Capítulo 6

Potencial central

6.1. Potenciales centrales. Ecuaciones radiales

Si el Hamiltoniano de una partícula es

$$H = \frac{1}{2M}\widehat{\mathbf{p}}^2 + V(|\mathbf{r}|) \;,$$

entonces $[H, \widehat{\mathbf{L}}] = 0$. Si ψ es autofunción de H al autovalor E, sean ψ_ℓ $(\ell = 0, 1, 2, \cdots)$ las proyecciones ortogonales de ψ al autoespacio $\mathcal{E}_\ell$ de $\widehat{\mathbf{L}}^2$ asociado al autovalor $\hbar^2\ell(\ell+1)$. Ya que $H\psi_\ell \in \mathcal{E}_\ell$, se tiene

$$H\psi_\ell = E\psi_\ell \;.$$

Usando (5.22), se tiene

$$\left(\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2}{2Mr^2}\ell(\ell+1) + V(r)\right\}\psi_\ell\right)(r, \theta, \phi) = E\psi_\ell(r, \theta, \phi) \;.$$

Pero

$$\psi_\ell = \sum_{m=-\ell}^{\ell} f_{\ell,m} Y_\ell^m$$

donde

$$f_{\ell,m}(r) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin(\theta)\overline{Y_\ell^m(\theta, \phi)}\psi_\ell(r, \theta, \phi)$$

es una función radial y

$$\int_0^\infty dr r^2 |f_{\ell,m}(r)|^2 \;<\; \infty \;.$$

Se sigue entonces que para $m = -\ell, -\ell+1, \cdots, \ell-1, \ell$,

$$\left(\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{\hbar^2}{2Mr^2}\ell(\ell+1) + V(r)\right\} f_{\ell,m}\right)(r) = E f_{\ell,m}(r) \;,$$

o sea que $f_{\ell,m}$ es una solución de la ecuación de Schrödinger radial

$$H_\ell R = ER \;, \tag{6.1}$$

donde el operador radial H_ℓ es

$$H_\ell = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{\hbar^2}{2Mr^2}\ell(\ell+1) + V(r) \ , \tag{6.2}$$

actuando sobre $L^2([0,\infty); r^2 dr)$.

Inversamente, si R_ℓ es una solución de la ecuación radial (6.1) para algún ℓ al autovalor E_ℓ de H_ℓ con

$$\int_0^\infty dr r^2 |R_\ell(r)|^2 < \infty \ ,$$

entonces

$$\psi_{\ell,m}(r,\theta,\phi) = R_\ell(r) Y_\ell^m(\theta,\phi) \ , \ m = -\ell, -\ell+1, \cdots, \ell-1, \ell \ ,$$

son $2\ell+1$ soluciones dos-a-dos ortogonales de la ecuación de Schrödinger estacionaria para H al autovalor E_ℓ. El problema de autovalores (i.e, autoenergías) de H se reduce entonces al problema de autovalores para los H_ℓ. En general, puede ocurrir que para $\ell \neq \ell'$, H_ℓ y $H_{\ell'}$ tengan un autovalor común.

6.1.1. El problema radial

El problema radial (6.1), puede reescribise

$$R'' + 2r^{-1}R - U_\ell R = -\epsilon R \ ,$$

donde $\epsilon = \frac{2M}{\hbar^2}E$ y

$$U_\ell(r) = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2M}{\hbar^2}V(r)$$

que actua como potencial efectivo dependiente de ℓ. El primer sumando, que es un término centrífugo, es siempre repulsivo para $\ell \geq 1$. Introduciendo la función $u(r) = rR(r)$ [1] , esto es equivalente a la llamada ecuación radial reducida

$$u'' = (U_\ell - \epsilon)u \ , \ \ u(0) = 0 \ . \tag{6.3}$$

El lector debe notar que los autovalores E de la ecuación radial (6.1) están dados por aquellos de la ecuación radial reducida (6.3) ϵ por la relación $E = \hbar^2\epsilon/(2M)$. Además, la ecuación radial reducida es formalmente análoga a una ecuación de Schrödinger unidimensional ($-\infty \leq x \leq \infty$) para una partícula en el potencial

$$\widetilde{U}_\ell(x) = \begin{cases} \infty & , \quad \text{si } x \leq 0 \\ U_\ell(x) & , \quad \text{si } x > 0 \end{cases}$$

que la confina a moverse en la semirecta positiva y fuerza la condición $u(0) = 0$. Los resultados unidimensionales pueden asi trasladarse a la ecuación radial.

[1] $f(r) \mapsto rf(r)$ es una transformación unitaria de $L^2([0,\infty); r^2 dr)$ en $L^2([0,\infty); dr)$.

- Los autovalores de la ecuación radial (6.1) o de la ecuación radial reducida (6.3) cuando existen, son simples y no mayores a $\lim_{r\to\infty} V(r)$. Las correspondientes autofunciones pueden elegirse a valores reales.

- Para $\ell \in \{0, 1, 2, \cdots\}$ enumere los autovalores aislados de H_ℓ (o sea de la ecuación radial (6.1)) $E_{n,\ell}$, con $n \in \{1, 2, \cdots\}$, de tal modo que

$$E_{1,\ell} < E_{2,\ell} < E_{3,\ell} < \cdots ;$$

entonces: la autofunción radial reducida $u_{n,\ell}$ asociada a $\epsilon_{n,\ell}$ tiene n ceros en $[0, \infty)$ (incluyendo el cero en $r = 0$) y correspondientemente, la autofunción radial $R_{n,\ell}$ tiene $n - 1$ ceros en $[0, \infty)$. Se tiene

$$E_{n,\ell_1} \leq E_{n,\ell_2} \ , \quad \text{si } \ell_1 < \ell_2.$$

Por lo tanto, a ℓ fijo, los autovalores están ordenados de menor a mayor por el primer índice que indica la cantidad de nodos de la correspondiente autofunción radial reducida. Y, si este primer índice es fijo, los autovalores están ordenados de menor a mayor por el segundo índice ℓ. Cuando el Laplaciano del potencial es de signo definido, se puede decir algo sobre el ordenamiento de los autovalores con $n + \ell$ fijo. Cuando $(\Delta V)(\mathbf{r}) \geq 0$ (respectivamente ≤ 0) para todo $\mathbf{r} \neq \mathbf{0}$, se tiene (Baumgartner, Grosse y Martin)

$$E_{n,\ell} \ \geq \ (\text{respectivamente} \leq) \ E_{n-1,\ell+1} \ .$$ [2]

En general, no es posible establecer una relación entre $E_{n,\ell}$ y $E_{n-1,\ell+1}$ y nada prohibe que $E_{n_1,\ell_1} = E_{n_2,\ell_2}$ ocurra para $\ell_1 \neq \ell_2$. Veremos que en los casos del potencial Coulombiano (atractivo) o armónico, esto pasa sistemáticamente y conduce a una alta degeneración de los autovalores resultantes para H (esto tiene una explicación coherente en términos de la existencia de constantes de movimiento). Sin embargo, en general y salvo en casos (llamados accidentales) $E_{n_1,\ell_1} = E_{n_2,\ell_2}$ no ocurre para $\ell_1 \neq \ell_2$, y los autovalores de H son entonces, genericamente, de multiplicidad $2\ell + 1$.

- Hay una serie de cotas sobre el número N_ℓ de autovalores de H_ℓ, incluyendo multiplicidades, cuando el potencial $V(r)$ decae rapidamente en el infinito. Mencionamos solamente las siguientes dos:

  - (Bargmann) Si $\int_0^\infty r \mid U(r) \mid \, dr$ y $\int_0^\infty r^2 \mid U(r) \mid \, dr$ existen, entonces

  $$N_\ell \leq \frac{1}{2\ell + 1} \int_0^\infty r \mid U_-(r) \mid \, dr \ , \quad U_-(r) = \min\{U(r), 0\} \ .$$

  Observe que, bajo estas fuertes condiciones de decaimiento, hay, por lo tanto, un valor maximal ℓ_{max} de ℓ por encima del cual H_ℓ no tiene autovalores discretos. Este valor está dado por

  $$\ell_{max} = \min \left\{ \ell : \ \ell > -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \int_0^\infty r \mid U_-(r) \mid \, dr \right\} \ .$$

  Para estos potenciales, hay una cota superior al módulo del momento angular de una autoestado.

[2] Notese que $\Delta r^{-1} = 0$ fuera de $r = 0$, con lo cual en el caso Coulombiano $V(\mathbf{r}) \propto r^{-1}$ esperamos que los autovalores del problema radial dependan unicamente de $n + \ell$.

- (Calogero) Si $V(r) \leq 0$ y monotono creciente, entonces
$$N_\ell \leq \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \sqrt{-U(r)}\, dr \ ,$$
para todo ℓ.

6.2. Potencial constante; funciones de Bessel esféricas

Si el potencial central V es constante e igual a V_o en algún intervalo $I \subset [0, \infty)$, se tiene $U_\ell(r) = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + U_o$ en I y la ecuación radial es
$$R'' + (2/r)R' + \left(\epsilon - U_o - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) R = 0 \ , \quad \text{en } I \ .$$
Si $\epsilon = U_o$ las dos soluciones linealmente independientes de esta ecuación son r^ℓ y $r^{-(\ell+1)}$. Cuando $\epsilon \neq U_o$ e introduciendo la variable
$$z = \begin{cases} \sqrt{\epsilon - U_o}\, r & , \quad \text{si } \epsilon > U_o \\ i\sqrt{U_o - \epsilon}\, r & , \quad \text{si } \epsilon < U_o \end{cases} \ ,$$
y la función Λ de la variable real z por $\Lambda(z) := R(z/\sqrt{\epsilon - U_o})$ cuando $\epsilon > U_o$ o de la variable imaginaria z por $\Lambda(z) := R(z/i\sqrt{U_o - \epsilon})$ cuando $\epsilon < U_o$ se obtiene, en ambos casos, la ecuación diferencial esférica de Bessel[3]
$$\Lambda'' + 2z^{-1}\Lambda' + \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} \right) \Lambda = 0 \ .$$
Las funciones esféricas de Bessel j_ℓ, y de Weber o Neumann $y_\ell = (-)^{\ell+1} j_{-\ell-1}$ son dos soluciones linealmente independientes. Para las propiedades de estas funciones, vease el §10 de [A&S]. En términos de las funciones de Bessel y de Weber comunes, se tiene
$$j_\ell(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, J_{\ell+\frac{1}{2}}(z) \ , \quad y_\ell(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, Y_{\ell+\frac{1}{2}}(z) \ .$$
El par de funciones esféricas de Hankel
$$h_\ell^{(1)}(z) = j_\ell(z) + i y_\ell(z) \ , \quad h_\ell^{(2)}(z) = j_\ell(z) - i y_\ell(z) \ ,$$
es otro sistema fundamental de soluciones. Para potenciales centrales constantes a trozos, los pares (j_ℓ, y_ℓ) y $(h_\ell^{(1)}, h_\ell^{(2)})$ juegan el mismo papel que los pares $(\cos(z), \sin(z))$ y (e^{iz}, e^{-iz}) para potenciales unidimensionales constantes a trozos. Es de sumo interes el comportamiento asintótico de estas funciones dado por:
$$j_\ell(z) \asymp \frac{z^\ell}{(2\ell+1)!!} \ , \quad y_\ell(z) \asymp \frac{-(2\ell-1)!!}{z^{\ell+1}} \ , \quad \text{para } |z| \to 0 \ ,$$

[3] La transformación $\Lambda(z) := z^{-1/2} f(z)$ conduce a la ec. diferencial de Bessel $z^2 f''(z) + z f'(z) + \left(z^2 - \left[\ell + \frac{1}{2}\right]^2 \right) f = 0$ de grado $\ell + 1/2$.

y para $|z| \to \infty$ con $|arg(z)| < \pi$,

$$j_\ell(z) \asymp z^{-1} \cos\left(z - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right) \ , \ \ y_\ell(z) \asymp z^{-1} \sin\left(z - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right) \ ,$$

$$h_\ell^{(1)}(z) \asymp z^{-1} \exp\left(iz - i\frac{(\ell+1)\pi}{2}\right) \ , \ \ h_\ell^{(2)}(z) \asymp z^{-1} \exp\left(-iz + i\frac{(\ell+1)\pi}{2}\right) \ .$$

Para z real (i.e., caso $U_o < \epsilon$) las asíntotas son funciones trigonométricas atenuadas con z^{-1}; mientras que para z imaginario (i.e., caso $U_o > \epsilon$) tenemos asintoticamente funciones hiperbólicas atenuadas con $|z|^{-1}$. Observese que cuando $U_o > \epsilon$, la segunda función de Hankel $h_\ell^{(2)}$ no es integrable como función de r en el infinito, mientras la primera, $h_\ell^{(1)}$, si lo es.