

CÁLCULO DE ESTADOS LIGADOS Y RESONANCIAS POR MEDIO DEL MÉTODO RICCATI-PADÉ

Javier García; Francisco M. Fernández

¹Instituto de Investigaciones Fisicoquímica Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Dpto. de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, Calle 64 Diag. 113, CP (1900), La Plata, Buenos Aires, Argentina.

igarcia@inifta.unlp.edu.ar

RESUMEN: Aplicamos el método Riccati-Padé (RPM) al efecto Stark en el átomo de hidrógeno y a dos pozos múltiples. Logramos obtener las resonancias en el primer caso, y los estados estacionarios y resonancias en el segundo con un gran número de cifras significativas. Los resultados están de acuerdo con experiencias previas que indican que el RPM es una herramienta muy versátil que permite obtener ambos tipos de soluciones resolviendo la misma ecuación. Dichos resultados son más precisos que los que se pueden encontrar en literatura, y permitieron verificar una fórmula WKB para el efecto Stark, y refutar otra para un pozo triple.

PALABRAS CLAVE: Método Riccati-Padé, Efecto Stark, Pozos múltiples

El método Riccati-Padé (RPM) consiste en representar la derivada logarítmica regularizada de la función de onda por medio de un aproximante de Padé de orden $[M/N]$. Dicho aproximante debe cumplir la condición de que los primeros $M + N + 1$ coeficientes de su desarrollo en serie de potencias coincidan con aquellos del desarrollo de la derivada logarítmica; esto lleva a un sistema de ecuaciones que tiene solución no trivial si se anula el determinante de Hankel:

$$H_D^d(E; \lambda_i) = \begin{vmatrix} f_{d+1} & f_{d+2} & \dots & f_{D+d} \\ f_{d+2} & f_{d+3} & \dots & f_{D+d+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{d+D} & f_{d+D+1} & \dots & f_{2D+d-1} \end{vmatrix} = 0 \quad (1)$$

en donde los f_i son los coeficientes mencionados, $D = M + N$, E es la energía del sistema y λ_i son los parámetros de los cuales depende el mismo. La elección de distintos valores de $d = M - N$ permite obtener varias ecuaciones para los casos en los cuales el problema depende de uno o más parámetros. Las raíces de la ecuación (1) pueden ser encontradas por medio del método Newton-Raphson si el determinante se calcula analíticamente o por el método de la secante, si se desea calcularlo numéricamente. El empleo de la segunda opción es más eficiente y permite la posibilidad de realizar los cálculos programando código fuente, en lugar de emplear sistemas de álgebra computacional. Típicamente se observa que para valores crecientes de D las soluciones a la ecuación (1) convergen a los estados estacionarios y resonancias del problema. En varias ocasiones se ha mostrado que esta convergencia es exponencial (ver, por ejemplo, [1]).

Aplicamos el RPM al efecto Stark por medio de la separación del problema en coordenadas parabólicas cuadradas[2]. Calculamos las resonancias de varios estados para valores pequeños de la constante de fuerza $F \approx 1 \times 10^{-3}$ u.a. hasta alcanzar 10 cifras estables en la parte imaginaria. Comparamos nuestro cálculo con la fórmula WKB obtenida en [4] para el estado fundamental y obtuvimos una excelente concordancia (ver figura 1).

Además, hicimos un cálculo con teoría de perturbaciones y verificamos que la parte real de la energía calculada por ambos métodos coincide hasta la última cifra estable (la serie perturbativa es asintótica a la parte real de la energía). Dicho de otro modo, $E_{RPM} - E_{PT} = O[\text{Im}(E)]$. Todos los resultados que

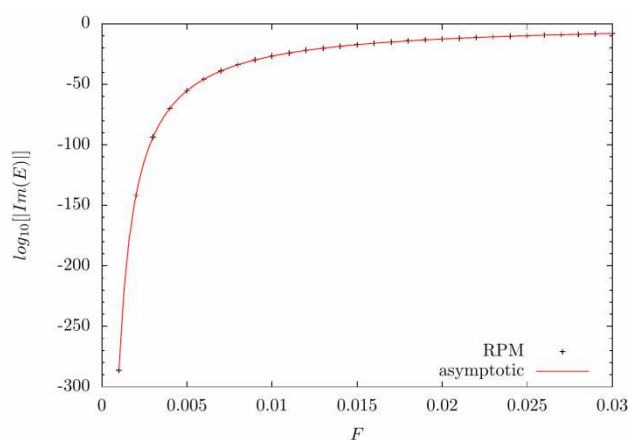


Figura 1. Parte imaginaria de la energía del estado fundamental del átomo de H en un campo eléctrico obtenida mediante RPM y la fórmula asintótica de [4].

obtuvimos coinciden hasta la última cifra estable con aquellos que se encuentran en literatura. Algunos de los resultados obtenidos fueron empleados para mostrar que un cálculo previo era erróneo [3].

Los pozos múltiples tienen la característica de poseer tanto estados ligados como resonancias (ver, por ejemplo, [4]). Nosotros trabajamos con dos ejemplos de estos potenciales: por un lado, el pozo triple dado por $V(x) = x^2 - 2g^2x^4 + g^4x^6$, y por otro, el doble pozo finito dado por $V(x) = (x^2 - 2j) \exp(-\lambda x^2) + 2j$ [5]. En ambos casos calculamos tanto los estados ligados como las resonancias con gran precisión para distintos valores de los parámetros (en algunos casos logramos obtener más de 1000 dígitos estables). Los resultados muestran que el RPM puede calcular ambos tipos de estados sin problemas, aunque converge más rápidamente cuando se calculan las resonancias. Para verificar los resultados, hicimos el mismo cálculo empleando el método variacional con la base del oscilador armónico para los estados ligados, y el método variacional con rotación compleja empleando la misma base para el caso de las resonancias. Los resultados coinciden hasta la última cifra calculada. La gran precisión con la que realizamos los cálculos nos permitió mostrar que para el pozo triple una fórmula WKB propuesta en [4] no ajusta correctamente a los resultados en el límite $g \rightarrow 0$ (figura 2)

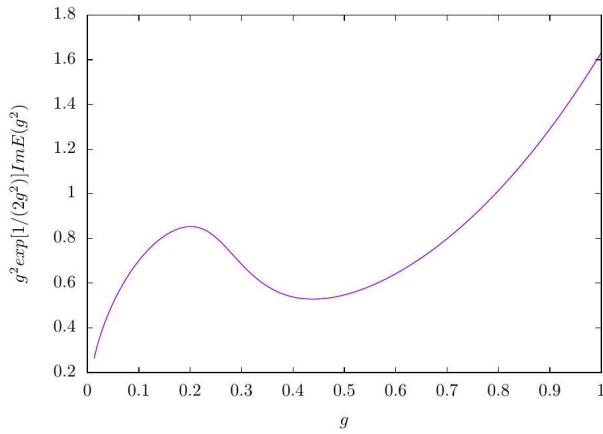


Figura 2. Cociente entre la parte imaginaria de la energía y la fórmula asintótica de literatura para el pozo triple.

Los resultados muestran que el RPM es un método sencillo y sumamente eficaz para realizar el cálculo de estados ligados y resonancias de distintos problemas. Esto se ve respaldado por la gran precisión con que logramos

realizar los cálculos. Para los dos problemas estudiados, el método conserva sus dos características más relevantes, a saber: convergencia exponencial y obtención de distintos tipos de soluciones resolviendo la misma ecuación.

REFERENCIAS

- [1] F. M. Fernández, "Direct calculation of accurate Siegert eigenvalues", *J. Phys. A: Math. Gen.* **28**, **1995**, 4043-4051
- [2] F. M. Fernández, J. Garcia: "Highly accurate calculation of the resonances in the Stark effect in hydrogen" *arXiv:1506.05797v1 [quant-ph]*
- [3] F. M. Fernández, J. Garcia: "Comment on Stark effect in neutral hydrogen by direct integration of the Hamiltonian in parabolic coordinates", *Phys. Rev. A*, **91**, **2015**, 066501
- [4] L. Benassi, V. Grecchi: "Resonances in the Stark effect and strongly asymptotic approximants", *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **1980**, **13**, 911
- [5] Trabajo en progreso.