

SOLUBILIDAD PARCIAL EN MECANICA CUANTICA

L. D. Salem y R. Montemayor

Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro
Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo
CC 439, 8400 San Carlos de Bariloche

Se analizan las condiciones de solubilidad parcial en mecánica cuántica por medio del método de factorización. Aislado las singularidades de la derivada logarítmica de la función de onda se desarrolla un procedimiento sistemático para construir soluciones exactas para la ecuación de Schrödinger. La existencia de soluciones exactas requiere la verificación de relaciones de consistencia entre las constantes de acoplamiento que definen el potencial.

Los potenciales exactamente solubles en mecánica cuántica son de indudable interés tanto por su significado intrínseco como por su utilidad práctica para ponderar la calidad de métodos numéricos, tratamientos perturbativos o aproximaciones semiclásicas. El concepto usual de hamiltoniano soluble implica el conocimiento exacto del conjunto completo de autofunciones y el espectro correspondiente. Los potenciales que satisfacen tal criterio son relativamente pocos, y están contenidos en su mayoría en la clasificación de Infeld y Hull^{1,2}, además de los relacionados con estos por el método de Abraham y Moses³. También la supersimetría⁴ ha sido utilizada para estudiar el problema de solubilidad en mecánica cuántica, como una consecuencia del concepto de invariancia de forma supersimétrica⁵. Sin embargo, recientemente se ha demostrado⁶ que este enfoque es completamente equivalente al método de factorización^{1,2}.

En los últimos años ha habido un interés creciente en una categoría más amplia de potenciales solubles: aquéllos que tienen sólo un subconjunto exactamente soluble de autofunciones. Por razones de espacio, para los antecedentes históricos referidos al lector a las Refs. 7-20 en nuestra Ref. 7.

En el presente trabajo presentamos un esquema simple y sistemático para tratar el problema de solubilidad parcial, utilizando el método de factorización. Las condiciones bajo las cuales la solución puede ser expresada en forma cerrada, emergen naturalmente para una familia amplia de potenciales. El esquema se basa en el análisis de la derivada logarítmica de la función de onda $\psi(x)$, y en el uso explícito del carácter simple de los cercos de la última. A continuación presentamos brevemente el método.

En la ecuación de Schrödinger unidimensional, eligiendo el sistema de unidades tal que $2\mu = \hbar = 1$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + (V(x) - E) \right) \psi(x) = 0. \quad (1)$$

El operador diferencial de segundo orden siempre puede factorizarse en el producto de dos operadores de primer orden^{1,2}

$$\left(\frac{d}{dx} + g(x) \right) \left(\frac{d}{dx} - g(x) \right) \psi(x) = 0, \quad (2)$$

donde $g(x)$ es la derivada logarítmica de la función de onda, o equivalente

$$\psi(x) \propto \exp \int^x dy g(y) \quad (3)$$

Reemplazando la Ec. (3) en la Ec. (1) se obtiene la siguiente ecuación de Riccati para $g(x)$:

$$g^2(x) + g'(x) = V(x) - E \quad (4)$$

Si nos concentramos en el espectro discreto (supondremos que $V(x)$ admite estados ligados), las funciones de onda normalizables $\psi_n(x)$ correspondientes al n -ésimo estado excitado tienen, de acuerdo a la teoría de Sturm-Liouville⁸, n ceros simples $\{x_j\}_{j=1,2,\dots,n}$ sobre el eje real en el dominio físico $x_- < x < x_+$. Por lo tanto $g(x)$ tiene n polos simples con residuo igual a 1 (ver Ref. 8) en $x = x_j$ para $j = 1, 2, \dots, n$. Sin pérdida de generalidad resulta útil escribir

$$g_n(x) = \bar{g}(x) + \sum_{j=1}^n \frac{1}{x - x_j} \quad (5)$$

donde tanto $g_n(x)$ como $\bar{g}(x)$ son reales en el dominio físico (x_-, x_+) ; además, $\bar{g}(x)$ es regular y su primitiva diverge en la frontera

$$\lim_{x \rightarrow x_j} \int^x dy \bar{g}(y) = -\infty \quad (6)$$

para garantizar la normalidad y continuidad de la función de onda.

Insertando la Ec. (5) en la Ec. (4) y descomponiendo las expresiones resultantes en fracciones simples, es inmediato obtener

$$\bar{g}^2(x) + \bar{g}'(x) + 2 \sum_{j=1}^n \frac{\bar{g}(x) - \Gamma_{nj}}{x - x_j} = V(x) - E \quad (7)$$

donde hemos definido

$$\Gamma_{nj} \equiv \sum_{k=1, k \neq j}^n (x_k - x_j)^{-1}$$

para $j = 1, 2, \dots, n$, junto con $\Gamma_{0,0} = \Gamma_{1,1} \equiv 0$.

Si el potencial $V(x)$ es regular en $x = x_j$, de la Ec. (7) resulta necesario que se verifique la igualdad

$$\bar{g}(x_j) = G_{nj}(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (8)$$

o sea que la posición de los ceros de la función de onda está definida por la componente regular $\bar{g}(x)$ de la derivada logarítmica.

El sistema de ecuaciones no lineales acopladas (8) puede tener más de una solución. Si tal es el caso, cada una de las soluciones tendrá sólo m de sus n elementos en (x, x_m) . Así, aún cuando originalmente considerábamos una autofunción con n nodos, las distintas soluciones al sistema (8) corresponden a funciones de onda del espacio de Hilbert con $m \leq n$ nodos. En otras palabras, cuando nos referimos a la Ec. (5) no estamos hablando necesariamente del n -ésimo estado excitado, sino de una familia de funciones de onda con n ceros en el plano complejo y m nodos en el dominio físico.

Para una clase muy amplia de potenciales, que incluye a los racionales

$$V(x) = \sum_{j=-2L}^{2M} v_j x^j \quad (9)$$

la ecuación diferencial (7) para $\bar{g}(x)$ resulta más sencilla de resolver que la correspondiente Ec. (4) para $g_n(x)$. Cabe acotar que si $L \geq 1$, el dominio físico es $(x, x_+) = (0, \infty)$.

De acuerdo con la Ecs. (3) y (5), una función de onda tendrá una expresión cerrada si y sólo si $\bar{g}(x)$ tiene primitiva expresable en forma cerrada. En el caso particular de los potenciales racionales y por ser $\bar{g}(x)$ regular proponemos

$$\bar{g}(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k x^k \quad (10)$$

Reemplazando en la Ec. (7) se ve inmediatamente que, primero, tal desarrollo es finito, o sea $a_k = 0$ para $k < -L$ y $k > M$, y los coeficientes $\{a_k\}_{-L \leq k \leq M}$ se obtienen unívoca y sistemáticamente a partir de las constantes de acoplamiento $\{v_k\}$ mediante simples relaciones de recurrencias⁷. En definitiva, $g(x)$ queda absolutamente especificada por las constantes de acoplamiento $\{v_k\}$ y eventualmente (cuando $M = 0$) n . Las funciones de onda resultan por lo tanto

$$\psi_n(x) \propto x^{a_1} \prod_{j=1}^n (x - x_j) \exp \sum_{k=-L, k \neq -1}^M \frac{a_k x^{k+1}}{(k+1)} \quad (11)$$

donde los ceros $\{x_j\}_{j=1,2,\dots,n}$ se determinan resolviendo las Ecs. (8). Como se dijo anteriormente es posible que haya más de un conjunto de soluciones y con ello una familia de funciones de onda $\psi_m^{(n)}(x)$ con $m \leq n$ nodos. La energía de los estados en cuestión resulta

$$E_m^{(n)} = v_0 - \left(a_0^2 + (2n+1)a_1 + \sum_{k=-\min L, M}^{\min L, M} a_k a_{-k} + \sum_{k=2}^M a_k \sum_{j=1}^n x_j^{k-1} \right) \quad (12)$$

Segundo, ciertas relaciones de consistencia, en número igual a $(L + M - 1)$, deben satisfacerse entre las constantes $\{v_k\}$:

$$v_k = 2f_k^m + (k+1)a_{k+1} + \sum_{-\min L, M-k}^{\min L+k, M} a_j a_{k-j} \quad (13)$$

$$= v_k(v_{-2L}, \dots, v_{-L-1}, v_M, \dots, v_{2M})$$

$$-L \leq k \leq M - 1 \quad \text{y} \quad k \neq 0$$

donde hemos definido

$$f_k^m = \sum_{m=k+1}^M a_m \sum_{j=1}^n x_j^{m-k-1}, \quad k \geq 0 \quad (14)$$

$$f_k^m = - \sum_{m=-L}^M a_m \sum_{j=1}^n x_j^{m-k-1}, \quad k < 0$$

junto con $f_k^0 = 0$. En cuanto a estas relaciones de vínculo, necesarias para garantizar la solubilidad, existen tres posibilidades:

- No existen tales vínculos, y por lo tanto el hamiltoniano es estrictamente soluble. Esto ocurre cuando $(M = 1, L = 0)$ ó $(m = 0, L = 1)$ y en el ca-

so simétrico para $(M = 1, L = 1)$.

- Los vínculos dependen exclusivamente de n . Las distintas soluciones a las Ecs. (8) corresponden a una familia de funciones de onda con $m \leq n$ nodos. Esta situación se presenta para el potencial séxtico simétrico en su versión 1D y 3D ($M = 3, L = 0, 1$).
- Los vínculos dependen de la posición de los ceros $\{x_j\}$ y, por lo tanto, distintas soluciones de las Ecs. (8) corresponden a funciones de onda de distintos potenciales. En este caso el subespacio exactamente soluble se reduce a un único autoestado.

Queremos remarcar que hasta el momento no hemos explotado eventuales simetrías. En particular si $V(x)$ es invariante ante reflexiones respecto al origen, o sea $V(x) = W(u = x^2)$ la función $g(x)$ es impar y todas sus singularidades están o bien sobre el eje imaginario (de a pares complejos conjugados), o bien sobre el eje real simétricamente ubicadas respecto de $x = 0$. Aprovechando la simetría del problema su resolución se ve simplificada⁷.

Ejemplos para distintos valores de L y M , explicitando las funciones de onda y energías correspondientes, han sido detalladamente analizados en la Ref. (7).

Cabe destacar una natural generalización al esquema aquí planteado, que permite ampliar sustancialmente la familia de potenciales parcialmente solubles. Para ello basta proponer en lugar del ansatz (5)

$$g_n(x; N) = \bar{g}(x) + \sum_{j=1}^N \frac{v_j}{x - z_j} \quad (15)$$

definida real sobre el eje real (Si $\text{Im } z_j \neq 0$ entonces z_j^* , también es un singularidad o cero de $g_n(x)$ y debe aparecer en uno de los términos de la Ec. (15).) con n polos simples en el dominio físico y $N - n$ singularidades fuera del dominio físico:

$$z_j = x_j \in (x_-, x_+) \text{ y } v_j = 1, \quad j = 1, 2, \dots, n \leq N \quad (16)$$

$$z_j \notin (x_-, x_+) \quad j = n + 1, n + 2, \dots, N.$$

Ello da lugar a una familia de funciones de onda de la forma

$$\psi_n(x) \propto x^{\alpha+1} \prod_{j=1}^N (x - z_j)^{\nu_j} \exp \sum_{k=-L, k \neq -1}^M \frac{a_k x^{k+1}}{(k+1)} \quad (17)$$

y candidatos posibles para admitir solubilidad son potenciales racionales mas generales que los conte-

nidos en la Ec. (9).

El método presentado permite un estudio sistemático del problema de la solubilidad parcial en mecánica cuántica. Se basa en la aislación de los polos de la derivada logarítmica de la función de onda. Hemos demostrado que la componente regular $\bar{g}(x)$ caracteriza en forma unívoca el subespacio soluble, determina la posición de los nodos de la función de onda y satisface la ecuación de Ricatti⁷ que es más simple que la correspondiente para $g_n(x)$. La analiticidad de la función $\bar{g}(x)$ es el elemento clave para determinar su forma funcional. Esto da una gran generalidad al esquema propuesto proveyendo un enfoque integrador al problema de solubilidad parcial.

Cabe señalar la posibilidad de extender el estudio de solubilidad a una familia más amplia de potenciales, mediante transformaciones de similitud o bien mediante el esquema supersimétrico³.

Otra característica de este método es que puede usarse en sentido inverso; esto es, para definir potenciales parcialmente solubles a partir de una función $g_n(x)$ que cumpla las condiciones necesarias para representar una función de onda *razonable*. permitiendo un número manejable de parámetros libres, el potencial definido por la Ec. (4) podría utilizarse para obtener soluciones aproximadas a problemas no exactamente solubles, mediante un tratamiento perturbativo⁹ o semiclásico¹⁰. Estos aspectos se encuentran actualmente bajo estudio.

REFERENCIAS

1. G. Darboux, C. R. Acad. Sci (Paris) **94**, 1456 (1889); E. Schrödinger, Proc. R. Irish Acad. A **46**, 9 (1940); *ibid* Proc. R. Irish Acad. A **46**, 183 (1940); *ibid* Proc. R. Irish Acad. A **47**, 53 (1941).
2. L. Infeld y T. D. Hull, Rev. Mod. Phys. **23**, 21 (1951) y referencias allí citadas.
3. P. B. Abraham y H. E. Moses, Phys. Rev. A **22**, 1333 (1980); M. B. Luban y D. L. Pursey, Phys. Rev. A **33**, 431 (1986).
4. E. Witten, Nucl. Phys. B **185**, 513 (1981); F. Cooper and B. Freedman, Ann. Phys (NY) **146**, 262 (1983); C. Sukumar, J. Phys. A **18**, 2917 (1985).
5. L. E. Gendenshtein, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz **38**, 299 (1983); *ibid* JETP Lett. **38**, 356 (1983); R. Dutt, A. Khare y U. P. Sukhatme, Phys. Lett. A **181**, 295 (1986); R. Montemayor, Phys. Rev. A **36**, 1562 (1987). F. Cooper, J. N. Ginocchio y A. Khare, Phys. Rev. D **36**, 2458 (1987). R. Dutt, A. Khare y U. P. Sukhatme, Am. J. Phys. **56**, 1963 (1988).
6. R. L. Montemayor y L. D. Salem, Phys. Rev. A **40**, 2170 (1989).

7. Para una exposición más detallada, ejemplos y referencias, ver L. D. Salem y R. L. Montemayor, "Factorization approach for partially solvable quantum Hamiltonians", Inf. Técnico CNEACAB 89/038, enviado a Phys. Rev. A (1989).
8. E. L. Ince, "Ordinary Differential Equations", ver caps. 10 y 11. (Longmans, Green, London, 1927). J. L. Dunham, Phys. Rev. 34, 438 (1929).
- R. A. Leacock y M. J. Padgett, Phys. Rev. Lett. 50, 3 (1983) y referencia 7 allí citada.
9. Y. Aharonov and C. K. Au, Phys. Rev. Lett 42, 1901 (1979); G. W. Rogers, J. Math. Phys. 26, 567 (1985).
10. R. H. Good, Phys. Rev. 90, 131 (1953); S. C. Miller and R. H. Good, Phys. Rev. 91, 174 (1953).