

Determinación de energías de ligadura y funciones de onda para estados resonantes

Autor: Franco Gerda

Director: Rodolfo M. Id Betan

1. Introducción

Cualquier sistema cuántico se lo puede encontrar, experimentalmente, tanto en un estado ligado estacionario o en un estado de dispersión, es decir, en un estado del espectro continuo. En otras palabras, podemos determinar experimentalmente el espectro continuo o discreto del sistema. Los estados de resonancia (estado cuasi-estacionarios), poseen un tiempo de vida definido, esto es, decaen. En experimentos de dispersión no podemos observarlo directamente, en su lugar vemos al espectro continuo de decaimiento. Entonces, en los experimentos de dispersión las resonancias se manifiestan no directamente, sino que a través de las características de las propiedades de los estados de dispersión, digamos, la Matriz-S o la sección eficaz.

La Matriz-S nos da la relación del estado anterior y posterior de un sistema físico atravesando un proceso de dispersión.

El estado de resonancia cuántica es, en muchos libros, descripto como una singularidad de la Matriz-S, se puede mostrar [2] que esta definición es equivalente a resolver la ecuación de Schrödinger estacionaria bajo ciertas condiciones de contorno. En particular, serán las planteadas en este trabajo.

2. Método de trabajo

Nuestro objetivo es resolver la ecuación de Schrödinger para un potencial pozo cuadrado, de valor V_0 y radio a . Ésta ecuación tiene la forma,

$$-\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}V(x)\right)\Psi(x) = \frac{2\mu}{\hbar^2}E\Psi(x) \quad (1)$$

donde

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } |x| < a, \\ 0 & \text{si } |x| > a. \end{cases} \quad (2)$$

Proponemos la siguiente solución, considerando $\beta = 2\mu/\hbar^2$, $\rho = \sqrt{-\beta E}$, $\kappa = \sqrt{\beta(V_0 + E)}$, con $-V_0 < E < 0$, donde $V_0 > 0$.

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{\rho x} & \text{si } x < -a, \\ Be^{i\kappa x} + Ce^{-i\kappa x} & \text{si } -a < x < a, \\ De^{-\rho x} & \text{si } x > a. \end{cases} \quad (3)$$

Las condiciones de contorno a satisfacer por la solución serán:

- Continuidad de la función en $x = \pm a$
- Continuidad de la derivada primera en $x = \pm a$.

Entonces, si consideramos la derivada

$$\Psi'(x) = \begin{cases} \rho A e^{\rho x} & \text{si } x < -a, \\ i\kappa B e^{i\kappa x} - i\kappa C e^{-i\kappa x} & \text{si } -a < x < a, \\ -\rho D e^{-\rho x} & \text{si } x > a. \end{cases} \quad (4)$$

Aplicando las condiciones de contorno

$$x = -a \rightarrow \begin{cases} A e^{-\rho a} = B e^{-i\kappa a} + C e^{i\kappa a} & \text{(i),} \\ \rho A e^{-\rho a} = i\kappa B e^{-i\kappa a} + i\kappa C e^{i\kappa a} & \text{(ii)} \end{cases} \quad (5)$$

$$x = a \rightarrow \begin{cases} B e^{i\kappa a} + C e^{-i\kappa a} = D e^{-\rho a} & \text{(iii),} \\ i\kappa B e^{i\kappa a} - i\kappa C e^{-i\kappa a} = -\rho D e^{-\rho a} & \text{(iv)} \end{cases} \quad (6)$$

Al aplicar las condiciones de contorno dadas, se encuentran dos clases de soluciones, las pares e impares. Se elige este nombre pues cada una nos lleva a una función de su respectivo tipo. Para el caso de las soluciones pares, resulta $A = D = 1$, $B = C = e^{-\rho_n a} / 2 \cos(\kappa_n a)$, y la función queda

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{\rho_n x} & x < -a \\ \frac{e^{-\rho_n a}}{\cos(\kappa_n a)} \cos(\kappa_n x) & -a < x < a \\ e^{-\rho_n x} & x > a, \end{cases} \quad (7)$$

donde ρ_n y κ_n se relacionan entre sí de la forma

$$\rho_n = \kappa_n \tan(\kappa_n a), \quad (8)$$

donde cada $n = 1, 2, \dots$ corresponde a un estado ligado.

Análogamente, para las soluciones impares, resulta $A = -D = 1$, $B = -C = \frac{-e^{-\rho_n a}}{2i \sin(\kappa_n a)}$, y la función queda

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{\rho_n x} & x < -a \\ -\frac{e^{-\rho_n a}}{\sin(\kappa_n a)} \sin(\kappa_n x) & -a < x < a \\ -e^{-\rho_n x} & x > a. \end{cases} \quad (9)$$

Esta vez, ρ_n y κ_n se relacionan como

$$-\rho_n = \kappa_n \cotan(\kappa_n a), \quad (10)$$

nuevamente, cada $n = 1, 2, \dots$ representa a un estado ligado distinto.

Sin embargo, aún no se ha completado la solución. Se necesita averiguar los valores de energía de los estados ligados. Para eso se deben encontrar los valores para los que se cumplen (8) y (10). Dado que estas ecuaciones no tienen una resolución analítica se debe recurrir a métodos numéricos. Para ello se utiliza el software utilitario *Mathematica*, en particular, el comando **FindRoot**. Vale aclarar que para hallar estos resultados, para ser más directos y evitar errores sistemáticos, volvemos a las formas de $\rho_n(E)$ y $\kappa_n(E)$.

Dado que **FindRoot** requiere de una semilla para obtener un resultado, más aún en este caso, en el que tenemos varias soluciones, se debe hallar alguna forma de encontrarlas. Para ésto se recurre a un método gráfico donde primero se grafica $\rho(E)$ y $\kappa_n(E) \cotan(\kappa_n(E)a)$ y se obtienen gráficos similares a los de las figuras (1a) y (1b).

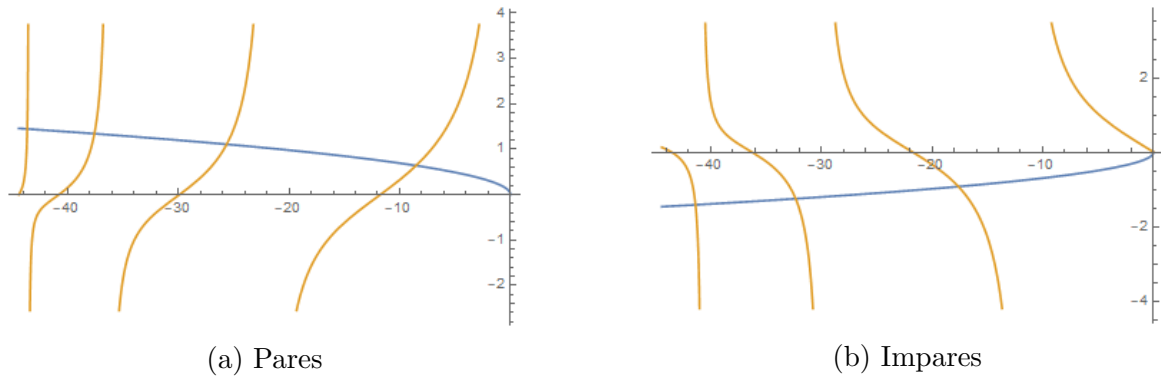


Figura 1: Gráficas para poder hallar los valores de energía de los estados ligados con los valores $V_0 = 44,42 \text{ MeV}$ y radio $a = 7,52474 \text{ fm}$

Función correspondiente	número de estado	Energía
Par	1	-43,65
Impar	2	-41,376
Par	3	-37,586
Impar	4	-32,32
Par	5	-25,63
Impar	6	-17,6
Par	7	-8,52

Cuadro 1: Valores de energía posibles hallados para $V_0 = 44,42$ y $a = 7,52474$.

Se visualizan las intersecciones entre las dos funciones y luego se usan como las semillas para el método. Una vez encontradas, solamente queda utilizar los parámetros para escribir la función y luego graficarla.

El análisis de este proyecto consiste en estudiar de manera cualitativa el comportamiento de nuestra función de onda hallada según el estado ligado que usemos para escribirla. También se variará el valor del potencial y del radio para poder visualizar que es lo que sucede con los estados ligados y las funciones asociadas a ellos.

3. Resultados

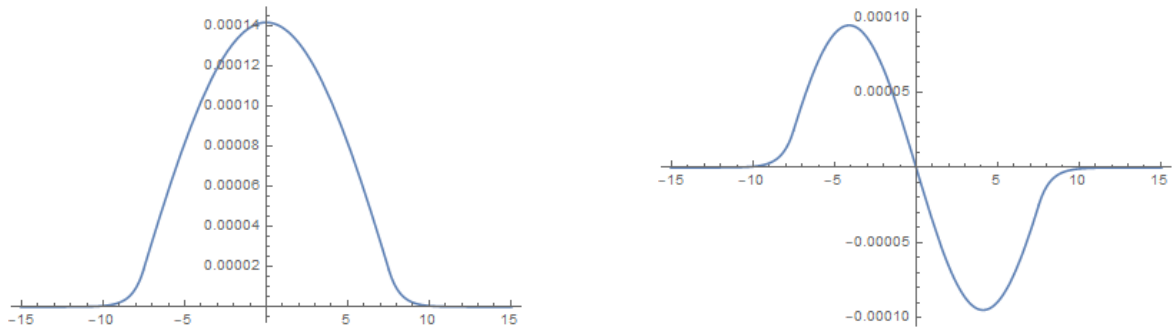
Para un primer análisis de los resultados, usaremos los valores¹ $V_0 = 44,42 \text{ MeV}$, $a = 7,52474 \text{ fm}$ y $\beta = 2\mu/\hbar^2 = 0,04801395461$

Para los valores indicados de potencial y radio se encontraron 7 estados ligados, de los cuales 3 se corresponden a la función de onda impar y 4 a la par. Se puede observar que a cada estado le corresponde una cantidad distinta de nodos, siendo los de mayor energía aquellos que mayor cantidad tienen.

Resulta interesante observar que, a medida que se disminuye el potencial, la cantidad de estados ligados disminuye. Si disminuimos el valor de nuestro potencial a $V_0 = 30 \text{ MeV}$ ya se puede observar la pérdida de un estado ligado. Si se continúa disminuyendo hasta $V_0 = 5 \text{ MeV}$ se visualiza que solo quedan tres estados ligados y, para encontrarse con un único estado ligado basta con utilizar un valor de $V_0 = 0,5 \text{ MeV}$.

¹En las próximas secciones se hablará del significado físico de éstos valores

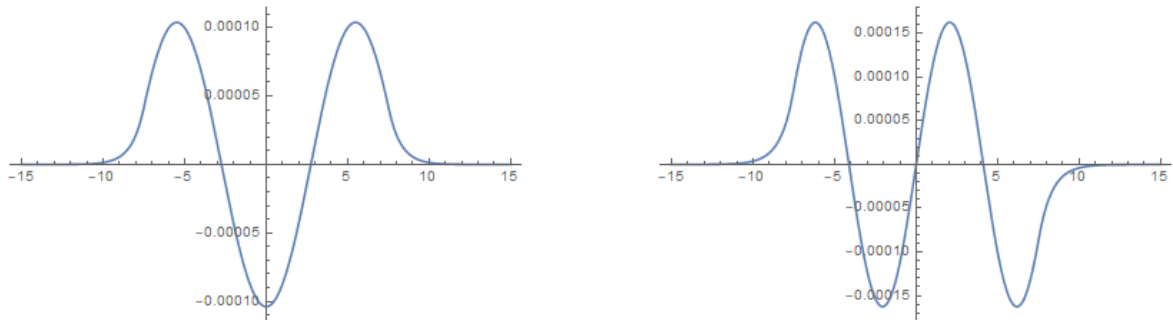
4. Discusión



(a) $E = -43,65$ MeV. Primer estado fundamental, (b) $E = -41,376$ MeV. Segundo estado, función impar.

Figura 2: Gráficas de las funciones de onda para los valores de energía de los estados ligados para un potencial de $V_0 = 44,42$ MeV y radio $a = 7,52474$ fm.

La razón de ser de este trabajo es visualizar, de manera numérica, que es lo que ocurre con los estados muy debilmente ligados. Los resultados utilizados con los primeros valores de potencial y radio se corresponden a neutrones que se acercan a núcleos de ^{209}Pb . Si se observan las figuras (2), (3) y (4) se puede visualizar como, para las ondas mas energéticas, entran a la región clásicamente prohibidas, es decir, a la zona exterior a nuestro potencial.



(a) $E = -37,586$ MeV. Tercer estado, función par. (b) $E = -32,32$ MeV. Cuarto estado, función impar.

Figura 3: Gráficas de las funciones de onda para los valores de energía de los estados ligados para un potencial de $V_0 = 44,42$ MeV y radio $a = 7,52474$ fm.

Si se observa la distribución de las áreas de las gráficas podemos observar un cierto comportamiento del nucleón en los distintos casos. Por ejemplo, en el estado fundamental se observa una preferencia a mantenerse cerca del centro de una manera muy simétrica. Por otro lado, cuando estamos en otros estados nos encontramos con distribuciones bastante distintas. En los estados correspondientes a las funciones impares, observamos que la función está distribuida en ambos lados del eje de las ordenadas, esto puede dar pistas sobre la forma de la interacción del nucleón con el núcleo.

Las funciones de onda pares, al igual que el estado fundamental, muestran siempre una distribución mayor en el centro del potencial, lo cual muestra una fuerte atracción, y a veces repulsión, de nuestra partícula hacia nuestro objetivo.

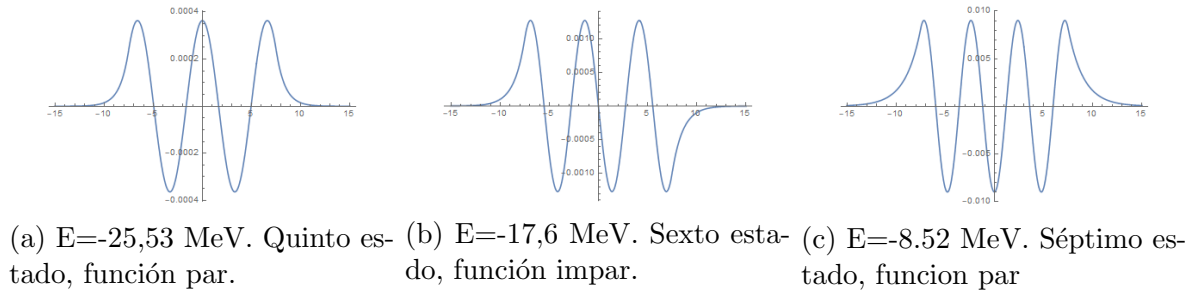


Figura 4: Gráficas de las funciones de onda para los valores de energía de los estados ligados para un potencial de $V_0 = 44.42$ MeV y radio $a = 7.52474$ fm.

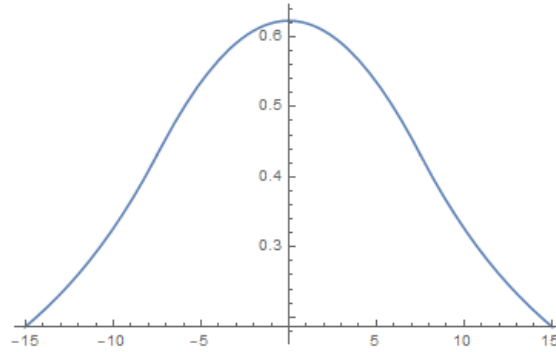


Figura 5: Función de onda para un potencial con un único nodo. $V_0 = 0.5$ MeV y $a = 7.52474$ fm

La figura (5) muestra como, para el caso de un potencial con un único nodo, la función muestra un ingreso mayor en la región clásicamente prohibida, comparada a la de la figura (2a).

5. Conclusiones

Este trabajo forma parte de un proyecto dividido en dos partes. En la otra parte se realiza un estudio mas detallado de algunos resultados relacionados con valores complejos utilizando el formalismo de la mecánica cuántica.

Una posible aplicación de este resultado es en el estudio del decaimiento radiactivo con potenciales fenomenológicos, además una extensión natural de este proyecto es realizar un análisis similar para sistemas con momento angular diferente de cero

Referencias

- [1] V. I. Kukulin, V. M. Krasnopol'sky, J. Horáček. *Theory of Resonances*. Kluwer Academic Publishers, 1988.
- [2] N. Hatano, H. Nakamura, T. Petrosky. *Definition and compilation of the Resonant state in quantum mechanics*.
- [3] S-Matrix
<https://en.wikipedia.org/wiki/S-matrix>