# MODELOS DE KRONING-PENNEY CUASI-EXACTAMENTE SOLUBLES

**L.D.Salem* y R.Montemayor****

*Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica e Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, 8400 San Carlos de Bariloche.*

Se investiga el problema de la solubilidad de la ecuación de Schrödinger para potenciales periódicos que podrían ser de interés en física del estado sólido. Los potenciales considerados se obtienen como extensión analítica de las familias asociadas a los potenciales de Morse y Pöschl-Teller hiperbólico consideradas en un trabajo previo. La determinación de los bordes de banda en los potenciales se reduce a un problema puramente algebraico.

La ecuación de Riccati modificada ha probado ser de utilidad para construir modelos solubles en mecánica cuántica [1-4]. Siguiendo dicho enfoque e introduciendo mapeos u(x), en trabajos anteriores[2,4] hemos analizado la familia de potenciales asociadas a los potenciales de Morse (con $u(x)=e^{-x}$) y Pöschl-Teller (con u= cosh(x)).
En este trabajo estudiamos un potencial V(x) periódico que depende de cuatro parámetros $\{\kappa, \lambda, \eta, N\}$:

$$V(x) = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\left\{\left[\frac{\kappa(\kappa-1)}{\sin^2(\alpha x)} + \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2(\alpha x)}\right] - 2\eta^2\cos(4\alpha x) + 2\eta(2N+\kappa+\lambda+1)\cos(2\alpha x)\right\}, \tag{1}$$

miembro *quasi-exactamente soluble* de la familia asociada al potencial *exactamente soluble* de Pöschl-Teller, transformación análitica x→ix de por medio[3,6]. De ahora en más y sin pérdida de generalidad adoptamos $2m = \hbar = 1$.

El dominio físico depende del signo específico de $\kappa(\kappa-1)$ y $\lambda(\lambda-1)$. Sin embargo, de la expresión del potencial se ve que el intercambio de los parámetros $\kappa \rightleftarrows \lambda$ es equivalente a una traslación $x \rightleftarrows x+\pi/\alpha$. Por lo tanto, de los nueve casos posibles sólo cinco (sólo seis) son relevantes cuando $\eta = 0$ ($\eta \neq 0$).

Si $\kappa(\kappa-1) > 0$ o $\lambda(\lambda-1) > 0$ el potencial tiene barreras impenetrables y sólo admite estados ligados y las funciones de onda se anulan donde $V(x)\to+\infty$. Si, en cambio, $\kappa(\kappa-1)\leq 0$ y $\lambda(\lambda-1)\leq 0$, la ecuación de Schrödinger admite soluciones de Bloch de la forma $\psi(x)=e^{ikx}\,\phi(x)$ con $\phi(x)=\phi(x+a)$ donde a es el parámetro de red igual a $2\alpha^{-1}$ o $\alpha^{-1}$ según el producto $\kappa\lambda(\kappa-1)(\lambda-1)$ sea igual o distinto de cero respectivamente.

En el esquema de Riccati modificado [1-4] escribimos las funciones de onda.

$$\psi(x) = \left|\frac{du}{dx}\right|^{-1/2} \cdot C(u;N)\exp\left(\int^u du\tilde{G}(u)\right). \tag{2}$$

donde u = u(x) es un mapeo adecuado tal que (a) el factor polinomial $C(u;N) \equiv \Pi^N_{j=1}(u-u_j)= \Sigma^N_{k=0}\, c_k\, u^k$ tiene en cuenta todos los ceros de la función de onda y (b) la componente regular de la derivada logarítmica $\tilde{G}$ es una función racional en u con primitiva explícita, de tal forma que la función de onda tiene forma cerrada en u.

Insertando la expresión (2) en la ecuación de Schrödinger y definiendo $\gamma = (d/du)\ln|du/dx|^{1/2}$, obtenemos la ecuación de Riccati modificada

$$V(x) - E = \left(\frac{du}{dx}\right)^2 \cdot \left[\tilde{G}^2 + \frac{d\tilde{G}}{du} + 2\sum_{j=1}^{N}\frac{\tilde{G}(u)-\tilde{G}(u_j)}{u-u_j} - \left(\gamma^2+\frac{d\gamma}{du}\right)\right] \tag{3}$$

que permite construir el potencial a partir de *N*, la función $\tilde{G}(u)$ y el mapeo u(x) apropiados. En particular, el potencial (1) resulta de la elección

* Becario CONICET

** Investigador CONICET

$$\tilde{G}(u) = \frac{1}{2}\left(\frac{(1/2)+\lambda}{u+1} + \frac{(1/2)+\kappa}{u-1}\right) - \eta \quad (4)$$

$$u = \cos(2\alpha x) \ .$$

Las autofunciones y autoenergías asociadas están dadas por:

$$\psi(x;N) \propto (u-1)^{\kappa/2}(u+1)^{\lambda/2}e^{-\eta u}\ C(u;N)$$

$$E = \alpha^2(2N+\kappa+\lambda)^2 - \quad (5)$$

$$-\frac{1}{2}\alpha^2\eta^2 + \frac{1}{4}\alpha^2\eta(\lambda - \kappa + 2c_{N-1}) \ ,$$

y corresponden a ondas estacionarias. Siguiendo el análisis desarrollado en la Ref.( [7], Ch.5 ¶.35, p.118) de caída en un pozo del tipo $V(x)\sim -x^{-2}$, debemos restringirnos a $\kappa = 0$ o $\kappa > 1/2$ y $\lambda = 0$ o $\lambda > 1/2$ .

Para especificar completamente los autoestados resta por evaluar C(u; N). Reemplazando las expresiones para el potencial (1) y la función de onda (5) en la ecuación de Schrödinger se obtiene

$$(u^2-1)\frac{d^2C}{du^2} + \left[2\eta u^2 + (\kappa+\lambda+1)u + (\kappa-\lambda-2\eta)\right]\frac{dC}{du} -$$

$$\left[E + 2N\ \eta u - \frac{1}{4}(\kappa+\lambda)^2\ \frac{1}{2}\eta^2 + \eta(\kappa-\lambda)\right] C = 0 \ . \quad (6)$$

**A. El caso $\eta = 0$.**

En este caso la ecuación diferencial (6) para C(u) es la hipergeométrica. Su única solución regular (compatible con el el *ansatz* polinomial) da lugar a

$$\psi(x;N) \propto \sin^{\kappa}(\alpha x)\ \cos^{\lambda}(\alpha x)\ 2\ F_1\ . \quad (7)$$

$$.\left(-N,\ N+\kappa+\lambda;\ \kappa+\frac{1}{2};\ \sin^2(\alpha x)\right)$$

$$E = \alpha^2\ (2N + \lambda + \kappa)^2 \ . \quad (8)$$

No hay ninguna restricción sobre $N$, que puede tomar valores $N = 0,1,\ldots,\infty$.

En el caso confinante obtenemos todos los estados en forma cerrada y en particular cuando $\kappa(\kappa-1) > 0$ y $\lambda(\lambda-1) > 0$ se recuperan los resultados conocidos para el potencial de Pöschl-Teller generalizado.

En el caso no confinante, los estados obtenidos corresponden a bordes de banda. El resto de las autofunciones se pueden escribir en términos de hipergeométricas no regulares (no corresponden al *ansatz* polinomial para C(u)). Es posible obtener también expresiones cerradas para la relación de dispersión E(k) y por lo tanto para la velocidad de grupo y la masa efectiva de la partícula. En particular, si $\lambda(\lambda-1) = 0$ y $\kappa(\kappa-1) < 0$ recuperamos el potencial de Scarf [8].

**B. El caso $\eta \neq 0$.**

La ecuación diferencial (6) puede reescribirse como un problema de autovalores para los coeficientes del polinomio C $(u;N)$[3,6],.

$$\sum_{k=0}^{N} H_{l,k}c_k = E_{c_l} \ , \quad \ell = 0,1,\ldots,N \ , \quad (9)$$

donde los únicos elementos no nulos de $H_{l,k}$ son

$$H_{l,l-1} = -16\alpha^2\eta(\ell - 1 + N),$$

$$H_{l,l} = -8\alpha^2\eta(\eta+\kappa-\lambda) + \alpha^2\ (2\ell+\kappa+\lambda)^2 \ , \quad (10)$$

$$H_{l,l+1} = 4\alpha^2(\ell+1)(\kappa - \lambda + 4\eta) \ ,$$

$$H_{l,l+2} = -4\alpha^2(\ell+2)(\ell+1) \ .$$

Expresiones explícitas para las funciones de onda y energías pueden obtenerse hasta $N$=4, y para $N$ mayores es necesario diagonalizar numéricamente el sistema (9).

Si $\kappa(\kappa-1) > 0$ y $\lambda(\lambda-1) \neq 0$ el potencial es confinante y las funciones de onda resultantes tienen $n$ nodos ($0 \le n \le N$) y corresponden al estado base y a los $N$ primeros estados excitados. En cambio, si $\kappa = 0$ ($\kappa$=1) y $\lambda(\lambda-1) > 0$, obtenemos los primeros $N$+1 estdos pares (impares). Finalmente, cuando el potencial es periódico no confinante dichas $N$+1 autofunciones corresponden a bordes de banda.

Cabe destacar que mientras las funciones de onda (5) están definidas por el conjunto de valores de $N$, $\kappa$ y $\lambda$, el potencial (1) depende de $\kappa(\kappa-1)$, $\lambda(\lambda-1)$ y además de $(2N + \kappa + \lambda)$ cuando $\eta \neq 0$. Por lo tanto, conjuntos distintos de parámetros {$\kappa'$, $\lambda'$ y N'} que conducen al mismo potencial pueden dar lugar a más de una ecuación diferencial (6) asociada al mismo sistema, y así con una simple reparametrización de las funciones de onda se pueden general diferentes autofunciones del mismo hamiltoniano. Esto es particularmente relevante cuando $\kappa(\kappa-1) = \lambda(\lambda-1)=0$, en cuyo caso recuperamos el potencial quasi-exactamente soluble discutido en las Refs. [3,4,6] con sus $2N+1$ o $2N+2$ primeros estados solubles.

## 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).

[3] R.Montemayor y L.D.Salem, Anales AFA, **2**,18 (1990).

[4] R.Montemayor y L.D.Salem, por publicarse en Phys. Rev.A.

[5] L.Infeld y T.D.Hull, Rev. Mod. Phys.**23**, 21 (1951) y referencias allí incluídas.

[6] L.D.Salem and R. Montemayor, *Modified Riccati approach to partially solvable quantum Hamiltonians.III Pöschl-Teller potentials related families*, en redacción.

[7] L.D.Landau, E.M.Lifshitz, *Quantum Mechanics, Non relativistic Theory* (Pergamon Press, Oxford, 1976);

[8] F.L.Scarf, Phys.Rev.**112**, 1137(1958). De hecho el autor estudió el caso $\kappa(\kappa-1) < 0$ y $\lambda(\lambda-1) = 0$, que es equivalente a una traslación $y \rightarrow y + \pi$ en la situación considerada aquí.



CEILAP
CITEFA - CONICET
ZUFRIATEGUI Y VARELA
1603 VILLA MARTELLI
REPUBLICA ARGENTINA