Una solución exacta de la ecuación de Schrödinger para un potencial no central

G. Gasaneo, F. D. Colavecchia* y C. R. Garibotti†

Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur
8000 Bahía Blanca - Buenos Aires - Argentina
email: ggasaneo@criba.edu.ar

En este trabajo se estudian las soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger de una partícula sometida a un potencial no central. Dicho potencial está dado por la suma de un potencial coulombiano puro y otro del tipo $m^2/\left[r(r \pm z)\right]$. Se estudiarán las soluciones del espectro continuo, su comportamiento asintótico y las secciones eficaces scattering correspondientes.

In this work we study the exact solutions of the Schrödinger equation for a particle in an non-central potential. This potential it is the sum of a two body coulomb potential and other given by $m^2/\left[r(r \pm z)\right]$. We study the solutions of the continuum spectra, its asymptotic behaviors and the corresponding cross sections.

Introducción

Es bien sabido que la solución exacta de la ecuación de Schrödinger para el problema de los tres cuerpos (PTC) que interactúan a través de potenciales coulombianos es aún desconocida. Sin embargo son muchas las soluciones aproximadas que se han propuesto, ver por ejemplo Garibotti y Miraglia (1980), Berakdar y Briggs (1994) , Beraldar (1996). Por otra parte hay un gran números de problemas de dos cuerpos para los cuales se conoce la solución exacta. Entre ellos se encuentra el problema de dos cuerpos coulombiano. Es usual escribir las soluciones aproximadas al PTC en término de las soluciones de problemas de dos cuerpos. Recientemente Gasaneo *at. al.*? ha presentado una solución aproximada para el PTC la cual puede ser expresada como la superposición de soluciones de un centro:

$$\Psi^{\Phi_2} = C\varphi_0^{tp} \sum a_m \varphi_m^t \varphi_m^p$$

φ_0^{tp} es la solución del problema coulombiano de los dos centros. φ_m^{te} y φ_m^{pe} son las soluciones de una ecuación de Schrödinger en la cual el potencial de interacción se escribe como la suma de un potencial coulombiano más un potencial no central. Las caracteristicas que Ψ^{Φ_2} presenta como función de dos centros son consecuencia directa de las caracteristicas que presentan las soluciones φ_m^{ij} de un potencial no central. La correlación que Ψ^{Φ_2} presenta en el espacio de configuraciones surge a partir de particular distribución de probabilidad presentada por las funciones φ_m^{te} y φ_m^{pe}.

En este trabajo se estudiarán en detalle las funciones φ_m^{te} soluciones de la ecuación de Schrödinger correspondientes al espectro continuo de energía. En la primer sección se estudiarán las distintas soluciones correspondientes al potencial no central. En la segunda sección se estudiarán los comportamientos asintóticos y en la tercera se analizarán las secciones eficases simple diferenciales asociadas con las amplitudes de transición obtenidas en la segunda sección. Finalmente se enumerarán algunas conclusiones.

La ecuación de Schrödinger

En esta sección estudiremos las soluciones de la ecuación de Schrödinger de una partícula sometida a potenciales del tipo:

$$V^{\pm} = -\frac{|Z|}{r} + \frac{m^2}{r^2\left(1 \pm \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{r}}\right)} \tag{1}$$

$$V^{\pm} = V^c + V^p$$

donde $V^c = |Z|/r$, $|Z|$ representa un producto de cargas, es el potencial coulombiano y m un entero positivo. V^p puede ser interpretado como una barrera de potencial parabólica ya que en su denominador aparece $r \pm \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r}$ que define una parabola, éste además diverge para $r = 0$ y a lo largo de las direcciones para las cuales $1 \pm \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{r}} = 0$. A partir de su definición $V^{\pm}$ representa un potencial no central que se extiende desde el origen de coordenadas y hasta el infinito en las direcciones $\pm\hat{\mathbf{k}}$ de acuerdo con la elección del signo en el potencial V^p.

La ecuación de Schrödinger que rige el movimiento de una partícula de masa μ sometida al potencial $V^{\pm}$ esta dada por:

*CAB-CONICET
†CAB-CONICET

$$H\psi = E\psi \quad (2)$$

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\nabla_r^2 + V^{\pm}\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

donde han sido utilizadas unidades atómicas para las cuales $\hbar = e = 1$.

Estudiaremos primeramente las soluciones del espectro continuo. Para ello introduciremos en (2) la siguiente función de prueba:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\varphi(\mathbf{r}) \quad (3)$$

obteniendo así para la distorsión φ la ecuación:

$$\left[\frac{1}{2\mu}\nabla_r^2 + \frac{i}{\mu}\mathbf{k}\cdot\nabla_r + \frac{1}{r}\left(|Z| - \frac{m^2}{r\left(1\pm\widehat{\mathbf{k}}\cdot\widehat{\mathbf{r}}\right)}\right)\right]\varphi(\mathbf{r}) = 0 \quad (4)$$

Para hacer un completo análisis de las soluciones de esta ecuación tomaremos el potencial V^+, pero debe ser destacado que ecuaciones similares pueden ser obtenidas para V^-.

La particularidad que caractariza las ecuaciones que usualmente se resuelven en los cursos elementales de mecánica cuántica es la separabilidad. Si la ecuación de Schrödinger, que describe la dinámica de un dado sistema, es separable entonces existe un conjunto de operadores que conmutan con el hamiltoniano y que están asociados con magnitudes medibles que se conservan en el tiempo. La separabilidad es la propiedad que caracteriza también a la ecuación (4). Escribiendo (4) en coordenadas parabólicas (L. D. Landau y E. M. Lifshitz (1965)) obtenemos:

$$\frac{1}{\mu r}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \frac{\mu(\xi+\eta)}{4\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + ik\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi} - \eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \mu\left(|Z| - \frac{m^2}{\xi}\right)\right]\varphi(\mathbf{r}) = 0 \quad (5)$$

que como puede verse se separa en tres ecuaciones, un para cada una de las variables. En este trabajo estudiaremos solamente aquellas soluciones para las cuales $\varphi(\mathbf{r})$ es independiente del ángulo ϕ. Introduciendo en (5) la función:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \chi_1(\xi)\chi_2(\eta) \quad (6)$$

y las constantes de separación β_1 y β_2 resulta:

$$\left[\xi\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + (1+ik\xi)\frac{\partial}{\partial\xi} + \beta_1 - \frac{m^2}{\xi}\right]\chi_1(\xi) = 0 \quad (7)$$

$$\left[\eta\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + (1-ik\eta)\frac{\partial}{\partial\eta} + \beta_2\right]\chi_2(\eta) = 0 \quad (8)$$

donde $\beta_1 + \beta_2 = \mu|Z|$. Las soluciones de estas dos ecuaciones pueden ser escritas en término de funciones de hipergeométricas confluentes del tipo de Kummer (Abramowitz and I. A. Stegun (1970)) como sigue:

$$\chi_1 = (-ik\xi)^m\,{}_1F_1\left[-i\frac{\beta_1}{k} + m, 1+2m, -ik\xi\right]$$

$$\chi_2 = {}_1F_1\left[i\frac{\beta_2}{k}, 1, ik\eta\right]$$

Así, la solución de (2) correspondiente al espectro continuo es:

$$\psi(\mathbf{r}) = Ne^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,{}_1F_1\left[i\frac{\beta_1}{k}, 1, ik\eta\right] \times (-ik\xi)^m\,{}_1F_1\left[-i\frac{\beta_2}{k} + m, 1+2m, -ik\xi\right] \quad (9)$$

donde N es una constante de normalización. Debemos notar que para el caso $m = 0$:

$$\psi = N^c e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,{}_1F_1\left[i\frac{\beta_1}{k}, 1, ik\eta\right]\,{}_1F_1\left[-i\frac{\beta_2}{k}, 1, -ik\xi\right] \quad (10)$$

obtenemos la solución general del problema coulombiano de los dos cuerpos para el caso en que se ha eligido la proyección del momento angular $l_z = 0$.

La solución cuyo comportamiento asintótico representa una onda plana más una onda esférica entrante se corresponde con la elección $\beta_1 = 0$:

$$\psi_k^1 = Ne^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left[-i(kr + \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right]^m \times {}_1F_1\left[-i\frac{Z\mu}{k} + m, 1+2m, -i(kr+\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right] \quad (11)$$

la cual para $m = 0$ se reduce a la correspondiente solución del problema coulombiano de los dos cuerpos:

$$\psi_k = N^c e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,{}_1F_1\left[-i\frac{Z\mu}{k}, 1, -i(kr+\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right] \quad (12)$$

Si se elije $\beta_2 = 0$ obtenemos:

$$\psi^2(\mathbf{r}) = Ce^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,{}_1F_1\left[i\frac{Z\mu}{k}, 1, ik\eta\right] \times (-ik\xi)^m\,{}_1F_1[m, 1+2m, -ik\xi] \quad (13)$$

Una de las soluciones de (2), asociada con V^+, para las cuales el potencial coulombiano está ausente está dada por:

$$\psi^3(\mathbf{r}) = N^P e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(-ik\xi)^m\,{}_1F_1[m, 1+2m, -ik\xi] \quad (14)$$

En las siguientes secciones estudiaremos los comportamientos asintóticos de estas funciones.

El comportamiento asintótico

Para estudiar los comportamientos asintóticos de las funciones dadas por (11) y (13) debemos utilizar la forma asintótica de las funciones ${}_1F_1[b, c, x]$, ver Abramowitz and I. A. Stegun (1970):

$${}_1F_1[b, c, x] = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-b)}(-x)^{-b}v[b, b-c+1, -x] + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)}x^{b-c}e^x v[1-b, c-b, x] \quad (15)$$

donde:

$$v[\alpha, \beta, x] = 1 + \frac{\alpha\beta}{1!x} + \cdots$$

Reemplazando (15) en (11) y despreciando ordenes de $1/r^2$ obtenemos:

$$\psi_k^1 \to N \left[(-1)^m \frac{\Gamma(1+2m)}{\Gamma\left(1+m+i\frac{|Z|\mu}{k}\right)} e^{-\frac{\pi}{2}\frac{|Z|\mu}{k}} \times \right.$$
$$e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+i\frac{|Z|\mu}{k}\ln[kr+\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}]} +$$
$$\left. \frac{\Gamma(1+2m)(-i)^{-i\frac{|Z|\mu}{k}-1}}{\Gamma\left(-i\frac{|Z|\mu}{k}+m\right)} \frac{e^{-ikr-i\frac{|Z|\mu}{k}\ln[kr+\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}]}}{[kr+\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}]} \right]$$

Normalizando a flujo saliente unitario resulta:

$$\psi_k^1 \to e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+i\frac{|Z|\mu}{k}\ln[kr+\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}]} + f_m(\theta) \frac{e^{-ikr-i\frac{|Z|\mu}{k}\ln[2kr]}}{r} \tag{16}$$

donde se han tomado N y $f(\theta)$ como:

$$N_m^1 = (-1)^{-m} \frac{\Gamma\left(1+m+i\frac{|Z|\mu}{k}\right)}{\Gamma(1+2m)} e^{\frac{\pi}{2}\frac{|Z|\mu}{k}}$$

$$f_m^1(\theta) = (-1)^{-m} \left[|Z|\,\mu \frac{e^{-i\frac{|Z|\mu}{k}\ln\left[\cos^2\frac{\theta}{2}\right]+2i\gamma_p}}{2k^2\cos^2\frac{\theta}{2}} + \right. \tag{17}$$
$$\left. im \frac{e^{-i\frac{|Z|\mu}{k}\ln\left[\cos^2\frac{\theta}{2}\right]+2i\gamma_p}}{2k\cos^2\frac{\theta}{2}} \right]$$
$$= (-1)^{-m}\left[f_c^1(\theta) + f_p^1(\theta)\right]$$

donde $\gamma_p = \arctan\left[\frac{|Z|\mu}{k(1+m)}\right]$. La amplitud de dispersión $f_m^1(\theta)$ resulta ser la suma de dos amplitudes: $f_c^1(\theta)$ y $f_p^1(\theta)$. $f_c^1(\theta)$ coincide con la amplitud de dispersión coulombiana salvo por la diferencia que aparece en γ_p, sus fases también coinciden cuando $m = 0$. $f_p^1(\theta)$ tiene la misma dependencia angular que la dada por $f_c^1(\theta)$, mientras que su intensidad depende proporcionalmente con el parametro m e inversamente proporcional con el momento k. A partir de lo mencionado puede concluirse que $f_c^1(\theta)$ y $f_p^1(\theta)$ están asociadas con las amplitudes de transición del potencial coulombiano el potencial parabólico V^+ respectivamente.

La solución ψ_k^1 normalizada resulta:

$$\psi_k^1 = N_m^1 e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left[-i(kr+\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right]^m \times \tag{18}$$
$${}_1F_1\left[-i\frac{|Z|\,\mu}{k}+m, 1+2m, -i(kr+\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right]$$

En la siguiente sección estudiaremos la sección eficaz definida por $f_m^1(\theta)$.

En la función de onda estudiada (11), o (18), la distorsión que acompaña a la onda plana depende solamente de una de las coordenadas parabólicas. Mientras que en ψ_k^2, dada por (13), depende de ambas coordenadas parabólicas. El estudio del comportamiento asintótico de ésta función surgirá del estudio del comportamiento las funciones en cada una de las variables. Reemplazando (15) en (13) y despreciando ordenes de $1/r^2$ se obtiene:

$$\psi^2(\mathbf{r}) \to e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\frac{|Z|\mu}{k}\ln[kr-\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}]} +$$
$$f_m^2(\theta)\frac{e^{ikr+i\frac{|Z|\mu}{k}\ln[2kr]}}{r} + \tag{19}$$
$$g_m^2(\theta)\frac{e^{-ikr-i\frac{|Z|\mu}{k}\ln[2kr]}}{r}$$

donde se han sido definidas N_m^2, $f_m^2(\theta)$ y $g_m^2(\theta)$ por:

$$N^2 = (-1)^m \frac{\Gamma(1+2m)}{\Gamma(1+m)}\Gamma\left(1-i\frac{|Z|\mu}{k}\right)e^{-\frac{\pi}{2}\frac{|Z|\mu}{k}}$$

$$f_m^2(\theta) = f_c^+(\theta) = |Z|\,\mu\frac{\Gamma\left(1+i\frac{|Z|\mu}{k}\right)}{\Gamma\left(1-i\frac{|Z|\mu}{k}\right)}\frac{e^{-i\frac{|Z|\mu}{k}\ln\left[\sin^2\frac{\theta}{2}\right]+2i\gamma_c}}{2k^2\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

$$g_m^2(\theta) = i(-1)^{-m} m\frac{e^{-i\frac{|Z|\mu}{k}\ln\left[\sin^2\frac{\theta}{2}\right]}}{2k\cos^2\frac{\theta}{2}}$$

con la fase coulombiana dada por $\gamma_c = \arctan\left[\frac{|Z|\mu}{k}\right]$ y donde $f_c^+(\theta)$ representa la amplitude de transición coulombiana asociada con una onda saliente.

Puede verse en (19) que no solo aparece una onda esférica saliente, modulada por la amplitud de dispersión coulombiana $f_c^+(\theta)$, sino que también aparece una onda esférica entrante modulada angularmente por la función $g^2(\theta)$. Se ha normalizado $\psi^2(\mathbf{r})$ de manera de que el coeficiente de la onda plana sea igual a uno. Observese que la funcion de onda en el origen se anula.

En el caso en el cual el potencial coulombiano está ausente, $|Z| = 0$, la función de onda, correspondiente a V^+, está dada por (14). El comportamiento asintótico de $\psi^3(\mathbf{r})$ se obtiene de reemplazar (15) en (14):

$$\psi^3(\mathbf{r}) \to e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_m^3(\theta)\frac{e^{-ikr}}{r} \tag{20}$$

donde N_m^3 y $f_m^3(\theta)$ están definidos por:

$$N_m^3 = (-1)^{-m}\frac{\Gamma(1+m)}{\Gamma(1+2m)}$$
$$f_m^3(\theta) = i(-1)^{-m}\frac{m}{2k\cos^2\frac{\theta}{2}}$$

La constante de normalización ha sido elegida de manera de tener flujo saliente unitario, con esta (14) resulta:

$$\psi^3(\mathbf{r}) = N_m^3 e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(-ik\xi)^m\,{}_1F_1[m, 1+2m, -ik\xi] \tag{21}$$

Aun cuando el potencial V^p es no central y extendido en el espacio, el comportamiento asintótico de $\psi^3(\mathbf{r})$ no se ve distorsionado, puede entonces decirse que se trata de un potencial de corto alcance. La amplitud de transición $f_m^3(\theta)$ se comporta angularmente de manera similar a la amplitud coulombiana, sin embargo su comportamiento con la energía, o con el momento k, es diferente.

En la siguiente sección se estudiarán las secciones eficaces que resultan de las amplitudes de transición definidas.

La sección eficaz

La sección eficaz de dispersión correspondiente a un potencial V, con el cual interactúa la partícula incidente, se define a partir de la amplitude de dispersión $f(\theta)$ y del comportamiento asintótico

$$\psi \to e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f^{\pm}(\theta)\frac{e^{\pm kr}}{r}$$

de la solución ψ de la ecuación de Schrödinger asociada con V, esta es ,ver L. S. Rodberg y R. M. Thaler:

$$\sigma^{\pm}(\theta) = \left|f^{\pm}(\theta)\right|$$

La ecuación (17) define la amplitud de probabilidad con la cual es dispersada la partícula incidente, para cada ángulo θ, al interactuar con el potencial V^{+}. La sección eficaz de dispersión $\sigma_m^{-}(\theta)$ obtenida a partir de $f_m^1(\theta)$, ver L. I. Schiff (1968), es:

$$\sigma_m^{-}(\theta) = \sigma_c(\theta) + \sigma_m^{p+}(\theta) + \sigma_{int}^{-}(\theta) \tag{22}$$

donde

$$\begin{aligned} \sigma_c(\theta) &= \frac{(|Z|\mu)^2}{4k^4\cos^4\frac{\theta}{2}} \\ \sigma_m^{p+}(\theta) &= \frac{m^2}{4k^2\cos^4\frac{\theta}{2}} \\ \sigma_{int}^{-}(\theta) &= 2\,\mathrm{Re}\left[f_c^1(\theta)\, f_p^1(\theta)\right] \end{aligned} \tag{23}$$

De la manera en que ha sido definida $\sigma_m^{-}(\theta)$ resulta de la suma de tres secciones eficaces: $\sigma_c(\theta)$, $\sigma_m^{p+}(\theta)$ y $\sigma_{int}^{-}(\theta)$. $\sigma_c(\theta)$ es la sección eficaz asociada con la dispersión en un centro coulombiano, $\sigma_m^{p+}(\theta)$, como veremos más adelante, es la sección eficaz asociada con la dispersión en el potencial parbólico V^p y $\sigma_{int}^{-}(\theta)$ resulta de la interferencia de los mencionados procesos de colisión. Puede verse que el comportamiento angular presentado por $\sigma_m^{-}(\theta)$ es similar al de la sección eficaz coulombiana, correspondiente a $m = 0$. Sin embargo el comportamiento con el momento k de la partícula es significativamente diferente. Se observa que para bajas energías, $k \to 0$, domina $\sigma_c(\theta)$; es decir que el centro dispersor actúa como un centro coulombiano puro dando así la sección eficaz de Rutherford. Para altas energía, $k \to \infty$, la partícula interactúa más fuertemente con el potencial V^p dominando entonces la sección eficaz $\sigma_m^{p+}(\theta)$.

La sección eficaz total que se obtiene intengrando $\sigma_m^{-}(\theta)$ es infinita. Esta propiedad surge como consecuencia del largo alcance del potencial, tal como ocurre con el potencial coulombiano.

La sección eficaz diferencial asociada con $f_m^3(\theta)$ es:

$$\sigma_m^{p+}(\theta) = \frac{m^2}{4k^2\cos^4\frac{\theta}{2}} \tag{24}$$

$\sigma_m^{p+}(\theta)$ es efectivamente la sección eficaz correspondiente a la dispersión de una partícula al interactual con el potencial parabólico V^p.

Se ve entonces que la sección eficaz $\sigma_m^{-}(\theta)$ resulta de la dispersión de una partícula por parte de un potencial compuesto, esto es la suma del potencial coulombiano V^c y el parabólico V^{+} .

Conclusiones

- Para el caso en que $m = 0$ las soluciones se corresponden con las del problema de dos cuerpos coulombiano.
- Para el caso de $|Z| = 0$ las soluciones se corresponden con las de la interacción con un potencial no central V^p.
- Para el caso de onda entrante, las secciones eficaces se corresponden con las de un potencal coulombiano si $m = 0$ y las de un potencial parabólico si $|Z| = 0$. En el caso general se obtiene la interferencia entre ambas interacciones.

C. R. Garibotti y J. E. Miraglia, Phys Rev A **21**, 572 (1980)

J. Berakdar y Briggs Phys. Rev. Lett. **72**, 3799 (1994)

J. Berakdar, Phys. Rev. A **53**, 2314 (1997)

G. Gasaneo, F. D. Colavecchia, C. R. Garibotti, P. Macri and J. E. Miraglia, *Correlated continuum wave functions for three particles with Coulomb interactions*, Phys. Rev. A **55**, 2809-2820 (1997); ver también *Approximate analytical solution for two electrons in the continuum* , P. Macri, J. E. Miraglia, F. D. Colavecchia and G. Gasaneo. Phys. Rev. A **55**, 3518-3525 (1997)

L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics non-Relativistic Theory*, Pergamon Press Ltd., 1965

L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Company, 1968

L. S. Rodberg y R. M. Thaler, *Introduction to Quantum Theory of Scattering*, Academic Press, 1967

Abramowitz and I. A. Stegun, (Dover Publications Inc., New York, 1970), p. 505.