MODELOS CUASI-EXACTAMENTE SOLUBLES EN MECÁNICA CUANTICA

R.Montemayor* y L.D.Salem**
Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro
Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo,
C.C. 439, 8400 San Carlos de Bariloche.

En la Ref. 1 presentamos un formalismo para estudiar el problema de solubilidad parcial en mecánica cuántica basado en una ecuación de Ricatti modificada. Por la estructura de dicha ecuación, el método es particularmente apropiado para el análisis de potenciales tipo serie de Laurent finita. En este trabajo, por medio de mapeos adecuadamente definidos ampliamos el rango de aplicabilidad del método. En particular, como un ejemplo del uso de estos mapeos, identificamos nuevas familias de potenciales de Morse y Pöschl-Teller. Discutimos en detalle características de los mismos así como de las soluciones obtenidas.

1 - INTRODUCCION

En un trabajo anterior [1] presentamos un formalismo para estudiar la solubilidad parcial en mecánica cuántica. Este se basa en una ecuación de Ricatti modificada para la componente regular de la derivada logarítmica de la función de onda, $\bar{g}(x)$:

$$\bar{g}^2(x) + \bar{g}'(x) + 2\,F_m(x;n) = V(x) - E_m \qquad (1.1)$$

donde $V(x)$ es el potencial, E_m el autovalor correspondiente, y

$$F_m(x;n) = \sum_{j=1}^{n} \frac{\bar{g}(x) - \bar{g}(x_j)}{x - x_j} \qquad (1.2)$$

Los puntos $x = x_j$ son los ceros de la función de onda en R.

En Ref.[2] desarrollamos el método en relación con potenciales tipo serie finita de Laurent, donde aparecían tanto sistemas parcialmente solubles como cuasi-exactamente solubles. Dentro de esta perspectiva propusimos una generalización del método basada en una transformación de coordenadas adecuada, $x \Rightarrow u$, y analizamos en detalle la transformación $u = x^2$ cuando $V(x)=W(u)$ es una serie finita en u.

Pero esto no agota las posibilidades del método. Por el contrario, es muy apropiado para analizar clases de potenciales mucho más generales. Explotando diferentes mapeos, se revela como un instrumento poderoso para generar nuevas familias de potenciales parcialmente solubles, como mostramos en este trabajo. En particular podemos generar diferentes familias asociadas a los potenciales exactamente solubles ya conocidos, en forma similar a la presentada en Ref.[2], donde consideramos $u = x^2$ y obtuvimos una familia que contiene al oscilador armónico como miembro exactamente soluble y al oscilador séxtico simétrico como el potencial cuasi-exactamente soluble.

Aquí desarrollamos tal aplicación construyendo una familia que contiene una gran variedad de potenciales tipo pozo simple y doble pozo cuasi-exactamente solubles, tanto simétricos como asimétricos, y en particular un potencial exactamente soluble: el oscilador de Morse. Esta familia nos da una herramienta analítica muy flexible para modelar sistemas físicos (tal como sistemas moleculares), o para probar métodos aproximados.

El mismo esquema que aplicamos aquí puede fácilmente implementarse para construir otros conjuntos de potenciales. Como un ejemplo, consideramos sucintamente otra familia sugestiva que se solapa parcialmente con la anterior y que contiene como miembro exactamente soluble el potencial de Pöschl-Teller en lugar del oscilador Morse.

2 - EL FORMALISMO EXTENDIDO

A continuación presentamos una revisión breve del método. Dada una transformación $u(x)$ tenemos para la función de onda:

$$\psi_m(x) = \psi(u) \equiv C_\mu(u)\ \psi(u) \qquad (2.1)$$

* Investigador CONICET
** Becario CONICET

Los índices m, μ están relacionados con el número de ceros de la función de onda en el interior del dominio físico en el plano complejo x y u respectivamente. El factor $\bar{\psi}(u)$ no tiene ceros en dicho dominio, excepto en su frontera, mientras que $C_\mu(u)$ contiene la estructura nodal de la función de onda.

Es conveniente recalcar que estamos buscando autofunciones con forma cerrada. Como se discutió en Ref. [2], el ansatz más simple no-trivial para el factor $C_\mu(u)$ es un polinomio de grado $\nu \geq \mu$ en u:

$$C_\mu(u) \equiv C_\mu(u;\nu) = \sum_{j=0}^{\nu} c_{j\mu}\, u^j = \prod_{j=1}^{\nu} (u - u_j) \quad (2.2)$$

En igual forma $\bar{G}(u)$ debe tener una primitiva expresable en forma cerrada. Su dependencia funcional en u está determinada por la forma del potencial.

La función de onda $\psi(u)$ satisface la "ecuación de Schrödinger":

$$[\alpha(u) \frac{d^2}{du^2} + \beta(u) \frac{d}{du} + E - W(u)]\, \psi(u) = 0 \quad (2.3)$$

donde

$$\alpha(u) = \left(\frac{du}{dx}\right)^2 ; \ \beta(u) = \frac{d^2u}{dx^2} \quad (2.4)$$

Descomponiendo la derivada logarítmica de $\psi(u)$ en sus componentes regular y singular en el dominio físico:

$$\frac{d}{du} \ln \psi = G_\mu(u;\nu) = \bar{G}(u) + \sum_{j=1}^{\nu} \frac{1}{u - u_j} \quad (2.5)$$

obtenemos que $\bar{G}(u)$ satisface la siguiente ecuación de Ricatti modificada:

$$\alpha(u)(\bar{G}^2(u) + \bar{G}'(u)) + \beta(u)\, \bar{G}(u) + 2\, \Phi_\mu(u;\nu,\{u_j\}) =$$

$$= W(u) - E_\mu \quad (2.6)$$

donde las primas denotan derivadas con respecto a u, y $\Phi_\mu(u;\nu,\{u_j\})$ es

$$\Phi_\mu(u;\nu,\{u_j\}) = \sum_{j=1}^{\nu} [\, \frac{du}{dx} \quad G(u) - \Gamma_{\nu j}) +$$

$$+ \frac{1}{2} \ \frac{d^2u}{dx^2} \ ]\, (u - u_j)^{-1} \quad (2.7)$$

con $\Gamma_{\nu j} = \Sigma_{k=1,k\neq j}^{\nu} (u_k - u_j)^{-1}$; $j = 1,2,\ldots,\nu$; $\Gamma_{\infty} = \Gamma_{ij} = 0$

y $\qquad \Phi_0(u;0) = 0$

Una propiedad muy directa de los coeficientes $\Gamma_{\nu j}$, útil más adelante es:

$$\sum_{j=1}^{\nu} \Gamma_{\nu j} = 0 \quad (2.8)$$

Dado que $W(u)$, $\alpha(u)$ y $\beta(u)$ son regulares en el dominio físico, el lado izquierdo de la Ec. (2.7) debe ser también regular en este dominio. Por lo tanto tenemos:

$$[\bar{G}(u) + \frac{\beta}{2\alpha}]_{u=u_j} = \Gamma_{\nu j}\, , \quad j = 1,\ldots,\nu \quad (2.9)$$

Este conjunto de ecuaciones relaciona los ceros de la función de onda con $\bar{G}(u)$. La identificación de solubilidad parcial, cuasi-exacta o exacta se deriva del análisis de $\Phi_\mu(u;\, \nu,\{u_j\})$. En relación con esto es importante notar que el sistema de Ecs. (2.9) puede tener más de un conjunto solución $\{u_j\}$ para un ν dado, y así podemos tener más de una función de onda con ν ceros y μ ($\leq\nu$) nodos. Supongamos que existe más de un conjunto solución. En principio cada conjunto $\{u_j\}$ dará lugar a una $\Phi_\mu(u;\nu\{u_j\})$ diferente y así el lado derecho de la Ec.(2.6) cambiará en correspondencia. Para un valor dado de ν hay dos posibilidades:

a) Si los $\Phi_\mu(u;\nu\{u_j\})$ correspondientes a distintas soluciones $\{u_j\}$ difieren en su dependencia en u, las funciones de onda resultantes corresponden a potenciales diferentes (potenciales parcialmente solubles).
b) Otra posibilidad mucho más interesante es que los Φ_μ correspondientes a distintas soluciones $\{u_j\}$ difieran entre si por una constante aditiva. En este caso las diferentes funciones de onda corresponden a autoestados de un mismo hamiltoniano, con diferentes energías. Las soluciones difieren en el número μ de nodos. Tenemos entonces un potencial cuasi-exactamente soluble.

Existe una alternativa para determinar completamente la solución que puede ser más conveniente desde el punto de vista computacional, como veremos en las aplicaciones siguientes.Consiste en encontrar los coeficientes c_j de $C_\mu(u;\nu)$ reeplazando la factorización (2.1) en la ecuación de Schrödinger (2.3) Haciendo esto y factorizando $\bar{\psi}$ tenemos

$$\alpha C'' + [2\alpha\bar{G} + \beta]C' + [\alpha(\bar{G}^2 + \bar{G}') + \beta\, \bar{G} + E - W]\, C = 0 \quad (2.10)$$

Las ecuaciones (2.6), (2.9) y (2.10) nos dan las funciones de onda y sus autoenergías correspondientes.

3 - EL MAPEO EXPONENCIAL

Aquí analizaremos una familia muy interesante de potenciales cuasi-exactamente solubles que incluye como caso especial al oscilador de Morse. Está dada por la siguiente expresión:

$$V(x) = \sum_{k=-2L+2}^{2M+2} w_k e^{-kx} \quad L, M \geq 0 \qquad (3.1)$$

con las constantes de acoplamoiento w_k tales que el potencial sea confinante. Para desarrollar nuestro análisis es conveniente introducir la transformación

$$u(x) = e^{-x} \qquad (3.2)$$

tal que el potencial se pueda escribir como una función racional de $u(x)$, es decir

$$V(x) = W(u) = \sum_{k=-2L+2}^{2M+2} w_k u^k \qquad (3.3)$$

De acuerdo con la Ec.(2.3), en términos de la nueva variable la ecuación de Schrödinger para $\psi(u) = \psi(x)$ es:

$$[u^2 \frac{d^2}{du^2} + u \frac{d}{du} + E - W(u)]\, \psi(u) = 0 \qquad (3.4)$$

Consideremos para la m-ésima autofunción la factorización dada en la Ec. (2.1). En este caso la frontera del dominio físico está dada por Re$(u) = 0, \infty$.

De la Ec. (2.6) la ecuación de Ricatti modificada que debe satisfacer la derivada logarítmica $\bar{G}(u)$ es:

$$u^2 (\bar{G}^2 - \bar{G}') + u\,\bar{G} + 2\,\Phi_m(u;\nu,\{u_j\}) = W - E \quad (3.5)$$

El factor $C_m(u;\nu)$ satisface la Ec.(2.11), que ahora es:

$$u^2 C'' + 2\,u^2 [\bar{G} + \frac{1}{2u}]\, C' + [u^2 (\bar{G}^2 + \bar{G}') +$$

$$+ \bar{u}\, G + E - W]\, C = 0 \qquad (3.6)$$

Dado que $W(u)$ y $C_m(u;\nu)$ son racionales en u, para tener soluciones cerradas asumiremos que $\bar{G}(u)$ es también racional en u. Por lo tanto tenemos:

$$G(u) = \sum_{k=-L}^{M} a_k u^k \qquad (3.7)$$

o

$$\bar{\psi}(u) = (u)^{a-1} \exp \{ \sum_{\substack{k=-L \\ k=-1}}^{M} \frac{a_k}{k+1} u^{k+1} \} \qquad (3.8)$$

De acuerdo a las Ecs. (2.7) la función $\Phi_m(u;\nu,\{u_j\})$ es ahora:

$$\Phi(u) = \Phi_m(u;\nu,\{u_j\}) = u^2 \sum_{j=1}^{\nu} \frac{\bar{G}(u) + 1/2u - \Gamma_{\nu j}}{u - u_j} \quad (3.9)$$

Tomando en cuenta a las Ecs. (3.3),(3.5) y (3.7) tenemos que $\Phi_m(u;\nu,\{u_j\})$ tiene una forma racional

$$\Phi_m(u;\nu,\{u_j\}) = u^2 \sum_{k=-L-1}^{M-1} f_k^m\, u^k \qquad (3.10)$$

donde los coeficientes están dados por

$$f^m_k = \begin{cases} \sum_{s=k+1}^{M-1} a_s\, \sigma_{s-k-1} & 0 \leq k \leq M-1 \\ -\sum_{s=k+1}^{M-1} (a_s + \frac{1}{2}\delta_{-1,s})\, \sigma_{s-k-1} & -(L+1) \leq k \leq -1 \end{cases} \qquad (3.11)$$

y hemos introducido

$$\sigma_s = \sum_{j=1}^{\nu} (u_j)^s . \qquad (3.12)$$

Reemplazando las Ecs. (3.3),(3.7) y (3.10) en la Ec. (3.5) se obtienen las relaciones siguientes entre los coeficientes a_k de $\bar{G}(u)$ y w_k del potencial

$$W_k = \begin{cases} \sum_{j=-(L+1)}^{k+L-1} a_j\, a_{k-2-j} - \delta_{k1}\, L a_{-L-1} & -2L \leq k \leq -L \\ \sum_{j=-(L+1)}^{k+L-1} a_j\, a_{k-2-j} - k\, a_{k-1} + 2 f^{\nu}_{k-2} & -L+1 \leq k \leq M-L \\ \sum_{j=k-M-1}^{M-1} a_j\, a_{k-2-j} - k\, a_{k-1} + 2 f^{\nu}_{k-2} & M-L+1 \leq k \leq M \\ \sum_{j=k-M-1}^{M-1} a_j\, a_{k-2-j} - 2 f^{\nu}_{M-1}\, \delta_{k,(M+1)} & M+1 \leq k \leq 2M \end{cases} \qquad (3.13)$$

para $k \neq 0$. La relación correspondiente a $k = 0$ nos da la energía:

$$E_m = -\{ \sum_{j=-\kappa-1}^{\kappa-1} a_j\, a_{-j-2} + f^{\nu}_{-2} \} \quad \kappa = \min.(L,M) \quad (3.14)$$

Para terminar completamente los coeficientes a_k y la energía E_m podemos encontrar los ceros u_j de la función de onda resolviendo el sistema de ecuaciones (2.9). Sin embargo, como se señaló en la Sección 2, generalmente es más conveniente usar la Ec.(3.6) para determinar directamente los coeficientes de $C_m(u;\nu)$ y la energía correspondiente. Esto se mostrará en los ejemplos siguientes.

A.- El potencial de Morse.

El miembro mejor conocido de esta familia es el potencial de Morse (M=1, L=0). Está dado por

$$W(u)=\sum_{k=0}^{2} w_k\, u^k = w_0 + w_1\, u + w_2 u^2 \quad (3.15)$$

con $w_2 > 0$ y $w_1 < 0$ para garantizar la existencia de estados ligados. Con una elección apropiada del orígen siempre podemos hacer $w_2=s^2$, $w_1=-2s^2$ y $w_0=0$. Al evaluar la función $\Phi_m(u;\nu)$ resulta:

$$\Phi_m(u;\nu)=\nu\, a_0\, u \quad (3.18)$$

que sólo depende de ν, pero no de la posición de los nodos. Para los coeficientes de $W(u)$ obtenemos:

$$a_0=-S \quad a_{-1}=s-\nu-1/2 \quad (3.19)$$

y no se genera ninguna relación de vínculo entre los coeficientes de $W(u)$ (éste es el único miembro de la familia donde sucede esto), lo cual implica que tiene solución cerrada para todo valor de ν, es decir, recobramos el bien conocido resultado de que es un potencial exactamente soluble.

De la Ec.(3.6) obtenemos la ecuación de Kummer:

$$C''+2\left(\frac{a_{-1}+1/2}{u}+a_0\right)C'-\frac{2\nu a_0}{u}C=0 \quad (3.20)$$

cuyas soluciones regulares pueden expresarse en términos de polinomios de Laguerre $L_\nu^{2s-2\nu-1}(2su)$. En resumen, de las Ecs. (2.1) y (3.14) tenemos:

$$\psi_\nu(x)\sim L_\nu^{2s-2\nu-1}(2s\, e^{-x})\exp(-s\, e^{-x}-(s-\nu-1/2)\,x)$$

$$E_\nu=-(s-\nu-1/2)^2 \quad \nu=0,1,\ldots,[s-1/2]. \quad (3.21)$$

B.- Un ejemplo interesante: M=L=1

El otro ejemplo que desarrollaremos aquí corresponde a M=1, L=1:

$$W(u)=\sum_{k=-2}^{2} w_k u^k = w_{-2}\, u^{-2}+w_{-1}\, u^{-1}+w_0+w_1\, u+ w_2\, u^2 \quad (3.22)$$

con w_2 y w_{-2} positivos definidos.

De las Ecs.(3.7) y (3.22) tenemos

$$\bar{G}(u)=a_{-2}\, u^{-2}+a_{-1}\, u^{-1}+a_0 \quad (3.23)$$

con $a_{-2}>0$ para tener funciones de onda normalizables. En este caso resulta

$$\Phi_m(u;\nu,\{u_j\})=\nu\, a_0\, u - a_{-2}\,\sigma_{-1} \quad (3\text{-}24)$$

A partir de la EC. (3.13) obtenemos las expresiones para los coeficientes a_k:

$$a_{-2}=(w_{-2})^{1/2}$$

$$a_0=-(w_2)^{1/2} \quad (3.25)$$

$$a_{-1}=1/2\,[\,1+w_{-1}\,(w_{-2})^{-1/2}]$$

y la relación de vínculo para los w_k

$$2(\nu+1)=-[\,w_{-1}\,(w_{-2})^{-1/2}+w_{-1}\,(w_{-2})^{-1/2}] \quad (3.26)$$

Aquí estamos en presencia de un vínculo que depende de ν, pero no de la solución particular $\{u_j\}$. Por lo tanto existe más de una solución para las Ecs.(2.9): es un potencial cuasi-exactamenbte soluble.

Resta determinar $C_m(u;\nu)$. Siguiendo la discusión de Ref.[2](Apéndice B) de la Ec. (3.6) obtenemos una relación de recurrencia para los c_k^m. Si elegimos $c_\nu^m=1$ y definimos $c_{\nu+1}^m=c_{-1}^m=0$, podemos reducirla al siguiente problema de autovalores:

$$\mathrm{M}\, c^m=-\sigma_{-1}^m\, c^m \quad (3.28)$$

donde la matriz M tiene las componentes no-nulas:

$$\mathrm{M}_{l,l}=l\left(\frac{1}{2}+a_{-1}\right)/a_{-2}$$

$$\mathrm{M}_{l,l+1}=(l+1) \qquad l=0,1,\ldots,\nu$$

$$\mathrm{M}_{l+1,l}=(l-\nu-1)\,a_0/a_{-2} \quad (3.29)$$

Los coeficientes c_l^m son las componentes del autovector c^m y σ_{-1}^m es el correspondiente autovalor. Pero esta matriz tiene una estructura tridiagonal con ambas diagonales secundarias definidas positivas; esto es suficiente para garantizar que sus (ν+1) autovalores son reales y por lo tanto tenemos ν soluciones independientes$\{c_k^m\}$. En otras palabras, dado un potencial de la forma (3.22) que satisface la Ec. (3.26), le corresponden ν+1 estados inferiores expresables en forma cerrada. En particular, la expresión de la energía para estos estados es:

$$E_m=-\{1/4[1+w_{-1}(w_{-2})^{-1/2}]^2-$$

$$-2\,(w_{-2})^{1/2}\,[(w_2)^{1/2}+\sigma_{-1}^m]\}+w_0 \quad (3.33)$$

4 - MAPEO HIPERBOLICO

Eligiendo el origen de coordenadas tal que el potencial resulte asintóticamente simétrico:

$$w_{-2} = w_2 \qquad (4.1)$$

e introduciendo los parámetros η y Δ definidos como sigue:

$$\begin{aligned} w_2 &= w_{-2} = \eta^2 \\ w_1 &= -\eta\,(\nu+1+\Delta) \qquad (4.2) \\ w_{-1} &= -\eta\,(\nu+1-\Delta) \end{aligned}$$

el potencial toma la forma

$$W(u) = 2\eta\,[\,\eta \cosh 2x - (\nu+1)\cosh x + \Delta \sinh x] + w_0 \qquad (4.3)$$

donde Δ es un parámetro de asimetría del potencial. Para $\Delta = 0$ tenemos el potencial simétrico

$$W(u) = 2\eta\,[\,\eta \cosh 2x - 4 \cosh x] \qquad (4.4)$$

La expresión para el potencial simétrico con M=L=1 sugiere otro posible mapeo para este subconjunto de la familia anterior. En lugar de la transformación (3.2) podemos usar:

$$v = \cosh x \qquad (4.5)$$

En términos de esta nueva variable el potencial toma la forma:

$$V(x;\nu) = \tilde{W}(v;\nu) = 4\eta^2 v^2 - 2\eta\,(\nu+1)\,v + w_0 - 2\eta^2 \,(4.6)$$

que puede ser interpretado como una expansión en $(v-1)$ y $(v+1)$:

$$\tilde{W}(v;\nu) = 4\eta^2(v-1)(v+1) - \eta\,(\nu+1)[(v-1) + (v+1)] + w_0 + 2\eta^2 \qquad (4.7)$$

Tomando en consideración esta última perspectiva encontramos otra familia de potenciales cuasi-exactamente solubles, que se solapa con la anterior en los potenciales de la forma (3.39), pero que contiene como miembro exactamente soluble al potencial de Pöschl-Teller. El ansatz para la parte regular de la derivada logarítmica dentro de este nuevo contexto es:

$$\bar{G}(v) = 1/2\,[\,\frac{a}{v+1} + \frac{b}{v-1}] - 2\eta \qquad (4.8)$$

A partir de esta expresión puede deducirse la estructura del potencial, que resulta ser:

$$W(v) = \frac{a(a-1)}{4}\,\frac{v-1}{v+1} + \frac{b(b-1)}{4}\,\frac{v+1}{v-1} + 4\eta^2(v^2-1) - 2\eta\,v\,(a+b+1+2n) + 2\eta\,(a-b) + (a+b+2ab)/4 - 2\Lambda + E_\mu \qquad (4.9)$$

con

$$2\Lambda = \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{a}{v_j+1} - \frac{b}{v_j-1} + \frac{1}{v_j^2-1}\right) \qquad (4.10)$$

En términos de la variable original x el potencial toma la forma:

$$V(x) = \frac{a(a-1)}{4}\mathrm{th}^2\!\left(\frac{x}{2}\right) + \frac{b(b-1)}{4}\mathrm{cth}^2\!\left(\frac{x}{2}\right) + 2\eta^2\cosh 2x - 2\eta\,(a+b+1+2n)\cosh x + w_0 \qquad (4.11)$$

y la expresión para las autoenergías es:

$$E_m = w_0 - 2\Lambda - (a+b+2ab)/4 + 2\eta\,(\eta-a+b) \qquad (4.12)$$

Es fácil ver que para a=0, 1 y b=0,1 se reduce al potencial simétrico ya presentado. Comparando la Ec.(4.9) con la Ec.(4.6) podemos relacionar el número n de ceros en el dominio v con el número de ceros ν en el dominio x:

$$\nu = 2n+a+b \qquad (4.13)$$

Por lo tanto la Ec.(4.9) con a=b=0 o a=b=1 se transforma en la Ec.(4.6) con ν par, y con a=0, b=1 o a=1, b=0 corresponde a dicha ecuación con ν impar. Por otro lado, para η=0 da lugar al potencial de Pöschl - Teller.

Un análisis detallado, siguiendo los lineamientos esbozados en la sección anterior, se desarrolla en Ref[3].

REFERENCIAS

1.- L.D.Salem y R.Montemayor, Anales AFA **1**, 24 (1990).
2.- L. D. Salem y R. Montemayor, *Phys. Rev.* **A 43**, 1169 (1991), y referencias allí contenidas.
3.- R.Montemayor y L.D.Salem, *Modified Ricatti approach to partially solvable quantum Hamiltonians. II: Morse related potentials*, Informe Técnico CNEA-CAB 91/, enviado a *Phys. Rev. A*.