

Determinación del coeficiente isotópico para potenciales x^{2n} utilizando un análisis dimensional de la ecuación de Schrödinger

R. Palí, R. de Coss y J. Mustre de León

*Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN
Apartado postal 73, Cordemex, 97310 Mérida, Yucatán, Mexico*

Recibido el 26 de mayo de 1998; aceptado el 10 de noviembre de 1998

La adimensionalización de las ecuaciones que rigen la dinámica de un sistema físico puede ser muy útil cuando se analiza el comportamiento cualitativo de cualquier variable involucrada en estas ecuaciones. En un sistema dinámico tal como el de una partícula moviéndose en un potencial efectivo, los coeficientes isotópicos miden el grado de anarmonicidad del potencial. En general cada eigenestado tiene un coeficiente isotópico distinto. En este trabajo determinamos los coeficientes isotópicos para potenciales de la forma $V(x) \propto x^{2N}$ ($N = 1, 2, 3, \dots$) a través del proceso de adimensionalización de la ecuación de Schrödinger. Encontramos una expresión analítica para el coeficiente isotópico, cuyo valor depende solamente de N y no del eigenestado. El valor del coeficiente isotópico se encuentra entre 1/2, para $N = 1$ (potencial armónico) y tiende a 1.0 a medida que se incrementa N . Esto es un reflejo del hecho que el potencial es más armónico entre más grande sea N .

Descriptores: Efecto isotópico en fonones; potenciales anarmónicos; óxidos superconductores

The adimensionalization of equations which govern the dynamics of a physical system can be very useful when studying the qualitative behavior of any variable involved in those equations. In a dynamic system like a particle moving in a effective potential, the isotopic coefficient measure the degree of anharmonicity of the potential. In general each eigenstate has a different coefficient. In this work, we determined the isotopic coefficients for potentials of the form $V(x) \propto x^{2N}$ ($N = 1, 2, 3, \dots$) through the adimensionalization process of the Schrödinger equation. We found an analytic expression for the isotopic coefficient which depends only of N but not on the eigenstate. The isotopic coefficient value starts at 1/2 for $N = 1$ (harmonic potential) and gradually converges to 1.0 when N increments. This reflects the fact that the potential is more anharmonic for increasing N .

Keywords: Isotope effect in phonons; anharmonic lattice modes; superconductor oxides

PACS: 63.20.Ry; 63.22.+m; 74.25.Kc; 74.72.Bk

1. Introducción

La adimensionalización de las ecuaciones que rigen el comportamiento dinámico de un sistema es un proceso que puede ser útil en la física, ya que nos puede ayudar a entender la dinámica de algunos sistemas, sin más complicaciones que parametrizar y analizar adecuadamente la dependencia cualitativa de las variables que se quieren estudiar en función de otras. Por ejemplo, en un sistema de una partícula moviéndose en un potencial efectivo, puede ser interesante conocer la dependencia de la energía del sistema como función de la partícula en cuestión. La dinámica de este sistema partícula-potencial se rige por la ecuación de Schrödinger.

La importancia del proceso de adimensionalización no sólo está presente en el análisis cualitativo de variables encontradas de manera analítica [1], sino que se extiende cuando queremos hacer uso de un formalismo numérico para encontrar la solución del problema, ya que los programas computacionales requieren de variables adimensionales para su correcto funcionamiento. A continuación describimos un proceso de adimensionalización con el cual se muestra la importancia de este proceso para encontrar soluciones a problemas presentes en la física actual.

En dinámica de redes es muy importante conocer qué tanto se desvían los potenciales interatómicos con respecto a la forma simple de un potencial armónico. Esta anarmonicidad determina propiedades como compresibilidad, dilatación y otras propiedades macroscópicas de los sistemas [2]. Además, en sistemas tales como los superconductores de alta temperatura crítica hay evidencia de que algunos potenciales interatómicos son altamente anarmónicos [3-5], y esto puede estar ligado al origen de la superconductividad en estos sistemas [6]. La cuantificación de la anarmonicidad de un potencial se puede hacer a través del estudio del efecto isotópico [7, 8]. En particular, el coeficiente isotópico puede ser determinado experimentalmente y esto permite conocer el grado de anarmonicidad de un sistema específico [8]. En lo que sigue, por simplicidad consideraremos el caso de un potencial unidimensional, sin embargo las definiciones y los conceptos se aplican a más dimensiones.

El espectro de energías de una partícula de masa M sujeta a un potencial $V(x)$, en general es un espectro discreto. Las energías de los estados excitados medidas con respecto al estado base (E_0) las denotaremos por E_n , donde el índice n ($n = 1, 2, 3, \dots$) denota el estado excitado. Una transición del estado base a un estado excitado n puede ocurrir cuando

el sistema absorbe un fotón de energía ($\hbar\omega$) igual a la energía de excitación E_n . La frecuencia de dicho fotón la llamaremos la frecuencia de excitación asociada al estado n y la denotaremos por ω_n , entonces tenemos que

$$E_n = \hbar\omega_n. \tag{1}$$

Por otro lado, las energías de excitación en general dependen del potencial y de la masa de la partícula sujeta a dicho potencial. Por ejemplo, para el caso del oscilador armónico, $V(x) = Ax^2$ [1], tenemos que $E_n \propto \sqrt{A/M}$, y como E_n es proporcional a ω_n [Eq.(1)], entonces

$$\omega_n \propto M^{-\frac{1}{2}}. \tag{2}$$

Esta dependencia de las ω_n con la masa es conocido como el efecto isotópico en las frecuencias de excitación. Para un potencial $V(x)$ arbitrario es común proponer una relación entre las frecuencias de excitación y la masa, de la forma siguiente:

$$\omega_n \propto M^{-\alpha_n}, \tag{3}$$

donde α_n es el coeficiente isotópico correspondiente al n -ésimo estado excitado, el cual en general es diferente para cada estado excitado. Para el caso particular del oscilador armónico α_n es independiente del estado y tiene el valor de $\alpha_{\text{arm}} = 1/2$. Por lo tanto, el grado de anarmonicidad de un sistema lo determinamos analizando cuánto se desvía el valor del coeficiente isotópico de $\alpha_{\text{arm}} = 1/2$.

Para otros potenciales distintos al armónico muchas veces no es posible resolver la ecuación de Schrödinger en forma analítica, por lo tanto el cálculo de los α_n correspondientes a esos potenciales se dificulta. En estos caso es necesario utilizar un método numérico para la solución de la ecuación de Schrödinger y calcular α_n . Para algunos potenciales esta dificultad puede ser evitada si hacemos uso de un análisis dimensional de la ecuación de Schrödinger, estos potenciales son de la forma

$$V(x) = A_N x^{2N}, \quad N = 1, 2, 3, \dots \tag{4}$$

En este trabajo presentamos un análisis dimensional de la ecuación de Schrödinger para potenciales descritos por la Ec. (4), con la finalidad de conocer sus coeficientes isotópicos sin necesidad de resolver la ecuación de Schrödinger. En la Sec. 2 presentamos el método de adimensionalización y parametrización de la ecuación de Schrödinger con los potenciales x^{2N} , con el cual encontramos los α_n correspondientes. En esta misma sección presentamos los resultados para $N = 1$ y $N = 2$, y posteriormente hacemos una generalización para todo N entero y positivo. En la Sec. 3 hacemos comentarios finales del trabajo.

2. Ecuación adimensional de Schrödinger y determinación del coeficiente isotópico

2.1. Ecuación adimensional de Schrödinger

Para encontrar el coeficiente isotópico en los potenciales x^{2N} , debemos adimensionalizar la ecuación de Schrödinger

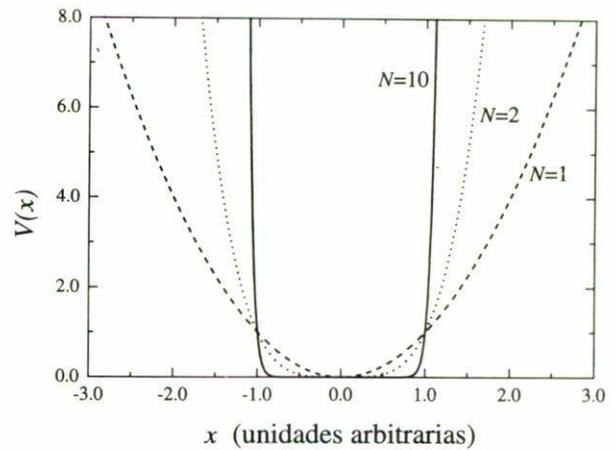


FIGURA 1. El potencial $V(x) = A_N x^{2N}$ para tres valores diferentes de N , potencial armónico $N = 1$ (línea discontinua), potencial cuártico $N = 2$ (línea punteada) y $N = 10$ (línea sólida).

con estos potenciales. La ecuación de Schrödinger unidimensional está dada por

$$H\psi(x) = E\psi(x), \tag{5}$$

donde

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x). \tag{6}$$

Analizaremos el caso cuando el potencial $V(x)$ tiene la forma

$$V(x) = A_N x^{2N}, \quad N = 1, 2, 3, 4, \dots \tag{7}$$

En la Fig. 1, mostramos gráficos del potencial para algunos valores de N . Las unidades correspondientes a cada uno de los parámetros del potencial x^{2N} son los siguientes:

$$[x] = \text{Longitud} \tag{8}$$

$$[A_N] = \frac{\text{Energía}}{(\text{Longitud})^{2N}} \tag{9}$$

Con la finalidad de tener un potencial con parámetros adimensionales, definimos la siguiente cantidad:

$$A_N = \frac{e_0 a_N}{r_0^{2N}}, \quad [a_N] = 1. \tag{10}$$

Como podemos ver, solamente hemos redefinido los parámetros del potencial, en función de nuevos parámetros. Estos nuevos parámetros son tales que a_N es adimensional tal como lo muestra la definición $[a_N]=1$; e_0 tiene dimensiones de energía y además es un parámetro que se escoge de manera arbitraria y con el cual se fija la escala de energía del problema, r_0 tiene dimensiones de longitud y al igual que e_0 es escogido de manera conveniente para fijar la escala de

longitud del problema. Sustituyendo estas definiciones en el potencial, obtenemos

$$V(x) = \frac{e_0 a_N}{r_0^{2N}} x^{2N}. \quad (11)$$

Ahora hacemos un cambio de variable

$$u = \frac{x}{r_0}, \quad (12)$$

de tal manera que u sea adimensional, es decir,

$$[u] = 1. \quad (13)$$

Entonces, el potencial puede expresarse como sigue:

$$V(u) = e_0 a_N u^{2N}. \quad (14)$$

Por otro lado, haciendo uso de la Ec. (12), tenemos que

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{r_0^2} \frac{d^2}{du^2} \quad (15)$$

Introduciendo estos resultados en el hamiltoniano [Ec. (6)], encontramos que

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r_0^2} \frac{d^2}{du^2} + e_0 a_N u^{2N}. \quad (16)$$

Ahora definimos un parámetro de masa adimensional

$$m = \frac{M e_0 r_0^2}{\hbar^2}, \quad [m = 1]. \quad (17)$$

Finalmente la ecuación de Schrödinger toma la siguiente forma:

$$\left[-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{du^2} + a_N u^{2N} \right] \psi = \varepsilon \psi, \quad (18)$$

donde hemos definido

$$\varepsilon = \frac{E}{e_0}. \quad (19)$$

Ahora todos los parámetros de la ecuación de Schrödinger para el potencial x^{2N} son adimensionales.

2.2. Determinación del coeficiente isotópico para $N = 1$ y $N = 2$

A partir de la ecuación de Schrödinger escrita en términos de parámetros adimensionales podemos hacer un análisis del parámetro que definimos como nuestra escala de energía (e_0) y observar la potencia con la cual éste depende de la masa M .

Comenzaremos por analizar los casos más sencillos, los cuales corresponden a $N = 1$ y $N = 2$; es decir, cuando $V(x) = A_1 x^2$ (potencial armónico) y $V(x) = A_2 x^4$, respectivamente.

a) Caso $N = 1$. De la Ec. (10), con $N = 1$ obtenemos

$$r_0^2 = e_0 \frac{a_1}{A_1}. \quad (20)$$

Sustituyendo lo anterior en la Ec. (17) y despejando e_0 , encontramos lo siguiente:

$$e_0 = \left(m \frac{A_1}{a_1} \right)^{\frac{1}{2}} \hbar M^{-\frac{1}{2}}. \quad (21)$$

Este resultado implica que

$$\omega_n \propto M^{-\frac{1}{2}}, \quad (22)$$

ya que $e_0 \propto E_n$ [Ec. (19)] y $E_n \propto \omega_n$ [Ec.(1)]. Por lo tanto, para el potencial x^2 , $\alpha_n = 1/2$, el cual era el resultado esperado [Ec. (2)].

b) Caso $N = 2$. De la Ec. (10), con $N = 2$ obtenemos que

$$r_0^2 = \left(e_0 \frac{a_2}{A_2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (23)$$

Sustituyendo lo anterior en la Ec. (17) obtenemos de manera inmediata que

$$e_0 = \left(m^2 \hbar^4 \frac{A_2}{a_2} \right)^{1/3} M^{-\frac{2}{3}},$$

de donde resulta que

$$\omega_n \propto M^{-\frac{2}{3}}. \quad (24)$$

Esto implica que $\alpha_n = 2/3$ para el potencial x^4 .

Debido a que el coeficiente isotópico no depende del eigenestado (n) en los potenciales que aquí estudiamos, de aquí en adelante omitiremos el subíndice n en el coeficiente isotópico.

2.3. Generalización para N entero y positivo

Con un procedimiento similar a los anteriores es posible generalizar el resultado para todos los casos que estamos analizando. Con ayuda de la Ec. (10) encontramos que para todo N entero positivo

$$r_0^2 = e_0^{\frac{1}{N}} \left(\frac{a_N}{A_N} \right)^{\frac{1}{N}}. \quad (25)$$

Este resultado es sustituido en la Ec. (17) definida para la masa adimensional y despejamos e_0 :

$$e_0 = \left(m^N \hbar^{2N} \frac{A_N}{a_N} \right)^{1/N+1} M^{-N/N+1}, \quad (26)$$

de lo cual obtenemos que

$$\omega \propto M^{-N/N+1}, \quad (27)$$

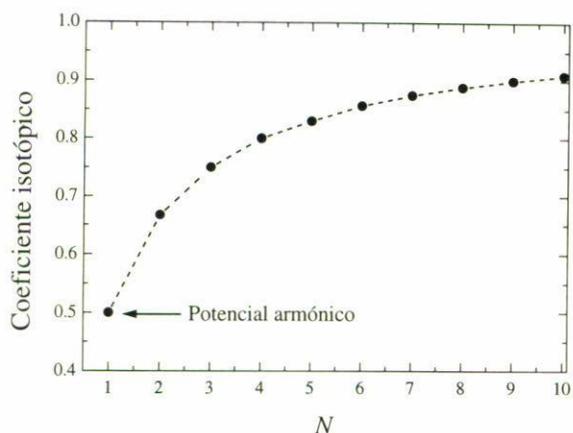


FIGURA 2. Coeficiente isotópico α como función de N para potenciales $V(x) = A_N x^{2N}$ (círculos sólidos), la línea discontinua no representa valores calculados.

entonces el coeficiente isotópico para el potencial x^{2N} puede deducirse de la siguiente regla:

$$\alpha = \frac{N}{N+1}, \quad N = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (28)$$

Por ejemplo, para el potencial $V(x) = A_3 x^6$, $\alpha = 3/4$ y para el potencial $V(x) = A_4 x^8$, $\alpha = 4/5$. En la Fig. 2 mostramos el valor del coeficiente isotópico para los primeros diez valores de N , donde podemos ver que α gradualmente se acerca al valor de uno a medida que N es mayor.

Para terminar con esta sección, es importante mencionar que si se quiere implementar un programa de cómputo para encontrar los eigenvalores de cualquiera de los potenciales descritos por la Ec. (7), la Ec. (18) resulta muy útil debido a que es una ecuación adimensional.

3. Comentarios finales

Hemos encontrado que el coeficiente isotópico para los potenciales x^{2N} no depende del eigenestado y está dado por $\alpha = N/(N+1)$. También encontramos que el valor del coeficiente isotópico se encuentra en el intervalo $1/2 \leq \alpha < 1$,

dependiendo del valor de N . Para $N = 1$ (potencial armónico) $\alpha = 1/2$ y tiende a uno a medida que aumenta N ; esto refleja el hecho que el potencial se vuelve gradualmente más anarmónico a medida que se aleja del caso armónico. Por otro lado, es interesante notar que el valor límite de $\alpha = 1$ que hemos encontrado para el potencial x^{2N} cuando N es muy grande, corresponde al coeficiente isotópico del pozo de potencial rectangular de paredes infinitas. Este resultado se puede entender cualitativamente a partir de la Fig. 1, en la cual podemos ver que a medida que N se incrementa, la forma del potencial tiende a la de un pozo de potencial rectangular de paredes infinitas (ver línea continua en Fig. 1, la cual corresponde a $N = 10$).

Recientemente hemos estudiado los compuestos $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ y $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ [9, 10] a través de un análisis del efecto isotópico en las frecuencias de excitación correspondientes a las vibraciones del oxígeno axial O(4), presente dentro de la red cristalina de estos compuestos. Este estudio consistió en calcular el cambio en las frecuencias de excitación que corresponden a las vibraciones del O(4) a lo largo del eje c , cuando variamos su masa. Comparando los resultados del coeficiente isotópico para diferentes potenciales anarmónicos con los valores experimentales [11–13], es posible obtener información acerca de la dinámica de la red y la naturaleza de las interacciones interatómicas en estos compuestos. Es en este tipo de análisis donde radica la importancia de conocer los coeficientes isotópicos de potenciales anarmónicos.

Finalmente, es importante mencionar que diversos estudios recientes muestran que la anarmonicidad juega un papel importante en la explicación del fenómeno de la superconductividad y del pequeño efecto isotópico presente en algunos compuestos superconductores de alta temperatura crítica.

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) a través de los proyectos No. 3868P-E9608 y No. 3967P-E9608.

1. L. de la Peña, *Introducción a la mecánica cuántica*, (Ediciones Científicas Universitarias, Fondo de Cultura Económica, México, 1991) p. 303.
2. N.M. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics*, (Holt-Sunders International Editions, 1976), Cap. 25.
3. J. Mustre de León, S.D. Conradson, I. Batistic, and A.R. Bishop, *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990) 1675.
4. P.G. Allen, J. Mustre de León, S.D. Conradson, and A.R. Bishop, *Phys. Rev. B* **44** (1991) 9480.
5. J. Mustre de León *et al.*, *Phys. Rev. B* **45** (1992) 2447.
6. J. Mustre de León *et al.*, *Rev. Mex. Fís.* **44 S3** (1998) 122.
7. Para una introducción al concepto de efecto isotópico en frecuencias de vibración ver: E.H. Wichmann, *Física Cuántica*, (Editorial Reverte, España, 1991) p. 382.
8. E.B. Wilson, Jr., J.C. Decius, and P.C. Cross, *Molecular Vibrations*, (Dover, New York, 1955) p. 182.
9. Ramón Palí, *Tesis de Maestría*, Departamento de Física Aplicada, CINVESTAV-IPN (1997).
10. R. Palí, R. de Coss y J. Mustre de León, *Rev. Mex. Fís.* **44 S3** (1998) 77.
11. M.K. Crawford, W.E. Farneth, E.M. McCarron III, and R.K. Bordia, *Phys. Rev. B* **38** (1988) 11382.
12. G. Ruani *et al.*, *Physica C* **226** (1994) 101.
13. R. Heen, T. Strach, E. Schönherr, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **55** (1997) 3285.