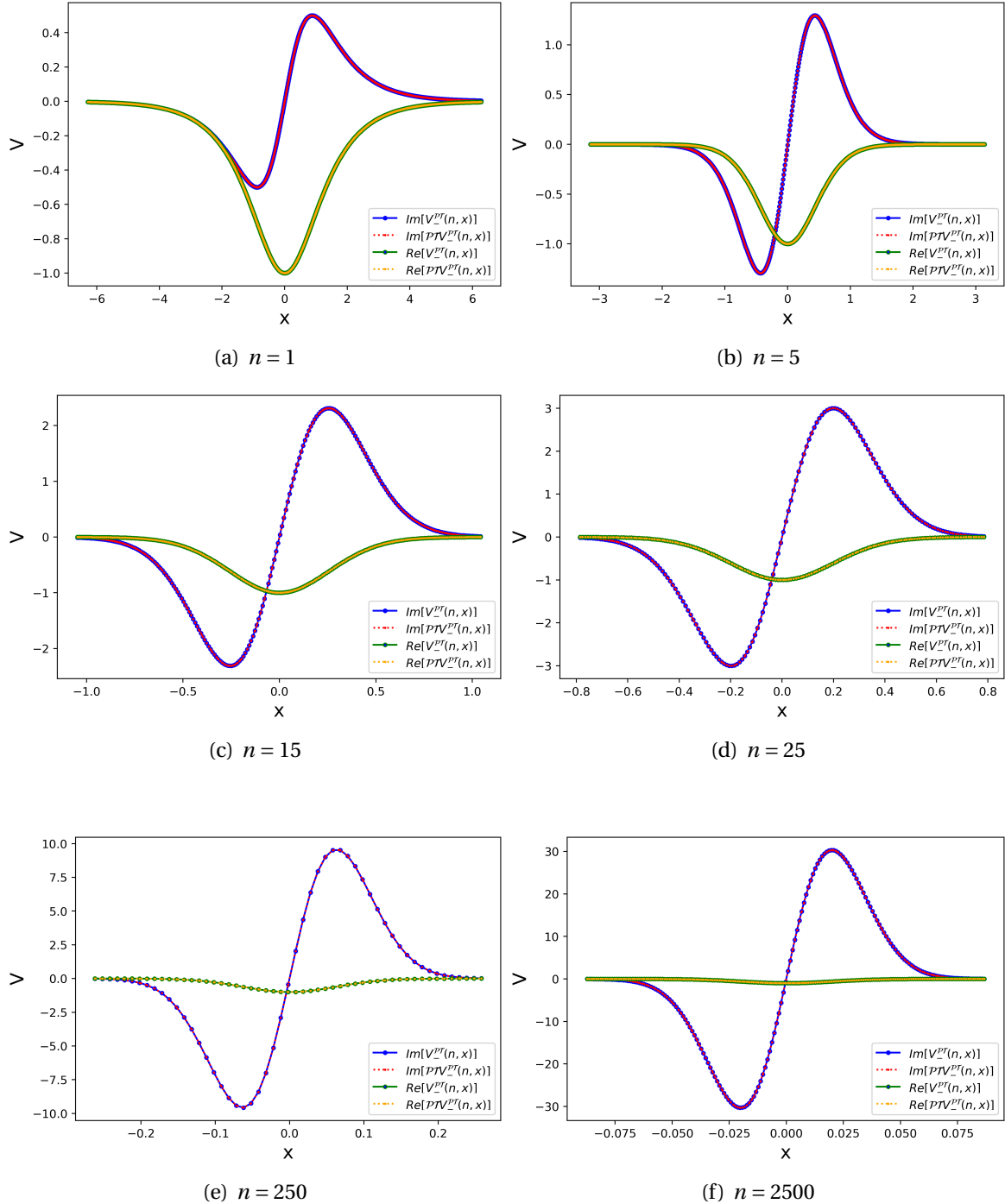


Figura 4.2.1: Parte real e imaginaria de los potenciales $v_{-}^{\mathcal{PT}}(n, x)$ y $\mathcal{PT} v_{-}(n, x)$ para los valores indicados de n .

4.3. Eigenvalores y límites en n elevado.

Y tenemos otros dos potenciales pseudo-Hermitianos $V_{\pm}^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)$ que aparecen como perturbaciones complejas de los otros 4 potenciales, estas parejas no son isoespectrales, dado que obtenemos que los eigenvalores son complejos conjugados.

n	$V_+(n, x)$	$V_-(n, x)$	$V_+^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)$	$V_-^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)$	$Im[V_+^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)]$	$Im[V_-^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)]$
1	$8.440760 * 10^{-4}$	$8.44076 * 10^{-4}$	$0.0000170713 - 3.47613 * 10^{-16}i$	$0.0000170713 + 3.47613 * 10^{-16}i$	0.100043	0.100043
5	$1.640540 * 10^{-4}$	$1.640540 * 10^{-4}$	$0.000410927 + 1.92924 * 10^{-15}i$	$0.000410927 - 1.92924 * 10^{-15}i$	0.0667536	0.0667536
15	$-5.51289 * 10^{-4}$	$-5.51289 * 10^{-4}$	$0.000866019 - 2.05599 * 10^{-15}i$	$0.000866019 + 2.05599 * 10^{-15}i$	-0.0489817	-0.0489817
25	$6.841940 * 10^{-4}$	$6.84194 * 10^{-4}$	$-0.001153380 - 1.60074 * 10^{-15}i$	$-0.001153380 + 1.60074 * 10^{-15}i$	-0.035001	-0.035001
250	$-3.781430 * 10^{-3}$	$-3.78143 * 10^{-3}$	$0.0035765100 - 1.15507 * 10^{-15}i$	$0.0035765100 + 1.15507 * 10^{-15}i$	-0.0132892	-0.0132892
2500	$-1.46606 * 10^{-5}$	$-1.46606 * 10^{-5}$	$0.0000146558 + 2.84454 * 10^{-17}i$	$0.0000146558 - 2.84454 * 10^{-17}i$	$-1.47616 * 10^{-4}$	$-1.47616 * 10^{-5}$

Tabla 4.3.1: Primer eigenvalor para los valores indicados de n .

n	$V_+(n, x)$	$V_-(n, x)$	$V_+^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)$	$V_-^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)$	$Im[V_+^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)]$	$Im[V_-^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)]$
1	0.1126800	0.1126800	$0.1200330 - 4.72085 * 10^{-16}i$	$0.1200330 + 4.72085 * 10^{-16}i$	-0.1036350	-0.1036350
5	0.0676831	0.0676831	$0.0498409 + 1.10128 * 10^{-15}i$	$0.0498409 - 1.10128 * 10^{-15}i$	-0.0794525	-0.0794525
15	0.0636224	0.0636224	$0.0609678 + 1.16753 * 10^{-16}i$	$0.0609678 - 1.16753 * 10^{-16}i$	0.0634509	0.063450900
25	0.0630411	0.0630411	$0.0618526 + 5.98719 * 10^{-16}i$	$0.0618526 - 5.98719 * 10^{-16}i$	0.0629689	0.062968900
250	0.0625357	0.0625357	$0.0624631 + 1.28513 * 10^{-15}i$	$0.0624631 - 1.28513 * 10^{-15}i$	0.0625307	0.062530700
2500	0.0625001	0.0625001	$0.0625000 + 1.71584 * 10^{-17}i$	$0.0625000 - 1.71584 * 10^{-17}i$	0.0625001	0.062500100

Tabla 4.3.2: Segundo eigenvalor para los valores indicados de n .

n	$V_+(n, x)$	$V_-(n, x)$	$V_+^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)$	$V_-^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)$	$Im[V_+^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)]$	$Im[V_-^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)]$
1	0.383889	0.383889	$-0.249951 - 4.92784 * 10^{-16}i$	$-0.249951 + 4.92784 * 10^{-16}i$	0.195587	0.195587
5	0.269635	0.269635	$0.2128090 - 2.64073 * 10^{-16}i$	$0.2128090 + 2.64073 * 10^{-16}i$	0.179211	0.179211
15	0.253268	0.253268	$0.2458710 + 7.84907 * 10^{-16}i$	$0.2458710 - 7.84907 * 10^{-16}i$	0.190773	0.190773
25	0.253612	0.253612	$0.2451000 - 2.97183 * 10^{-15}i$	$0.2451000 + 2.97183 * 10^{-15}i$	0.201909	0.201909
250	0.242752	0.242752	$0.2574500 - 7.71433 * 10^{-16}i$	$0.2574500 + 7.71433 * 10^{-16}i$	0.226902	0.226902
2500	0.249974	0.249974	$0.2500330 + 3.66567 * 10^{-16}i$	$0.2500330 - 3.66567 * 10^{-16}i$	0.249974	0.249974

Tabla 4.3.3: Tercer eigenvalor para los valores indicados de n .

n	$V_+(n, x)$	$V_-(n, x)$	$V_+^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)$	$V_-^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)$	$Im[V_+^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)]$	$Im[V_-^{\mathcal{P}\mathcal{T}}(n, x)]$
1	0.748740	0.748740	$0.416142 + 1.5288 * 10^{-15}i$	$0.416142 - 1.5288 * 10^{-15}i$	0.637817	0.637817
5	0.601075	0.601075	$0.50293 - 1.14452 * 10^{-15}i$	$0.502930 + 1.14452 * 10^{-15}i$	0.592509	0.592509
15	0.571926	0.571926	$0.550366 + 2.41927 * 10^{-15}i$	$0.550366 - 2.41927 * 10^{-15}i$	0.570396	0.570396
25	0.567186	0.567186	$0.557083 - 1.38269 * 10^{-15}i$	$0.557083 + 1.38269 * 10^{-15}i$	0.566540	0.566540
250	0.562869	0.562869	$0.562195 + 8.64385 * 10^{-16}i$	$0.562195 - 8.64385 * 10^{-16}i$	0.562823	0.562823
2500	0.562538	0.562538	$0.562538 - 1.94469 * 10^{-16}i$	$0.562538 + 1.94469 * 10^{-16}i$	0.562538	0.562538

Tabla 4.3.4: Cuarto eigenvalor para los valores indicados de n .

n	$V_+(n, x)$	$V_-(n, x)$	$V_+^{\mathcal{PT}}(n, x)$	$V_-^{\mathcal{PT}}(n, x)$	$Im[V_+^{\mathcal{PT}}(n, x)]$	$Im[V_-^{\mathcal{PT}}(n, x)]$
1	1.200830	1.200836	$0.848158 - 1.40963 * 10^{-15}i$	$0.848158 + 1.40963 * 10^{-15}i$	0.978816	0.978816
5	1.058300	1.058300	$0.928149 - 2.33884 * 10^{-15}i$	$0.928149 + 2.33884 * 10^{-15}i$	0.958762	0.958762
15	1.014730	1.014730	$0.982321 - 3.97727 * 10^{-15}i$	$0.982321 + 3.97727 * 10^{-15}i$	0.952464	0.952464
25	1.009920	1.009926	$0.988395 - 1.15801 * 10^{-15}i$	$0.988395 + 1.15801 * 10^{-15}i$	0.958940	0.958940
250	0.993049	0.993049	$1.007650 - 2.14154 * 10^{-15}i$	$1.007650 + 2.14154 * 10^{-15}i$	0.977534	0.977534
2500	1.000180	1.000180	$1.000240 - 9.52075 * 10^{-16}i$	$1.000240 + 9.52075 * 10^{-16}i$	1.000180	1.000180

Tabla 4.3.5: Quinto eigenvalor para los valores indicados de n .

4.3.1. Convergencia de los potenciales $Im[v_-^{\mathcal{PT}}(n, x)]$ y $v_-(n, x)$ para valores elevados de n .

Analizando los resultados gráficos para el potencial $v_-(n, x)$ y su contraparte \mathcal{PT} -simétrica nos percatamos de que la parte imaginaria de $v_-^{\mathcal{PT}}(n, x)$ tiende al potencial $v_-(n, x)$ cuando el parámetro n toma valores suficientemente grandes. También se mencionó la convergencia de los eigenvalores en las tablas anteriores.

Para encontrar a que se hace referencia "valores grandes" proponemos analizar los potenciales con la transformada wavelet continua $G2$ como complemento a los eigenvalores calculados de manera numérica, cabe resaltar que los eigenvalores asociados a la parte imaginaria del potencial $v_-^{\mathcal{PT}}(n, x)$ no contienen la parte imaginaria que aparece en los cuadros de la sección anterior.

El caso $v_-(n, x)$ generado con los operadores de factorización $f(x) = \text{sech}(x)$ (4.3.1) y su versión \mathcal{PT} simétrica (4.3.2) convergen en valores elevados del parámetro n .

Esto se debe a que los potenciales $v_-(n, x)$ contienen una función $\text{sech}^{2n}(x)$ y $-\text{sech}^{2n}(x)$ y si consideramos solo la parte imaginaria del potencial con simetría \mathcal{PT} obtenemos una función perturbada del potencial $v_-(n, x)$.

$$v_-(n, x) = \text{sech}^{2n}(x) + n \text{sech}^{n+1}(x) \sinh(x) \quad (4.3.1)$$

$$v_-^{\mathcal{PT}}(n, x) = -\text{sech}^{2n}(x) + i n \text{sech}^{n+1}(x) \sinh(x) \quad (4.3.2)$$

$$v_-(n, x) \rightarrow Im[v_-^{\mathcal{PT}}(n, x)] \quad (4.3.3)$$

Algunos potenciales (4.3.1) y (4.3.2) se muestran en la figura (4.3.1).

En tal figura se puede apreciar que los potenciales comienzan a traslaparse cuando aumenta el valor del parámetro n esto debería ser suficiente para que el espectro de eigenvalores también converja dado que los potenciales son iguales".

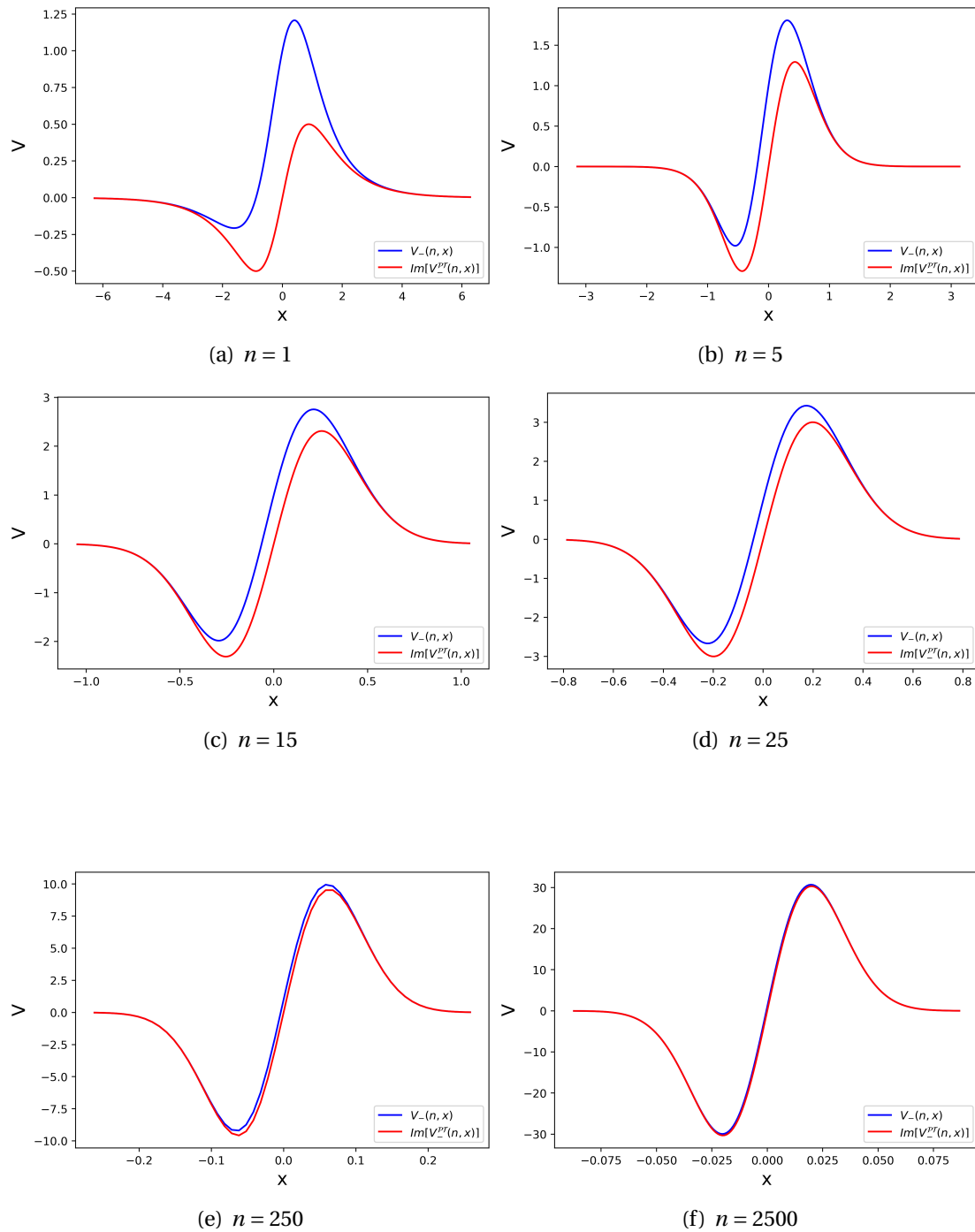


Figura 4.3.1: Potenciales $v_-(n, x)$ e $Im[v_-^{PT}(n, x)]$ para los valores indicados de n .

4.3.2. Comportamiento de los eigenvalores en función del parámetro n

En esta sección se muestran los eigenvalores para el potencial $v_-(n, x)$ e $Im[v_-^{PT}(n, x)]$ se aprecia que ambos espectros son reales y que empiezan a converger en valores mayores a 250.

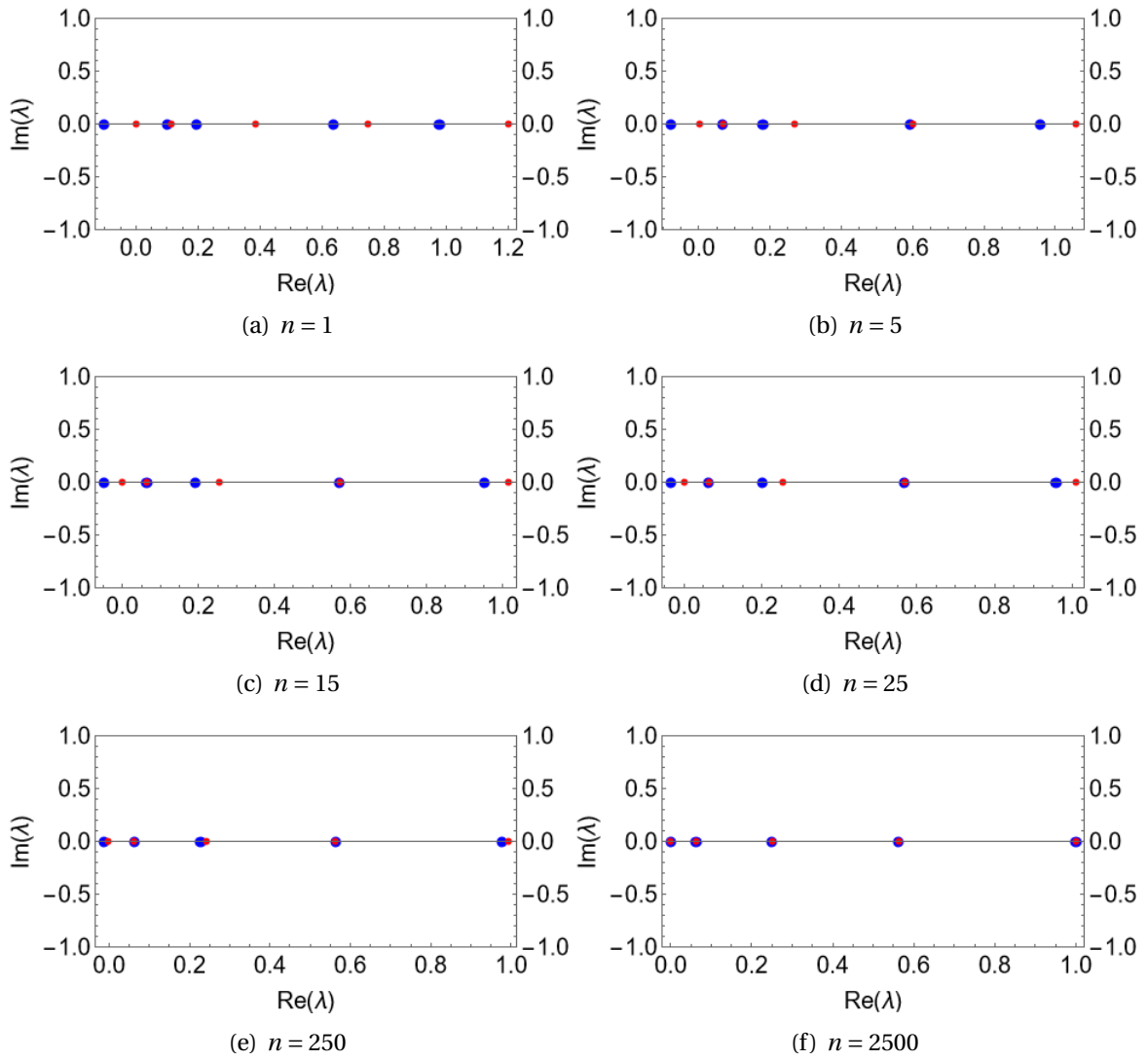


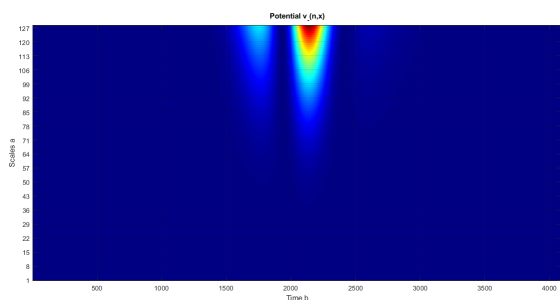
Figura 4.3.2: Eigenvalores para los valores indicados del parámetro n .

4.3.3. Escalogramas y espectros multifractal para el potencial $v_-(n, x)$ y la parte imaginaria de su versión \mathcal{PT} simétrica.

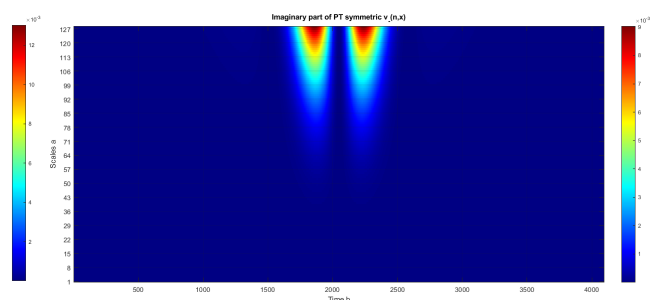
Como ya se mencionó en la sección anterior las gráficas del potencial empiezan a trasladarse en valores pequeños del parámetro. Sin embargo eso no es suficiente para asegurar que los eigenvalores calculados también convergen, por lo tanto esos potenciales en valores pequeños del parámetro n no son equivalentes.

Surge de manera natural la siguiente cuestión: ¿ Como podemos asegurar que dos potenciales son equivalentes, es decir que sus eigenvalores sean iguales sin necesidad de calcularlos considerando que la comparación directa de ellos no funciona de manera adecuada (4.3.1)?

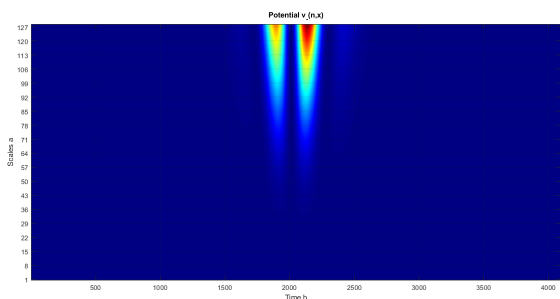
Para responder el cuestionamiento anterior proponemos aplicar análisis con transformadas wavelet para identificar con mayor precisión la equivalencia de los potenciales con los eigenvalores asociados.



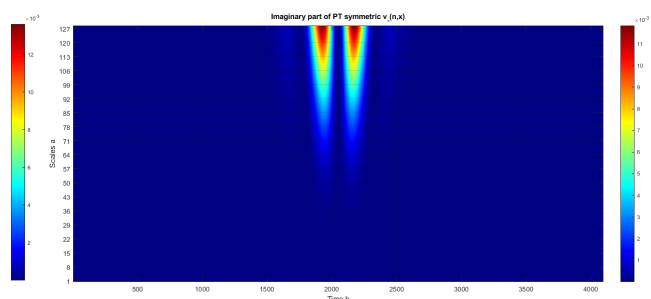
(a) $v_-(n, x), n = 1$



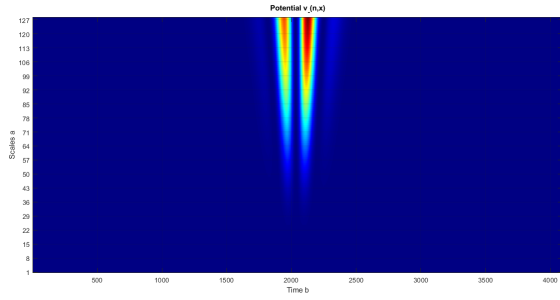
(b) $Im[v_-^{\mathcal{PT}}(n, x), n = 1$



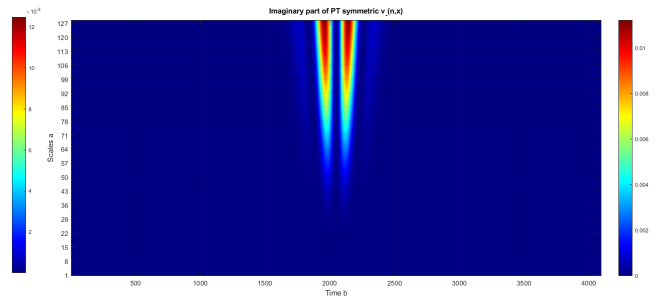
(c) $v_-(n, x), n = 5$



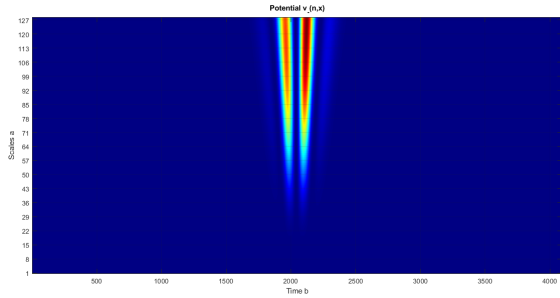
(d) $Im[v_-^{\mathcal{PT}}(n, x), n = 5$



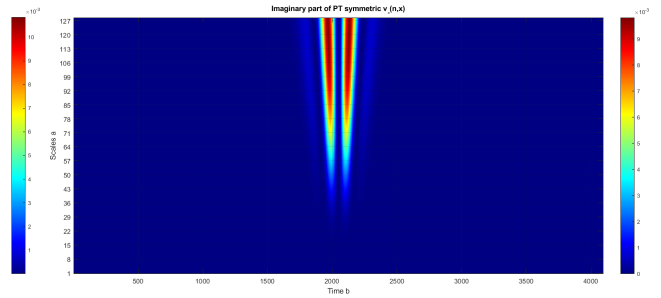
(e) $v_-(n, x), n = 15$



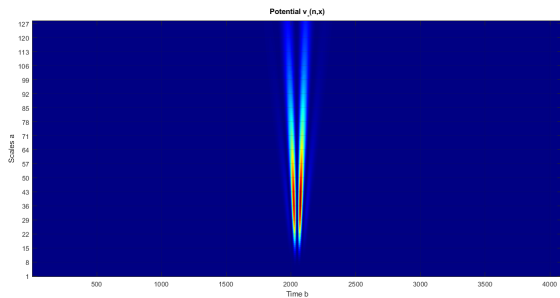
(f) $Im[v_-^{\mathcal{PT}}(n, x), n = 15$



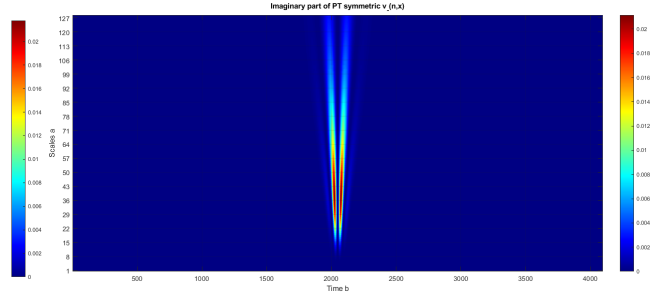
(g) $v_-(n, x), n = 25$



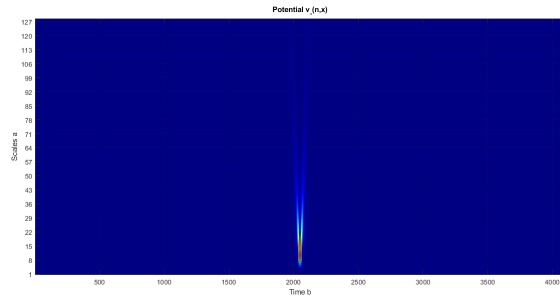
(h) $Im[v_-^{\mathcal{PT}}(n, x), n = 25$



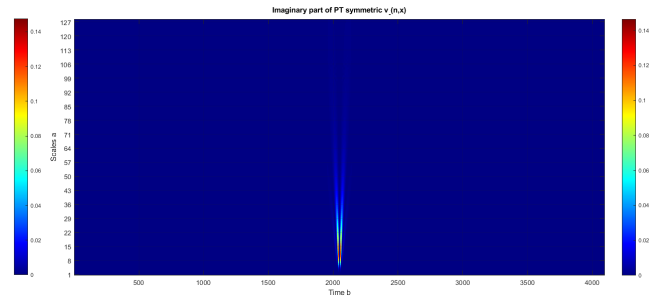
(i) $v_-(n, x), n = 250$



(j) $Im[v_-^{\mathcal{PT}}(n, x), n = 250$



(k) $v_-(n, x), n = 2500$



(l) $Im[v_-^{\mathcal{PT}}(n, x), n = 2500$

4.3.4. Análisis multifractal

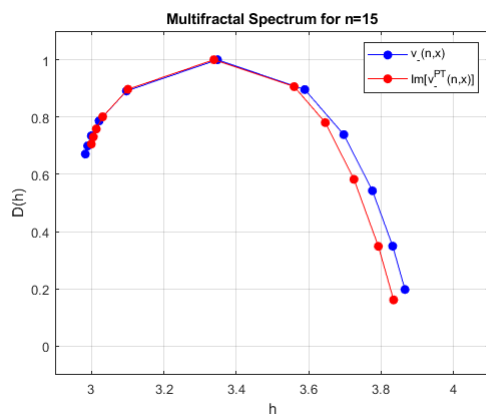
En este caso los exponentes de Hölder dependen del parámetro n .

La wavelet utilizada para este análisis fue la symlet con 3 momentos de desvanecimiento y con las condiciones de la tabla 4.3.6. Tales condiciones se implementan para eliminar el ruido en la señal proveniente de la región donde los potenciales tienen valores nulos.

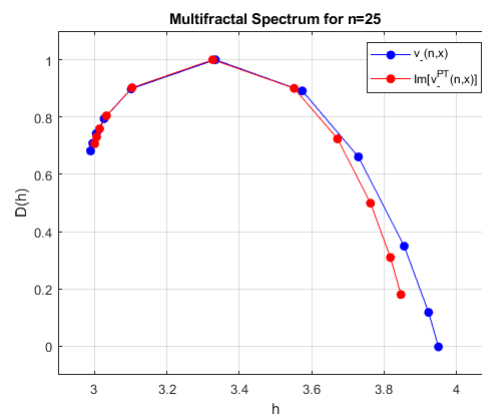
El comportamiento de los espectros multifractal muestra que cuando aumenta el valor del parámetro n los espectros de los potenciales tienden a traslaparse.

n	x_{min}	x_{max}	$samples$
5	$-\pi/2$	$\pi/2$	4096
15	$-\pi/3$	$\pi/3$	4096
25	$-\pi/4$	$\pi/4$	4096
250	$-\pi/12$	$\pi/12$	4096
2500	$-\pi/36$	$\pi/36$	4096

Tabla 4.3.6: Dominios de la señal y particiones del intervalo utilizados para calcular los espectros multifractal.



(m) $n = 15$



(n) $n = 25$

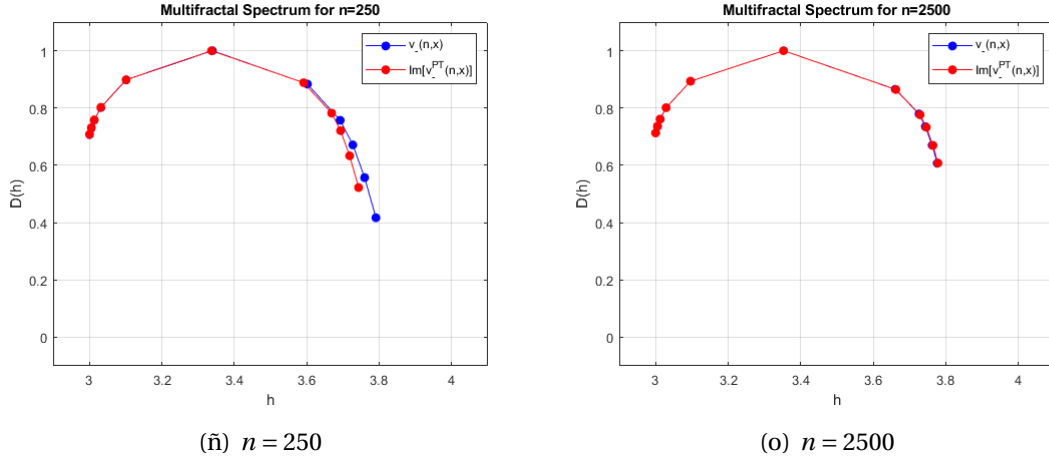


Figura 4.3.3: Espectros multifractal.

4.4. Efecto de confinamiento en una red con simetría \mathcal{PT}

Los potenciales periódicos son de especial interés en la ciencia de materiales [66, 67] ya que son los modelos más aceptados para trabajar sistemas cristalinos. Tales potenciales han sido abordados desde mecánica cuántica supersimétrica obteniendo nuevas familias exactamente solubles [68, 69]

En esta sección vamos a trabajar con el superpotencial $w = \cos^\alpha x$, $\alpha \in \mathbb{Z}$ en el entorno de los operadores con componente imaginaria; $\pm D_x + iw$ que nos darán los siguientes compañeros supersimétricos

$$V_{\pm}(x; \alpha) = -\cos^{2\alpha}(x) \mp i\alpha \cos^{\alpha-1}(x) \sin(x) \quad (4.4.1)$$

Factorizando la función $\cos^\alpha(x)$ de la ecuación anterior podemos escribir la familia de potenciales como

$$V_{\pm}(x; \alpha) = \cos^\alpha(x) (-\cos^\alpha(x) \mp i\alpha \cos^{-1}(x) \sin(x)) \quad (4.4.2)$$

que puede reducirse aún más hasta llegar a una forma similar a la que encontramos en el capítulo 5, solo que aquí contiene la parte imaginaria de manera explícita y un signo negativo en el superpotencial.

$$V_{\pm}(x; \alpha) = w(-w \mp i\alpha \tan(x)) \quad (4.4.3)$$

mientras que los Hamiltoniano asociados serían los siguientes;

$$\hat{H}_{\pm}(x; \alpha) = -D_x^2 + \cos^\alpha(x) (-\cos^\alpha(x) \mp i\alpha \cos^{-1}(x) \sin(x)) \quad (4.4.4)$$

Es claro que la familia de potenciales dados por la ecuación (4.4.1) es invariante bajo la acción de los operadores \mathcal{P} y \mathcal{T} ya que la función utilizada como superpotencial es par y su derivada es una función impar debido a la función $\sin(x)$ que aparece en los

compañeros supersimétricos, primero aplicamos el operador de paridad \mathcal{P} sobre los compañeros supersimétricos $V_{\pm}(x; \alpha)$

$$\mathcal{P}V_{\pm}(-x; \alpha) = -\cos^{2\alpha}(-x) \mp i\alpha \cos^{\alpha-1}(-x) \sin(-x) \quad (4.4.5)$$

$$= -\cos^{2\alpha}(x) \pm i\alpha \cos^{\alpha-1}(x) \sin(x) \quad (4.4.6)$$

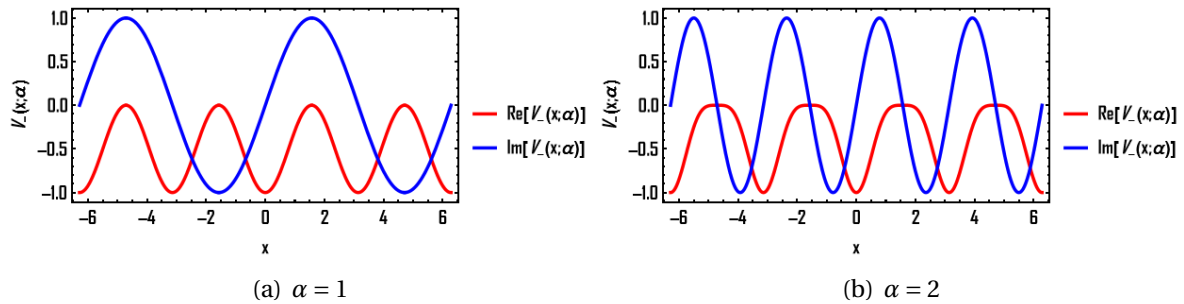
después aplicamos el operador \mathcal{T} y comparamos con la familia $V_{\pm}(x; \alpha)$

$$\mathcal{P}\mathcal{T}\bar{V}_{\pm}(-x; \alpha) = -\cos^{2\alpha}(x) \mp i\alpha \cos^{\alpha-1}(x) \sin(x) = V_{\pm}(x; \alpha) \quad (4.4.7)$$

dado que son iguales, vamos a decir que la familia de potenciales $V_{\pm}(x; \alpha)$ es invariante bajo la acción del operador $\mathcal{P}\mathcal{T}$, por lo que obtendremos espectros complejos conjugados si la simetría está rota y reales si no lo está.

En la figura (4.4) se muestra la parte real e imaginaria algunos de los potenciales obtenidos tomando algunos valores del parámetro α puede observarse que el período depende de la paridad del parámetro, siguiéndose así que la parte real siempre tiene período $L = \pi$ mientras que el de la imaginaria depende de la paridad del parámetro α . Para valores pares el periodo o parámetro de red es de $L = \pi$ y para los impares $L = 2\pi$. Una representación geométrica de estos potenciales se encuentra en el anexo B en el cuál podemos apreciar que forman curvas cerradas y simples en el plano complejo.

Ahora que ya discutimos acerca de la estructura de los potenciales a tratar vamos a centrarnos en el efecto del parámetro α que aparece como multiplicador escalar de la parte imaginaria de los compañeros supersimétricos el cuál es que para valores elevados hace que los máximos y mínimos del potencial sean mayores, esto a su vez genera un efecto de pozo cuántico con una barrera de potencial cada vez mayor que hace que la densidad de probabilidad se concentre en el mínimo, este efecto ocurre para la parte real e imaginaria del potencial por lo cuál sería un efecto global de pérdida-ganancia en la interpretación óptica de la simetría $\mathcal{P}\mathcal{T}$.



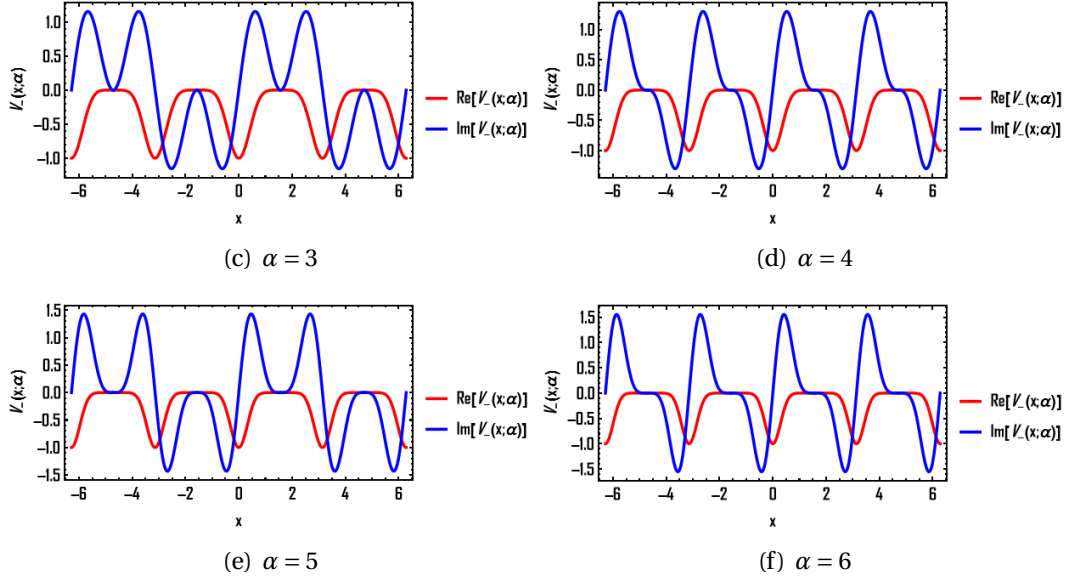


Figura 4.4.1: Caso unidimensional de una familia de potenciales periódicos invariantes bajo la acción del operador \mathcal{PT} .

4.4.1. Caso bidimensional

Como ya lo hicimos anteriormente vamos a aplicar la idea de las ecuaciones diferenciales de variables separables para generar un Hamiltoniano bidimensional utilizando el ya presentado de una dimensión.

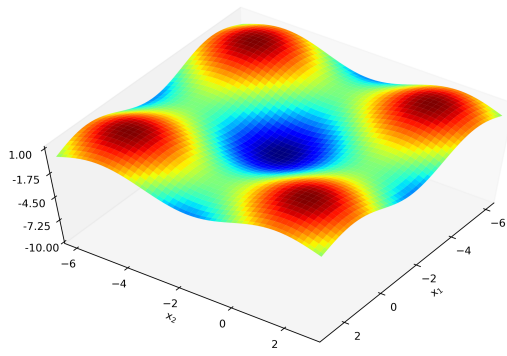
Este procedimiento nos permite estudiar las simetrías asociadas al problema de Sturm-Liouville, su relación con la simetría \mathcal{PT} y a su vez con la supersimetría que es una característica inherente a los potenciales estudiados. En las siguientes figuras se presentan los gráficos tridimensionales asociados a la parte real e imaginaria de los potenciales tomando en consideración la paridad del parámetro α .

$$\hat{H}_{\pm}(\alpha, x_1, x_2) = -D_{x_1}^2 - D_{x_2}^2 \mp (i\alpha \cos^{\alpha-1}(x_1) \sin(x_1) - \cos^{2\alpha}(x_1) + i\alpha \cos^{\alpha-1}(x_2) \sin(x_2) - \cos^{2\alpha}(x_2) - \cos^{2\alpha}(x_2))$$

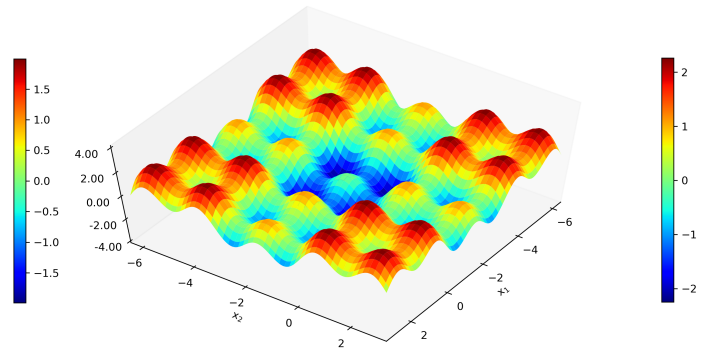
$$= -\nabla^2 + V_{\pm}(\alpha, x_1, x_2), \quad \nabla = \sum_{j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_j}$$

$$\text{Re}[V_{\pm}(\alpha, x_1, x_2)] = -\sum_{j=1}^2 \cos^{2\alpha}(x_j)$$

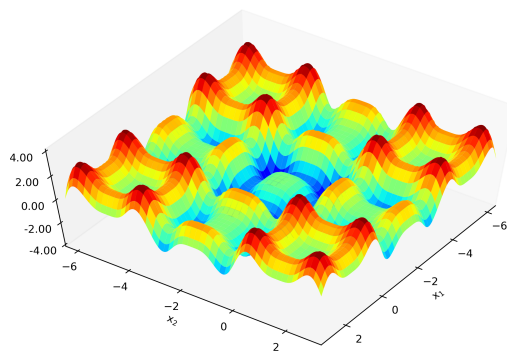
$$\text{Im}[V_{\pm}(\alpha, x_1, x_2)] = \mp \alpha \sum_{j=1}^2 \cos^{\alpha-1}(x_j) \sin(x_j)$$



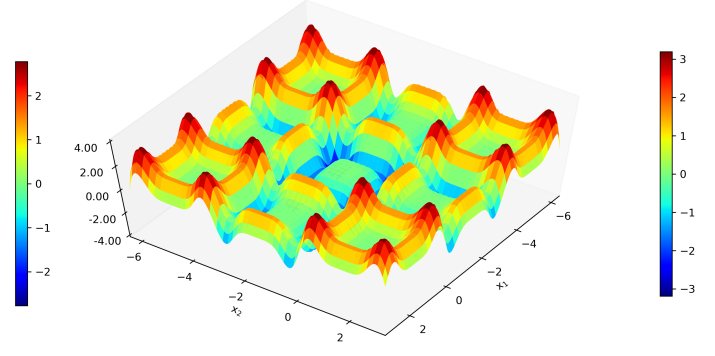
(a) $\alpha = 1$



(b) $\alpha = 3$

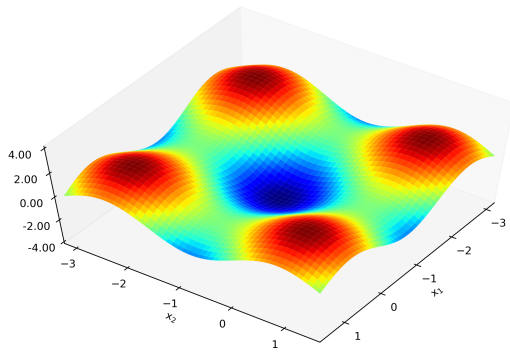


(c) $\alpha = 5$

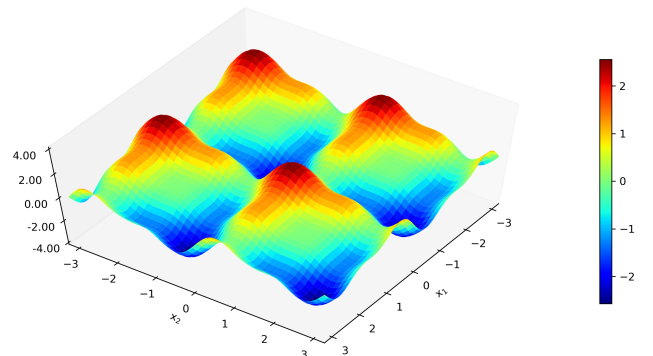


(d) $\alpha = 7$

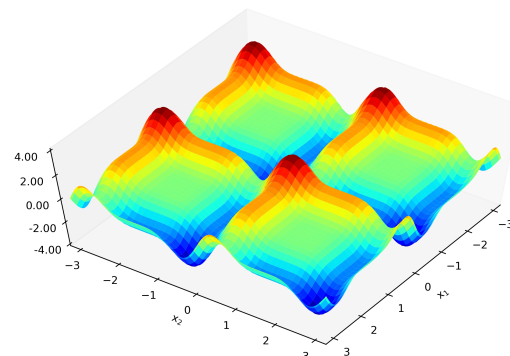
Figura 4.4.2: Parte imaginaria del potencial $V_-(\alpha, x)$ para los valores indicados de α .



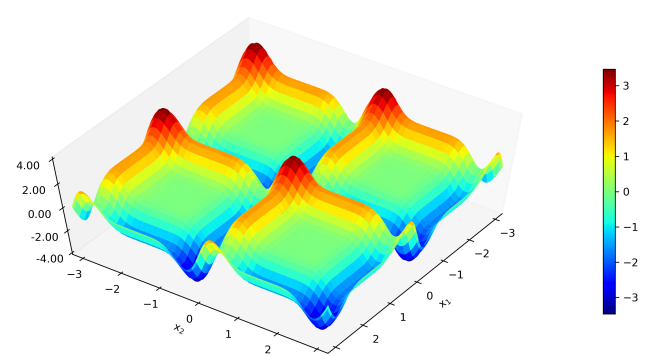
(a) $\alpha = 2$



(b) $\alpha = 4$



(c) $\alpha = 6$



(d) $\alpha = 8$

Figura 4.4.3: Parte imaginaria del potencial $V_-(\alpha, x)$ para los valores indicados de α .

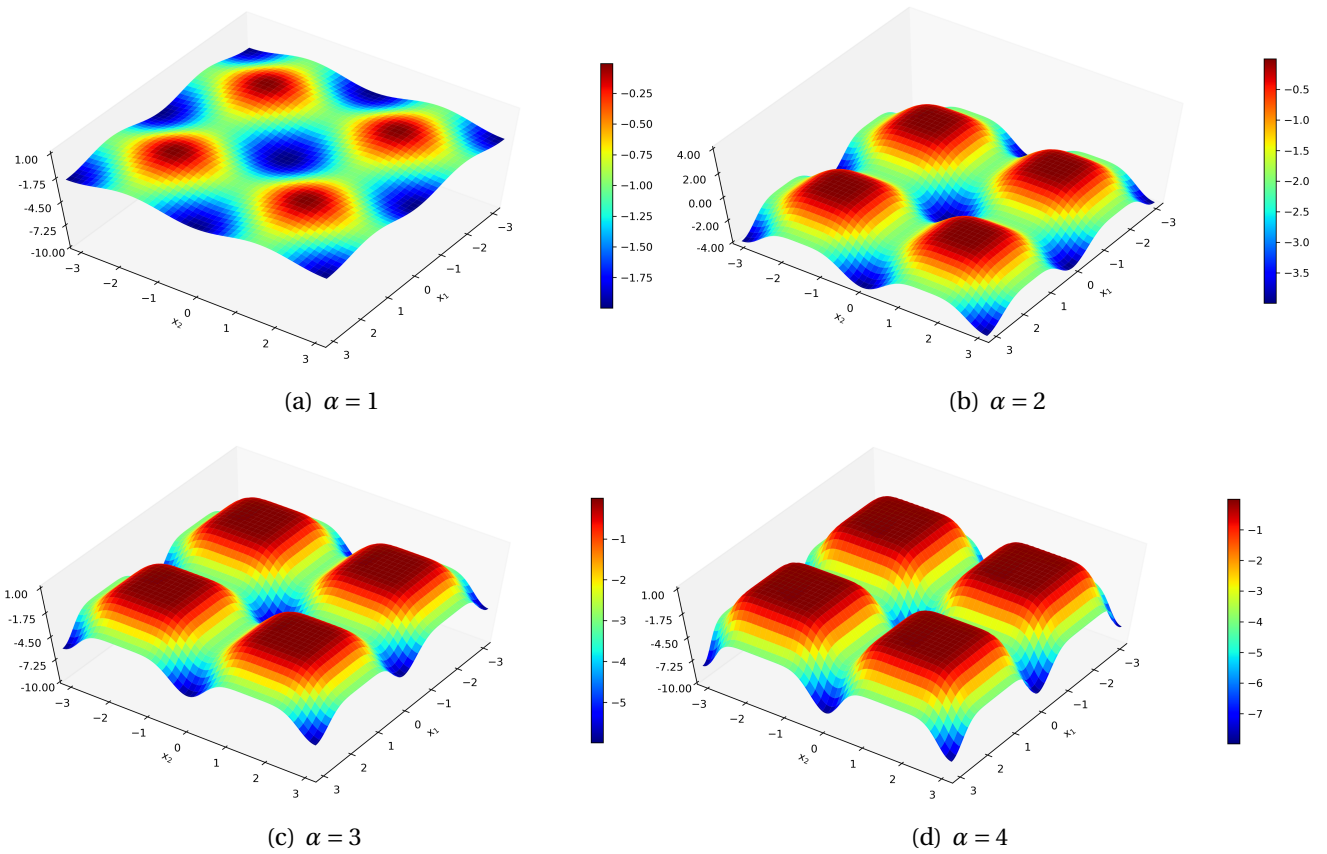
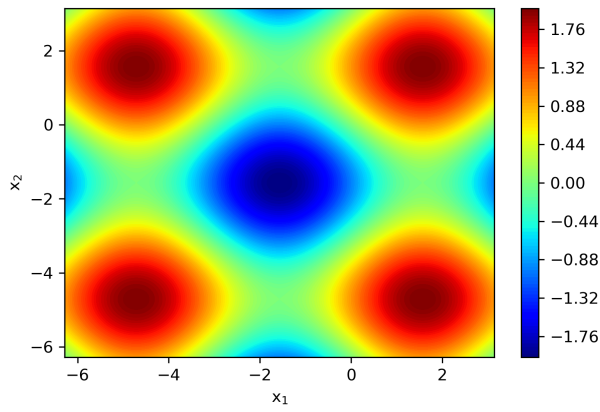


Figura 4.4.4: Parte real de los compañeros supersimétricos $V_{\pm}(\alpha, x)$ para los valores indicados de α .

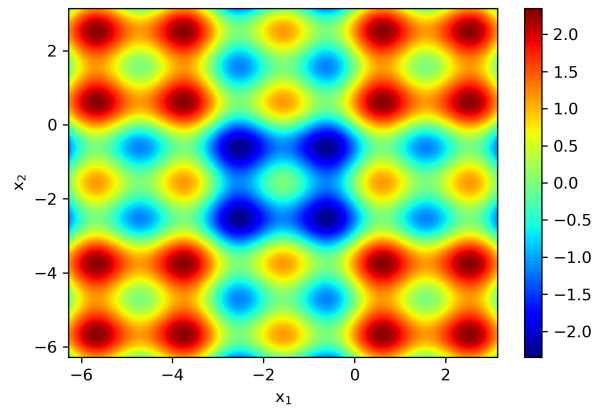
La representación tridimensional, aunque es visualmente atractiva no nos permite estudiar las simetrías puntuales del potencial de una manera adecuada. Por eso usamos gráficos de contorno asociados a cada celda unitaria de las gráficas anteriores.

Los casos para α impar muestran una reflexión en la diagonal principal denotada con la letra m . También presenta una operación de inversión sobre la diagonal secundaria $\bar{2}$ mientras que los casos impares muestran reflexiones sobre los ejes y sobre las diagonales aparte de que tienen una rotación en el centro de la celda de $\theta = \pi/4$ que deja invariante el mosaico, juntando todas las simetrías que dejan invariante la celda obtenemos el grupo puntual $4mm$.

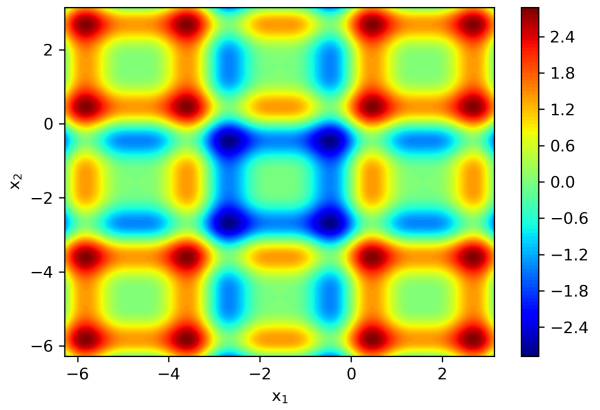
Cabe resaltar que el caso $\alpha = 2$ también muestra un grupo $4mm$ y es el único de la familia de potenciales para α par que tiene esta característica.



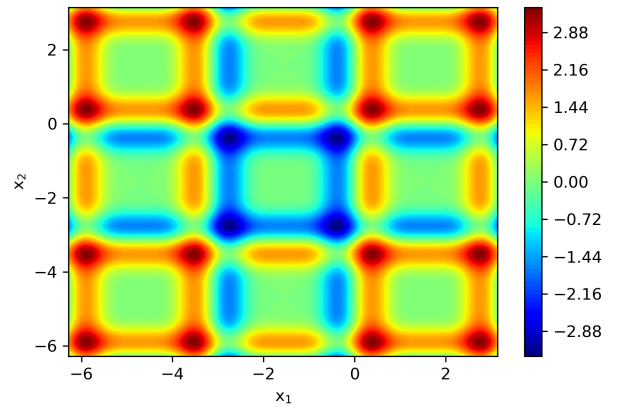
(a) $\alpha = 1$



(b) $\alpha = 3$



(c) $\alpha = 5$



(d) $\alpha = 7$

Figura 4.4.5: Parte imaginaria del potencial $V_-(n, x)$ para los valores indicados de n .

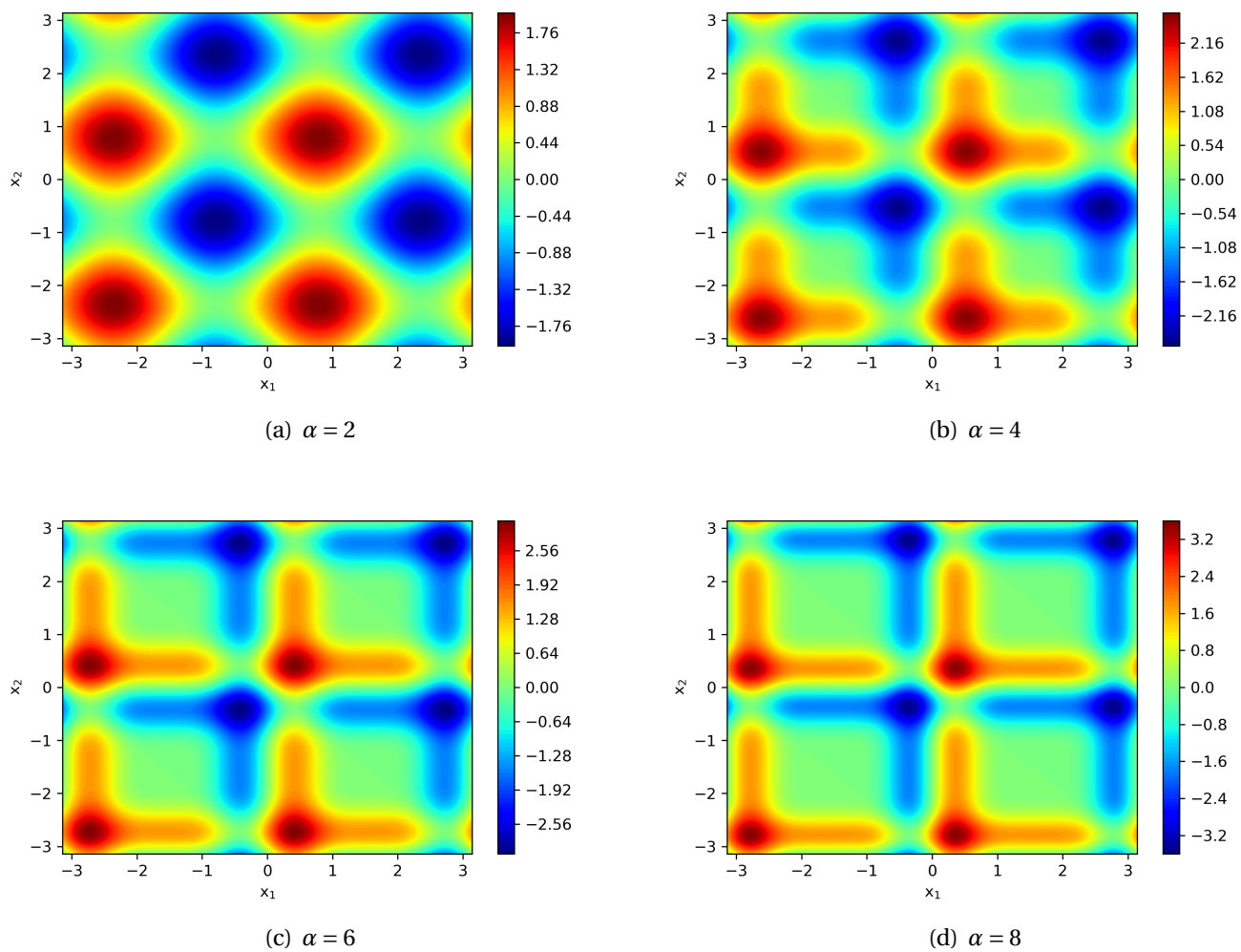


Figura 4.4.6: Parte imaginaria del potencial $V_-(\alpha, x)$ para los valores indicados de α .

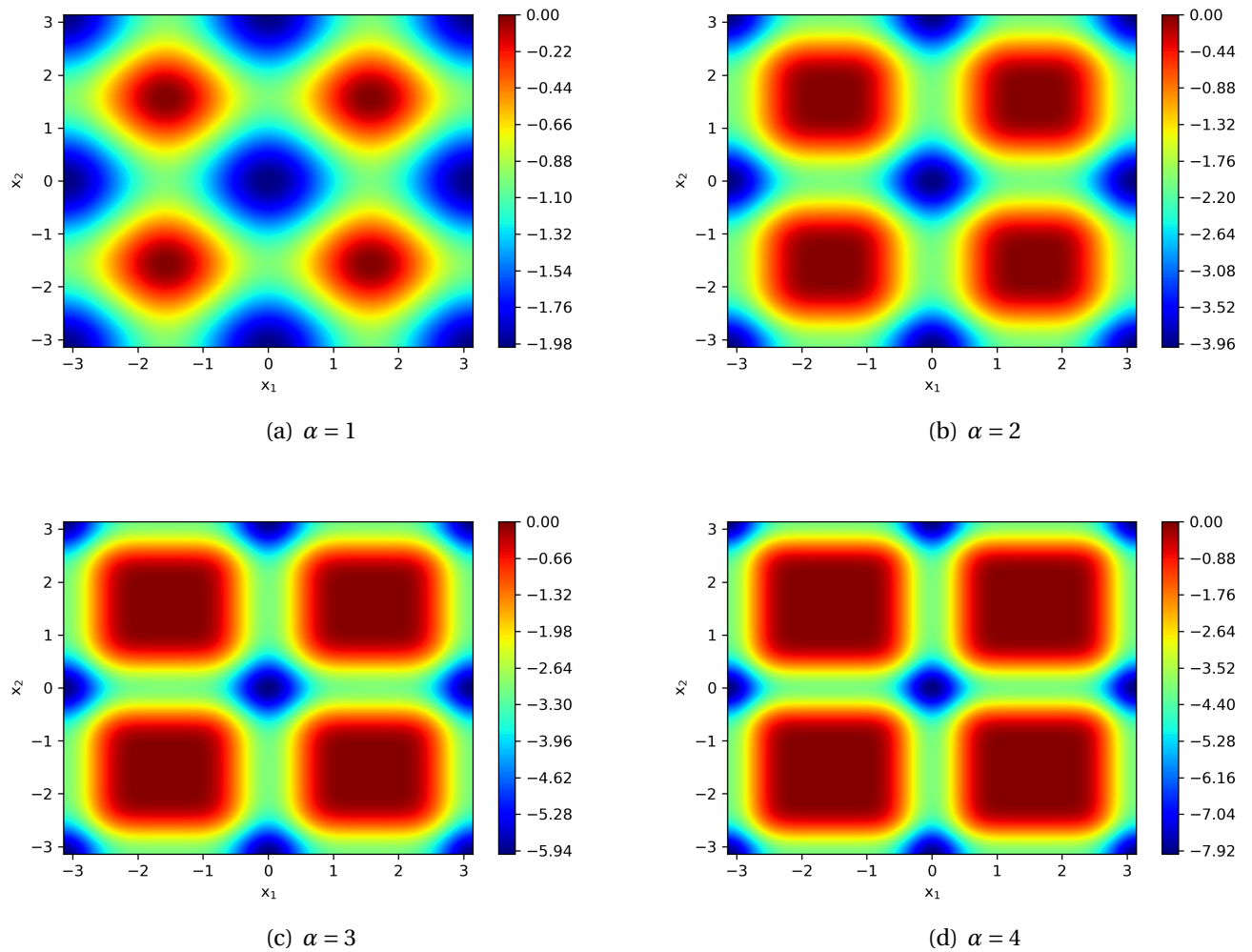


Figura 4.4.7: Parte real de los compañeros supersimétricos $V_{\pm}(\alpha, x)$ para los valores indicados de α .

4.5. Conclusiones

En este capítulo utilizamos una pareja de operadores complejos para construir Hamiltonianos exactamente solubles a través de la metodología supersimétrica, mostramos que para el caso de potencial Scarf II en su versión \mathcal{PT} simétrica con el parámetro de control n presenta una convergencia entre los eigenvalores del potencia estándar y los casos con n elevados, además se encontró que los eigenvalores de los supersimétricos del potencial resultan ser complejos conjugados, los datos se presentaron en una tabla de 6 entradas en la cuál se muestra que las partes imaginarias de los potenciales con simetría \mathcal{PT} son isoenergéticas al igual que la pareja de compañeros $V_{\pm}(x; n)$.

Con la finalidad de enlazar el estudio con el área de materiales utilizamos funciones periódicas como superpotencial y generamos redes bidimensionales con parte real e imaginaria, cabe destacar que la periodicidad esta presente tanto en la componente real como

en la imaginaria, a pesar de eso los periodos son distintos en ambas redes y eso ocasiona que el caso de 2 dimensiones aparezca un grupo de simetría puntual más complejo que las reflexiones estándar, en síntesis los resultados obtenidos para el sistema periódico son los siguientes:

Para el caso unidimensional se obtiene que el período de la parte imaginaria del potencial está en función del parámetro α que aparece en el superpotencial. Puede apreciarse que al aumentar el valor del parámetro de control α la magnitud de los máximos y mínimos globales de la parte imaginaria incrementa. Esto puede interpretarse como la aparición de una barrera de potencial adicional a la del caso $\alpha = 1$ que genera un efecto de tipo confinamiento. Con la parte real sucede que la magnitud del máximo no aumenta pero el ancho de los pozos que modela disminuye su tamaño, por lo cuál y fenomenológicamente la densidad de probabilidad se concentrara en los centros de los mínimos. El caso bidimensional muestra que el caso impar tiene un grupo de simetría puntual distinto al de los pares y el efecto de confinamiento sigue presente.

Apéndice A

Demostración propiedad ν

Sea $g(t)$ una función de energía finita $g(t) \in \mathbb{L}^d$, no necesariamente continua. Si tomamos las operaciones de escalamiento y traslación sobre la variable t se obtiene la siguiente familia de funciones,

$$g(t, a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} g\left(\frac{t-b}{a}\right), \quad (\text{A.0.1})$$

Donde $a \in \mathbb{R}$ ($a > 0$) es un parámetro de escalamiento y $b \in \mathbb{R}$ es el de traslación. El factor $a^{-1/2}$ en (A.0.1) es una constante de normalización añadida para preservar la energía.

Vamos a considerar la familia de funciones Gaussianas y sus derivadas g_m , donde m representa el orden de la derivada de la función Gaussiana $e^{\left(\frac{t-b}{a}\right)}$.

$$W_{g_m}^{f^{(n)}}(a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} f^{(n)}(t) g_m\left(\frac{t-b}{a}\right) dt, \quad m \geq 1. \quad (\text{A.0.2})$$

con el cambio de variables;

$$\tau = \frac{t-b}{a} \Rightarrow d\tau = \frac{1}{a} dt. \quad (\text{A.0.3})$$

$$u = g_m(\tau), \quad dv = f^{(n)}(t) dt \quad (\text{A.0.4})$$

$$du = g_{m+1}(\tau) d\tau, \quad v = f^{(n-1)}(t) \quad (\text{A.0.5})$$

$$du = \frac{1}{a} g_{m+1}\left(\frac{t-b}{a}\right) dt. \quad (\text{A.0.6})$$

$$W_{g_m}^{f^{(n)}}(a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \left[\frac{1}{a} g_m\left(\frac{t-b}{a}\right) f^{(n-1)}(t) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{a} f^{(n+1)}(t) g_{m+1}\left(\frac{t-b}{a}\right) dt \right] \quad (\text{A.0.7})$$

El primer término de la ecuación (A.0.7) es cero debido a la propiedad de los momentos de desvanecimiento de la wavelet [24],

$$W_{g_m}^{f^{(n)}}(a, b) = -\frac{1}{\sqrt{a}} \frac{1}{a} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f^{(n-1)}(t) g_{m+1} \left(\frac{t-b}{a} \right) dt \right] \quad (\text{A.0.8})$$

$$W_{g_m}^{f^{(n)}}(a, b) = -\frac{1}{a} W_{g_{m+1}}^{f^{(n-1)}}(a, b). \quad (\text{A.0.9})$$

De la última ecuación obtenemos una relación entre las derivadas de la función $f^n(t)$ (A.0.10) y $g_m(t)$ (A.0.11) y sus derivadas de orden superior e inferior,

$$f^{(n)}(t) \xrightarrow{f dt} f^{(n-1)}(t) \quad (\text{A.0.10})$$

$$g_m(t; a, b) \xrightarrow{D_t} g_{m+1}(t; a, b) \quad (\text{A.0.11})$$

Para el caso $n = 2$ en (A.0.9);

$$W_{g_m}^{f^{(2)}}(a, b) = -\frac{1}{a} W_{g_{m+1}}^{f^{(1)}}(a, b) = \frac{1}{a^2} W_{g_{m+2}}^{f^{(0)}}(a, b). \quad (\text{A.0.12})$$

En está ecuación se presenta una relación entre las derivadas de orden cero, uno y dos para la función $f(t)$.

Finalmente, la generalización para la ecuación (A.0.12) es;

$$W_{g_m}^{f^{(n)}}(a, b) = \left(-\frac{1}{a} \right)^\alpha W_{g_{m+\alpha}}^{f^{(n-\alpha)}}(a, b), \quad \alpha = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (\text{A.0.13})$$

A.1. Caso $\alpha \notin N$

La ecuación (A.0.13) nos muestra una relación directa entre la derivada de orden entero n de una función $f(t)$ y sus integrales $f^{(n-\alpha)}$ sin embargo queda el caso intermedio, es decir, cuando α no es un entero.

El análisis de tal ecuación nos arroja dos propiedades relevantes;

La transformada waveelt se convierte en una función compleja debido a que el cociente $(-\frac{1}{a})^\alpha$ es un número complejo, dado que el parámetro de dilatación solo está definido para valores positivos.

Por otro lado, si tomamos valores fraccionarios del parámetro α debemos introducir la noción de derivadas no enteras en el kernel de la transformada wavelet $g_{m+\alpha}(t; a, b)$ y a su vez, integrales fraccionarias de la función analizada $f^{(n-\alpha)}(t)$.

La relación mostrada en la ecuación (A.0.9) muestra la relación entre las derivadas de la función $f(t)$ y las integrales de la función $g(t)$ y puede representarse con el siguiente diagrama;

$$\begin{array}{ccc}
 & \xrightarrow{f dt} & \\
 f^{(n)}(t) & & f^{(n-1)}(t) \\
 & \xleftarrow{D_t} &
 \end{array} \tag{A.1.1}$$

$$\begin{array}{ccc}
 & \xrightarrow{D_t} & \\
 g_m(t; a, b) & & g_{m+1}(t; a, b) \\
 & \xleftarrow{f dt} &
 \end{array} \tag{A.1.2}$$

Como ya vimos en párrafos anteriores, el orden del parámetro α puede ser no entero y debemos introducir derivadas e integrales de orden fraccionario, lo que convierte el diagrama anterior en una forma generalizada, para α arbitrario;

$$\begin{array}{ccc}
 & \xrightarrow{I_t^\alpha} & \\
 f^{(n)}(t) & & f^{(n-\alpha)}(t) \\
 & \xleftarrow{D_t^\alpha} &
 \end{array} \tag{A.1.3}$$

$$\begin{array}{ccc}
 & \xrightarrow{D_t^\alpha} & \\
 g_m(t; a, b) & & g_{m+\alpha}(t; a, b) \\
 & \xleftarrow{I_t^\alpha} &
 \end{array} \tag{A.1.4}$$

con $0 < \alpha < 1$, para $\alpha = 1$ se obtiene el caso ilustrado en el diagrama (A.1.1) y (A.1.2)

Algunas definiciones para integrales fraccionarias (A.1.5) y derivadas (A.1.6) es dada por los operadores de Caputo-Fabrizio [71]

$${}_0^C D_x^{-\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(n+\alpha)} \int_0^x (x-\tau)^{n+\alpha-1} f^{(n)}(\tau) d\tau, \quad n = [-\alpha] \tag{A.1.5}$$

$${}_0^C D_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^x (x-\tau)^{n-\alpha-1} f^{(n)}(\tau) d\tau, \quad n = [\alpha] \tag{A.1.6}$$

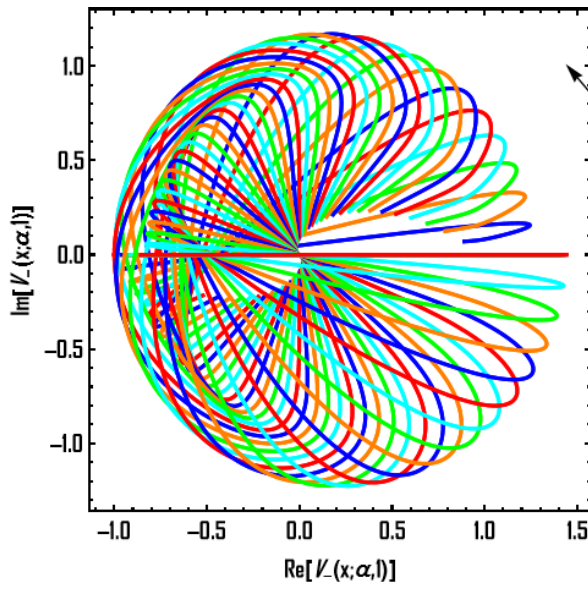
Apéndice B

Representación en el plano complejo de algunos potenciales no Hermtianos y con simetría \mathcal{PT}

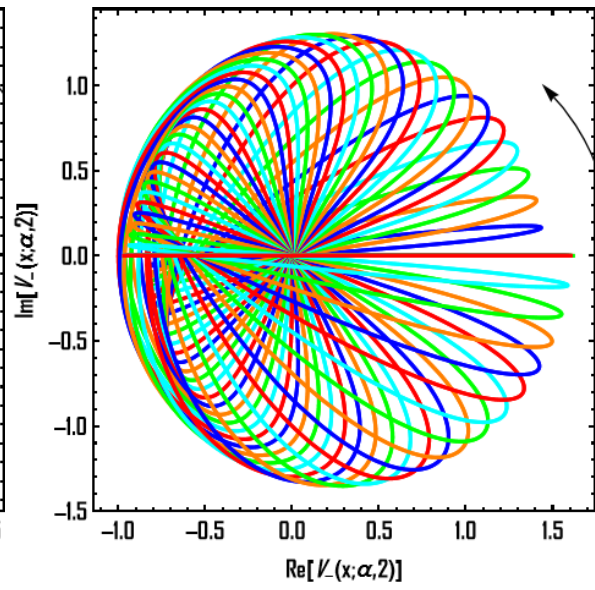
En este apéndice se muestran las gráficas para el potencial $V_-(x; \alpha, \kappa)$ para diferentes valores de κ , lo que restringe los permitidos para α mediante la relación $\kappa \leq \alpha \leq \kappa + 1$, se puede apreciar que las curvas obtenidas para $\kappa \geq 1$ son cerradas y no suaves. La flecha negra muestra el sentido en el cuál se toman valores de α , por ejemplo, en la figura (B) comienza en $\alpha = 1$ y llega hasta $\alpha = 2$ las particiones para todos los gráficos fueron de 0.025, es decir; $\alpha_{j+1} = \alpha_j + 0.025$, $j \geq 0$ y $\alpha_0 = \kappa$.

Mientras que en la figura (B) se presentan los gráficos correspondientes al potencial $V_-(x; \alpha) = -\cos^{2\alpha} + i \cos^{\alpha-1}(x) \sin(x)$ para valores no enteros de α , las curvas representativas para estos casos son suaves y cerradas no simples, las particiones para los valores de α son las mismas que las tomadas para las gráficas (B) sin incluir valores enteros.

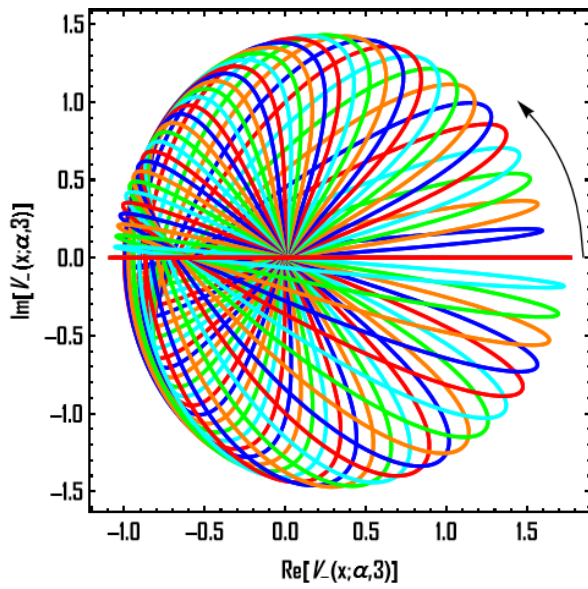
El último conjunto de gráficas, presentado en la figura (B) muestra los gráficos en el plano complejo para los casos enteros del parámetro α , asociados con las figuras (4.4). Podemos notar que tanto en el caso entero y no entero obtenemos curvas suaves y cerradas, a excepción del caso $\alpha = 1$.



(a) $\kappa = 1$



(b) $\kappa = 2$



(c) $\kappa = 3$

Figura B.0.1: Gráficos en el plano complejo para los potenciales de la sección 3, capítulo 4.

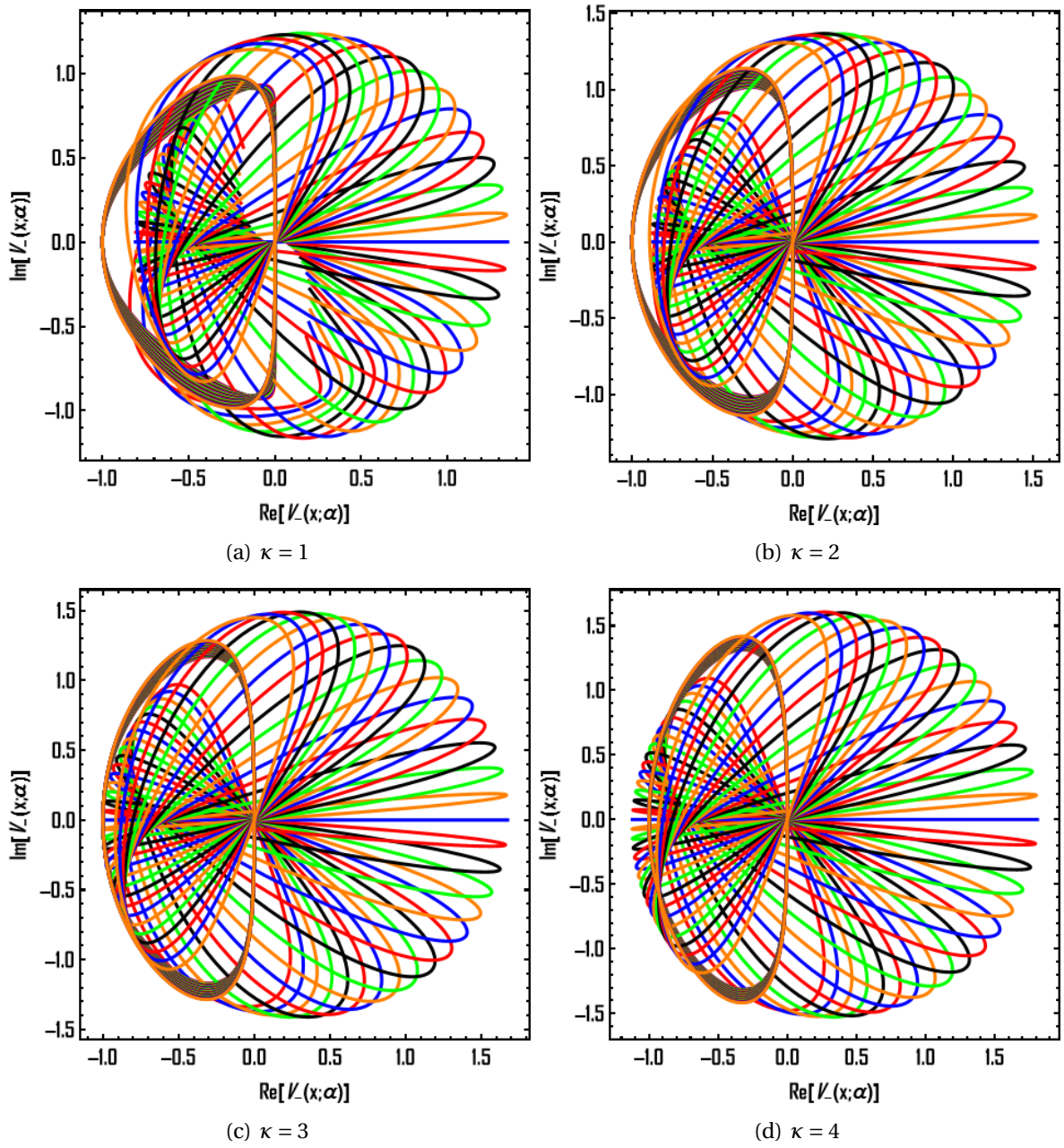


Figura B.0.2: Gráficos en el plano complejo para los potenciales de la sección 3, capítulo 5.

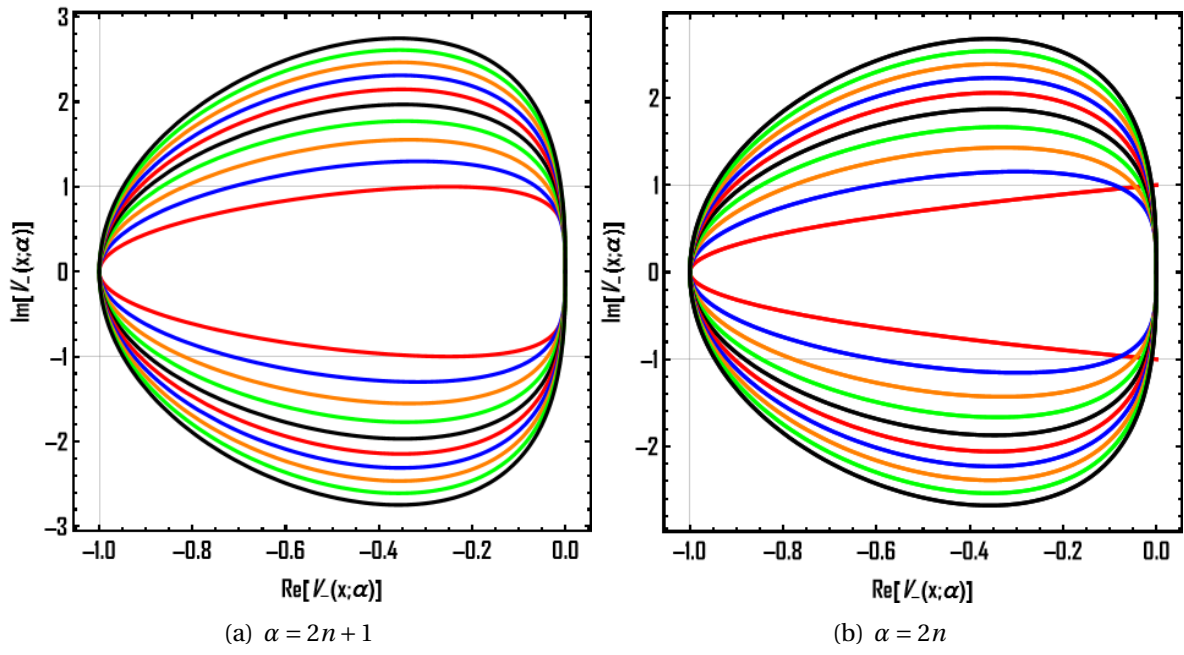


Figura B.0.3: Gráficos en el plano complejo para los potenciales de la sección 3, capítulo 5.

Bibliografía

- [1] F. Cooper, A. Khare, U. Sukhatme, *Supersymmetric quantum mechanics*, 1st. edition, (World scientific publishing, Singapore, 2001).
- [2] V. Sukumar, *Supersymmetric quantum mechanics and its applications*, AIP Conference Proceedings, 166-235, (2004), doi: 10.1063/1.1853202.
- [3] A. Gangopadhyaya, J. Mallow, C. Rasinariu, *Supersymmetric quantum mechanics an introduction*, 2nd. edition, (World scientific publishing, Singapore, 2018), doi: 10.1142/7788.
- [4] B. Bagchi, *Supersymmetry in quantum and classical mechanics*, (Chapman and Hall, New York, 2000), ISBN: 9780367398125.
- [5] S.H. Dong, *Factorization method in quantum mechanics*, 1st. edition, (Springer, Dordrecht, 2007), doi:10.1007/978-1-4020-5796-0.
- [6] L.E. Gendenshtein, I.V. Krive, *Supersymmetry in quantum mechanics*, *Sov. Phys. Usp.*, 28 (1985), 645, doi: 10.1070/PU1985v028n08ABEH003882.
- [7] G. Chen, Z.D. Chen, P.C. Xuan, *Exactly solvable potentials of the Klein Gordon equation with the supersymmetry method*, *Phys. Lett. A*, 352 (2006), 317–320, doi: 10.1016/j.physleta.2005.12.024.
- [8] A. Khare, R.K. Bhaduri, *Supersymmetry, shape invariance and exactly solvable noncentral potentials*, *Am. J. Phys.*, 62 (1994), 1008–1014, doi:10.1119/1.17698.
- [9] E.D. Filho, R.M. Ricotta, *Supersymmetry, variational method and Hulthén potential*, *Modern Physics Letters A* 10, 22(1995), pp.1613-1618, doi: 10.1142/S0217732395001733.
- [10] B. Mielnik, *Factorization method and new potentials with the oscillator spectrum*, *J. Math. Phys.*, 25(1984), 3387-3389, doi:10.1063/1.526108.
- [11] D.J.C. Fernández, *New hydrogen-like potentials*, *Letters in mathematical physics*, 8 (1984) , 337–343, doi: 10.1007/BF00400506.
- [12] V.B. Matveev, M.A. Salle, *Darboux transformations and solitons*, (Springer, Berlin, 1991).

- [13] H.C. Rosu, Short survey of Darboux transformations, Symmetries in quantum mechanics and quantum optics: proceedings of the First International Workshop, (1999), pp. 301-315.
- [14] S.Cruz y Cruz, R. Razo, O. Rosas-Ortiz, K. Zelaya, Coherent states for exactly solvable time-dependent oscillators generated by Darboux transformations, Physica Scripta, 95 4 (2020), doi:10.1088/1402-4896/ab6525. s
- [15] N. Moiseyev, Non-Hermitian quantum mechanics, 1st. edition, (Cambridge University Press, Cambridge, 2011), doi: 10.1017/CBO9780511976186.
- [16] Y. Ashidaa, Z. Gong, M. Ueda, Non-Hermitian physics, Advances in physics, 69 (2020) 3, pp.249–435, doi: 10.1080/00018732.2021.1876991.
- [17] C.M. Bender, P.D. Mannheim, PT symmetry and necessary and sufficient conditions for the reality of energy eigenvalues. Phys. Lett. A, 374.15-16, 1616-1620, (2010), doi: 10.1016/j.physleta.2010.02.032.
- [18] C.M. Bender, PT Symmetry in quantum and classical physics, 1st. edition, (World scientific publishing, Europe Ltd., 2019), doi: 10.1142/q0178.
- [19] R. El-Ganainy, K.G. Makris, M. Khajavikhan, Z.H.Muslimani, S.Rotter, D.N.Christodoulides, Non-Hermitian physics and PT symmetry, Nature Physics, 14(2018), 11-19, doi: 10.1038/nphys4323.
- [20] D. Christodoulides, J. Yang, Parity-time symmetry and its applications, 1st. edition, (Springer, Singapore, 2018), doi:10.1007/978-981-13-1247-2
- [21] C.M. Bender, S. Boettcher, Real spectra in non-Hermitian Hamiltonians having \mathcal{PT} symmetry, Phys. Rev. Lett. 80, 24(1998), pp.5243-5246, doi: 10.1103/PhysRevLett.80.5243.
- [22] B.B. Hubbard, The world according to wavelets: The story of a mathematical technique in the making, 2nd. edition, (CRC press, New York, 1998), ISBN: 9781568810720.
- [23] C.K. Chui, Wavelet analysis and its applications, volume 1, 1st. edition, chapter 1, (Academic press, 1992), ISBN: 0121745848.
- [24] S. Mallat, W.L. Hwang, Singularity detection and processing with wavelets, IEEE transactions on information theory, 38-2, pp. 619-620, (1992), doi: 10.1109/18.119727.
- [25] Z.R. Struzik, Wavelet methods in (financial) time-series processing, Physica A: Statistical mechanics and its applications 296, 1–2(2001), pp.307-319, doi: 10.1016/S0378-4371(01)00101-7.
- [26] A. Kratzer, Die ultraroten rotationsspektren der halogenwasserstoffe, Zeitschrift für physik 3, 5(1920), pp.289, doi: 10.1007/BF01327754.

- [27] E. Fues, Das Eigenschwingungsspektrum zweiatomiger Moleküle in der Undulationsmechanik 385, 12(1926), pp.367–396, doi:10.1002/andp.19263851204.
- [28] P.M. Morse, Diatomic molecules according to the wave mechanics. 2. Vibrational levels, Phys.rev., 34 (1929), pp. 57-64, doi:10.1103/PhysRev.34.57.
- [29] B. Chakrabarti, Use of supersymmetric isospectral formalism to realistic quantum many-body problems, Pramana – J. Phys., 73, 2, (2009), pp.405–416, doi: 10.1007/s12043-009-0132-6.
- [30] C. Quesne, Revisiting an isospectral extension of the Morse potential, Eur. Phys. J. Plus, (2021), doi: 10.1140/epjp/s13360-021-01086-8.
- [31] S.V. Krasnoshchekov, X. Chang, Ladder operators for Morse oscillator and a perturbed vibrational problem, International Reviews in Physical Chemistry, 38(1), (2019), pp.63–113, doi: 10.1080/0144235X.2019.1593583.
- [32] M.R. Setare, O. Hatami, An algebraic approach to the q-deformed Morse potential, Modern Physics Letters A. 24, No. 5(2009), pp.361–367, doi: 10.1142/S0217732309028230.
- [33] P. Kalauni, A. Kumar, S. Muruges, Supersymmetric quantum mechanical system for locating the Riemann zeros, Eur. Phys. J. Plus 138, 487 (2023), doi: 10.1140/epjp/s13360-023-04056-4.
- [34] M.D. McGuigan, Riemann hypothesis, modified Morse potential and supersymmetric quantum mechanics, arXiv: Mathematical Physics, (2020), doi: 10.48550/arXiv.2002.12825.
- [35] L. Pauling, The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals: An introduction to modern structural chemistry, 3rd. edition, chapter 1, (Cornell University Press, Ithaca, 1960), ISBN: 0801403332.
- [36] E.R. Lippincott, A new relation between potential energy and internuclear distance, J. Chem. Phys. 21, 2070–2071 (1953) doi: 10.1063/1.1698744.
- [37] A.A. Frost, B. Musulin, Semiempirical potential energy functions. I. The H₂ and H₂⁺ diatomic molecules, J. Chem. Phys. 22, pp.1017–1020 (1954), doi: 10.1063/1.1740254.
- [38] Y.P. Varshni, Comparative study of potential energy functions for diatomic molecules, Rev. Mod. Phys 29, 664 (1957), doi: 10.1103/RevModPhys.29.664.
- [39] J. Fischer, M. Wendland, On the history of key empirical intermolecular potentials, Fluid Phase Equilibria, 573 (2023), pp. 113876, doi:10.1016/j.fluid.2023.113876.

- [40] J.P. Araújo, M.Y. Ballester, A comparative review of 50 analytical representation of potential energy interaction for diatomic systems: 100 years of history, *International journal of quantum chemistry* 121, 24(2021), doi: 10.1002/qua.26808.
- [41] G. Mie, Zur kinetischen theorie der einatomigen körper, *Ann. Phys.* 316, 8(1903), pp.657–697, doi:10.1002/andp.19033160802.
- [42] J.E. Lennard-Jones, Cohesion, *Proceedings of the physical society* 43, 5(1931), pp.461–482, doi:10.1088/0959-5309/43/5/301.
- [43] N. Rosen, P.M. Morse, On the vibrations of polyatomic molecules, *Phys. Rev.* 42, 2(1932), pp. 210, doi: 10.1103/PhysRev.42.210.
- [44] T. Kihara, Virial Coefficients and Models of Molecules in Gases, *Rev. Mod. Phys.*, 25 (1953), pp.831, doi:10.1103/RevModPhys.25.831.
- [45] T. Tietz, Potential-energy function for diatomic molecules, *Canadian Journal of Physics* 49, 10(1971), pp.1315–1319, doi:10.1139/p71-155.
- [46] F. Ke-Xue, W. Meng, J. Chun-Sheng, Improved five-parameter exponential-type potential energy model for diatomic molecules, *Communications in theoretical physics*, (2019), 71(1), 103, doi: 10.1088/0253-6102/71/1/103.
- [47] S.B. Doma, A.A. Gohar, M.S. Younes, Analytical solutions of the molecular Kratzer-Feus potential by means of the Nikiforov-Uvarov method, *J Math Chem* 61, (2023), pp. 1301–1312, doi: doi.org/10.1007/s10910-023-01462-y.
- [48] S.M. Ikhdair, R. Sever, Exact quantization rule to the Kratzer-type potentials: an application to the diatomic molecules, *J Math Chem*, 45 (2009), pp.1137–1152, doi: 10.1007/s10910-008-9438-8.
- [49] E.P. Inyanga, E.O. Obisungb, The study of electronic states of Ni ans Sci molecules with screened Kratzer potential, *East European journal of physics*, 3(2022), pp.32-38, doi:10.26565/2312-4334-2022-3-04.
- [50] E. Schrödinger, Quantisierung als Eigenwertproblem, *Ann. Phys.* 28, 6(1926), pp. 384-361, doi:
- [51] A. Lobato, M.A. Salvadó, J.M. Recio, M. Taravillo, V.G. Baonza, *Angew Chem.Int.Ed*, 60(2021), pp.17028–17036, doi:10.1002/anie.202102967.
- [52] G. Malescio, Intermolecular potentials — past, present, future, *Nature materials* 2, 8(2003), pp. 501–503, doi:10.1038/nmat949.
- [53] S.V. Goryainov, A model of phase transitions in double-well Morse potential: Application to hydrogen bond, *Phys. B*, 407 (2012), pp. 4233-4237, doi: 10.1016/j.physb.2012.06.045.

- [54] M.C. Lawrence, G.N. Robertson, The interpretation of the neutron inelastic scattering and infrared absorption spectra of chromous acid using the double Morse potential model, *J. Chem. Phys.* 87(6) (1987), pp. 3375-3380, doi: 10.1063/1.452980 .
- [55] M. Znojil, Exact solution for Morse oscillator in PT-symmetric quantum mechanics, *Phys. Lett. A*, 264 (1999), pp. 108-111, doi: 10.1016/S0375-9601(99)00805-1.
- [56] B.P. Straughan, S.Walker, *Spectroscopy*, vol.3, chapter 3, 1st. edition, (Springer, Dordrecht, 1976), doi: 10.1007/978-94-009-5741-1.
- [57] J.M. Hollas, *Modern spectroscopy*, chapter 7, 4th. edition, (J. Wiley & Sons, England, 2004), ISBN: 978-0-470-84416-8.
- [58] B. Lv, C. Chen, F. Zhang, G.M. Poletaev, R.Y. Rakitin, Potentials for describing interatomic interactions in $\gamma Fe - Mn - C - N$ system, *Metals*, 12, 982 (2022), doi: 10.3390/met12060982.
- [59] S.M. Blinder, *Introduction to quantum mechanics*, 1st. edition, chapter 14, (Academic press, 2004), ISBN: 0121060519.
- [60] J. de la Cruz, H.C. Rosu, J.S. Murguía, Multifractal analysis of the symmetry of a strictly isospectral energy landscape on a square lattice, *Materials letters*, 293 (2021), 129659, doi: 10.1016/j.matlet.2021.129659.
- [61] A. Paris-Mandoki & R. Jauregui, Analytical results for the Morse potential in s-wave ultracold scattering: three dimensional vs. one dimensional problem, arXiv:1203.1285v1, (2012), doi: 10.48550/arXiv.1203.1285.
- [62] A. Matsumoto, Generalised matrix elements in discrete and continuum states for the Morse potential, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 21 (1988), pp. 2863-2870, doi: 10.1088/0953-4075/21/16/011.
- [63] J. Choi, C.P. Chen, Certain relationships among polygamma functions, Riemann zeta function and generalized zeta function, *J. Inequal Appl.*, 75 (2013), doi: 10.1186/1029-242X-2013-75.
- [64] S. Flügge, *Practical quantum mechanics*, Classics in mathematics, 1st. edition, (Springer Berlin, Heidelberg, 1999), pp.183, doi: 10.1007/978-3-642-61995-3.
- [65] F. Nutku, E. Aydiner, K.D. Sen, Complexity of HCl and H₂ molecules under q-deformed Morse potential. *Indian J. Phys* 96, (2022), pp. 1–7, doi: 10.1007/s12648-021-02028-x.
- [66] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*, 8th. edition, (John Wiley & sons inc., London, 2004), ISBN: 9780471415268.

- [67] L. Kronig, W.G. Penney, Quantum mechanics of electrons in crystal lattices, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 130, 814(1931), pp. 499–513. doi: 10.1098/rspa.1931.0019.
- [68] G. Dunne, J. Feinberg, Self-isospectral periodic potentials and supersymmetric quantum mechanics, *Phys. Rev. D* 57, 1271, 2-15, (1998), doi: 10.1103/PhysRevD.57.127.
- [69] G. Dunne, J. Mannix, Supersymmetry breaking with periodic potentials, *Phys. Lett. B*, 428.1-2, (1998), pp.115-119, doi: 10.1016/S0370-2693(98)00373-6.
- [70] B. Bagchi, C. Quesne, An update on the \mathcal{P} -symmetric complexified Scarf II potential, spectral singularities and some remarks on the rationally extended supersymmetric partners, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 43, 30(2010), pp. 305301, doi: 10.1088/1751-8113/43/30/305301.
- [71] M. Caputo, M. Fabrizio, Applications of new time and spatial fractional derivatives with exponential kernels *Prog. Fract. Differ. Appl.*, 2 (2016), pp. 1-11, doi: 10.18576/pfda/020101.
- [72] J.C. van den Berg, *Wavelets in physics*, 2nd. edition, (Cambridge university press, 2004), ISBN: 0521593115.
- [73] J.M. Cruz-Duarte, J.Rosales García, C.R. Correa Cely, A. García Perez, J.G. Avina Cervantes, A closed form expression for the Gaussian-based Caputo-Fabrizio fractional derivative for signal processing applications, *Commun. nonlinear sci. number simulat.*, 61 (2018), pp.138-148, doi: 10.1016/j.cnsns.2018.01.020.
- [74] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products*, p. 153, formula 2. 513. 3,4, 7th. edition, (Academic Press, 2007), ISBN: 9780080471112.
- [75] J. D. Hunter, *Matplotlib: A 2d graphics environment, computing in science & engineering*, 9(3), 90-95, (2007).



Multifractal analysis of the symmetry of a strictly isospectral energy landscape on a square lattice



J. de la Cruz^{a,*}, J.S. Murguía^b, H.C. Rosu^a

^a Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, Camino a la Presa San José 2055, Lomas 4^a sección, 78216 San Luis Potosí, S.L.P., Mexico

^b Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Avenida Parque Chapultepec 1570, 78210 San Luis Potosí, S.L.P., Mexico

ARTICLE INFO

Article history:

Received 15 December 2020

Received in revised form 27 February 2021

Accepted 5 March 2021

Available online 17 March 2021

Keywords:

Multifractal

Hölder regularity

Isospectral

Symmetry

Riccati equation

ABSTRACT

We use the Hölder regularity analysis to study the symmetry breaking and recovery due to a parametric potential generated via the strictly isospectral factorization method. The initial potential is two-dimensional and periodic in the two Cartesian directions, with the symmetry group P_{4mm} . The resulting parametric isospectral potential display a P_m symmetry for values of the parameter moderately close to the singular value γ_s . However, at large values of the parameter, visually around $\gamma = \gamma_s + 110$, the original symmetry is recovered. For a much higher precision value of the parameter for this symmetry recovery, we show that the multifractal spectrum of the parametric potential can be conveniently used. In the latter case, we obtain $\gamma = \gamma_s + 201.085$ for three decimal digits precision.

© 2021 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

In 1984, Mielnik [1] obtained the parametric Darboux isospectral potential $V(x, \gamma) = x^2/2 - d/dx [\log(e^{-x^2/2} + \gamma)]$ for the case of the harmonic oscillator potential, $V_{\text{harm}} = x^2/2$, and since then many parametric isospectral potentials have been discussed in the literature [2]. Here, Mielnik's method is applied to a periodic two-dimensional potential with identical sinusoidal components on both Cartesian axes which is of interest in textures of energy landscapes. The main goal is to obtain a very precise value (much beyond the visual one) of the Darboux deformation parameter γ at which the symmetry associated to the original potential is recovered. The feature of symmetry recovery in this case is based on the well known fact that when $\gamma \rightarrow \infty$ the parametric deformation goes to zero. From the strict calculus point of view this comes out from the fact that in Eq. (6) below, γ stands in the denominator of ϕ and as such the ϕ term goes to zero at increasing γ . Physically, it is well known that γ is related to the change of boundary conditions from Dirichlet to Robin ones [3], and so the recovery of the initial symmetry can be controlled through external fields. We notice that the issue of (super) symmetry breaking and recovery has been discussed previously for relativistic quantum field models, but focused on the concept of mass generation, see e.g. [4,5], while in

condensed matter physics, the same issue has been related to phase transitions, either of equilibrium or non-equilibrium type.

The symmetry operations for the chosen periodic potential are $\pi/2$ rotations applied at the center of the cell and reflections over the axis and diagonals, while the deformed potential landscapes only possess a reflection with respect to the principal diagonal. When the deformation parameter takes a sufficiently high value the symmetry operations for the deformed potential are very close to the non deformed ones with a high level of precision and one can say that all the lost symmetries are recovered.

The effect of the deformation parameter is to modify the local maxima and minima distribution in the deformed potential, which physically implies that the probability density is redistributed over the landscape as a function of the deformation parameter, and becomes the same as that of the original potential when the deformation parameter is increased. In practice, the level of the achieved symmetry recovery is high already at moderate values of γ , but we are interested in much more precise values of this parameter such that the initial potential landscape and the corresponding deformed one can be considered as indistinguishable.

To find such precise values, we use the multifractal analysis which allows to study in detail the distribution of singularities of a function. The spectrum of singularities depends on the Hölder exponents that are used generically in the signal processing area since they allow the characterization of the local regularity of a signal or a function [6]. Moreover, our multifractal approach to isospectral potential energy landscapes and their symmetry recovery

* Corresponding author.

ery displays similarities with Kolmogorov's statistical theory of turbulence based on the concepts of energy cascades and self-similarity, in particular with a symmetry model of multifractal cascades in fully developed turbulence which incorporates intermittency effects approached by multifractal techniques [7]. As quoted in [7], Onsager related the Kolmogorov's $-5/3$ scaling law of turbulence to the fact that velocity is Hölder continuous of exponent one third. In addition, it is well known that the isothermal surfaces in a medium of fluid turbulence are fractal above an inner scale which depends on the Reynolds number [8] suggesting that the same thing may happen with the fractality of the isospectral landscapes in terms of some scale depending on the deformation parameter.

2. Methodology

2.1. Isospectral texture of energy landscapes

We consider the very simple periodic two-dimensional Schrödinger equation of separable Cartesian variables [9]

$$\sum_{i=1}^2 \left[-\nabla_i^2 + V_-(x_i) \right] \psi(x_i) = 0, \quad \nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad (1)$$

where $V_-(x_i) = \cos^2(x_i) + \sin(x_i)$ is the periodic potential function and $\psi(x_i)$ are stationary solutions. Eq. (1) can be factorized by the operators

$$\hat{a}_i^\dagger = -\nabla_i + \cos(x_i), \quad \hat{a}_i = \nabla_i + \cos(x_i). \quad (2)$$

Next, we use the isospectral condition [1]

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{b}\hat{b}^\dagger \quad (3)$$

to obtain the two Riccati equations

$$V_+(x_i) = \beta_i^2(x_i) + \beta_i'(x_i), \quad V_-(x_i) = \cos^2(x_i) - \sin(x_i) \quad (4)$$

whose general solution is

$$\beta_{i,g}(x_i) = \cos(x_i) + \phi_i(x_i) = \cos(x_i) + \frac{e^{-2\sin(x_i)}}{\gamma_i + \int_0^{x_i} e^{-2\sin(x_t)} dx_t} \quad (5)$$

from which one can generate the deformed potential

$$\begin{aligned} V_{\gamma_1, \gamma_2}(x_1, x_2) &= \sum_{i=1}^2 [V_+(x_i) - 2\nabla_i \beta_{i,g}(x_i)] \\ &= \sum_{i=1}^2 [V_-(x_i) - 2\nabla_i \phi_i(x_i)]. \end{aligned} \quad (6)$$

From the last two equations, one can see that there is a value of γ where the isospectral potential becomes singular; this value is given by $\gamma_s = -2\pi I_0(2)$ [10], where I_0 is the modified Bessel function of zero order.

The Figs. 1(a,b) show the original potential and the deformed one (6), respectively. The contour plots have been used to classify the symmetry groups related to these potentials.

2.2. Hölder regularity and multifractal analysis

Functions displaying singularities are characterized by the singularity spectrum which measures their strength through their Hölder exponents α . The calculation of the singularity spectrum is performed only for one coordinate since for the other one it is identical.

It is known [11] that a function f has a Hölder exponent α over $(c + \epsilon, d - \epsilon)$, if and only if for any $\epsilon > 0$ there exists a constant $A > 0$ such that for $x_0 \in (c + \epsilon, d - \epsilon)$ and for $a > 0$ we have

$|W_{a,x_0} f(x)| \leq Aa^{z+1/2}$, where W_{a,x_0} is the wavelet transform of f , an integral transform with wavelets as integral nuclei [11]. In our case, with $f(x_i) = V_{\gamma_i}(x_i)$, we have $|W_{a,x_0} V_{\gamma_i}(x_i)| \leq Aa^{z+1/2}$, which is equivalent to

$$\log |W_{a,x_0} V_{\gamma_i}(x_i)| \leq \log A + \left(\alpha + \frac{1}{2} \right) \log(a). \quad (7)$$

The value of α in (7) corresponds to the Hölder exponent of $V_{\gamma_i}(x_i)$ at the point $x_i = x_0$ [11].

We will also use the fractal dimension of a function f defined as

$$D(\alpha) = -\frac{\log N_\alpha(s)}{\log s}, \quad (8)$$

where $N_\alpha(s)$ is the number of intervals of size s intersecting the set S_α of points where the function is Hölder continuous, i.e., its modulus of continuity is bounded by $|f(x_0) - f(x_0 + s)| \leq C|s|^\alpha$ for any point $x_0 \in S_\alpha$.

In this work, the Hölder exponents depend on the deformation parameters γ_i . Therefore we obtain a family of singularity spectra related to the set of isospectral potentials.

3. Results and discussion

The plots in Fig. 2 (a-h) represent the evolution of the symmetry on the tiles as a function of the deformation parameter γ , starting with the tiles of symmetry group P_{4mm} related to the original potential. Because of the isospectral transformation, the group is modified to P_m symmetry group, but when the deformation parameter γ takes values bigger than a critical value a return to the original group P_{4mm} can be seen in Fig. 2. The symmetry group classification is according to [12]. Since the critical value of γ cannot be determined only from the contour plots of the parametric potentials, we analyze their Hölder regularity to find a very accurate value.

The original potential has an associated multifractal spectrum plotted in fig. (3) that is used to find the approximated critical value of the deformation parameter. The precision of this method can be seen in the Figs. 4 that show the region where the multifractal spectra are different for the studied potentials.

The results show that the multifractal spectrum of the original potential is recovered when the deformation parameter takes rather big values. To establish a precise value for the deformation parameter in terms of local regularity we use the method of lines of modulus maxima with the Mexican hat wavelet. The method provides a full characterization of the potential generating a table with the Hölder exponent values of the considered function whose positions vary as a function of the deformation parameter. Moreover, we can introduce a condition of equivalence of two potentials as follows:

Two potentials are equivalent when the number of singularities and Hölder exponents of the potentials are the same and are located in the same neighborhoods.

We thus present in Table 1 the Hölder exponent values and their locations for the original potential and the isospectral parametric potential at the determined values of the deformation parameter at which the values of Hölder exponents (α) are as close as numerically possible to the values of the original potential, while their position (x_0) may be considered in a small neighborhood of the original locations. Proceeding in this way, we find that the critical value of γ at which the symmetry group of the original potential is recovered is between $\gamma_s + 201.084 < \gamma < \gamma_s + 201.085$ (1).

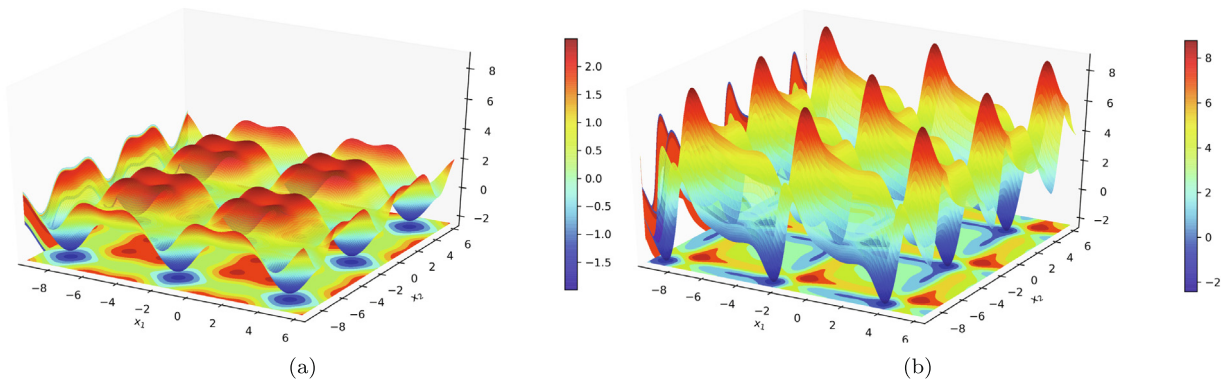


Fig. 1. Three-dimensional plots of (a) the original potential $V_-(x_{1,2})$ and (b) the parametric isospectral potential $V_{\gamma_{1,2}=5}(x_{1,2})$.

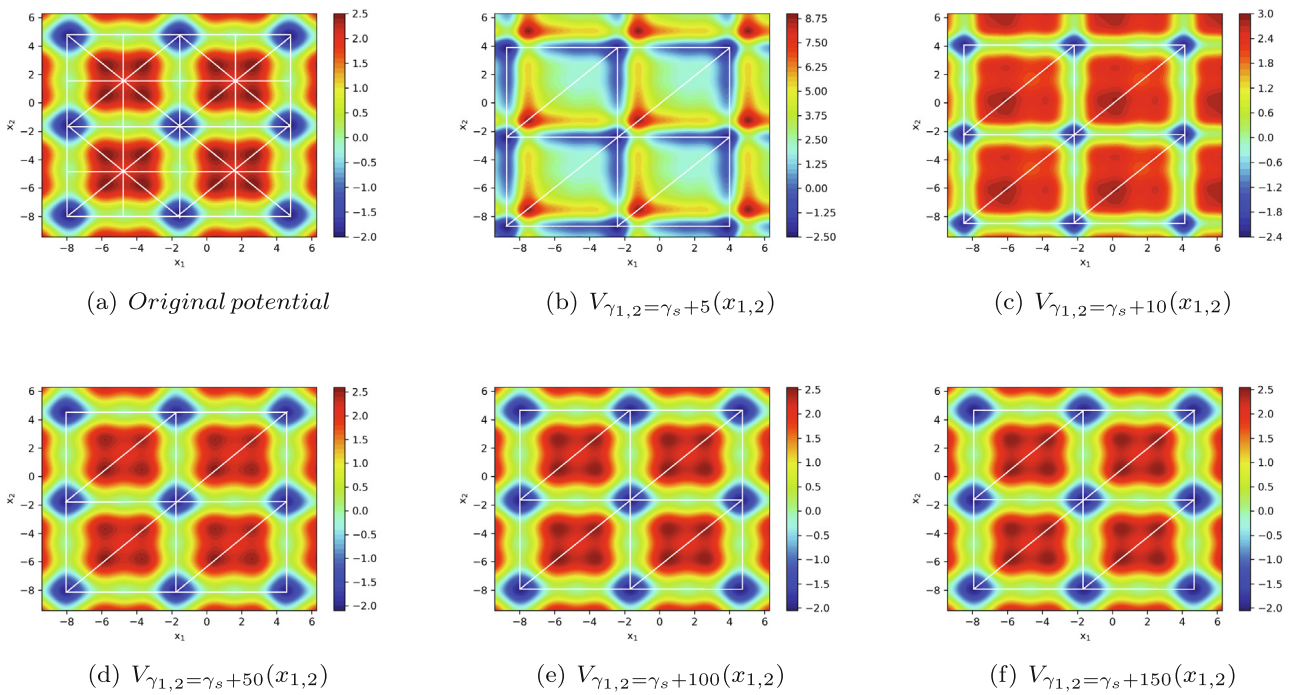


Fig. 2. Convergence to the original tile.

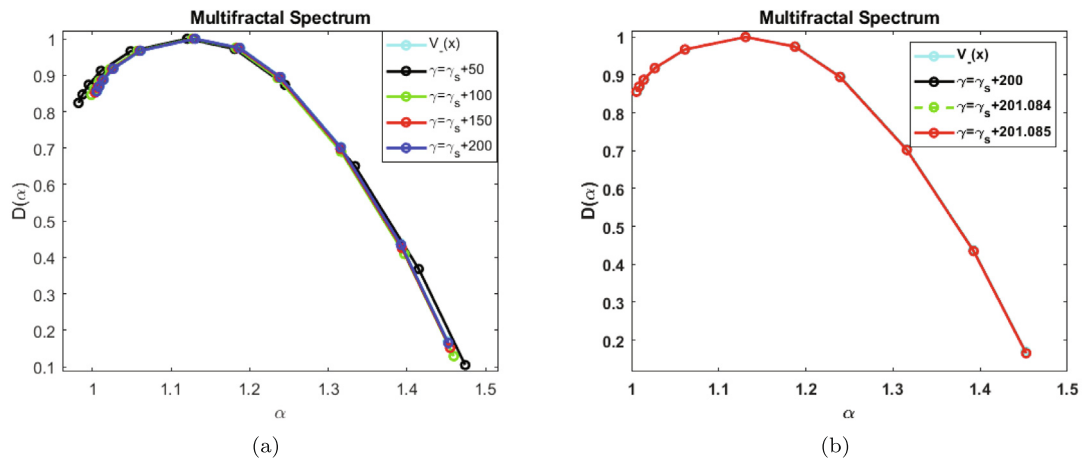


Fig. 3. Convergence to the multifractal spectrum of the original potential $V_-(x)$.

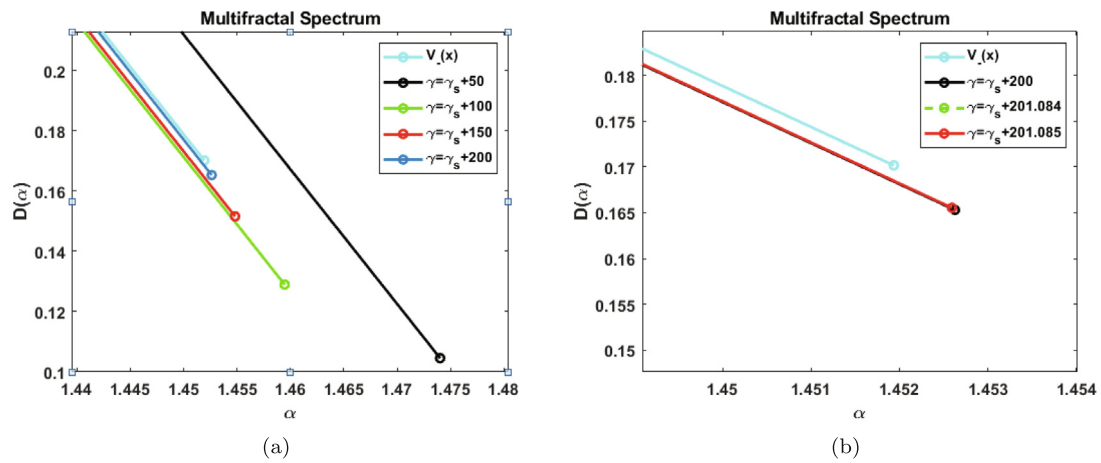


Fig. 4. Amplification of the convergence region for the multifractal spectrum.

Table 1

Hölder exponents (α) and their position (x_0) for the original potential and five members of the family of parametric isospectral potentials, of which the last two are separated by only $1 \cdot 10^{-3}$ in the deformation parameter.

$V_-(x)$		$\gamma_s + 10$		$\gamma_s + 50$		$\gamma_s + 100$		$\gamma_s + 201.084$		$\gamma_s + 201.085$	
x_0	α	x_0	α	x_0	α	x_0	α	x_0	α	x_0	α
5	1.978	32	1.575	5	1.909	5	1.955	5	1.975	5	1.975
170	1.963	118	1.844	172	1.959	171	1.959	170	1.963	170	1.963
314	1.960	193	1.958	313	1.960	314	1.960	314	1.960	314	1.960
459	1.966	310	1.956	460	1.964	460	1.965	459	1.966	459	1.966
619	1.999	459	1.954	599	1.924	609	1.996	617	1.998	617	1.999

For $\gamma_s + 201.085$, all α 's but one are identical to those of $V_-(x)$ up to three decimal digits.

4. Conclusion

We have shown through a simple illustrative example that the contour plots of parametric potentials which are supersymmetric isospectral to periodic potentials provide interesting energy landscapes in which the electrons may move in a material planar slab. They display symmetry properties of much interest in materials science such as symmetry breaking and the recovery of the symmetry group related to the initial landscape.

As shown here, the multifractal analysis provides a high-precision measure of the convergence of the deformed potentials to the original one when the deformation parameter takes big values. Using this kind of analysis, we can establish a relationship between the multifractal spectrum and the symmetry breaking in terms of equivalence of their multifractal spectra. Highly precise values of the critical deformation parameter can be obtained through the convergence of Hölder exponents for the deformed potential to those of the original one.

In materials science, there are other issues that can be approached by multifractal analysis. An example of transition of symmetry groups $P_m \rightarrow P_{4mm}$ as in our study occurs in a phase transition of ferroelectric type due to temperature changes in a ceramic solid solution [13].

Furthermore, the parametric isospectral (supersymmetric) energy landscapes that we have introduced here have potential applications to areas such as electron transport in semiconductor superlattices, optical superlattices, and trapped ultracold atoms, to name just a few. Besides, more complicated isospectral energy landscapes can be constructed by using factorization operators with more periodic components.

CRediT authorship contribution statement

J. la Cruz: Writing - original draft, Methodology. J.S. Murguía: Supervision, Validation. H.C. Rosu: Writing - original draft, Supervision, Formal analysis.

Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Acknowledgement

The first author acknowledges the financial support of CONA-CyT through a doctoral fellowship. This paper was partially supported by CONACYT funds from grant CB 2017-2018 A1-S-45697. The authors thank the referees for important remarks that helped to refine this work.

References

[1] B. Mielnik, Factorization method and new potentials with the oscillator spectrum, J. Math. Phys. 25 (1984) 3387-3389.
 [2] H.C. Rosu, S.C. Mancas, P. Chen, One-parameter families of supersymmetric isospectral potentials from Riccati solutions in function composition form, Ann. Phys. 343 (2014) 87-102.
 [3] T.L. Curtright, C.K. Zachos, Branched Hamiltonians and supersymmetry, J. Phys. A: Math. Theor. 47 (2014) 145201.
 [4] A. Sako, T. Suzuki, Recovery of full N=1 supersymmetry in non(anti-)commutative superspace, JHEP 11 (2004) 010.

- [5] L. Ibiapina Bevilaqua, A.C. Lehum, A.J. da Silva, Soft supersymmetry breaking in the nonlinear sigma model, *Phys. Lett. B* 789 (2019) 150–153.
- [6] J.S. Murguía, J. Urías, On the wavelet formalism for multifractal analysis, *Chaos* 11 (2001) 858–863.
- [7] G.C. Layek, Sunita, Multifractal cascade symmetry model for fully developed turbulence, *Fractals* 26 (2018) 1850070..
- [8] P. Constantin, I. Procaccia, K.R. Sreenivasan, Fractal geometry of isoscalar surfaces in turbulence: Theory and experiments, *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 1739–1742.
- [9] J. Socorro, M.A. Reyes, C.V. Mora, E. Condori, Supersymmetric quantum mechanics: two factorization schemes and quasi-exactly solvable potentials, in *Panorama of contemporary quantum mechanics - concepts and applications*, editor T.T. Truong, IntechOpen, 2019..
- [10] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products*, p. 496, formula 3.937.2, Academic Press, 2007..
- [11] S. Mallat, *A wavelet tour of signal processing, chapter 6, third edition*, Academic Press, 2009.
- [12] D. Schattschneider, The plane symmetry groups: Their recognition and notation, *Amer. Math. Monthly* 85 (1978) 439–450.
- [13] W. Ge, Y. Ren, J. Zhang, C.P. Devreugd, J. Li, D. Viehland, A monoclinic-tetragonal ferroelectric phase transition in lead-free $(K_{0.5}Na_{0.5})NbO_3 - x\%LiNbO_3$ solid solution, *J. Appl. Phys.* 111 (2012) 103503.

Physica A: Statistical Mechanics and its Applications

The parametric Darboux deformation of the classical harmonic oscillator

--Manuscript Draft--

Manuscript Number:	PHYSA-233645
Article Type:	Research Paper
Section/Category:	Concepts or methods of statistical mechanics in Other topics
Keywords:	Harmonic oscillator; Parametric Darboux transformation; Ermakov-Pinney equation; Ermakov-Lewis invariant; Riccati solution; inverted factorization
Corresponding Author:	Haret C Rosu, Ph.D. Potosi Institute of Scientific and Technological Research San Luis Potosi, MEXICO
First Author:	Haret C Rosu, Ph.D.
Order of Authors:	Haret C Rosu, Ph.D. J. de la Cruz, M
Abstract:	One-parameter Darboux deformations are effected for the classical harmonic oscillator following the recent paper [Rosu & Mancas, Mod. Phys. Lett. A 38, 2350022 (2023)], where a hyperbolic counterpart related to Fibonacci numbers has been discussed. Furthermore, upon considering the harmonic oscillator as a particular case of parametric oscillator, the corresponding Ermakov-Lewis invariants are introduced and their independence on the deformation parameter is proved.
Suggested Reviewers:	<p>Vladislav Kravchenko, PhD Staff, Center for Research and Advanced Studies of the National Polytechnic Institute vkravchenko@math.cinvestav.edu.mx He is an expert in mathematical physics</p> <p>David Fernandez, PhD Staff, Center for Research and Advanced Studies of the National Polytechnic Institute david.fernandez@cinvestav.mx He is an expert in the topic of our work.</p> <p>Tiberiu Harko, PhD Staff, Babeş-Bolyai University Astronomical Observatory tiberiu.harko@aira.astro.ro He is an expert in mathematical physics in general.</p> <p>Michel Planat, PhD Staff, Franche-Comté Electronics Mechanics Thermal Science and Optics Sciences and Technologies Department of Optics michel.planat@femto-st.fr He is an expert scientist who knows about our previous works in this area.</p> <p>Oscar Rosas, PhD Staff, Center for Research and Advanced Studies of the National Polytechnic Institute orosas@fis.cinvestav.mx He is an expert in the topic of this work.</p>

December 14th, 2023

Cover Letter

We wish to submit for publication at *Physica A* our work “The parametric Darboux deformation of the classical harmonic oscillator”, because we know that the journal had a long tradition of publishing papers in mathematical physics and still publishes papers of this kind. By Darboux deformations we understand Darboux transformations (DTs) that we apply to the paradigmatic case of free harmonic oscillator. The standard DT based on particular Riccati solutions does not provide new results in this case, and this may be the reason why this method has not been considered in the literature for this case. However, if the general Riccati solution is used then equations corresponding to parametric oscillators are generated. These parametric oscillators can be considered as Darboux deformations of the classical harmonic oscillators. Furthermore, they can be approached through the Ermakov-Pinney nonlinear equation and their Ermakov-Lewis invariants can be introduced. This is what we have worked out in this contribution, which, to the best of our knowledge, is new in the literature.

Haret C. Rosu (corresponding author)

Highlights

1. One-parameter Darboux deformations of the harmonic oscillator are worked out.
2. Ermakov-Pinney equations are discussed in detail for this class of parametric oscillators.
3. Ermakov-Lewis invariants do not depend on the deformation parameter.

The parametric Darboux deformation of the classical harmonic oscillator

H.C. Rosu^{1,*} and J. de la Cruz^{1,†}

¹*Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, Camino a la Presa San José 2055, Col. Lomas 4a Sección, San Luis Potosí, 78216 S.L.P., Mexico*

One-parameter Darboux deformations are effected for the classical harmonic oscillator following the recent paper [Rosu & Mancas, *Mod. Phys. Lett. A* 38, 2350022 (2023)], where a hyperbolic counterpart related to Fibonacci numbers has been discussed. Furthermore, upon considering the harmonic oscillator as a particular case of parametric oscillator, the corresponding Ermakov-Lewis invariants are introduced and their independence on the deformation parameter is proved.

Keywords: Harmonic oscillator; Parametric Darboux transformation; Ermakov-Pinney equation; Ermakov-Lewis invariant.

I. INTRODUCTION

Parametric Darboux transformations, a.k.a. parametric supersymmetrizations, of homogeneous second-order linear differential equations have been an interesting topic in the literature since four decades now. Different from the common Darboux transformations which are based on a particular Riccati solution, they are based on the general Riccati solution and therefore generate whole families of Darboux covariant equations. In a quantum mechanical context, this covariance has been used to generate many exactly solvable Schrödinger problems that are isospectrally related to a given exactly solvable quantum eigenvalue problem with the parameter related to the changed character of the boundary conditions. This kind of parametric Darboux transformations have been applied in many areas of physics [1-7] including the free damped harmonic oscillator in classical mechanics [8], but, to the best of our knowledge, the pure harmonic oscillator has not been studied in this approach.

In this short paper, our goal is to present a parametric Darboux analysis of the classical harmonic/trigonometric oscillator, as a counterpart of the recent work [9] on the parametric supersymmetrization of the simple hyperbolic ‘oscillator’

$$y_i'' - \tilde{\varphi}^2 y_i = 0, \quad (1.1)$$

where $\tilde{\varphi} \approx 0.4812$ is the natural logarithm of the golden ratio $\varphi \equiv \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.6180$ and the subindex refers to the odd and even cases. In [9], the supersymmetric approach of (1.1) has been motivated by the fact that its hyperbolic function solutions are the odd and even Binet expressions of the Fibonacci numbers as previously pointed out by Faraoni and Atieh [10] who used it in the FRW cosmological context.

The trigonometric counterpart of equation (1.1), i.e.,

$$G'' + \omega_0^2 G = 0, \quad (1.2)$$

where ω_0 is the natural frequency of the oscillator is formally obtained from (1.1) by the change $\tilde{\varphi}^2 \rightarrow -\omega_0^2$.

The rest of the paper is structured as follows. Section II contains a brief review of the parametric supersymmetric approach in general terms. The application to equation (1.2) is described in section III. The associated Ermakov problem with the corresponding Ermakov-Lewis invariants is discussed in section IV. Finally, the conclusions end up the paper.

II. BRIEF REVIEW OF THE PARAMETRIC DARBOUX DEFORMATION

The operatorial form of (1.2)

$$(D^2 - f(t)) G = 0, \quad D = \frac{d}{dt}, \quad f(t) = -\omega_0^2, \quad (2.3)$$

*Electronic address: hcr@ipicyt.edu.mx; ORCID: 0000-0001-5909-1945

†Electronic address: josue.delacruz@ipicyt.edu.mx; ORCID: 0000-0001-5943-5752

can be factored in the form

$$(D - \Phi)(D + \Phi)G \equiv [D^2 - (-\Phi' + \Phi^2)]G = 0, \quad (2.4)$$

with the negative logarithmic derivative, $\Phi = -G'/G$ of a solution G of (2.3). In the Φ variable, (2.3) is turned into the Riccati equation,

$$-\Phi' + \Phi^2 = f(t). \quad (2.5)$$

Way backwards, if one knows a Riccati solution Φ of (2.5), the solution of (2.3) can be obtained from $G = \exp(-\int^t \Phi)$.

The Darboux-transformed equation of (2.4), also known as the supersymmetric partner equation of (2.4), is obtained by reverting the factoring

$$(D + \Phi)(D - \Phi)\hat{G} \equiv [D^2 - (\Phi' + \Phi^2)]\hat{G} = 0. \quad (2.6)$$

The generic interesting fact of the reverted factorizations is that they are not unique [1, 2, 7]. This is because in the factorization brackets one can use the general Riccati solution in the form of the Bernoulli ansatz $\Phi_g = \Phi + 1/u$, where the function u satisfies the first-order differential equation

$$-u' + 2\Phi u + 1 = 0 \quad (2.7)$$

and not just a particular solution Φ . Then, it is easy to show that

$$\left(D + \Phi + \frac{1}{u}\right) \left(D - \Phi - \frac{1}{u}\right) \tilde{G} = [D^2 - (\Phi' + \Phi^2)]\tilde{G} = 0. \quad (2.8)$$

Furthermore, the left hand side of the latter equation can be written as

$$[D^2 - (\Phi'_g + \Phi_g^2)]\tilde{G} = 0, \quad (2.9)$$

The relevant result is obtained when one reverts back the factorization brackets in the intent to return to the initial equation

$$[D^2 - (-\Phi'_g + \Phi_g^2)]\mathcal{G} = 0. \quad (2.10)$$

Substituting the Bernoulli form of Φ_g in (2.10) leads to

$$[D^2 - (f(t) + 4\Phi u^{-1} + 2u^{-2})]\mathcal{G} = 0, \quad (2.11)$$

which is clearly different from (2.4) representing a one-parameter family of equations that have the same Darboux-transformed partner, the running parameter of the family being the integration constant that occurs in Bernoulli's function $1/u$. The latter can be obtained by the integration of (2.7)

$$\frac{1}{u} = \frac{e^{-2\int^t \Phi(t')dt'}}{\gamma + \int^t e^{-2\int^t \Phi(t')dt'} dt} = \frac{d}{dt} \ln \left(\gamma + \int^t e^{-2\int^t \Phi(t')dt'} \right). \quad (2.12)$$

Equation (2.11) differs from the initial equation under consideration by the parametric Darboux deformation $4\Phi/u + 2/u^2$ of its nonoperatorial part $f(t)$. The solution \mathcal{G} of this kind of equations are related to the initial (undeformed) solution G as follows

$$\mathcal{G} = e^{-\int^t \Phi_g ds} = e^{-\int^t \Phi ds} e^{-\int^t \frac{d}{ds} \ln(\gamma + \int^t e^{-2\int^t \Phi(s)ds}) ds} = \frac{G}{\gamma + \int^t G^2(s)ds}. \quad (2.13)$$

We are now ready to apply this simple mathematical scheme to the two trigonometric cases for $f(t) = -\omega_0^2$ in the next section.

III. THE PARAMETRIC DARBOUX-TRANSFORMED CLASSICAL HARMONIC OSCILLATOR

In this section, we present the two cases, odd and even, of the parametric Darboux-transformed classical harmonic oscillator.

(i) *The odd parametric Darboux-transformed case.*

In the odd case, $G_o = \sin(\omega_0 t)$, the Riccati solution is $\Phi_o = -\tilde{\varphi} \cot(\omega_0 t)$ and the Darboux pair of Riccati equations have the form

$$-\frac{d\Phi_o}{dt} + \Phi_o^2 = -\omega_0^2, \quad \frac{d\Phi_o}{dt} + \Phi_o^2 = -\omega_0^2[1 - 2\operatorname{cosec}^2(\omega_0 t)], \quad (3.14)$$

where the periodic singular free term in the right hand side of the second Riccati equation is the non-parametric Darboux deformation of $\tilde{\varphi}^2$. For this case, the parametric Darboux partner equation (2.11) takes the form

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega_{\gamma,o}^2\right) \mathcal{G}_o = 0, \quad \omega_{\gamma,o}^2 = \omega_0^2 \left(-1 - \frac{8 \sin(2\omega_0 t)}{2\omega_0(2\gamma + t) - \sin(2\omega_0 t)} + \frac{32 \sin^4(\omega_0 t)}{(2\omega_0(2\gamma + t) - \sin(2\omega_0 t))^2}\right) \quad (3.15)$$

with the two linearly independent solutions given by

$$\mathcal{G}_{o,1}(\omega_0 t) = \frac{4\omega_0}{2\omega_0(2\gamma + t) - \sin(2\omega_0 t)} \sin(\omega_0 t), \quad (3.16)$$

$$\mathcal{G}_{o,2}(\omega_0 t) = \frac{[-4\omega_0^2(2\gamma + t)^2 \cot(\omega_0 t) + 2\omega_0 t - \sin(2\omega_0 t)]}{4\omega_0^2 [2\omega_0(2\gamma + t) - \sin(2\omega_0 t)]} \sin(\omega_0 t). \quad (3.17)$$

(ii) *The even parametric Darboux-transformed case.*

In the even case, $G_e = \cos(\tilde{\varphi} t)$, the Riccati solution $\Phi_e = \tilde{\varphi} \tan(\tilde{\varphi} t)$ leads to the Darboux pair of Riccati equations

$$-\frac{d\Phi_e}{dt} + \Phi_e^2 = -\omega_0^2, \quad \frac{d\Phi_e}{dt} + \Phi_e^2 = -\omega_0^2[1 - 2\sec^2(\omega_0 t)]. \quad (3.18)$$

The parametric Darboux partner equation reads

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega_{\gamma,e}^2\right) \mathcal{G}_e = 0, \quad \omega_{\gamma,e}^2 = -\omega_0^2 \left(1 - \frac{8 \sin(2\omega_0 t)}{2\omega_0(2\gamma + t) + \sin(2\omega_0 t)} - \frac{32 \cos^4(\omega_0 t)}{(2\omega_0(2\gamma + t) + \sin(2\omega_0 t))^2}\right) \quad (3.19)$$

with the two linearly independent solutions given by

$$\mathcal{G}_{e,1}(\omega_0 t) = \frac{4\omega_0}{2\omega_0(2\gamma + t) + \sin(2\omega_0 t)} \cos(\omega_0 t), \quad (3.20)$$

$$\mathcal{G}_{e,2}(\omega_0 t) = \frac{[4\omega_0^2(2\gamma + t)^2 \tan(\omega_0 t) + 2\omega_0 t - \sin(2\omega_0 t)]}{4\omega_0^2 [2\omega_0(2\gamma + t) + \sin(2\omega_0 t)]} \cos(\omega_0 t). \quad (3.21)$$

Plots of the solutions (3.16), (3.17) and (3.20), (3.21) are given in Figure 1.

IV. THE ASSOCIATED ERMAKOV-PINNEY EQUATION

In this section, we consider (1.1) as a parametric oscillator equation in the particular cases of constant coefficients, which has been studied in more detail in [12]. It is a well-known result that one can use two given linear independent solutions, u_1 , and u_2 , of the parametric oscillator equation,

$$u'' + \omega^2(t)u = 0, \quad (4.22)$$

to build a particular solution of the corresponding nonlinear Ermakov-Pinney equation

$$v'' + \omega^2(t)v + kv^{-3} = 0, \quad (4.23)$$

where $k \neq 0$ is an arbitrary real constant, by means of Pinney's formula [11]

$$v(t) = \sqrt{u_1^2 - \frac{ku_2^2}{W^2}}. \quad (4.24)$$

where W is the Wronskian of the two linearly independent solutions u_1 and u_2 .

For the case $\omega^2(t) = \omega_0^2$, a constant, the Ermakov-Pinney equation has the autonomous form [12]

$$v'' + \omega_0^2 v + kv^{-3} = 0. \quad (4.25)$$

From (4.24), by taking $u_1 = \sin(\omega_0 t)$, $u_2 = \cos(\omega_0 t)$, and $W = -\omega_0$, the particular solution of (4.25) is

$$v_o(t) = \sqrt{\sin^2(\omega_0 t) - \frac{k \cos^2(\omega_0 t)}{\omega_0^2}} = \sqrt{(1 + \kappa) \sin^2(\omega_0 t) - \kappa}, \quad (4.26)$$

where $\kappa = k/W^2$ and $\sin^2(\omega_0 t) + \cos^2(\omega_0 t) = 1$ has been used.

On the other hand, if one takes $u_1 = \cos(\omega_0 t)$, $u_2 = \sin(\omega_0 t)$, and $W = \omega_0$, the particular solution of (4.25) is

$$v_e(t) = \sqrt{\cos^2(\omega_0 t) - \frac{k \sin^2(\omega_0 t)}{\omega_0^2}} = \sqrt{(1 + \kappa) \cos^2(\omega_0 t) - \kappa}. \quad (4.27)$$

Both (4.26) and (4.27) that we call the odd and even case, respectively, can be used to calculate the Ermakov-Lewis invariant defined as

$$\mathcal{I}_{v_o} = \frac{1}{2} \left[-k \left(\frac{u}{v_o} \right)^2 + (u'v_o - uv_o')^2 \right], \quad \mathcal{I}_{v_e} = \frac{1}{2} \left[-k \left(\frac{u}{v_e} \right)^2 + (u'v_e - uv_e')^2 \right]. \quad (4.28)$$

Using for u the linear superposition $u = Mu_1 + Nu_2$ in each of the latter expressions, the Ermakov-Lewis invariants become [13]

$$\mathcal{I}_{v_o} = \mathcal{I}_{v_e} = \frac{1}{2} (\omega_0^2 N^2 - kM^2) = \text{const}. \quad (4.29)$$

For the parametric Darboux-deformed counterparts, the Ermakov-Pinney equations are

$$\mathcal{V}_o'' + \omega_{\gamma,o}^2 \mathcal{V}_o + k\mathcal{V}_o^{-3} = 0, \quad \mathcal{V}_e'' + \omega_{\gamma,e}^2 \mathcal{V}_e + k\mathcal{V}_e^{-3} = 0. \quad (4.30)$$

In the odd case, we take $u_1 = \mathcal{G}_{o,1}(\omega_0 t)$, and $u_2 = \mathcal{G}_{o,2}(\omega_0 t)$ from (3.16) and (3.17), respectively. Using (4.24), we have

$$\mathcal{V}_o = 2\omega_0 \frac{\sqrt{[1 + \tilde{\kappa}_o(\omega_0 t)] \sin^2(\omega_0 t) - \tilde{\kappa}_o(\omega_0 t)}}{\sin(\omega_0 t) \cos(\omega_0 t) - \omega_0(2\gamma + t)}, \quad (4.31)$$

where

$$\tilde{\kappa}_o(\omega_0 t) = \frac{kV_o(t)}{\omega_0^2}, \quad V_o(\omega_0 t) = [\sin^2(\omega_0 t) - 2\omega_0^2(2\gamma + t)^2 + \omega_0 t \tan(\omega_0 t)]^2.$$

Let us notice that \mathcal{V}_o is not singular for $t \geq 0$ if $\gamma > 0$.

In the even case, we take $u_1 = \mathcal{G}_{e,1}(\omega_0 t)$, and $u_2 = \mathcal{G}_{e,2}(\omega_0 t)$ from (3.20) and (3.21), respectively. Using again Pinney's formula, we have

$$\mathcal{V}_e = 2\omega_0 \frac{\sqrt{[1 + \tilde{\kappa}_e(\omega_0 t)] \cos^2(\omega_0 t) - \tilde{\kappa}_e(\omega_0 t)}}{\sin(\omega_0 t) \cos(\omega_0 t) + \omega_0(2\gamma + t)}, \quad (4.32)$$

where

$$\tilde{\kappa}_e(\omega_0 t) = \frac{kV_e(t)}{\omega_0^2}, \quad V_e(t) = [\cos^2(\omega_0 t) - 2\omega_0^2(2\gamma + t)^2 - \omega_0 t \cot(\omega_0 t)]^2.$$

Likewise the odd case, \mathcal{V}_e is not singular for $t \geq 0$ if $\gamma > 0$.

Plots of the Ermakov-Pinney solution for two values of γ are displayed in Fig. 3.

The Ermakov-Lewis invariant is

$$\mathcal{I}_{\mathcal{V}_o} = \frac{1}{2} \left[-k \left(\frac{u}{\mathcal{V}_o} \right)^2 + (u' \mathcal{V}_o - u \mathcal{V}_o')^2 \right], \quad \mathcal{I}_{\mathcal{V}_e} = \frac{1}{2} \left[-k \left(\frac{u}{\mathcal{V}_e} \right)^2 + (u' \mathcal{V}_e - u \mathcal{V}_e')^2 \right]. \quad (4.33)$$

Similarly to the undeformed case, letting $u = \tilde{M}\mathcal{G}_{o,1} + \tilde{N}\mathcal{G}_{o,2}$ with \mathcal{V}_o from (4.31), or $u = \tilde{M}\mathcal{G}_{e,1} + \tilde{N}\mathcal{G}_{e,2}$ with \mathcal{V}_e from (4.32), the invariants become

$$\mathcal{I}_{\mathcal{V}_o} = \frac{1}{2} (\tilde{N}^2 - k\tilde{M}^2) = \text{const}, \quad \mathcal{I}_{\mathcal{V}_e} = \frac{1}{2} (\tilde{N}^2 - k\tilde{M}^2) = \text{const}. \quad (4.34)$$

We have checked the constant values of the invariants given in (4.34) by the plots displayed in Fig. 4 of the expressions for these invariants as given in (4.33). Equation (4.34) shows that the Ermakov-Lewis invariants do not depend on the Darboux deformation parameter, which can be considered as an expected result.

V. CONCLUSIONS

We have introduced and discussed in detail the one-parameter Darboux-deformed family of equations of the trigonometric classical oscillator and the corresponding Ermakov-Pinney equations together with the Ermakov-Lewis invariants for these cases. The latter invariants depend on the superposition constants of the linearly independent solutions, but not on the deformation parameter.

Credit author statement

H.C. Rosu: Writing - original draft, Supervision, Formal analysis.

J. de la Cruz: Calculation, Investigation.

Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Data availability

No data was used for the research described in the paper.

Acknowledgments

The second author acknowledges the financial support of CONACyT through a doctoral fellowship.

-
- [1] B. Mielnik, Factorization method and new potentials with the oscillator spectrum, J. Math. Phys. 25 (1984) 3387-3389.
 - [2] D.J. Fernández C., New hydrogen-like potentials, Lett. Math. Phys. 8 (1984) 337-343.
 - [3] H.C. Rosu, Darboux-Witten techniques for the Demkov-Ostrovsky problem, Phys. Rev. A 54 (1996) 2571-2576.
 - [4] H.C. Rosu, J. Socorro, One-parameter family of closed radiation-filled FRW “quantum” universes, Phys. Lett. A 223 (1996) 28-30.
 - [5] H.C. Rosu, Supersymmetric Fokker-Planck strict isospectrality, Phys. Rev. E 56 (1997) 2269-2271.
 - [6] H.C. Rosu, Darboux class of cosmological fluids with time-dependent adiabatic indices, Mod. Phys. Lett. A 15 (2000) 979-989.
 - [7] H.C. Rosu, S.C. Mancas, P. Chen, One-parameter families of supersymmetric isospectral potentials from Riccati solutions in function composition form, Ann. Phys. 343 (2014) 87-102.
 - [8] H.C. Rosu, M.A. Reyes, Riccati parameter modes from Newtonian free damping motion by supersymmetry, Phys. Rev. E 57 (1998) 4850-4852.
 - [9] H.C. Rosu, S.C. Mancas, One-parameter Darboux-deformed Fibonacci numbers, Mod. Phys. Lett. A 38 (2023) 2350022.
 - [10] V. Faraoni, F. Atieh, Generalized Fibonacci numbers, cosmological analogies, and an invariant, Symmetry 13 (2021) 200.
 - [11] E. Pinney, The nonlinear differential equation $y'' + p(x)y + cy^{-3} = 0$, Proc. Am. Math. Soc. 1 (1950) 681-681.
 - [12] S.C. Mancas, H.C. Rosu, Integrable differential equations with Ermakov nonlinearities and Chiellini damping, Appl. Math. Comp. 259 (2015) 1-11.
 - [13] S.C. Mancas, H.C. Rosu, Ermakov-Lewis invariants and Reid systems, Phys. Lett. A 378 (2014) 2113-2117.

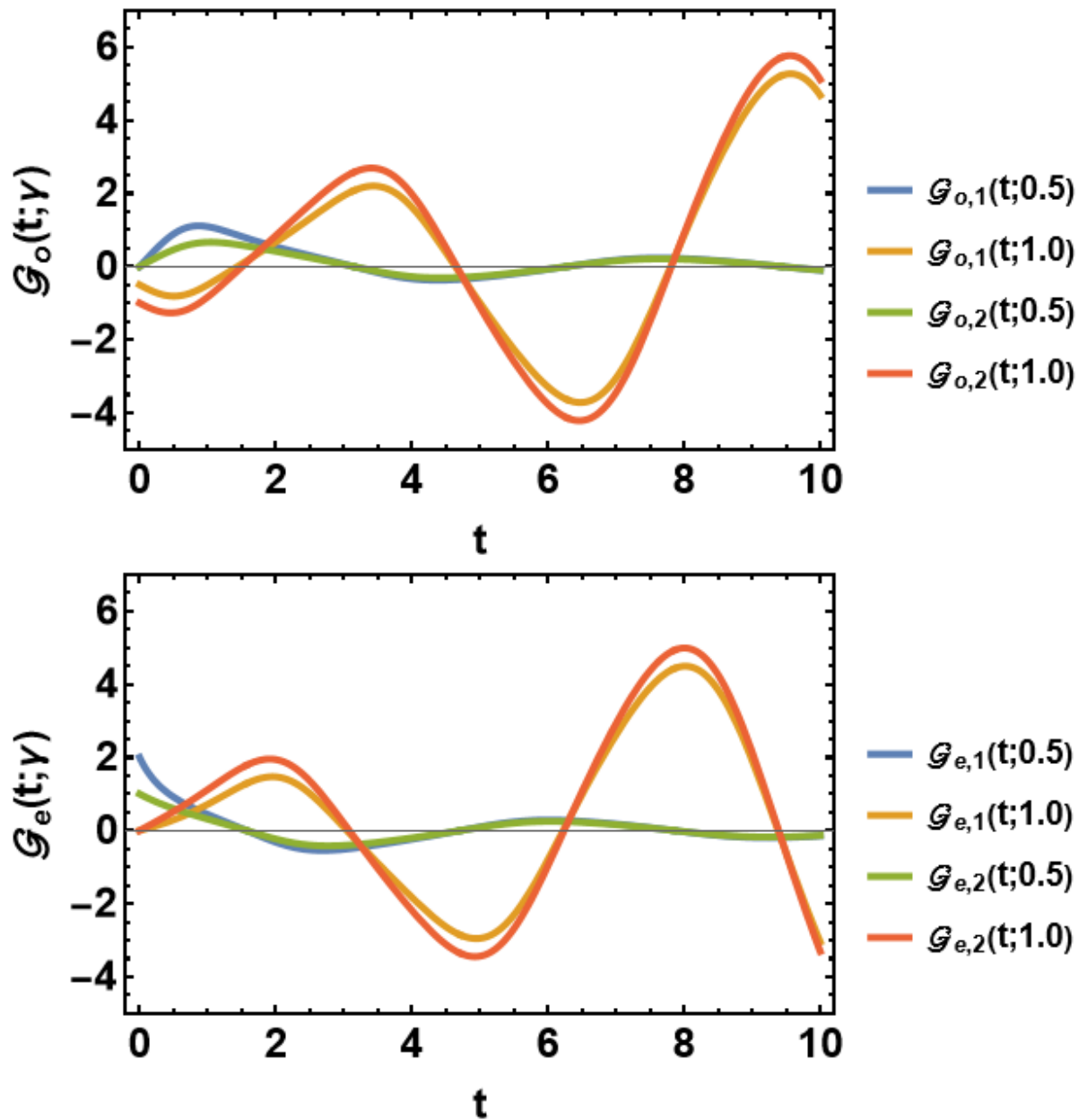


FIG. 1: The Darboux-deformed pairs of odd and even linearly independent solutions with $k = -1$ and $\omega_0 = 1$ for $\gamma = 0.5$ and $\gamma = 1$.

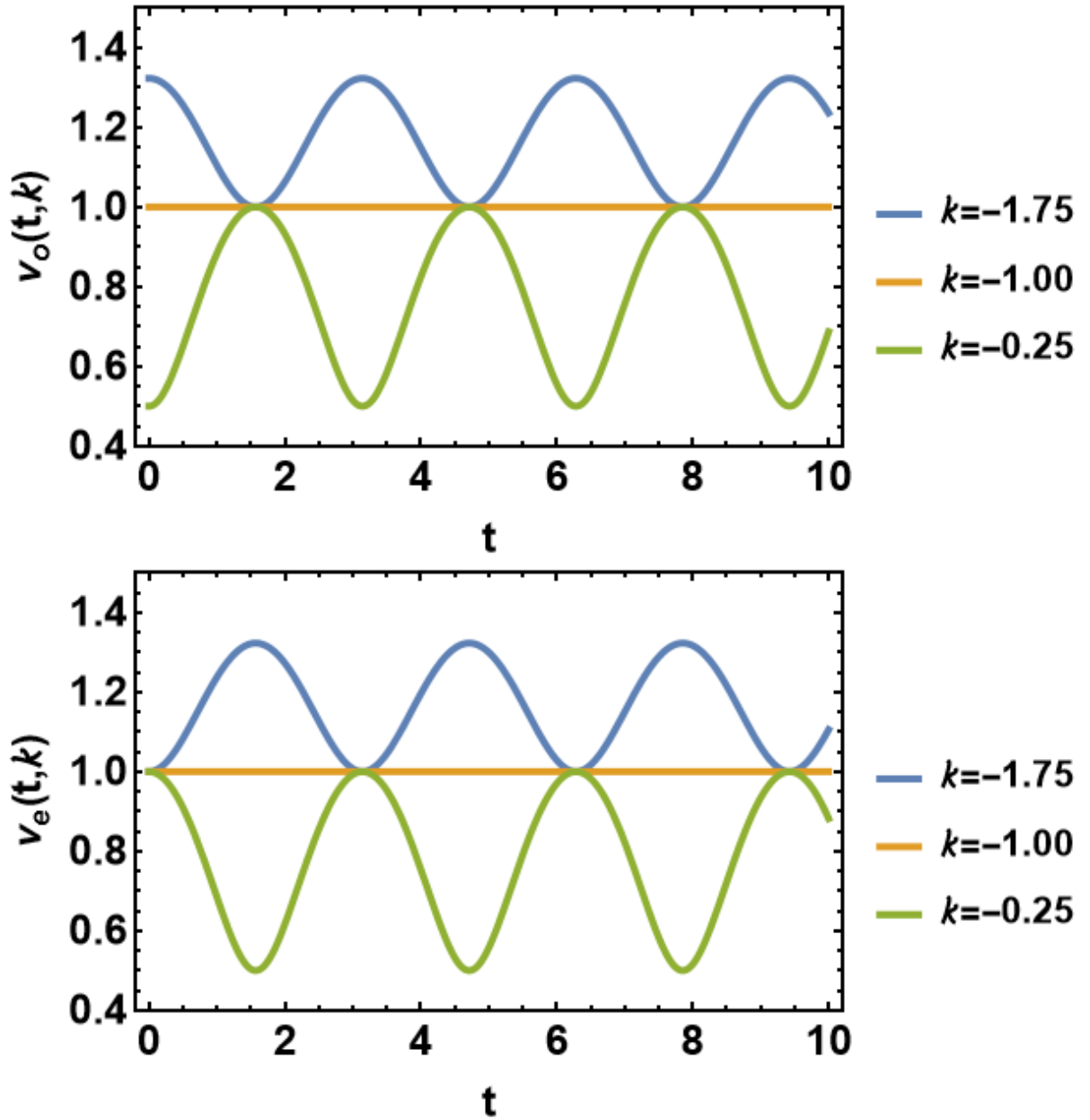


FIG. 2: The Ermakov-Pinney solutions (4.26) and (4.27) for $\kappa = -1.75, -1, -0.25$. These solutions are not just shifted one with respect to the other since their quotient is $[(\tan^2(\omega_0 t) - \kappa)/(1 - \kappa \tan^2(\omega_0 t))]^{1/2}$, which is unity only for $\kappa = -1$.

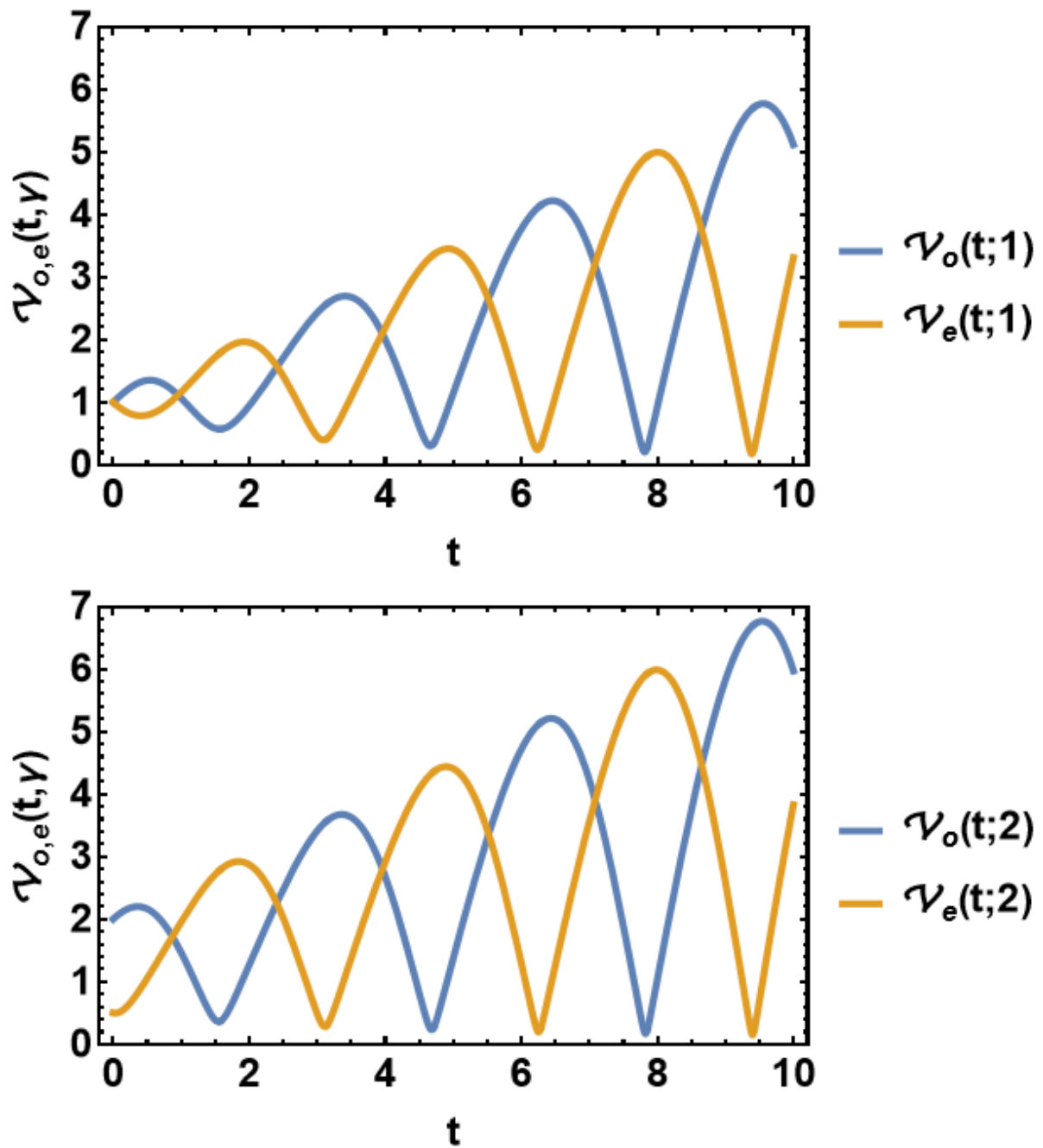


FIG. 3: The Darboux-deformed odd and even Ermakov-Pinney solutions with $k = -1$ for $\gamma = 1$ (up) and $\gamma = 2$ (down).

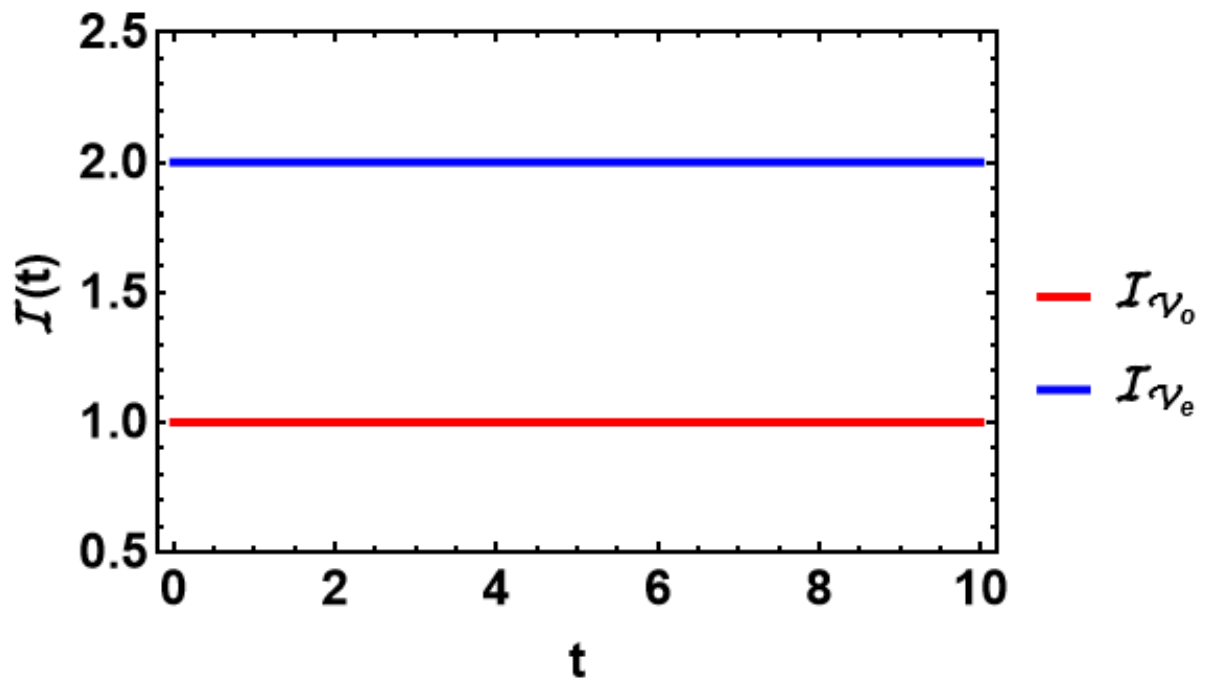


FIG. 4: Ermakov-Lewis invariants: the odd case (red) is for $\tilde{M} = \tilde{N} = 1$ and $k = -1$ and the even case (blue) is for $\tilde{M} = \sqrt{15}$, $\tilde{N} = \frac{1}{2}$ and $k = -\frac{1}{4}$, respectively.

Declaration of interest statement

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.