Elementos de matriz para el potencial de Morse

V. Gaftoi N., J. López B.,

J. Morales R.* y D. Navarrete G.

Area de Física, División de Ciencias Básicas e Ingeniería,
Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco
Av. San Pablo 180, Apartado postal 16-306, 02200 México, D.F.

(Recibido el 16 de abril de 1990; aceptado el 9 de mayo de 1990)

Resumen. Mostramos la utilidad del teorema hipervirial para obtener elementos de matriz entre eigenestados del potencial de Morse.

PACS: 02.90.+p; 03.65.Fd

1. Introducción

En [1] se utilizó el teorema hipervirial (TH) [2] para determinar elementos de matriz para el oscilador armónico unidimensional, sin embargo, no conocemos alguna publicación donde se aplique el TH al cálculo de elementos de matriz asociados al potencial de Morse [3,4], aquí tratamos de remediar en parte esta última situación. En general, al emplear el TH basta conocer el potencial V y el correspondiente espectro de energía E_n, haciéndose así innecesaria la fórmula explicita de la función de onda ψ_n, opinamos que aquí radica la principal relevancia del TH. En la Sec. 2 se utiliza el TH para a) demostrar que $\langle n|e^{-au}|n\rangle = \langle n|e^{-2au}|n\rangle$, b) calcular $\langle m|u|n\rangle$, $n > m$ una vez ya conocidos los elementos $\langle m|e^{-\theta au}|n\rangle$, $\theta = 1, 2$, y c) Mostrar que los $\langle m|e^{-\beta au}|n\rangle$, $\beta = 3, 4, 5\ldots$ son obtenibles a partir de $\langle m|e^{-au}|n\rangle$ y $\langle m|e^{-2au}|n\rangle$. En la Sec. 3 se exponen las fórmulas generales de [5,6,7] para $\langle m|e^{-\beta au}|n\rangle$, enfatizándose que aún no se ha probado la equivalencia de la fórmula de Rosen [5]-(Vasan-Cross) [6] con la expresión obtenida por Berrondo *et al.* [7].

2. Teorema hipervirial

En este trabajo nuestro objetivo principal es el cálculo de elementos de matriz para el potencial de Morse en el caso de un centro, es decir, debemos determinar integrales del tipo

$$\langle m|f(r)|n\rangle \equiv \int_0^\infty \psi_m f(r)\psi_n \, dr, \tag{1.a}$$

*Instituto Mexicano del Petróleo, Subdirección General de Investigación Aplicada.

donde $\frac{1}{r}\psi_m$ es la función de onda radial (constante de Planck y masa reducida iguales a uno)

$$\frac{d^2}{dr^2}\psi_n + 2[E_n - V(r)]\psi_n = 0. \tag{1.b}$$

El procedimiento directo para evaluar (1.a) consiste en sustituir ahí las expresiones explícitas de f y ψ_n, y después efectuar a pie las integrales correspondientes. Sin embargo, en [1] se mostró que para el oscilador armónico el toerema hipervirial [2] permite calcular (1.a) sin utilizar la fórmula explícita de la función de onda. La ecuación de Schrödinger contiene toda la información sobre nuestro sistema cuántico, entonces parte de esta información se almacena en el teorema hipervirial el cual a su vez se emplea para estudiar (1.a) sin tener a ψ_m explícitamente.

De (1.b) no es difícil [2] obtener el teorema hipervirial

$$(E_m - E_n)^2\langle m|f|n\rangle + \tfrac{1}{4}\langle m|f''''|n\rangle + (E_m + E_n)\langle m|f''|n\rangle \\ -2\langle m|f''V|n\rangle - \langle m|f'V'|n\rangle = 0, \tag{2}$$

donde las primas denotan derivadas respecto a r. Nótese que (2) exige conocer el espectro de energía asociado al potencial $V(r)$. Si ahora nos limitamos a la interacción de Morse [3]

$$\begin{aligned} V(r) &= D\Big(e^{-2au} - 2e^{-au}\Big), \qquad & u &= r - r_0 \\ E_n &= -\frac{a^2}{8}b^2, & b &= K - 2n - 1 \end{aligned} \tag{3}$$

donde los parámetros D, K, a, r_0 y la correspondiente función ψ_n se han explicado en [4]. Como r y u difieren por una constante aditiva entonces es claro que (2) es válido con las primas representando derivadas respecto a u, además (1.a) nos queda

$$\langle m|f(r)|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(u + r_0)f(u + r_0)\psi_n(u + r_0)\,du. \tag{4}$$

Enseguida haremos algunos ejemplos [para (3)] con funciones particualres, esto con el fin de ilustrar cómo (2) permite obtener alguna información sobre determinados elementos de matriz.

a) $f(r) = r - r_0$, entonces de (2,3)

$$(E_m - E_n)^2\langle m|u|n\rangle = 2aD\langle m|e^{-au} - e^{-2au}|n\rangle, \tag{5}$$

que a su vez origina dos situaciones, a saber:

i) $n = m$

Entonces (5) implica

$$\langle n|e^{-au}|n\rangle = \langle n|e^{-2au}|n\rangle, \tag{6}$$

es decir, son idénticos entre sí los elementos diagonales para e^{-au} y e^{-2au}. Enfatizamos que (6) es un resultado obtenido sin conocer explícitamente a ψ_m ni al espectro E_m; en la Sec. 3 observaremos la validez de (6) mediante las fórmulas de Rosen [5], Vasan-Cross [6] y Berrondo-Palma-López [7], en efecto, veremos que $\langle n|e^{-au}|n\rangle = \frac{1}{K}(K-2n-1)$.

ii) $n > m$

Así (5) conduce a

$$\langle m|u|n\rangle = \frac{2aD}{(E_m - E_n)^2}\langle m|e^{-au} - e^{-2au}|n\rangle, \tag{7.a}$$

esto significa que una vez conocidos los elementos de matriz $\langle m|e^{-\theta au}|n\rangle$, $\theta = 1,2$, entonces quedan determinados los elementos $\langle m|u|n\rangle$ para $n > m$. De las expresiones de [5,6,7] tenemos que

$$\begin{aligned} \langle m|e^{-au}|n\rangle &= A = \frac{(-1)^{n+m}}{K}\left[\frac{b_1 b_2 n!\Gamma(K-n)}{m!\Gamma(K-m)}\right]^{1/2}, \qquad & b_1 &= K-2n-1, \\ \langle m|e^{-2au}|n\rangle &= \frac{A}{K}[(n+1)(K-n) - m(K-m-1)], \qquad & b_2 &= K-2m-1, \end{aligned} \tag{7.b}$$

con Γ denotando la conocida función gama. Por lo tanto, al sustituir (3,7.*b*) en (7.*a*) obtenemos

$$\langle m|u|n\rangle = \frac{AK}{a(m-n)(K-n-m-1)}, \qquad n > m. \tag{7.c}$$

Este resultado (7.*c*) también fue deducido por Gallas [8]: este autor no utiliza el teorema hipervirial pero sí emplea una fórmula no-trivial entre funciones gama, a saber ($n > m$):

$$\frac{m!\Gamma(K-m)}{n!\Gamma(K-n)}\sum_{j=0}^{m}\frac{(n-m+j-1)!\Gamma(K-n-m+j-1)}{j!\Gamma(K-2m+j)} = \frac{1}{(n-m)(K-n-m-1)}. \tag{7.d}$$

Aquí y en las Refs. [5,6,7] no se necesitó (7.*d*). No trataremos el caso diagonal $\langle n|u|n\rangle$, el cual puede encontrarse en Gallas [8] (cálculo analítico) y en Sandoval [9] (diferenciación paramétrica).

b) Sea $f(r) = e^{-\beta a(r-r_0)}$, $\beta = 0, 1, 2, \ldots$. En consecuencia, de (2,3) es inmediato que (para $n \geq m$)

$$\left[(E_m - E_n)^2 + \frac{\beta^4 a^4}{4} + \beta^2 a^2 (E_m + E_n)\right] \langle m|e^{-\beta a u}|n\rangle$$
$$-2\beta D a^2 (1+\beta)\langle m|e^{-a(\beta+2)u}|n\rangle + 2\beta D a^2(1+2\beta)\langle m|e^{-a(\beta+1)u}|n\rangle = 0 \quad (8.a)$$

así, por ejemplo, si $\beta = 1$ entonces (8.a) implica

$$\left[(E_m - E_n)^2 + \frac{a^4}{4} + a^2(E_m + E_n)\right] \langle m|e^{-au}|n\rangle$$
$$-4Da^2\langle m|e^{-3au}|n\rangle + 6Da^2\langle m|e^{-2au}|n\rangle = 0 \quad (8.b)$$

y si en (8.b) sustituimos (3,7.b) resulta que

$$\langle m|e^{-3au}|n\rangle = \frac{A}{K^2}\left\{(n+1)(K-n)\left[\tfrac{1}{2}(n+2)(K-n+1) - m(K-m-1)\right]\right.$$
$$\left. + \tfrac{1}{2}m(m-1)(K-m-1)(K-m-2)\right\} \quad (8.c)$$

que también es obtenible a partir de las relaciones de [5,6,7]. Así, (8.b) nos muestra que basta conocer $\langle m|e^{-\theta a u}|n\rangle$, $\theta = 1, 2$, para determinar $\langle m|e^{-3au}|n\rangle$. Si en (8.$a$) ponemos $\beta = 2$ entonces $\langle m|e^{-4au}|n\rangle$ es determinado por $\langle m|e^{-\gamma a u}|n\rangle$, $\gamma = 2, 3$, etc. En resumen, mediante (8.a), un proceso de recurrencia y los elementos de matriz $\langle m|e^{-au}|n\rangle$ y $\langle m|e^{-2au}|n\rangle$ podemos calcular $\langle m|e^{-\beta a u}|n\rangle$, $\beta = 3, 4, 5, \ldots$; esto muestra la utilidad del teorema hipervirial.

3. Elementos de matriz para $e^{-\beta a u}$

En la sección anterior empleamos los resultados (7.b), aquí los justificaremos mostrando expresiones generales para $\langle m|\exp(-\beta a(r-r_0))|n\rangle$, $\beta = 0, 1, 2, \ldots$.

De acuerdo con (4) tenemos que

$$\langle m|e^{-\beta a u}|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m e^{-\beta a u}\psi_n \, du, \quad (9.a)$$

Rosen [5] y Vasan-Cross [6] sustituyeron en (9.a) la expresión explícita [4] de ψ_n asociada al potencial de Morse, entonces después de efectuar diversas integrales entre polinomios de Laguerre obtuvieron

$$\langle m|e^{-\beta a u}|n\rangle = \frac{(-1)^{n+m}}{K^\beta}\left[\frac{b_1 b_2 m!\Gamma(K-m)}{n!\Gamma(K-n)}\right]^{1/2}$$

$$\times \sum_{j=0}^{m} \frac{(-1)^j \Gamma(n+\beta-j)\Gamma(K-n-1+\beta-j)}{j!(m-j)!\Gamma(K-m-j)\Gamma(\beta-j)}, \qquad (9.b)$$

recordar que $b_1 \equiv K - 2n - 1$ y $b_2 \equiv K - 2m - 1$. Si en (9.b) colocamos $\beta = 1, 2$ deducimos las relaciones (7.b); además, con $n = m$ y $\beta = 1, 2$ de (9.b) probamos (6)

$$\langle n|e^{-au}|n\rangle = \langle n|e^{-2au}|n\rangle = \frac{b_1}{K}, \qquad (9.c)$$

resultado que también fue obtenido por Huffaker-Dwivedi [10] mediante operadores de escalera construidos con el método de factorización de Infeld-Hull [11] (en esta Ref. [11] también se calcula (7.c) con operadores de creación y aniquilación).

Por otro lado, en [7] se utilizó el hecho de que el potencial de Morse es equivalente a un oscilador armónico bidimensional, y se obtuvo que ($n \geq m$)

$$\langle m|e^{-\beta au}|n\rangle = \frac{(-1)^{n+m}}{K^\beta}\left[\frac{b_1 b_2 m!\Gamma(K-m)}{n!\Gamma(K-n)}\right]^{1/2} \frac{n!}{\Gamma(K-m)}$$

$$\times \sum_{j=0}^{m} \binom{\theta - Q}{j}\binom{\theta + Q}{\theta - j} \frac{(K-n-2+\beta-j)!}{(m-j)!}, \qquad (9.d)$$

donde $\theta = \beta - 1$, $Q = n - m$ y $\binom{p}{q}$ representan coeficientes binomiales; de (9.d también son inmediatas (7.b,9.c). Hemos probado directamente que (9.b, d) conducen a los mismos resultados para los casos i) n, β arbitrarios y $m = 0, \ldots, 2$; ii) n, m arbitrarios y $\beta = 0, \ldots 4$, sin embargo, hasta ahora nadie ha podido demostrar que (9.b) y (9.d) son completamente equivalentes. Quizá un método para tal fin sería la inducción matemáica: Dejar n, m arbitrarios y aceptar que (9.b, d) coinciden para algún β, y entonces probar su igualdad para $(\beta + 1)$.

Para finalizar, hagamos el siguiente comentario. En este trabajo nos hemos interesado en elementos de matriz para el potencial de Morse, la mayoría de los métodos para calcularlos son *directos* en el sentido de que en todo momento nos ocupamos con (3). Por ahora investigamos un método *indirecto* (es decir, sin utilizar (3) explícitamente): el proceso indirecto empleado en [7] se apoya en la analogía de los osciladores de Morse y armónico en dos dimensiones, nosotros deseamos explotar la equivalencia entre los potenciales de Coulomb y Morse descubierta por Lee [12], originándose así la posibilidad de que diversos elementos de matriz para Morse sean consecuencia inmediata de elementos de matriz para Coulomb ya conocidos en la literatura [13,14].

Referencias

1. J. Morales, J. López B., A. Palma, *J. Math. Phys.* **28** (1987) 1032.
2. J. Morales, A. Palma, L. Sandoval, *Int. J. Quantum. Chem.* **29** (1986) 211.

3. P. Morse, *Phys. Rev.* **34** (1929) 57.
4. V. Gaftoi, J. López B., J. Morales, D. Navarrete, *Rev. Mex. Fís.* **36** (1990) 310.
5. N. Rosen, J. Chem. Phys. 1 (1933) 319.
6. V.S. Vasan, R.J. Cross, *J. Chem. Phys.* **78** (1983) 3869.
7. M. Berrondo, A. Palma, J. López B., *Int. J. Quantum. Chem.* **31** (1987) 243.
8. J.A. Gallas, *Phys. Rev. A* **21** (1980) 1829.
9. L. Sandoval, "Los operadores de aniquilación y creación en el cálculo de elementos de matriz". Tesis doctoral, Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN México (1990).
10. J.N. Huffaker, P.H. Dwivedi, *J. Math. Phys.* **16** (1975) 862.
11. L. Infeld, T.E. Hull, *Rev. Mod. Phys.* **23** (1951) 21.
12. Soo-Y. Lee, *Am. J. Phys.* **53** (1985) 753.
13. J.H. Epstein, S.T. Epstein, *Am. J. Phys.* **30** (1962) 266.
14. M. Badawi, N. Bessis, G. Bessis, G. Hadinger, *Phys. Rev. A* **8** (1973) 727.

Abstract. We show the usefulness of the hypervirial theorem to obtain matrix elements between eigenstates of the Morse potential.