

## PROBABILIDAD DE LOCALIZACIÓN DE UNA PARTÍCULA EN UN POTENCIAL ISOTÓNICO CUÁNTICO

MARICRUZ CASTILLO GARCÍA <sup>a</sup>, CARMEN VIRIDIANA BARRANCO DÍAZ <sup>a</sup>,  
MARIO ALBERTO MAYA MENDIETA <sup>a</sup>

<sup>a</sup>Facultad de Ciencias Físico Matemáticas  
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, San Claudio y Río Verde, San Manuel, Puebla Puebla  
e-mail: mari.c.g.fis@gmail.com, angel.5viri.9@gmail.com, mmaya@fcfm.buap.mx

El oscilador isotónico es uno de los pocos sistemas cuánticos con solución exacta. En este trabajo presentamos dos contribuciones sobre este problema. La primera consiste en proponer un método algebraico de solución más sencillo que los que aparecen en la literatura. La segunda contribución se refiere al cálculo de la probabilidad de localización de la partícula sujeta al potencial isotónico mediante fórmulas que determinan los lugares más probables en los que se encuentra la partícula.

**Keywords:** Operadores, función de onda, probabilidad.

### 1. Introducción

El potencial isotónico es un oscilador armónico con una barrera infinita de potencial en el centro. Este es uno de los pocos problemas resueltos de forma exacta en la mecánica cuántica. Tiene aplicaciones en óptica cuántica, en moléculas poliatómicas, en teoría de muchos cuerpos, cadenas de espines para la computación cuántica. En la literatura aparecen diversos enfoques para resolver la ecuación de Schrodinger con este potencial. El que trataremos en este trabajo es un método algebraico por medio de operadores de ascenso y descenso, como en el oscilador armónico [1], pero a diferencia de este caso, en el que esos operadores contienen derivadas de primer orden, los operadores para el potencial de tipo isotónico que hemos encontrado en la literatura son de segundo orden [2], [3].

En este trabajo presentamos nuestra contribución al mejor conocimiento de este sistema cuántico, en dos aspectos: el primero consiste en un método de solución, también de tipo algebraico, en el que el orden de las derivadas en los operadores de escalera se reducen de segundo orden a derivadas de primer orden, por medio de la ecuación de Schrodinger. La simplificación en el cálculo de las funciones de onda es considerable, como lo mostramos más adelante

La segunda contribución que hacemos es sobre el

comportamiento de la partícula atrapada en el potencial isotónico. Para esto tomamos un modelo específico de oscilador isotónico [2] en el que las funciones de onda y el espectro de energía dependen de un parámetro  $d$ , en principio abierto, que depende de la masa de la partícula y de la intensidad de la barrera de potencial en  $x = 0$ . Este parámetro nos permite modelar el potencial isotónico para localizar a la partícula en la zona permitida por dicho potencial.

El plan de este trabajo es el siguiente: En la Sección 2 damos los resultados de la Ref. [2] relevantes para nosotros. En la Sección 3 presentamos nuestra propuesta para la simplificación en el orden de las derivadas en los operadores de escalera y por lo tanto en la obtención de las funciones de onda y del espectro de energía. En la Sección 4 mostramos como el parámetro  $d$  se puede utilizar para modelar la probabilidad de localización de la partícula, y finalmente, en la Sección 5 comentamos brevemente nuestros resultados y damos las conclusiones.

### 2. El potencial isotónico de Nagiyev

El hamiltoniano utilizado por Nagiyev en la Ref. [2] tiene la forma

$$\hat{H}_N = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 + \frac{g}{x^2} \quad (1)$$

donde aparece el usual término cuadrático del oscilador armónico. La parte singular de este hamiltoniano está caracterizada por la constante  $g$ . Debemos resolver la ecuación de Schrodinger

$$\hat{H}_N \psi_n(x) = E_n \psi_n(x) \quad (2)$$

El hamiltoniano (1) está factorizado por los operadores  $\hat{c}^\pm$  definidos por

$$\hat{c}^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \mp \frac{d}{dx} + x - \frac{d+1/2}{x} \right) \quad (3)$$

La factorización del hamiltoniano es de la forma

$$\hat{H}_N = \hbar\omega (\hat{c}^+ \hat{c}^- + d + 1) \quad (4)$$

lo cual se puede demostrar sin mucha dificultad. En (4) aparece el parámetro  $d$  el cual es

$$d = \sqrt{1 + 8g} \quad (5)$$

y asume que  $g > -1/8$  para que  $d$  sea real. El conmutador de los operadores (3) es

$$[\hat{c}^-, \hat{c}^+] = 1 + \frac{d+1/2}{x^2} \quad (6)$$

El hecho de que este conmutador dependa de la posición  $x$  a través de la variable  $\xi$  indica que los operadores  $\hat{c}^-, \hat{c}^+$  no son de escalera, es decir, que no generan a las funciones de onda  $\psi_n(x)$  soluciones de la ecuación de Schrodinger (2). Es conocido que cuando en el potencial de un sistema cuántico hay dos términos dependientes de la posición, los operadores de escalera, si existen, son operadores diferenciales de segundo orden. Es el caso del potencial de Nagiyev, el cual es

$$V_N(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{g}{x^2}, \quad x > 0. \quad (7)$$

Por la forma del potencial las condiciones de frontera son

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} \psi_n(x) &= 0 \\ \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_n(x) &= 0 \end{aligned}$$

Los operadores de escalera se proponen de la siguiente forma

$$\hat{A}^\pm = (\hat{a}^\pm)^2 - \frac{g}{x^2} \quad (8)$$

en donde aparecen los operadores de ascenso  $\hat{a}^+$  y descenso  $\hat{a}^-$  del oscilador armónico

$$\hat{a}^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \mp \frac{d}{dx} + x \right) \quad (9)$$

Podemos introducir (9) en (8) para tener la forma explícita de  $\hat{A}^\pm$  como operadores diferenciales de segundo orden:

$$\hat{A}^+ = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - x \frac{d}{dx} + \frac{1}{2} (x^2 - 1) - \frac{g}{x^2} \quad (10)$$

$$\hat{A}^- = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + x \frac{d}{dx} + \frac{1}{2} (x^2 + 1) - \frac{g}{x^2} \quad (11)$$

Los operadores  $\hat{A}^\pm$  tienen las siguientes propiedades:

$$[\hat{A}^-, \hat{A}^+] = \hat{H}_N \quad (12)$$

$$[\hat{H}_N, \hat{A}^+] = \hat{A}^+ \quad (13)$$

$$[\hat{H}_N, \hat{A}^-] = -\hat{A}^- \quad (14)$$

Son precisamente las propiedades (13) y (14) las que aseguran que  $\hat{A}^+$  es un operador de ascenso y que  $\hat{A}^-$  es de descenso, respectivamente, pues

$$\hat{A}^+ \psi_n(x) = c_{n+1} \psi_{n+1}(x) \quad (15)$$

$$\hat{A}^- \psi_n(x) = c_{n-1} \psi_{n-1}(x) \quad (16)$$

siendo  $\psi_n(x)$  una solución de (2) correspondiente a la energía  $E_n$ . Las propiedades (13) y (14) garantizan que  $\psi_{n+1}(x)$  y  $\psi_{n-1}(x)$  también son soluciones de (2).

### 3. Nuestro método de solución

Como hemos mencionado, los operadores de escalera del potencial de Nagiyev son operadores diferenciales de segundo orden, como se puede ver en las formas (10) y (11). Ahora vamos a demostrar que se pueden reducir a operadores diferenciales de primer orden, si usamos la ecuación de Schrodinger (2) con el potencial (7), en la forma

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} &= 2[V(x) - E_n] \psi_n \\ &= 2 \left( \frac{1}{2}x^2 + \frac{g}{x^2} - E_n \right) \psi_n \end{aligned} \quad (17)$$

Si aplicamos los operadores (10) y (11) a la función  $\psi_n(x)$  podemos escribir

$$\begin{aligned} \hat{A}^+ \psi_n &= -x \frac{d\psi_n}{dx} + \left( x^2 - E_n - \frac{1}{2} \right) \psi_n \\ &= c_{n+1} \psi_{n+1}(x) \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned}\widehat{A}^- \psi_n &= x \frac{d\psi_n}{dx} + \left(x^2 - E_n + \frac{1}{2}\right) \psi_n \\ &= c_{n-1} \psi_{n-1}(x) \quad (19)\end{aligned}$$

La expresiones (15) y (18) muestran un mecanismo que nos permite construir la función de onda  $\psi_{n+1}(x)$  por medio de un operador diferencial de primer orden, a diferencia del operador de ascenso (10) el cual es de segundo orden. El ahorro en la cantidad de cálculos es considerable, pues siguiendo el procedimiento usual de crear la función de onda  $\psi_n(x)$  a partir de la función del estado base  $\psi_0(x)$  de acuerdo a

$$\psi_{n+1}(x) = \left(\widehat{A}^+\right)^n \psi_0(x)$$

tendríamos que realizar  $2n$  derivadas usando (10), mientras que con (18) sólo serían  $n$  derivadas, como lo vamos a hacer a continuación. Una restricción de (18) y (19) es que sólo son válidas para soluciones  $\psi_n(x)$  de la ecuación de Schrodinger. A continuación calculamos  $\psi_0(x)$  con (19), con la hipótesis de que es la función de onda correspondiente al estado de mínima energía. La afirmación de que existe una energía mínima se basa en el hecho de que el potencial dá lugar a una fuerza que obliga a la partícula cuántica a moverse en una región

$$0 < x < \infty,$$

es decir, está confinada. Lo anterior nos lleva a la condición

$$\widehat{A}^- \psi_0 = 0 \quad (20)$$

que por (19) se convierte en la ecuación diferencial

$$x \frac{d\psi_0}{dx} + \left(x^2 - E_0 + \frac{1}{2}\right) \psi_0 = 0$$

la cual se resuelve por separación de variables para llegar a

$$\psi_0(x) = x^{E_0 - \frac{1}{2}} e^{-x^2/2} \quad (21)$$

La función (21) satisface automáticamente las condiciones de frontera. A continuación calculamos la derivada de la función (21) por ser necesaria para construir  $\psi_0(x)$  y todas las demás funciones  $\psi_n(x)$ . El resultado es

$$\frac{d\psi_0}{dx} = \left[ -\frac{E_0 - \frac{1}{2}}{x^2} - 1 + \left(\frac{E_0 - \frac{1}{2}}{x} - x\right)^2 \right] \psi_0 \quad (22)$$

Con (21) iniciamos la escalera de estados cuánticos:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= -x \frac{d\psi_0}{dx} + \left(x^2 - E_1 - \frac{1}{2}\right) \psi_0 \\ &= C_1 \psi_0(x) L_1^d(x^2) \\ \psi_2(x) &= -x \frac{d\psi_1}{dx} + \left(x^2 - E_2 - \frac{1}{2}\right) \psi_1 \\ &= C_2 \psi_0(x) L_2^d(x^2) \\ &\dots \\ \psi_n(x) &= -x \frac{d\psi_{n-1}}{dx} + \left(x^2 - E_{n-1} - \frac{1}{2}\right) \psi_{n-1} \\ &= C_n \psi_0(x) L_n^d(x^2) \quad (23)\end{aligned}$$

En la expresiones (23)  $L_n^d(x^2)$  es el polinomio de Laguerre de grado  $n$  y  $C_n$  es una constante de normalización sujeta a la condición

$$\int_0^\infty |\psi_n(x)|^2 dx = C_n^2 \int_0^\infty |\psi_0(x) L_n^d(x^2)|^2 dx = 1 \quad (24)$$

La condición (24) es absolutamente necesaria para la correcta interpretación probabilística de la mecánica cuántica.

#### 4. La densidad de probabilidad

Entre los postulados de la mecánica cuántica está la identificación de las variables físicas con operadores hermíticos. Así, si  $q$  es una cantidad física (energía, momento, posición,...), entonces se le asocia un operador hermítico que representamos con el símbolo  $\widehat{Q}$ . La densidad de probabilidad es precisamente

$$\rho(x) = |\psi_n(x)|^2 = \psi_n^*(x) \psi_n(x)$$

El valor promedio o valor esperado de la variable física  $q$  debe especificarse con cuidado pues es su operador el que debe entrar en los cálculos. La manera que concuerda con los experimentos es la siguiente

$$\langle \widehat{Q} \rangle = \int_a^b \psi_n^*(x) \widehat{Q} \psi_n(x) dx$$

Para el oscilador isotónico de este trabajo el valor esperado de  $q$  es

$$\langle \widehat{Q} \rangle = \int_a^b \psi_0(x) L_n^d(x^2) \widehat{Q} \psi_0(x) L_n^d(x^2) dx$$

Introduciendo la forma específica de  $\psi_0(x)$  según (21)

$$\begin{aligned}\langle \widehat{Q} \rangle &= \int_a^b x^{E_0 - \frac{1}{2}} e^{-x^2/2} L_n^d(x^2) \\ &\widehat{Q} x^{E_0 - \frac{1}{2}} e^{-x^2/2} L_n^d(x^2) dx \quad (25)\end{aligned}$$



Esta fórmula para el valor esperado de una cantidad física de una partícula confinada por un potencial isotónico es el objetivo de este trabajo. Con (25) podemos calcular todos los valores que predice la mecánica cuántica para este sistema. Para una aplicación de (25) hemos elegido la posición  $x$ . En este caso el operador asociado a la posición es la misma variable  $x$ . Así, la posición más probable de la partícula en el estado  $n$  es la integral

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_0^{\infty} x^{2E_0} e^{-x^2} [L_n^d(x^2)]^2 dx \quad (26)$$

Por ejemplo, en el estado base  $n = 0$ ,  $L_0^d(x^2) = 1$ . Entonces el valor esperado de la posición de la partícula es

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_0^{\infty} x^{2E_0} e^{-x^2} dx$$

## 5. Conclusiones

En este trabajo hemos realizado dos contribuciones que creemos son originales: la primera es el método de solución por operadores diferenciales de primer orden, el cual simplifica bastante los cálculos de las funciones de onda, y que puede ser aplicado a otros sistemas cuánticos. La segunda consiste en dar una expresión exacta para calcular los valores más probables de la posición  $x$  de la partícula en el estado cuántico  $n$ . Nuestro principal interés es en el tema de soluciones exactas de la ecuación de Schrodinger, y este trabajo se encuadra en él, aunque esperamos que nuestra contribución tenga alguna utilidad práctica.

## Referencias

- [1] M. D. Fayer, Elements of Quantum Mechanics, New York, 2001
- [2] S. M. Nagiyev et al, On dynamical symmetry group of the relativistic linear singular oscillator, arXiv:math-ph/0608057v2 28 Sep 2006.
- [3] P. Camiz et al, Exact solution of a time dependent quantal harmonic oscillatos with a singular perturbation, Journal of Mathematical Physics 12 (1971) 2040.