Um estudo sobre a Supersimetria no contexto da Mecânica Quântica

Fabricio Marques do Carmo

Orientador: Prof. Dr. Adilson José da Silva

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Adilson José da Silva (USP)

Prof. Dr. Alex Gomes Dias (UFABC)

Prof. Dr. Emerson José Veloso de Passos (USP)

São Paulo 2011

FICHA CATALOGRÁFICA Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Carmo , Fabricio Marques do

Um estudo sobre a Supersimetria no contexto da Mecânica Quântica. - São Paulo, 2011.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física – Depto. de Física Matemática

Orientador: Prof. Dr. Adilson José da Silva

Área de Concentração: Física

Unitermos:1. Física; 2. Mecânica Quântica; 3. Teoria de Campos e Ondas; 4. Física Matemática; Física Teórica

USP/IF/SBI-024/2011

Ao meu pai Edson com quem tive minhas primeiras discussões filosóficas profundas sobre o Universo, assunto esse que eu viria a conhecer mais tarde com o nome de Física. Eu gostaria que, de algum modo, ele pudesse me ver agora.

À minha querida esposa Luciana, amor da minha vida, que encontrei uma certa vez, há muito tempo, na final de um torneio de damas.

Não importa onde você parou... em que momento da vida você cansou... o que importa é que sempre é possível e necessário "Recomeçar". Recomeçar é dar uma nova chance a si mesmo... é renovar as esperanças na vida e o mais importante... acreditar em você de novo... Sofreu muito nesse período? Foi aprendizado. Chorou muito? Foi limpeza da alma. Ficou com raiva das pessoas? Foi para perdoá-las um dia. Tem tanta gente esperando apenas um sorriso seu para "chegar" perto de você. Recomeçar... hoje é um bom dia para começar novos desafios. Onde você quer chegar? Ir alto... Sonhe alto... queira o melhor do melhor... pensando assim trazemos para nós aquilo que desejamos... Se pensarmos pequeno coisas pequenas teremos... Já se desejarmos fortemente o melhor e principalmente lutarmos pelo melhor, o melhor vai se instalar em nossa vida. Porque sou do tamanho daquilo que vejo, e não do tamanho da minha altura.

Carlos Drummond de Andrade, "Recomeçar"

Agradecimentos

Ao Professor Adilson José da Silva, orientador, cuja fantástica receptividade, disposição, habilidade didática e força bruta para resolver problemas, se mostraram ímpares desde o princípio;

Aos meus amigos do Instituto de Física, Claudio Padilha, Felipe Villaverde, Ronaldo Batista, Henrique Xavier, Roberto Maluf, Enrique Alberto Gallegos Collado, Kazuo Teramoto e Osvaldo Negrini que estiveram sempre dispostos a ajudar de forma relevante na resolução de problemas, em geral, totalmente não relacionados com seja lá o que for que eles faziam;

Aos meus outros amigos e professores favoritos não citados acima, pois a lista de nomes é, felizmente, extensa demais para ser aqui colocada;

Ao meu pai Edson, à minha mãe Ely e ao meu irmão Fabio, que me ensinaram a ser quem eu sou;

À minha querida esposa Luciana, pelo extremamente relevante e enorme (com ênfase em enorme) amor que fez e faz toda a diferença em minha vida, que me faz feliz, e;

Ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), pelo apoio concedido durante o período de realização deste trabalho. <u>ii</u>_____

RESUMO

Neste trabalho apresentamos uma introdução à Supersimetria no contexto da Mecânica Quântica em 1 dimensão espacial. Para isso desenvolvemos o conceito de fatorização de hamiltonianos por meio do exemplo do oscilador harmônico simples, introduzimos o oscilador supersimétrico e, em seguida, generalizamos esses conceitos para introduzir os fundamentos da Mecânica Quântica Supersimétrica. Discutimos também a respeito de ferramentas úteis na resolução de problemas de Mecânica Quântica que estão intrinsecamente relacionadas à Supersimetria como a hierarquia de hamiltonianos e a invariância de forma. Apresentamos dois métodos de aproximação que serão particularmente úteis; o bem conhecido Método Variacional e também a Teoria de Perturbações Logarítmica, esta última intimamente relacionada com os conceitos de superpotenciais e hierarquia de hamiltonianos. Por fim, apresentamos problemas associados à superpotenciais que são monômios em potências pares da coordenada x multiplicados pela função sinal $\varepsilon(x)$, o que aparentemente constitui uma classe inédita de problemas na Mecânica Quântica Supersimétrica.

ABSTRACT

In this work we present an introduction to Supersymmetry in the context of 1-dimensional Quantum Mechanics. For that purpose we develop the concept of hamiltonians factorization using the simple harmonic oscillator as an example, we introduce the supersymmetric oscilator and, next, we generalize these concepts to introduce the fundamentals of Supersymmetric Quantum Mechanics. We also discuss useful tools to solve problems in Quantum Mechanics which are intrinsecally related to Supersymmetry as hierarchy of hamiltonians and shape invariance. We present two approximation methods which will be specially useful: the well known Variational Method and the Logarithmic Perturbation Theory, the latter being closely related to the concepts of superpotentials and hierarchy of hamiltonians. Finally, we present problems related to superpotentials which are monomials in even powers of the x coordinate multiplied by the sign function $\varepsilon(x)$, which seems to be a new class of problems in Supersymmetric Quantum Mechanics.

Índice

1 Introdução					
	1.1	O que	é Supersimetria?	1	
	1.2	A Sup	persimetria no Contexto da Mecânica Quântica	3	
2 Mecânica Quântica Supersimétrica					
	2.1	Fatori	zação de Hamiltonianos	5	
		2.1.1	Fatorização do Hamiltoniano do OHS	5	
		2.1.2	Fatorização de um Hamiltoniano Geral	6	
	2.2	Oscila	dores Harmônicos e Supersimetria	7	
		2.2.1	Osciladores Bosônico e Fermiônico	7	
		2.2.2	Oscilador Supersimétrico	10	
	2.3 Mecânica Quântica Supersimétrica				
		2.3.1	Generalização do Oscilador Supersimétrico	12	
		2.3.2	Autovalores e Auto estados de H	14	
		2.3.3	Parceiros Supersimétricos	16	
		2.3.4	Quebra da Supersimetria	20	
		2.3.5	Hierarquia de Hamiltonianos	23	
	2.4	Invari	nvariância de Forma		
		2.4.1	Potenciais Invariantes de Forma	27	
		2.4.2	Invariância de Forma e a Hierarquia de Hamiltonianos	28	

3	Mét	odos d	e Aproximação	37		
	3.1	Método Variacional				
		3.1.1	O Método Variacional	37		
		3.1.2	Parâmetros Variacionais como Coeficientes de uma Série de Funções	38		
	3.2	2 Teoria de Perturbações Logarítmica				
		3.2.1	A Teoria de Perturbações Logarítmica	42		
		3.2.2	Reparametrização de Potenciais	48		
4 Aplicações				51		
	4.1Superpotenciais do Tipo $W(x) = gx^{2n+1}$					
	4.3	4.3 Superpotencial $W(x) = g\varepsilon(x)x^2$				
		4.3.1	Buscando Soluções Analíticas da Equação de Schrödinger	56		
		4.3.2	Buscando Soluções Aproximadas pelo Método Variacional $\ .\ .$.	59		
		4.3.3	Buscando Soluções Aproximadas pela Teoria de Perturbações			
			Logarítmica	68		
5	Con	sideraç	ões Finais	73		
Re	Referências Bibliográficas 7					

1 Introdução

1.1 O que é Supersimetria?

A Supersimetria (SUSI) é uma simetria que relaciona estados bosônicos e fermiônicos. Ela foi originalmente desenvolvida no contexto da Teoria Quântica de Campos tendo sido proposta em 1966 por Miyazawa [1] como uma simetria entre mésons e bárions. Foi redescoberta no início dos anos 70 e em 1974 foi trazida à atenção da comunidade científica por meio dos trabalhos de Wess e Zumino [2]. Esses trabalhos apresentaram o que ficou conhecido como *Modelo de Wess-Zumino*, o primeiro modelo de teoria quântica de campos em (3 + 1) dimensões supersimétrico.

A SUSI surgiu como um caminho para estender o Grupo de Poincaré de modo a incluir simetrias internas. Antes isso não era permitido devido ao teorema *no-go* de Coleman-Mandula [3], que impunha uma restrição sobre essa possibilidade afirmando que a álgebra de Lie mais geral das simetrias da matriz S consistente com uma teoria quântica de campos relativística deveria conter, além dos geradores do Grupo de Poincaré (aqui denotados P_{μ} para translações no espaço-tempo e $J_{\mu\nu}$ para rotações no espaço e *boosts*), no máximo um número finito de operadores escalares B_{μ} pertencentes à álgebra de Lie de um grupo compacto. Esse obstáculo foi finalmente contornado devido a um resultado de Haag, Sohnius e Lopuszanski [4] que mostrou que, para incluir as simetrias internas, a álgebra de Lie do grupo de Poincaré deveria ser estendida para uma álgebra de Lie graduada de modo a incluir além de comutadores também *anti*-comutadores [5]. Essa álgebra estendida é então chamada *álgebra SUSI* ou simplesmente *super-álgebra*.

A relação estabelecida pela SUSI entre estados bosônicos e fermiônicos se dá por meio das transformações SUSI, cujos geradores denotamos $Q \in \overline{Q}$. A parte da superálgebra que é incluída no Grupo de Poincaré estabelecendo relações entre os geradores SUSI e os geradores das translações no espaço-tempo é da forma ¹:

$$\{Q_{\alpha}, \bar{Q}_{\dot{\beta}}\} = 2\sigma^{\mu}_{\ \alpha\dot{\beta}}P_{\mu}$$

$$\{Q_{\alpha}, Q_{\beta}\} = \{\bar{Q}_{\dot{\alpha}}, \bar{Q}_{\dot{\beta}}\} = 0$$

$$[P_{\mu}, Q_{\alpha}] = [P_{\mu}, \bar{Q}_{\dot{\alpha}}] = 0$$

(1.1)

Embora (1.1) seja apenas *parte* da super-álgebra, neste trabalho nos referiremos a conjuntos de equações desse tipo simplesmente como *super-álgebra*.

A SUSI prevê que, para cada partícula (bóson ou férmion), deve haver uma outra partícula correspondente com a mesma massa e diferindo de $\frac{1}{2}$ no valor do spin (férmion ou bóson). Essas partículas são então chamadas de *parceiras supersimétricas*. O parceiro supersimétrico do fóton, que é um bóson de spin 1 e massa de repouso nula, seria então um férmion de spin $\frac{1}{2}$ com massa de repouso nula ao qual chamamos *fotino*. O parceiro supersimétrico do elétron, que é um férmion de spin $\frac{1}{2}$ e massa m_e , seria, por sua vez, um bóson de spin *zero* com massa m_e ao qual chamamos *s-elétron* (*scalar-electron*). Como os parceiros supersimétricos das partículas do modelo padrão, contrariando a expectativa, jamais foram observados, então, se a SUSI for uma simetria da natureza, ela deva ter sido *quebrada* em algum momento. E daí vem o interesse em estudar a quebra da SUSI a medida que a temperatura do Universo diminuiu.

¹Aqui, uma vez que este trabalho se refere à Mecânica Quântica, não nos preocuparemos em detalhar assuntos como *tipos de índice, spinores de Majorana, transformações SUSI*, etc. Para uma introdução didática do assunto ver, por exemplo, [6] ou [7].

1.2 A Supersimetria no Contexto da Mecânica Quântica

No início da década de 80, Witten [8] [9] propôs como um caminho para o entendimento da quebra da SUSI a construção de um esquema em Mecânica Quântica onde estavam presentes os principais ingredientes da SUSI. Esse esquema é o que chamamos de *Mecânica Quântica Supersimétrica* (MQ SUSI). O interesse em estudar MQ SUSI é, desde então, justificado pela simplicidade dessa formulação da SUSI em comparação com a original. Sendo mais simples esperamos que seu estudo forneça pistas relevantes para o melhor entendimento da SUSI na Teoria Quântica de Campos, em especial no que se refere à quebra da SUSI.

A super-álgebra da MQ SUSI, devidamente adaptada para o tipo de sistema que representa, tem a mesma forma da super-álgebra dada em (1.1) podendo ser escrita, por exemplo, como:

$$\{Q, Q^{\dagger}\} = 2H$$

$$\{Q, Q\} = \{Q^{\dagger}, Q^{\dagger}\} = 0$$

$$[H, Q] = [H, Q^{\dagger}] = 0$$

(1.2)

Em comparação com a SUSI original, dizemos que a MQ SUSI relaciona estados respectivamente chamados "bosônicos" e "fermiônicos". Essa nomenclatura não tem, entretanto, nada a ver com o spin de partículas sendo inteiro ou semi-inteiro (o que caracterizaria a definição de bósons e férmions) e em MQ SUSI representa, conforme veremos, apenas uma analogia.

A MQ SUSI é frequentemente chamada de *modelo de brinquedo* uma vez que, em sua concepção original, o objetivo foi fornecer ferramentas para o entendimento de algo mais profundo. Apesar disso podemos destacar inúmeras possibilidades de empregar a MQ SUSI como uma ferramenta na resolução de problemas da própria Mecânica Quântica. Um primeiro exemplo que podemos citar consiste na aplicação da MQ SUSI ao problema do oscilador harmônico simples (OHS). Uma generalização do método algébrico de resolução do OHS (aquele que utiliza operadores de criação e destruição $a^{\dagger} e a$) permite tratar outros tipos de problema e está diretamente ligada aos conceitos da MQ SUSI. Uma outra aplicação interessante consiste em empregar os métodos da MQ SUSI na resolução da equação radial do problema do átomo de hidrogênio, o que é uma opção muito mais simples do que a usual.

Nesse trabalho apresentaremos um estudo da Supersimetria no contexto da Mecânica Quântica em 1 dimensão espacial. Primeiramente apresentaremos os fundamentos da MQ SUSI, introduzindo-a por meio da fatorização de hamiltonianos em analogia com o método algébrico de resolução do OHS. Também serão apresentados métodos para a resolução de problemas em Mecânica Quântica utilizando conceitos da MQ SUSI como hierarquia de hamiltonianos e invariância de forma. Alguns métodos de aproximação que serão úteis em seguida são apresentados. Por fim, apresentamos alguns problemas para os quais utilizamos os métodos da MQ SUSI e os métodos de aproximação previamente expostos. Em especial, nos concentramos na resolução de uma classe de problemas ainda não explorada pela literatura acerca de potenciais do tipo $W(x) = g\varepsilon(x)x^{2n}$, isto é, na forma de monômios em potências pares de x multiplicados pela função sinal $\varepsilon(x)$.

2 Mecânica Quântica Supersimétrica

2.1 Fatorização de Hamiltonianos

2.1.1 Fatorização do Hamiltoniano do OHS

A fatorização do hamiltoniano do oscilador harmônico simples (OHS) consiste em tentar escrevê-lo como um produto de dois operadores de primeira ordem.

O hamiltoniano do OHS, tendo escolhido por simplicidade $\hbar = 2m = \omega = 1$, é dado por:

$$H = p^2 + x^2 \tag{2.1}$$

Sabendo que em Mecânica Quântica $[x,p] \neq 0,$ definimos:

$$a^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - ip)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + ip)$$
(2.2)

e notamos que

$$a^{\dagger}a + aa^{\dagger} = p^2 + x^2 = H$$

onde os termos contendo [x, p] são cancelados.

Sendo [x, p] = i (pois estamos usando $\hbar = 1$) e tendo definido a^{\dagger} e a em função de x e p em (2.2), encontramos que $[a, a^{\dagger}] = 1$, o que permite escrever:

$$H = a^{\dagger}a + aa^{\dagger} = a^{\dagger}a + \frac{1}{2} = aa^{\dagger} - \frac{1}{2}$$
(2.3)

ou seja, podemos redefinir o hamiltoniano a menos de um fator constante, de modo que ele seja simplesmente:

$$H = a^{\dagger}a \tag{2.4}$$

(ou, de forma análoga, podemos também redefini-lo de de modo que ele seja $H = aa^{\dagger}$).

Com isso temos o hamiltoniano do OHS fatorizado, isto é, escrito como um produto dos operadores a^{\dagger} e a.

2.1.2 Fatorização de um Hamiltoniano Geral

Inspirados pela fatorização do hamiltoniano do OHS, vamos tentar estender o método para um hamiltoniano mais geral. Para isso definimos:

$$A^{\dagger} = (W(x) - ip)$$

$$A = (W(x) + ip)$$
(2.5)

onde W(x) é uma função de x.

Vamos agora construir um hamiltoniano na mesma forma do hamiltoniano OHS dado em (2.4), ou seja:

$$H_{-} = A^{\dagger}A \tag{2.6}$$

Também podemos, e de fato vamos, construir um hamiltoniano $H_+ = AA^{\dagger}$. Substituindo (2.5) em (2.6), usando que $p = -i\frac{d}{dx}$ e sendo $W'(x) = \frac{d}{dx}W(x)$, temos:

$$H_{-} = A^{\dagger}A = (W(x) - ip) (W(x) + ip)$$

= $p^{2} + (W(x)^{2} + i[W(x), p]) = p^{2} + (W(x)^{2} - W'(x))$ (2.7)

e de forma idêntica para $H_+ = A A^\dagger,$ de modo que:

$$H_{\mp} = p^2 + \left(W(x)^2 \mp W'(x) \right)$$

o que permite definir os potenciais $V_{\mp}(x)$ dos hamiltonianos H_{\mp} como:

$$V_{\mp}(x) = W(x)^2 \mp W'(x)$$
 (2.8)

que é conhecida como equação de Riccati.

Assim, vemos que para fatorizar um hamiltoniano geral devemos, uma vez que conhecemos seu potencial V(x), resolver a equação de Riccati (2.8) para determinar a função W(x). Se isso for possível, podemos então, conforme (2.5) construir os operadores A^{\dagger} e A e com isso obter o hamiltoniano $H = A^{\dagger}A$ (e também $H = AA^{\dagger}$) na forma fatorizada.

2.2 Osciladores Harmônicos e Supersimetria

2.2.1 Osciladores Bosônico e Fermiônico

Vamos introduzir a seguir o conceito de osciladores bosônico e fermiônico. Esses conceitos serão utilizados em seguida para construir um exemplo didático do funcionamento e aplicabilidade do formalismo da SUSI à Mecânica Quântica.

O oscilador bosônico que vamos definir agora nada mais é do que o próprio oscilador harmônico simples da Mecânica Quântica. Em termos de operadores de criação e destruição, o hamiltoniano do sistema é dado por (ver (2.3)):

$$H_B = \frac{1}{2} \left(a^{\dagger} a + a a^{\dagger} \right) \tag{2.9}$$

onde a^{\dagger} e *a* são, respectivamente, os operadores de criação e destruição. Esses operadores satisfazem as seguintes relações de comutação:

$$[a, a^{\dagger}] = 1$$

 $[a, a] = [a^{\dagger}, a^{\dagger}] = 0$ (2.10)

e o espectro de H_B é formado pelos vetores de estado $|n\rangle$ de tal forma que:

$$a |0\rangle = 0$$
 e $\frac{(a^{\dagger})^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle = |n\rangle$ (2.11)

tendo n a possibilidade de assumir os valores $0, 1, 2, \ldots$

Em contraste com a expressão (2.9), do hamiltoniano do oscilador bosônico, que é simétrica pela troca das posições de $a \in a^{\dagger}$, definimos o oscilador fermiônico por meio de seu hamiltoniano:

$$H_F = \frac{1}{2} \left(b^{\dagger} b - b b^{\dagger} \right) \tag{2.12}$$

de modo que esta seja antissimétrica pela troca das posições de $b e b^{\dagger}$. Aqui $b e b^{\dagger}$ são, respectivamente, operadores de criação e destruição fermiônicos. Esses operadores são definidos como elementos grassmanianos, satisfazendo as seguintes relações de *anti*comutação:

$$\{b, b^{\dagger}\} = 1$$

$$\{b, b\} = \{b^{\dagger}, b^{\dagger}\} = 0$$
(2.13)

O espectro de H_F é definido em (2.14) de forma semelhante a que foi feita para o espectro de H_B em (2.11). Aqui porém, a nilpotência dos operadores $b e b^{\dagger}$, manifestada na segunda linha de (2.13), restringe os possíveis valores de n, de modo que:

$$b|0\rangle = 0$$
 e $b^{\dagger}|0\rangle = |1\rangle$ (2.14)

e com isso o espectro de H_F é formado por apenas dois estados, $|m\rangle$ com m = 0, 1..

Dadas as relações de comutação (2.10) e anticomutação (2.13), podemos utilizá-las para reescrever os hamiltonianos (2.9) e (2.12) como:

$$H_B = \left(N + \frac{1}{2}\right)$$

$$H_F = \left(M - \frac{1}{2}\right)$$
(2.15)

onde $N = a^{\dagger}a$ e $M = b^{\dagger}b$ são operadores número, isto é, são operadores tais que, conforme (2.11) e (2.14), as seguintes equações de autovalores e autoestados são satisfeitas:

$$N |n\rangle = n |n\rangle$$

$$M |m\rangle = m |m\rangle$$
(2.16)

onde podemos ter $n = 0, 1, 2, ... \in m = 0, 1..$

Utilizando a definição dos operadores número acima e as relações de anti-comutação (2.13), vemos que, para o operador número fermiônico, vale:

$$M^{2} = b^{\dagger}bb^{\dagger}b = b^{\dagger}(1 - b^{\dagger}b)b = b^{\dagger}b = M$$
$$\Rightarrow \quad M(M - 1) = 0$$

de modo que os autovalores desse operador só podem assumir os valores 0 ou 1, o que é uma outra forma de ver a restrição sobre os valores de m.

Sendo válidas as equações de autovalores e autovetores (2.16), considerando a forma dos hamiltonianos H_B e H_F conforme (2.15) e sabendo quais são os valores que n e mpodem assumir, temos que os autovalores desses hamiltonianos são:

$$E_n^B = \left(n + \frac{1}{2}\right) , \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$E_m^F = \left(m - \frac{1}{2}\right) , \qquad m = 0, 1.$$
(2.17)

Cabe notar aqui que denominar esses osciladores "bosônico" e "fermiônico" é uma analogia associada, respectivamente, à simetria e antissimetria dos hamiltonianos correspondentes. Além disso, a restrição sobre os possíveis valores de m é um análogo do princípio da exclusão de Pauli.

2.2.2 Oscilador Supersimétrico

Vamos definir um hamiltoniano que é a soma dos osciladores bosônico e fermiônico:

$$H = H_B + H_F = \left(a^{\dagger}a + b^{\dagger}b\right) \tag{2.18}$$

onde o lado direito foi obtido substituindo as equações (2.15).

Tendo em vista a definição dos operadores número conforme (2.16), temos que os autoestados do hamiltoniano (2.18) são:

$$|n,m\rangle = |n\rangle \otimes |m\rangle \tag{2.19}$$

e a equação de Schrödinger para esse hamiltoniano fica:

$$H|n,m\rangle = (n+m)|n,m\rangle \tag{2.20}$$

onde a forma dos autovalores foi determinada a partir de (2.17), somando $E_n^B \in E_m^F$.

O estado fundamental desse sistema é $|0,0\rangle$ com energia $E_0 = 0$. Todos os outros estados são duplamente degenerados uma vez que, para n > 0, podemos ter m = 0 ou m = 1, de modo que os estados $|n,0\rangle \in |n-1,1\rangle$, conforme (2.20), tem a mesma energia.

A seguir, definimos os operadores:

$$Q = a^{\dagger}b \tag{2.21}$$
$$Q^{\dagger} = b^{\dagger}a$$

que misturam operadores de criação e destruição bosônicos e fermiônicos.

Usando as relações de comutação (2.10) e anti-comutação (2.13) juntamente com a definição do hamiltoniano (2.18) e com a definição dos operadores $Q \in Q^{\dagger}$, mostramos que:

$$[Q, H] = [Q^{\dagger}, H] = 0 \tag{2.22}$$

$$\{Q,Q\} = \{Q^{\dagger},Q^{\dagger}\} = 0 \tag{2.23}$$

$$\{Q, Q^{\dagger}\} = H \tag{2.24}$$

Essas relações de comutação e anti-comutação definem a nossa super-álgebra, sendo $Q \in Q^{\dagger}$ os geradores das transformações SUSI. A ação desses operadores sobre os autoestados do hamiltoniano H pode ser avaliada por meio das seguintes relações:

$$[Q, H_B] = [a^{\dagger}b, a^{\dagger}a + \frac{1}{2}] = [a^{\dagger}b, a^{\dagger}a] = a^{\dagger}[a^{\dagger}, a]b = -a^{\dagger}b = -Q$$
$$[Q, H_F] = [a^{\dagger}b, b^{\dagger}b - \frac{1}{2}] = [a^{\dagger}b, b^{\dagger}b] = a^{\dagger}(bb^{\dagger})b = a^{\dagger}\{b^{\dagger}, b\}b = a^{\dagger}b = Q$$

onde (2.10) e (2.13) foram usadas. De forma idêntica temos:

$$[Q^{\dagger}, H_B] = [b^{\dagger}a, a^{\dagger}a + \frac{1}{2}] = [b^{\dagger}a, a^{\dagger}a] = b^{\dagger}[a, a^{\dagger}]a = b^{\dagger}a = Q^{\dagger}$$
$$[Q^{\dagger}, H_F] = [b^{\dagger}a, b^{\dagger}b - \frac{1}{2}] = [b^{\dagger}a, b^{\dagger}b] = -b^{\dagger}(bb^{\dagger})a = -b^{\dagger}\{b, b^{\dagger}\}a = -b^{\dagger}a = -Q^{\dagger}$$

Com isso, vamos agora avaliar a ação dos operadores H_B e H_F sobre um vetor de estado $Q |n, m\rangle$:

$$H_BQ|n,m\rangle = (QH_B - [Q, H_B])|n,m\rangle = Q\left(n + \frac{1}{2}\right)|n,m\rangle + Q|n,m\rangle$$

$$= \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right)Q|n,m\rangle$$

$$H_FQ|n,m\rangle = (QH_F - [Q, H_F])|n,m\rangle = Q\left(m - \frac{1}{2}\right)|n,m\rangle - Q|n,m\rangle$$

$$= \left(m - 1 - \frac{1}{2}\right)Q|n,m\rangle$$
(2.25)

ou seja, para $m \neq 0$, $Q |n, m\rangle$ é autoestado de H_B e H_F com autovalores $\left(n + 1 + \frac{1}{2}\right)$ e $\left(m - 1 - \frac{1}{2}\right)$, respectivamente. Para m = 0, o operador Q aniquila o vetor de estado $|n, 0\rangle$, ou seja, $Q |n, 0\rangle = 0$.

O mesmo desenvolvimento feito em (2.25) e (2.26) pode ser feito para um vetor de estado $Q^{\dagger} |n, m\rangle$, levando à concluir que, para $n \neq 0$ e $m \neq 1$, esse estado é autoestado de H_B e H_F com autovalores $n - 1 + \frac{1}{2}$ e $m + 1 - \frac{1}{2}$, respectivamente. Para n = 0 ou m = 1, por outro lado, temos que $Q^{\dagger} |n, m\rangle = 0$.

Em outras palavras, o operador Q atua nos autoestados de H levando o número quântico fermiônico de m = 1 a m = 0 e o número quântico bosônico de n a n + 1. O operador Q^{\dagger} , por sua vez, leva m = 0 em m = 1 e n em n - 1. Com isso vemos que, uma vez que vale (2.22) e levando em conta a normalização, temos, de acordo com a equação de Schrödinger (2.20):

$$\left. \begin{array}{l} Q \left| n, m \right\rangle = \delta_{m,1} \sqrt{n+1} \left| n+1, m-1 \right\rangle \\ Q^{\dagger} \left| n, m \right\rangle = \delta_{m,0} \sqrt{n} \left| n-1, m+1 \right\rangle \end{array} \right\} \qquad E_{nm} = (n+m) \qquad (2.27)$$

ou seja, exceto pelo autoestado $|0,0\rangle$, de energia $E_0 = 0$, todos os outros autoestados de H satisfazem (2.27). Esses estados $Q |n,m\rangle$ e $Q^{\dagger} |n,m\rangle$ são degenerados, tendo ambos energia $E_{n,m} = (n+m)$. Isso é a manifestação da supersimetria desse sistema que é então denominado oscilador supersimétrico.

2.3 Mecânica Quântica Supersimétrica

2.3.1 Generalização do Oscilador Supersimétrico

A Mecânica Quântica Supersimétrica (MQ SUSI) pode ser entendida como uma generalização do modelo do oscilador supersimétrico no mesmo sentido em que a fatorização de hamiltonianos em termos dos operadores $A \in A^{\dagger}$ feita na seção 2.1.2 é uma generalização da fatorização do hamiltoniano do OHS. O oscilador supersimétrico constitui, na verdade, o sistema supersimétrico mais simples da Mecânica Quântica. Na definição dele, empregamos, conforme o que foi feito na seção 2.1.1, a forma fatorizada de hamiltonianos de osciladores harmônicos, o oscilador bosônico e o oscilador fermiônico. Podemos então procurar generalizar esse método para sistemas de Mecânica Quântica com hamiltonianos fatorizáveis, isto é, hamiltonianos que tenham potenciais V(x) tais que a equação de Riccati (2.8) admita solução W(x) (ver seção 2.1.2). Se houver essa possibilidade, essa função W(x) assim determinada é denominada *superpotencial*, podendo ser entendida de algum modo como um objeto mais fundamental em uma teoria MQ SUSI do que o próprio potencial.

Vamos então definir um hamiltoniano H de tal forma que ele satisfaça a álgebra definida por (2.22) e (2.24). Com essa finalidade definimos os geradores $Q \in Q^{\dagger}$ de forma semelhante a (2.21), mas agora como:

$$Q = A^{\dagger}\theta$$

$$Q^{\dagger} = \theta^{\dagger}A$$
(2.28)

com os operadores $A e A^{\dagger}$ no lugar de $a e a^{\dagger}$ e sendo $\theta e \theta^{\dagger}$ elementos grassmanianos satisfazendo as relações de anti-comutação (2.13). Uma possível realização dessas relações de anti-comutação ocorre para $\theta e \theta^{\dagger}$ dados por:

$$\theta = \sigma_{+} = \frac{1}{2} (\sigma_{1} + i\sigma_{2}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\theta^{\dagger} = \sigma_{-} = \frac{1}{2} (\sigma_{1} - i\sigma_{2}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
(2.29)

onde $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ e $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ são matrizes de Pauli.

Com isso temos, a partir de (2.24), uma matriz H^{-1} dada por:

$$H = \{Q, Q^{\dagger}\} = \begin{pmatrix} A^{\dagger}A & 0\\ 0 & AA^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{-} & 0\\ 0 & H_{+} \end{pmatrix}$$
(2.30)

¹Essa matriz $H = \begin{pmatrix} H_{-} & 0 \\ 0 & H_{+} \end{pmatrix}$ é algumas vezes chamada de *super-hamiltoniano*.

sendo também satisfeitas, como se pode facilmente verificar, as relações (2.22) e (2.23), ou seja:

$$[Q, H] = [Q^{\dagger}, H] = 0$$

 $\{Q, Q\} = \{Q^{\dagger}, Q^{\dagger}\} = 0$

Podemos ainda escrever H explicitamente em termos do superpotencial como:

$$H = \left(p^2 + W(x)^2\right) \mathbb{1} - W'(x)\sigma_3 \tag{2.31}$$

onde 1 é a matriz identidade 2×2 e $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ é uma matriz de Pauli.

Com isso, H definida em (2.30) e os geradores $Q \in Q^{\dagger}$ definidos em (2.28) satisfazem as relações de comutação e anti-comutação (2.22), (2.23) e (2.24) definindo, portanto, uma super-álgebra.

2.3.2 Autovalores e Autoestados de H

Os candidatos a autoestados de H são matrizes $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_n^- \\ \psi_m^+ \end{pmatrix}$, onde $\psi_n^- e \psi_m^+$ são, respectivamente, os autoestados dos hamiltonianos H_- e H_+ com autovalores E_n^- e E_m^+ . Assim temos:

$$H\Psi = \begin{pmatrix} H_{-} & 0\\ 0 & H_{+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{n}^{-}\\ \psi_{m}^{+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{n}^{-}\psi^{-}\\ E_{m}^{+}\psi_{m}^{+} \end{pmatrix}$$

o que permite concluir que, para $E_n^- = E_m^+$, Ψ será autoestado de H.

Como, conforme (2.22), os geradores $Q \in Q^{\dagger}$ comutam com H, sabemos que se Ψ é um autoestado de H, então $Q\Psi \in Q^{\dagger}\Psi$ também são. Assim, examinando a ação de H sobre $Q\Psi \in Q^{\dagger}\Psi$, temos:

$$\begin{aligned} HQ\Psi &= \begin{pmatrix} H_{-} & 0\\ 0 & H_{+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & A^{\dagger}\\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{n}^{-}\\ \psi_{m}^{+} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} H_{-}A^{\dagger}\psi_{m}^{+}\\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{\dagger}AA^{\dagger}\psi_{m}^{+}\\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{\dagger}H_{+}\psi_{m}^{+}\\ 0 \end{pmatrix} = E_{m}^{+}Q\Psi \end{aligned}$$

е

$$HQ^{\dagger}\Psi = \begin{pmatrix} H_{-} & 0\\ 0 & H_{+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0\\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{n}^{-}\\ \psi_{m}^{+} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 0\\ H_{+}A\psi_{n}^{-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\ AA^{\dagger}A\psi_{n}^{-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\ AH_{-}\psi_{n}^{-} \end{pmatrix} = E_{n}^{-}Q^{\dagger}\Psi$$

ou seja, $Q\Psi$ e $Q^{\dagger}\Psi$ são, respectivamente, auto
estados degenerados de H com autovalore
s $E_m^+=E_n^-.$

Precisamos ainda ter um estado fundamental Ψ_0 de tal forma que, digamos, $Q^{\dagger}\Psi_0 =$ 0. Para isso escolhemos o hamiltoniano $H_- = A^{\dagger}A$ de tal forma que o estado fundamental dele tenha energia $E_0^- = 0$. Assim:

$$H_{-}\psi_{0}^{-} = A^{\dagger}A\psi_{0}^{-} = 0$$

Uma forma de conseguir isso é impondo que $A\psi_0^- = 0$ (isso é o análogo de agir com o operador de destruição *a* sobre o estado fundamental $|0\rangle$ de um OHS). Dessa forma, temos:

$$A\psi_0^-(x) = (W(x) + ip)\,\psi_0^-(x) = \left(W(x) + \frac{d}{dx}\right)\psi_0^-(x) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d}{dx}\psi_0^-(x) = -W(x)\psi_0^-(x)$$

e, portanto,

$$\psi_0^-(x) = \mathcal{N} \exp\left(-\int^x W(y)dy\right)$$
(2.32)

é o estado fundamental de H_- . Isso é verdade desde que esse estado seja normalizável, ou seja, desde que se possa encontrar uma constante \mathcal{N} de modo que $\langle \psi_0^- | \psi_0^- \rangle = 1$. Se não houver essa possibilidade dizemos que ocorre quebra da supersimetria ou que temos SUSI quebrada.

Havendo essa possibilidade porém e sendo o estado fundamental aniquilado por Q^{\dagger} (ou Q), dizemos que o sistema *preserva SUSI* e o estado fundamental de H é dado por:

$$\Psi_0 = \begin{pmatrix} \psi_0^- \\ 0 \end{pmatrix} \tag{2.33}$$

Os demais autoestados de H, com $n = 1, 2, 3, \ldots$, são:

$$Q^{\dagger}\Psi_n \quad e \quad Q\Psi_n \tag{2.34}$$

onde:

$$\Psi_n = \begin{pmatrix} \psi_n^-\\ \psi_{n-1}^+ \end{pmatrix} \tag{2.35}$$

Nessa situação temos um estado fundamental Ψ_0 com energia $E_0^- = 0$ e todos os outros estados $Q^{\dagger}\Psi_n$ e $Q\Psi_n$ degenerados com energia $E_n^- = E_{n-1}^+ > 0$.

Daqui em diante, a menos que mencionemos explicitamente a quebra de SUSI, consideraremos sempre a situação de SUSI preservada.

2.3.3 Parceiros Supersimétricos

Nesse ponto podemos abrir mão da notação matricial em favor da simplicidade. Isso é feito notando que os componentes não nulos dos autoestados $Q^{\dagger}\Psi_n$ e $Q\Psi_n$ de H são, respectivamente, autoestados de H_- e H_+ , ou seja,

$$\Psi_0 = \begin{pmatrix} \psi_0^- \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad Q^{\dagger} \Psi_n = \begin{pmatrix} 0 \\ A \psi_n^- \end{pmatrix} \quad e \quad Q \Psi_n = \begin{pmatrix} A^{\dagger} \psi_{n-1}^+ \\ 0 \end{pmatrix}$$

são autoestados de H com energias, respectivamente, $E_0^- = 0$ e $E_n^- = E_{n-1}^+$, $n \ge 1$. Com isso, uma vez que temos:

$$\begin{aligned} H_{-}\psi_{0}^{-} &= 0 \\ H_{+}A\psi_{n}^{-} &= AA^{\dagger}A\psi_{n}^{-} = AH_{-}\psi_{n}^{-} = E_{n}^{-}A\psi_{n}^{-} \\ H_{-}A^{\dagger}\psi_{n-1}^{+} &= A^{\dagger}AA^{\dagger}\psi_{n-1}^{+} = A^{\dagger}H_{+}\psi_{n-1}^{+} = E_{n-1}^{+}A^{\dagger}\psi_{n-1}^{+} \end{aligned}$$

os componentes não nulos $A\psi_n^-$ e $A^{\dagger}\psi_{n-1}^+$ são, respectivamente, autoestados de H_+ e H_- com energia $E_n^- = E_{n-1}^+$ e o estado fundamental da teoria passa a ser simplesmente o autoestado ψ_0^- de H_- .

Nesse contexto, os hamiltonianos H_{\mp} que compõem a matriz H tem, conforme a equação de Riccati (2.8), potenciais:

$$V_{\mp} = W(x)^2 \mp W'(x)$$

que são então chamados potenciais parceiros supersimétricos.

Utilizando essa linguagem, dizemos que temos dois hamiltonianos parceiros, H_- e H_+ , sendo que um deles (conforme nossa escolha, H_-) tem um estado fundamental $\psi_0^$ de energia $E_0^- = 0$ e os demais estados com energias $E_n^- > 0$, $n = 1, 2, 3, \ldots$ Enquanto isso o outro hamiltoniano, H_+ , tem níveis de energia E_{n-1}^+ , $n = 1, 2, 3, \ldots$ de tal forma que $E_{n-1}^+ = E_n^-$. Além disso, vemos que os autoestados de H_- e H_+ se relacionam de modo que $\psi_{n-1}^+ \propto A\psi_n^-$ e $\psi_n^- \propto A^{\dagger}\psi_{n-1}^+$. Levando em conta a normalização e considerando $n = 1, 2, 3, \ldots$, podemos sumarizar isso como:

$$E_0^- = 0 (2.36)$$

$$E_{n-1}^{+} = E_{n}^{-} \tag{2.37}$$

$$\psi_{n-1}^{+} = \left(E_{n}^{-}\right)^{-1/2} A \psi_{n}^{-} \tag{2.38}$$

$$\psi_n^- = \left(E_{n-1}^+\right)^{-1/2} A^{\dagger} \psi_{n-1}^+ \tag{2.39}$$

Isso permite não somente relacionar níveis de energia desses dois hamiltonianos, mas também construir as autofunções correspondentes. Os operadores $A e A^{\dagger}$ permitem construir as autofunções de H_{+} a partir das autofunções de H_{-} e vice-versa sendo que, ao fazer isso (conforme ilustra a figura 2.1), esses operadores modificam a forma das funções originais destruindo ou criando nós.



Figura 2.1: Ação dos operadores $A \in A^{\dagger}$ sobre as autofunções associadas a um nível de energia $E_n^- = E_{n-1}^+$.

Exemplo 2.1 (Poço Quadrado Infinito). Seguindo [11], vamos considerar o exemplo do Poço Quadrado Infinito, ou seja, do sistema de Mecânica Quântica definido pelo potencial:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , & 0 \le x \le L \\ \infty & , & x < 0 \text{ ou } x > L \end{cases}$$
(2.40)

As soluções da equação de Schrödinger com o potencial (2.40) na região $0 \leq x \leq L$ são:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\left(\frac{(n+1)\pi x}{L}\right)$$
(2.41)

$$E_n = \frac{\pi^2}{L^2} (n+1)^2 \tag{2.42}$$

onde podemos ter n = 0, 1, 2, ...

Definindo um hamiltoniano H_{-} de poço infinito deslocado de tal modo que esse novo hamiltoniano tenha energia do estado fundamental zero, ou seja, de tal modo que o potencial de H_{-} seja $V_{-}(x) = V(x) - E_{0}$, teremos como soluções:

$$\psi_n^-(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\left(\frac{(n+1)\pi x}{L}\right)$$
(2.43)

$$E_n^- = \frac{\pi^2}{L^2} n(n+2) \tag{2.44}$$

Sendo o estado fundamental de H_{-} dado por (2.32), podemos derivar aquela expressão com respeito a x e obter o superpotencial:

$$W(x) = -\frac{\psi_0^{-\prime}(x)}{\psi_0^{-}(x)} = -\frac{\pi}{L}\cot\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$
(2.45)

A partir da equação de Riccati (2.8) vemos que $V_{-}(x) = W(x)^{2} - W'(x)$ e definimos seu parceiro supersimétrico como $V_{+}(x) = W(x)^{2} + W'(x)$. Na região $0 \le x \le L$ esses potenciais são:

$$V_{-}(x) = -\frac{\pi^{2}}{L^{2}}$$

$$V_{+}(x) = -\frac{\pi^{2}}{L^{2}} + 2\frac{\pi^{2}}{L^{2}}\operatorname{cosec}^{2}\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$
(2.46)

Utilizando as relações (2.37) e (2.38) respectivamente para as soluções (2.44) e (2.43) correspondentes ao hamiltoniano H_{-} , encontramos as soluções correspondentes ao hamiltoniano H_{+} que são:

$$\psi_{n-1}^{+}(x) = \left(\frac{2}{n(n+2)L}\right)^{1/2} \left\{-\cot\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\frac{(n+1)\pi x}{L} + (n+1)\cos\left(\frac{(n+1)\pi x}{L}\right)\right\}$$
(2.47)
$$E_{n-1}^{+} = \frac{\pi^2}{L^2}n(n+2)$$
(2.48)

onde podemos ter n = 1, 2, 3, ...

Esse exemplo ilustra uma possível utilidade da MQ SUSI ao relacionar os estados de sistemas consideravelmente distintos. Se conhecemos as soluções de um desses sistemas, então podemos obter facilmente as soluções do outro.

2.3.4 Quebra da Supersimetria

Conforme vimos nas seções anteriores, quando a função de onda do estado fundamental de um hamiltoniano H_{-} pode ser determinada por (2.32), então esse hamiltoniano H_{-} pode ser fatorizado, isto é, pode ser escrito na forma:

$$H_{-} = A^{\dagger}A = p^{2} + W^{2}(x) - W'(x)$$
(2.49)

onde W(x) é o superpotencial e teremos um hamiltoniano parceiro SUSI H_+ da forma:

$$H_{+} = AA^{\dagger} = p^{2} + W^{2}(x) + W'(x)$$
(2.50)

Vamos considerar agora um problema em que nos é dado inicialmente um superpo-

tencial W(x) e queremos saber se os hamiltonianos H_{-} e H_{+} definidos conforme (2.49) e (2.50) são parceiros SUSI, ou seja, queremos saber se esses hamiltonianos obedecem às propriedades descritas na seção 2.3.3 acima. Para que a SUSI se manifeste no nosso sistema devemos ter um estado fundamental normalizável de energia zero que deve satisfazer a equação de Schrödinger ou para H_{-} ou para H_{+} . Em outras palavras devemos ter ou:

$$A\psi_0^-(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_0^-(x) = \mathcal{N}\exp\left(-\int^x W(y)dy\right)$$
 (2.51)

ou

$$A^{\dagger}\psi_{0}^{+}(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_{0}^{+}(x) = \mathcal{N}\exp\left(+\int^{x} W(y)dy\right)$$
(2.52)

de tal forma que, para o superpotencial W(x) dado, ou (2.51) ou (2.52) será o estado fundamental normalizável de energia zero.

Sendo (2.51) o estado fundamental procurado, então a SUSI se manifesta conforme descrito nas seções acima com H_{-} sendo o hamiltoniano para o qual temos um estado fundamental de energia zero. Se, ao invés de (2.51), (2.52) for esse estado fundamental podemos simplesmente fazer uma redefinição $W(x) \rightarrow \tilde{W}(x) = -W(x)$ e, com isso teremos novamente (2.51) sendo o estado fundamental procurado. Desse modo, desde que (2.51) ou (2.52) sejam o estado fundamental normalizável de energia zero, podemos escolher H_{-} como sendo o hamiltoniano para o qual esse estado de energia zero é o estado fundamental e a SUSI se manifestará nesse sistema.

Se, por outro lado, não existirem soluções normalizáveis ou na forma (2.51) ou na forma (2.52), então não poderemos definir H_{-} com um estado fundamental de energia zero e, nesse caso, dizemos que a SUSI é *quebrada*. Se a SUSI for quebrada as expressões (2.36) e (2.37) que relacionam os níveis de energia de H_{-} e H_{+} , bem como (2.38) e (2.39) que relacionam os estados não mais valerão e no lugar delas teremos:

$$E_n^+ = E_n^-, \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$
 (2.53)

$$\psi_n^+ = \left(E_n^-\right)^{-1/2} A \psi_n^- \tag{2.54}$$

$$\psi_n^- = \left(E_n^+\right)^{-1/2} A^{\dagger} \psi_n^+ \tag{2.55}$$

onde todos os níveis de energia de H_- e H_+ , inclusive os estados fundamentais estarão emparelhados e os operadores A e A^{\dagger} não mais modificam o número de nós nas funções de onda.



Figura 2.2: Forma geral de uma função de onda $\psi_0(x)$ normalizável sem nós.

De acordo com (2.51) e (2.52), o superpotencial pode ser escrito em termos das funções de onda do estado fundamental de energia zero (ou de H_{-} ou de H_{+}) como:

$$W(x) = \mp \frac{\psi_0^{\mp'}(x)}{\psi_0^{\mp}(x)} \tag{2.56}$$

onde o sinal "-" corresponde a escolha de H_- como sendo o hamiltoniano com o estado fundamental de energia zero.

Se a função de onda que aparece em (2.56) for a função de onda do estado fundamental de energia zero normalizável e sem nós, por exemplo, da forma da figura 2.2, então de acordo com (2.56), com o sinal de $\psi_0(x)$ sendo sempre o mesmo e com o sinal de $\psi'_0(x)$ mudando conforme o sinal de x muda, vemos que os superpotenciais
para os quais a SUSI não é quebrada devem ter sinais opostos conforme x é positivo ou negativo. De modo mais geral a função de onda do estado fundamental pode ter outras formas diferentes daquela da figura 2.2, porém, para que ocorra a manifestação da SUSI ainda é preciso que o superpotencial W(x) tenha sinais opostos para $x \to +\infty$ e $x \to -\infty$, ou em outras palavras, W(x) deve ter um número ímpar de zeros.

Em particular para a escolha de H_{-} como o hamiltoniano que tem o estado fundamental normalizável de energia zero, deveremos ter, conforme (2.56), W(x) < 0 para $x \to -\infty \in W(x) > 0$ para $x \to +\infty$.

2.3.5 Hierarquia de Hamiltonianos

Consideremos um conjunto de hamiltonianos H_n , n = 1, 2, 3, ... com estados fundamentais ψ_0^n de energias E_0^n não necessariamente nulas. Podemos, a partir dos H_n , definir novos hamiltonianos $\tilde{H}_n = H_n - E_0^n$. Esses novos hamiltonianos \tilde{H}_n tem energias dos estados fundamentais nulas e seus autoestados são os mesmos dos hamiltonianos H_n . Agora vamos supor que possamos escrever esses novos hamiltonianos em formas fatorizadas $\tilde{H}_n = A_n^{\dagger}A_n$, ou seja, vamos supor que seja possível encontrar superpotenciais $W_n(x)$ de modo que os potenciais dos hamiltonianos \tilde{H}_n sejam dados por:

$$\tilde{V}_n(x) = V_n(x) - E_0^n = W_n(x)^2 - W'_n(x)$$
(2.57)

(que é simplesmente a equação de Riccati, (2.8)). Além disso vamos supor que vale a equação (2.32), ou seja, vamos supor que possamos escrever os estados fundamentais ψ_0^n como:

$$\psi_0^n(x) = \mathcal{N}_n \exp\left(-\int^x W_n(y)dy\right) \tag{2.58}$$

Tendo determinado os superpotenciais $W_n(x)$, podemos definir, conforme (2.5), os operadores $A_n^{\dagger} \in A_n$ como:

$$A_n^{\dagger} = (W_n(x) - ip)$$

$$A_n = (W_n(x) + ip)$$
(2.59)

e com isso, os hamiltonianos originais H_n podem ser escritos como:

$$H_n = A_n^{\dagger} A_n + E_0^n \tag{2.60}$$

Consideremos agora que \tilde{H}_2 é o parceiro supersimétrico de \tilde{H}_1 , que \tilde{H}_3 é o parceiro supersimétrico de \tilde{H}_2 e assim por diante, ou seja, consideremnos que \tilde{H}_{n+1} é o parceiro SUSI de \tilde{H}_n . Sendo assim, se $\tilde{H}_n = A_n^{\dagger} A_n$, então teremos $\tilde{H}_{n+1} = A_n A_n^{\dagger}$ Alternativamente, podemos dizer que, se H_n é dado por (2.60), então podemos escrever H_{n+1} como:

$$H_{n+1} = A_n A_n^{\dagger} + E_0^n \tag{2.61}$$

Desse modo, sendo $H_n \in H_{n+1}$ dados, respectivamente, por (2.60) e (2.61), sabemos, conforme o que vimos nas seções 2.3.2 e 2.3.3, que o estado fundamental de H_n terá energia E_0^n e todos os outros estados terão energias $E_k^n = E_{k-1}^{n+1}$, k = 1, 2, 3, ... Na nossa notação E_a^b é a energia do nível *a* do hamiltoniano H_b . A figura 2.3 exemplifica isso para uma sequência de hamiltonianos.

A essa sequência de hamiltonianos, definida dessa forma, damos o nome de *hierarquia de hamiltonianos*.

De acordo com a equação (2.37) (e conforme ilustrado na figura 2.3), sabemos que os níveis de energia se relacionam simplesmente como:

$$E_{k-j}^{n+j} = E_k^n \tag{2.62}$$

onde $j = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ e $(k - j) \ge 0$.



Figura 2.3: Hierarquia de hamiltonianos.

Além disso, por meio das equações (2.38) e (2.39), determinamos a relação entre os autoestados correspondentes a cada nível de energia como:

$$\psi_{k-j}^{n+j} = \left(\prod_{l=1}^{j} \left(E_{k-j+l}^{n+j-l} - E_0^{n+j-l} \right)^{-1/2} A_{n+j-l} \right) \psi_k^n \tag{2.63}$$

$$\psi_k^n = \left(\prod_{l=1}^j \left(E_{k+j-l}^{n+l} - E_0^{n+l}\right)^{-1/2} A_{n+l-1}^{\dagger}\right) \psi_{k-j}^{n+j}$$
(2.64)

onde j > 0 e $(k - j) \ge 0$.

A hierarquia de hamiltonianos pode ser construída recursivamente a partir de um hamiltoniano $H_n = p^2 + V_n(x)$, supondo que este possa ser escrito na forma (2.60). Nesse caso o superpotencial $W_n(x)$ é determinado pela equação de Riccati (2.57). Uma vez que tenhamos determinado $W_n(x)$, podemos utilizar (2.61) para determinar H_{n+1} , cujo potencial é V_{n+1} . Conhecendo V_{n+1} podemos utilizar novamente a equação de Riccati (2.57) para determinar W_{n+1} , e assim por diante. Seguindo esse procedimento, podemos obter os potenciais (e consequentemente os próprios hamiltonianos) de j posições à direita na hierarquia como:

$$V_{n+j} = V_n + 2\frac{d}{dx} \sum_{l=1}^{j} W_{n+l-1}$$
(2.65)

Alternativamente, se pudermos determinar o estado fundamental ψ_0^n de H_n , podemos utilizar (2.58) para escrever o superpotencial W_n como:

$$W_n = -\frac{d}{dx}\ln\left(\psi_0^n\right)$$

que substituído na equação (2.65) resulta em:

$$V_{n+j} = V_n - 2\frac{d^2}{dx^2} \ln\left(\prod_{l=1}^j \psi_0^{n+l-1}\right)$$
(2.66)

Essa construção pode ser utilizada para, uma vez conhecidos os k primeiros estados de um hamiltoniano H_n , determinar os (k-j) primeiros estados de outros j hamiltonianos H_{n+j} (j < n) à direita de H_n na hierarquia de hamiltonianos. Também podemos determinar k estados excitados acima do nível (j - 1) dos hamiltonianos H_{n-j} à esquerda nessa mesma sequência. Podemos ainda utilizar a hierarquia de hamiltonianos para, uma vez conhecidos os estados fundamentais de k hamiltonianos na sequência, determinar os k primeiros estados do primeiro hamiltoniano.

Para exemplificar isso podemos imaginar, por exemplo, o caso do OHS, cujo superpotencial associado é $W(x) \propto x$. Se considerarmos uma hierarquia formada pelos hamiltonianos de osciladores deslocados, ou seja, de tal forma que o *n*-ésimo hamiltoniano à direita na sequência seja $H_n = H_{OHS} + nE_0^{OHS}$, então podemos usar o procedimento descrito acima para construir tantos estados do OHS quantos forem os hamiltonianos na sequência. Isso nada mais é do que o conhecido método algébrico para obtenção das soluções do OHS o que, como vemos, corresponde a uma aplicação a um caso particular do procedimento mais geral que foi descrito nesta seção.

2.4 Invariância de Forma

2.4.1 Potenciais Invariantes de Forma

Vamos considerar um par de potenciais $V_n \in V_{n+1}$ podendo depender, além da coordenada x, de conjuntos de parâmetros $a_n \in a_{n+1}$, respectivamente. Se a_n for uma função dos parâmetros a_{n+1} , ou seja, se $a_n \equiv a_n(a_{n+1})$, e se, além disso, for possível escrever os potenciais $V_n \in V_{n+1}$ respeitando uma relação do tipo:

$$V_{n+1}(x;a_{n+1}) = V_n(x;a_n(a_{n+1})) + R(a_{n+1})$$
(2.67)

onde $R(a_{n+1})$ é independente de x, então dizemos que V_n e V_{n+1} são potenciais invariantes de forma (PIF).

A invariância de forma, juntamente com a hierarquia de hamiltonianos (que foi discutida na seção 2.3.5), desempenha um papel importante na determinação de soluções em MQ SUSI. Como exemplo de invariância de forma podemos pensar, novamente, no OHS. Conforme comentamos no último parágrafo da seção 2.3.5, podemos considerar uma hierarquia de hamiltonianos da forma $H_n = H_{OHS} + nE_0^{OHS}$. Para essa hierarquia vemos que, tomando qualquer par de hamiltonianos consecutivos na sequência, os potenciais correspondentes são, além de parceiros SUSI, invariantes de forma. Tomando um par de hamiltonianos não consecutivos, embora estes já não sejam parceiros SUSI, ainda assim serão invariantes de forma.

O interesse em estudar a invariância de forma é encontrar um método de resolução de problemas em Mecânica Quântica análogo ao método algébrico do OHS que se estenda a sistemas cujos potenciais sejam invariantes de forma.

2.4.2 Invariância de Forma e a Hierarquia de Hamiltonianos

Consideremos novamente o par de potenciais parceiros SUSI e PIF $V_n e V_{n+1}$ da seção 2.4.1 acima, respeitando a condição de invariância de forma (2.67). Esses potenciais correspondem, respectivamente, a hamiltonianos parceiros H_n e H_{n+1} , sendo H_n tal que:

$$E_0^n(a_n) = 0 \qquad e \qquad \psi_0^n(x;a_n) = \mathcal{N}\exp\left[-\int^x W(y;a_n)dy\right]$$
(2.68)

Podemos utilizar a condição (2.67) recursivamente para construir uma sequência de potenciais da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} V_n(x;a_n) \\ V_{n+1}(x;a_{n+1}) &= V_n(x;a_n(a_{n+1})) + R_n(a_{n+1}) \\ V_{n+2}(x;a_{n+2}) &= V_{n+1}(x;a_{n+1}(a_{n+2})) + R_{n+1}(a_{n+2}) \\ &= V_n(x;a_n(a_{n+1}(a_{n+2}))) + R_n(a_{n+1}(a_{n+2})) + R_{n+1}(a_{n+2}) \\ \vdots \\ V_{n+j}(x;a_{n+j}) &= V_n(x;a_n(a_{n+1}(\cdots(a_{n+j-1}(a_{n+j}))\cdots))) + R_n(a_{n+1}(a_{n+2}(\cdots(a_{n+j-1}(a_{n+j}))\cdots))) \\ &\quad + R_{n+1}(a_{n+2}(a_{n+3}(\cdots(a_{n+j-1}(a_{n+j}))\cdots))) + \cdots + R_{n+j-1}(a_{n+j}) \\ \vdots \end{aligned}$$

Nessa sequência, os elementos (n + j) e (n + j + 1) (onde $j \ge 1$) são dados, respectivamente, por:

$$V_{n+j}(x;a_{n+j}) = V_n(x;a_n) + \sum_{k=n}^{n+j-1} R_k(a_{k+1})$$
(2.69)

$$V_{n+j+1}(x;a_{n+j+1}) = V_n(x;a_n) + \sum_{k=n}^{n+j} R_k(a_{k+1}) = V_{n+1}(x;a_{n+1}) + \sum_{k=n}^{n+j-1} R_{k+1}(a_{k+2})$$
(2.70)

(aqui a dependência dos parâmetros em relação a outros parâmetros foi omitida).

Se, ao utilizarmos a condição de invariância de forma (2.67) recursivamente para construir essa sequência, considerarmos que:

$$a_p(a_q) = f(a_q)$$
 e $R_p(a_q) = R(a_q)$, $\forall p, q$

então os hamiltonianos correspondentes aos potenciais (2.69) e (2.70) serão, respectivamente:

$$H_{n+j} = H_n + \sum_{k=n}^{n+j-1} R(a_{k+1})$$
(2.71)

$$H_{n+j+1} = H_{n+1} + \sum_{k=n}^{n+j-1} R(a_{k+1})$$
(2.72)

e, como H_n e H_{n+1} são parceiros SUSI, então H_{n+j} e H_{n+j+1} também são, ou seja, a sequência de hamiltonianos assim construída forma uma hierarquia de hamiltonianos. Saber disso permite, utilizando os conhecimentos apresentados na seção 2.3.5, encontrar os valores das energias dos diversos níveis, bem como as autofunções correspondentes, de um sistema que apresenta invariância de forma.

A partir de (2.71) e sabendo que $E_0^n = 0$, encontramos que a energia do estado fundamental de H_{n+j} é dada por:

$$E_0^{n+j} = \sum_{k=n}^{n+j-1} R(a_{k+1})$$
(2.73)

e, conforme o que foi visto na seção 2.3.5, os valores das energias do hamiltoniano H_n se relacionam com os valores das energias dos estados fundamentais dos hamiltonianos H_{n+j} à direita na hierarquia de modo que $E_j^n = E_0^{n+j}$ $(j \ge 1)$. Além disso sabemos que $E_0^n = 0$. Assim, utilizando (2.62) e substituindo (2.73), temos:

$$E_0^n(a_n) = 0$$
 e $E_j^n(a_n) = \sum_{k=n}^{n+j-1} R(a_{k+1})$ (2.74)

que são os valores de todos os níveis de energia do hamiltoniano H_n , sendo estes dependentes dos parâmetros a_n .

Os estados de H_n também podem ser determinados, a partir de ψ_0^n (dado em (2.68)), por meio da hierarquia de hamiltonianos. Para fazer isso devemos notar que, conforme (2.71), o hamiltoniano H_{n+j} difere de H_n simplismente por uma soma de termos constantes. Essa soma é, conforme (2.73), a energia E_0^{n+j} do estado fundamental de H_{n+j} . Assim, a partir da equação de Schrödinger com o hamiltoniano H_{n+j} e com seu estado fundamental, temos:

$$H_{n+j}\psi_0^{n+j} = (H_n + E_0^{n+j})\psi_0^{n+j} = E_0^{n+j}\psi_0^{n+j} \implies H_n\psi_0^{n+j} = 0$$

$$\Rightarrow \quad \psi_0^{n+j} = \psi_0^n$$
(2.75)

Agora, utilizando (2.64), que relaciona estados de uma hierarquia de hamiltonianos, com k = j e, de acordo com (2.75), substituindo ψ_0^{n+j} por ψ_0^n , podemos escrever:

$$\psi_j^n = \left(\prod_{l=1}^j \left(E_{2j-l}^{n+l} - E_0^{n+l}\right)^{-1/2} A_{n+l-1}^{\dagger}\right) \psi_0^n \tag{2.76}$$

que permite determinar, a partir do estado fundamental ψ_0^n , todos os outros estados por meio da aplicação de operadores A^{\dagger} . No caso particular do OHS esses operadores serão justamente os operadores de criação (ou operadores escada) a^{\dagger} apresentados na seção 2.1.1, expressão (2.2).

Exemplo 2.2 (Problema Radial do Átomo de Hidrogênio). Um exemplo interessante da aplicabilidade dos conceitos de invariância de forma e hierarquia de hamiltonianos consiste em sua aplicação na resolução da equação radial do problema do átomo de hidrogênio. Essa possibilidade é estudada, por exemplo, em [10].

Em Mecânica Quântica resolver o problema do átomo de Hidrogênio consiste em resolver a equação de Schrödinger em 3 dimensões em coordenadas esféricas com um potencial coulombiano $V_c(r) = -\frac{e^2}{r}$. Para fazer isso empregamos o método de separação de variáveis supondo soluções da forma $\frac{u(r)}{r}Y(\theta,\varphi)$. A partir disso surgem duas equações diferenciais. Uma delas, a qual chamamos equação angular, é a equação diferencial parcial em θ e φ cujas soluções são os harmônicos esféricos $Y_{lm}(\theta,\varphi)$. A outra, a qual chamamos equação radial, é uma equação diferencial ordinária que tem a mesma forma de uma equação de Schrödinger em 1 dimensão (a coordenada r), mas com potencial:

$$V_r(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}$$
(2.77)

Podemos construir uma sequência de hamiltonianos com potenciais invariantes de forma semelhantes ao potencial $V_r(r)$ dado em (2.77). Essa sequência invariante de forma é constituida de potenciais que dependem de um parâmetro l de tal modo que ir de um elemento da sequência para outro elemento consecutivo consiste em realizar uma translação do tipo $l \rightarrow l + 1$. Escolhendo o potencial do primeiro hamiltoniano da sequência de tal modo que, para l = 0, a energia do estado fundamental desse hamiltoniano seja zero, temos:

$$V_1(r;l) = -\frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{e^4}{4(l+1)^2}$$
(2.78)

Os demais potenciais da sequência devem estar relacionados com o primeiro por meio da soma de fatores R(l). Se esses fatores forem da forma:

$$R(l) = \frac{e^4}{4l^2} - \frac{e^4}{4(l+1)^2}$$
(2.79)

então a sequência será:

$$\begin{split} V_1(r;l) &= -\frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{e^4}{4(l+1)^2} + \frac{e^4}{4(l+1)^2} - \frac{e^4}{4(l+1)^2} \\ V_2(r;l+1) &= V_1(r;l+1)) + R(l+1) \\ &= -\frac{e^2}{r} + \frac{(l+1)((l+1)+1)}{r^2} + \frac{e^4}{4((l+1)+1)^2} + \frac{e^4}{4(l+1)^2} - \frac{e^4}{4((l+1)+1)^2} \\ V_3(r;l+2) &= V_1(r;l+2) + R(l+1) + R(l+2) \\ &= -\frac{e^2}{r} + \frac{(l+2)((l+2)+1)}{r^2} + \frac{e^4}{4((l+2)+1)^2} + \frac{e^4}{4(l+1)^2} - \frac{e^4}{4((l+2)+1)^2} \\ \vdots \\ V_{j+1}(r;l+j) &= V_1(r;l+j) + \sum_{k=1}^{j} R(l+k) \\ &= -\frac{e^2}{r} + \frac{(l+j)((l+j)+1)}{r^2} + \frac{e^4}{4((l+j)+1)^2} + \frac{e^4}{4(l+1)^2} - \frac{e^4}{4((l+j)+1)^2} \\ \end{split}$$

Para formar uma hierarquia de hamiltonianos a partir dessa sequência de potenciais, devemos determinar superpotenciais que fatorizem cada um dos hamiltonianos correspondentes. Esses superpotenciais são:

$$W_j(r) = \frac{e^2}{2(l+j)} - \frac{(l+j)}{r}$$
(2.80)

de modo que a sequência de potenciais invariantes de forma pode ser redefinida como:

$$\begin{split} \tilde{V}_1 &= V_1 - \left[\frac{e^4}{4(l+1)^2} - \frac{e^4}{4(l+1)^2}\right] = W_1^2 - W_1' \\ \tilde{V}_2 &= V_2 - \left[\frac{e^4}{4(l+1)^2} - \frac{e^4}{4((l+1)+1)^2}\right] = W_2^2 - W_2' \\ \vdots \\ \tilde{V}_{j+1} &= V_{j+1} - \left[\frac{e^4}{4(l+1)^2} - \frac{e^4}{4((l+j)+1)^2}\right] = W_{j+1}^2 - W_{j+1}' \\ \vdots \end{split}$$

que são potenciais dois a dois parceiros SUSI, isto é, são potenciais que correspondem aos hamiltonianos de uma hierarquia.

De acordo com (2.73), a energia do estado fundamental de um hamiltoniano na posição (j + 1), j = 0, 1, 2, ..., da sequência é dada por:

$$E_0^{j+1} = \sum_{k=1}^j R(l+k) = \frac{e^4}{4(l+1)^2} - \frac{e^4}{4((l+j)+1)^2}$$
(2.81)

e, levando em consideração o emparelhamento de níveis de energia da hierarquia, de acordo com (2.74), temos:

$$E_j^1 = \frac{e^4}{4(l+1)^2} - \frac{e^4}{4((l+j)+1)^2}$$
(2.82)

O estado fundamental do hamiltoniano (j + 1), conforme (2.68) e passando a explicitar a dependência em l, é dado por:

$$\psi_{0,l}^{j+1} = \mathcal{N}_{j+1,l} \exp\left(-\int^r dr W_{j+1,l}(r)\right)$$
(2.83)

o que, definindo de acordo com nosso sistema de unidades $a \equiv \frac{2}{e^2}$, resulta em:

$$\psi_{0,l}^{j+1}(r) = \mathcal{N}_{j+1,l} r^{l+j+1} e^{-\frac{r}{a(l+j+1)}}$$
(2.84)

com

$$\mathcal{N}_{j+1,l} = \left(\left(\frac{a}{2}(l+j+1) \right)^{2l+2(j+1)+1} \Gamma(2j+2(j+1)+1) \right)^{-1/2}$$

Comparando (2.84) com as funções de onda radiais do átomo de hidrogênio, ou seja, com as soluções u(r) da equação de Schrödinger com o potencial $V_r(r)$ dado em (2.77) e levando em consideração a forma como essas funções dependem de l e j, temos:

$$\psi_{0,l}^{j+1}(r) = \psi_{0,l-k}^{j+1+k}(r) = u_{l+j+1,l+j}(r)$$
(2.85)

onde $l, k = 0, 1, 2, ... e k \le l$.

Utilizando agora a expressão (2.76) e escolhendo j = 0 em (2.84), podemos construir, a partir de $\psi_{0,l+j}^1(r)$ qualquer autofunção $\psi_{j,l}^1(r)$ de H_1 :

$$\psi_{j,l}^{1}(r) = \left(\prod_{q=1}^{j} \left(E_{2j-q}^{1+q} - E_{0}^{1+q}\right)^{-1/2} A_{q,l}^{\dagger}\right) \psi_{0,l+j}^{1}(r)$$
(2.86)

onde $A_{q,l}^{\dagger} = \left(W_{q,l}(r) - \frac{d}{dr}\right)$ com $W_{q,l}(r)$ dado em (2.80).

Escolhendo diferentes valores de l, as funções (2.86) serão as diferentes funções radiais do átomo de hidrogênio. Por exemplo, a função $\psi_{1,l}^1(r)$, obtida por meio de (2.86) a partir de $\psi_{0,l+1}^1(r)$, corresponde a $u_{2+l,l}(r)$, ou seja, $u_{2,0}(r)$ para l = 0, $u_{3,1}(r)$ para l = 1, $u_{4,2}(r)$ para l = 2 e assim por diante. De modo geral encontraremos a correspondência:

$$\psi_{i,l}^1(r) = u_{l+j+1,l}(r) \tag{2.87}$$

O hamiltoniano H_1 difere do hamiltoniano H_r da equação radial apenas por um fator extra $\frac{1}{a^2(l+1)^2}$, então, para obter os níveis de energia do átomo de hidrogênio basta subtrair esse fator de (2.82) para obter:

$$E_{l+j+1} = -\frac{1}{a^2(l+j+1)^2}$$
(2.88)

que é a energia do nível (l+j+1).

Seguindo a convenção, podemos definir $n \equiv (l + j + 1)$ e $\kappa \equiv a^{-1}$ em (2.87) e (2.88) e obter a bem conhecida expressão para o *n*-ésimo nível de energia do átomo de hidrogênio, $E_n = -\frac{\kappa^2}{n^2}$, correspondendo às autofunções $u_{n,l}(r)$, com $l \leq n - 1$.

3 Métodos de Aproximação

3.1 Método Variacional

3.1.1 O Método Variacional

Em Mecânica Quântica o *Método Variacional* é um método que permite encontrar aproximações para a função de onda e para a energia do estado fundamental e de estados excitados do sistema.

O ponto de partida para o emprego do método é a escolha de uma função tentativa $\phi(x)$ para fazer o papel de função de onda do estado fundamental do sistema. Embora essa escolha seja arbitrária, é interessante notar que é recomendável escolher funções tentativa cuja forma seja tão próxima quanto possível da forma que se supõe serem as funções de onda reais (desconhecidas). Essa escolha pode ser guiada, por exemplo, por características que sabemos *a priori* que as funções de onda de determinado tipo de sistema devem ter. Assim a escolha de funções tentativa com maior ou menor semelhança com as funções de onda reais conduz a aproximações, respectivamente, melhores ou piores. A função tentativa deve ainda depender de um ou mais parâmetros α indeterminados que são chamados *parâmetros variacionais*.

O segundo passo consiste na construção de um objeto chamado *funcional da energia*, que é definido de forma semelhante ao valor esperado do hamiltoniano do sistema, sendo esse valor esperado calculado como se a função de onda do sistema fosse a função tentativa. Para essa finalidade a função tentativa deve estar devidamente normalizada, como seria com a função de onda real. O funcional da energia assim construído é um funcional dos parâmetros variacionais sendo denotado por $E[\alpha]$.

Por fim, o método consiste no emprego do princípio variacional tomando como aproximação superior para o valor da energia o valor de $E[\alpha]$ minimizado com respeito com respeito aos parâmetros variacionais α . Então, encontrando os valores dos parâmetros α que tornam $E[\alpha]$ mínimo, esse valor mínimo é a aproximação para a energia que o Método Variacional fornece. A aproximação para a função de onda correspondente é obtida substituindo esses valores dos parâmetros α na função tentativa.

Na seção seguinte apresentaremos um possível meio de implementação do Método Variacional que será particularmente útil na resolução de um dos problemas do próximo capítulo.

3.1.2 Parâmetros Variacionais como Coeficientes de uma Série de Funções

Nesta seção apresentamos um possível caminho para a resolução de um problema em Mecânica Quântica por meio do Método Variacional. Mais adiante o Método Variacional assim apresentado será especialmente útil na resolução de um problema MQ SUSI envolvendo um oscilador anarmônico. Vamos empregar o método partindo de uma função tentativa na forma:

$$\phi(x) = \sum_{j=1}^{m} \alpha_j f_j(x) \tag{3.1}$$

onde j = 1, 2, ..., m. e os coeficientes $\alpha_j \in \mathbb{C}$ são os parâmetros variacionais. Aqui as funções $f_j(x)$ devem ser convenientemente escolhidas podendo levar a resultados melhores ou piores dependendo da escolha feita e das características do problema.

A partir da equação de Schrödinger com a função tentativa no lugar da função de onda, definimos o funcional da energia como:

$$E[\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m] = \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$
(3.2)

onde a presença do denominador do lado direito corresponde a normalizar a função tentativa $\phi(x)$.

O Método Variacional diz que encontrando os valores dos parâmetros α_j , $j = 1, \ldots, m$. que minimizam o funcional (3.2), esse valor mínimo é uma aproximação para a energia do estado fundamental no sistema descrito pelo hamiltoniano H. Além disso, substituindo os valores de α_j assim encontrados, a função (3.1) é uma aproximação para a função de onda desse estado fundamental. A forma como apresentaremos o Método Variacional aqui permite determinar não somente uma aproximação para o estado fundamental, mas também para os m primeiros níveis (lembrando que m é o número de parâmetros). Vejamos como isso é feito.

Multiplicando os dois lados de (3.2) por $\langle \phi | \phi \rangle$, substituindo (3.1) e derivando em relação a α_k , temos:

$$E[\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m] \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \sum_{i,j=1}^m \alpha_i^* \alpha_j \langle f_i | f_j \rangle = \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \sum_{i,j=1}^m \alpha_i^* \alpha_j \langle f_i | H | f_j \rangle$$

onde foi consirerado que $\frac{\partial E}{\partial \alpha_k} = 0$, uma vez que os parâmetros α_k correspondem a mínimos de E. Além disso devemos notar que as somas duplas surgem pois as funções $f_j(x)$ não necessariamente formam uma base ortogonal.

Com isso, omitindo a dependência de E com relação aos parâmetros α_j e definindo $S_{ij} \equiv \langle f_i | f_j \rangle$ e $H_{ij} \equiv \langle f_i | H | f_j \rangle$, temos:

$$E\sum_{i,j=1}^{m} \alpha_i^* \delta_{jk} \langle f_i | f_j \rangle = \sum_{i,j=1}^{m} \alpha_i^* \delta_{jk} \langle f_i | H | f_j \rangle$$

$$\Rightarrow \quad E\sum_{j=1}^{m} \alpha_j^* S_{jk} = \sum_{j=1}^{m} \alpha_j^* H_{jk}$$

$$\Rightarrow \quad \sum_{j=1}^{m} (ES_{kj} - H_{kj}) \alpha_j = 0$$

que corresponde a um sistema de m equações (uma para cada valor de k) e m incógnitas $\alpha_j, j = 1, 2, ..., m$. Podemos representar esse sistema por um produto de matrizes simplesmente como:

$$M\alpha = 0 \tag{3.3}$$

onde α é uma matriz coluna $m \times 1$ cujos elementos são os parâmetros α_j e M é uma matriz $m \times m$ com elementos dados por:

$$M_{kj} = (ES_{kj} - H_{kj}) \tag{3.4}$$

Para que esse sistema de equações tenha solução não trivial devemos exigir que o determinante de M seja zero:

$$\det M = 0 \tag{3.5}$$

A equação (3.5) é uma equação de grau m em E e as m soluções dessa equação são, em ordem crescente, os valores aproximados das energias $E_{j-1}, j = 1, 2, ..., m$. dos mprimeiros níveis do sistema.

Uma vez que tenhamos encontrado os valores de E por meio de (3.5), podemos substituir, por exemplo, o *n*-ésimo valor E_n novamente no sistema (3.3) e, juntamente com a condição de normalização:

$$1 = \sum_{i,j=1}^{m} \alpha_i^* \alpha_j S_{ij} \tag{3.6}$$

podemos então determinar os valores dos parâmetros α_j^n (onde o índice *n* destaca a correspondência com o *n*-ésimo nível). Substituindo esses parâmetros α_j^n assim determinados em (3.1) encontramos uma aproximação para a função de onda $\psi_n(x)$ associada à energia E_n .

Vale destacar que o Método Variacional conforme descrito acima é interessante quando estamos procurando soluções da equação de Schrödinger que apresentem alguma evidência de terem uma forma parecida com (3.1). Outras formas de funções tentativa com diferentes tipos de dependência nos parâmetros são perfeitamente possíveis, porém podem acabar tornando a resolução complicada. Aumentar o número de parâmetros variacionais também é um meio de melhorar a precisão do método com a desvantagem de tornar os cálculos mais trabalhosos aumentando o esforço computacional.

Exemplo 3.1 (Oscilador Harmônico Simples). Um exemplo interessante do funcionamento do Método Variacional conforme descrito aqui é utilizá-lo para resolver o probelma do OHS. Para o OHS podemos utilizar o método com a forma de função tentativa dada em (3.1) e, escolhendo $f_j(x) = x^{j-1}e^{-\frac{1}{2}x^2}$, encontrar inclusive as soluções exatas. Nesse caso os parâmetros α_j^n determinados serão, a menos da normalização, os coeficientes dos polinômios de Hermite $\mathcal{H}_n(x^2)$.

Exemplo 3.2 (Oscilador Anarmônico do Tipo x^4). A mesma escolha de $f_j(x)$ feita para o OHS pode ser adotada para um oscilador anarmônico com $V(x) = \frac{1}{4}x^4$. Nesse caso, utilizando 1 parâmetro, isto é, fazendo m = 1 em (3.1), encontramos um valor para a energia do estado fundamental $E_0 = 0,6875$, que difere em cerca de 2,9% do valor numérico dado em [11], 0,667986. Com 3 parâmetros, porém, encontramos um valor $E_0 = 0,680159$, diferindo já por apenas 1,8%. Já com 5 parâmetros, encontramos $E_0 = 0,668530$, de modo que essa diferença cai para 0,08%.

Resolvendo esse mesmo problema para funções tentativa da forma:

$$\phi(x) = \mathcal{N}_{\beta} e^{-\beta x^2}$$

е

$$\phi(x) = \mathcal{N}_{\gamma,\rho} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{\rho}\right)^{\gamma}\right]$$

sendo β , $\gamma \in \rho$ os parâmetros variacionais, encontramos, conforme [11], diferenças de, respectivamente, 2,0% e 0,2%, que embora correspondam a valores mais precisos com um menor número de parâmetros, acabam levando (no caso de 2 parâmetros) a um sistema bem mais complicado de se resolver do que (3.3).

3.2 Teoria de Perturbações Logarítmica

3.2.1 A Teoria de Perturbações Logarítmica

A Teoria de Perturbações Logarítmica é um método de aproximação que determina o estado fundamental de um sistema em Mecânica Quântica. Embora determinar apenas o estado fundamental pareça uma desvantagem inicialmente, ao contrário da teoria de perturbações usual da Mecânica Quântica, que para determinar elementos de certas ordens de correção necessita do conhecimento de uma base completa de autoestados do caso não perturbado, a teoria aqui apresentada é um procedimento recursivo que não impõe essa exigência. Além disso, fazendo uso da hierarquia de hamiltonianos, é possível, conforme descrito na seção 2.3.5 do capítulo 2, converter o problema de determinar vários estados excitados em vários problemas de determinar estados fundamentais e, desse modo, podemos remover a aparente limitação do método.

Vamos considerar a equação de Schrödinger para o estado fundamental de um sistema descrito pelo potencial V(x).

$$p^{2}\psi_{0}(x) + V(x)\psi_{0}(x) = E_{0}\psi_{0}(x)$$
(3.7)

Suponhamos agora que o potencial V(x) dependa de algum parâmetro δ de modo que V(x) possa ser escrito como uma expansão em série de potências de δ , ou seja, suponhamos que:

$$V(x) = \sum_{n=0}^{\infty} V_n(x)\delta^n$$
(3.8)

Vamos considerar ainda que a energia do estado fundamental E_0 também possa ser escrita na forma de uma série assim como o potencial V(x). Essa série será então ¹:

$$E_0 = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \delta^n \tag{3.9}$$

Da mesma forma que fizemos na seção 2.3.5 do capítulo 2, podemos considerar um hamiltoniano \tilde{H} com energia do estado fundamental $\tilde{E}_0 = 0$ obtido a partir do hamiltoniano original do nosso problema por meio da subtração da energia E_0 do estado fundamental, ou seja, tal que:

$$\tilde{V}(x) = V(x) - E_0$$

onde $\tilde{V}(x)$ é o potencial associado ao hamiltoniano \tilde{H} . Com isso, supondo que o hamiltoniano \tilde{H} seja fatorizável, de modo a permitir a definição de um superpotencial

¹Vamos usar a letra B ao invés de E para representar os coeficiente da série de modo a evitar confusão, por exemplo, entre E_0 , que é a energia do estado fundamental, e B_0 , que é o coeficiente de ordem zero da série (ou correção de ordem zero à energia)

W(x)² e considerando que seja possível encontrar um estado fundamental normalizável a partir de W(x), então, conforme (2.32), a função de onda desse estado fundamental será:

$$\psi_0(x) = \mathcal{N} \exp\left(-\int^x W(y)dy\right) \tag{3.10}$$

e substituindo (3.10) na equação de Schrödinger (3.7) e rearranjando devidamente os termos, chegamos a:

$$V(x) - E_0 = W(x)^2 - W'(x)$$
(3.11)

que é simplesmente a equação de Riccati (2.8).

A equação de Riccati (3.11) que surge como consequência de substituir (3.10) na equação de Schrödinger pode ser entendida como uma equação de Schrödinger transformada que surge da escolha de trabalhar com a quantidade ln ψ_0 em lugar de ψ_0 . Essa nova quantidade ln ψ_0 é um *logaritmo* e está relacionada com o superpotencial W(x)por meio de (3.10). Esse é o motivo do nome "teoria de perturbações *logarítmica*". Alguns autores, entretanto, chamam esse método de aproximação simplesmente de "*expansão* δ ", o que é uma nomenclatura talvez um pouco genérica demais.

Por fim, consideramos que o superpotencial W(x) também tem uma expansão em série do tipo:

$$W(x) = \sum_{n=0}^{\infty} W_n(x)\delta^n$$
(3.12)

e, ainda, que cada $W_n(x)$ satisfaz a condição $W_n(0) = 0$.

Substituindo (3.8), (3.9) e (3.12) na equação (3.11), temos:

²O superpotencial W(x) não precisa ser (e em geral não é) conhecido *a priori*. Mesmo que não seja possível encontrar um W(x) que torne \tilde{H} fatorizável, vamos supor que W(x) existe.

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[V_n(x) - B_n \right] \delta^n = \sum_{n,m=0}^{\infty} W_n(x) W_m(x) \delta^{n+m} - \sum_{n=0}^{\infty} W'_n(x) \delta^n$$
(3.13)

Colecionando um a um os termos correspondentes a potências iguais de δ , a equação (3.13) fornece:

$$V_0(x) - B_0 = W_0(x)^2 - W_0'(x) \qquad n = 0$$

$$V_1(x) - B_1 = 2W_0(x)W_1(x) - W_1'(x) \qquad n = 1$$

$$V_2(x) - B_2 = 2W_0(x)W_2(x) - W'_2(x) + W_1(x)^2 \qquad n = 2$$

$$V_{3}(x) - B_{3} = 2W_{0}(x)W_{3}(x) - W_{3}'(x) + 2W_{1}(x)W_{2}(x) \qquad n = 3$$
$$V_{4}(x) - B_{4} = 2W_{0}(x)W_{4}(x) - W_{4}'(x) + W_{2}(x)^{2} + 2W_{1}(x)W_{3}(x) \qquad n = 4$$
$$\vdots \qquad \vdots$$

onde os diferentes valores de n são as diversas ordens de perturbação. Podemos sumarizar as equações para as diferentes ordens de perturbação como:

$$V_0(x) - B_0 = W_0(x)^2 - W_0'(x) , \qquad n = 0 \qquad (3.14)$$

$$V_1(x) - B_1 = 2W_0(x)W_1(x) - W_1'(x) , \qquad n = 1 \qquad (3.15)$$

е

$$V_n(x) - B_n = 2W_0(x)W_n(x) - W'_n(x) + \sum_{k=1}^{n-1} W_k(x)W_{n-k}(x), \quad n = 2, 3, 4, \dots \quad (3.16)$$

As equações para as diferentes ordens de perturbação podem ser resolvidas recursivamente para determinar por meio de (3.9) o valor da energia E_0 do estado fundamental do sistema. A seguir veremos como isso é feito.

Ordem Zero

A equação de ordem zero (3.14), é simplesmente uma equação de Riccati. Resolvê-la para $W_0(x)$ e B_0 corresponde a encontrar o valor da energia B_0 do estado fundamental de um hamiltoniano H_0 cujo potencial é $V_0(x)$ e, em seguida, fatorizar um hamiltoniano $\tilde{H}_0 = H_0 - B_0$, encontrando o superpotencial $W_0(x)$. Esse superpotencial $W_0(x)$ pode ser usado na definição da função de onda do estado fundamental de H_0 (ou de \tilde{H}_0), que, de acordo com (2.32) será:

$$\varphi_0(x) = \mathcal{N}e^{-\int^x W_0(y)dy} \tag{3.17}$$

onde \mathcal{N} é o fator de normalização correspondente.

Aqui $B_0 \in \varphi_0(x)$ são, respectivamente, as correções de ordem zero para a energia e para a função de onda do estado fundamental do sistema. Encarando esses dois objetos como *correções*, dizemos então que a energia e a função de onda do estado fundamental do sistema em *ordem zero de aproximação* são, respectivamente:

$$E_0 = B_0$$
 e $\psi_0(x) = \varphi_0(x) = \mathcal{N}e^{-\int^x W_0(y)dy}$ (3.18)

que, se pensarmos em δ como a constante de acoplamento de uma "perturbação" ao potencial $V_0(x)$, corresponderia à solução do caso "não perturbado".

Ordem 1

Multiplicando os dois lados da equação (3.15) por $-|\varphi_0(x)|^2$, sendo $\varphi_0(x)$ dado por (3.17), temos:

$$B_1|\varphi_0(x)|^2 - V_1(x)|\varphi_0(x)|^2 = \frac{d}{dx} \left(W_1(x)|\varphi_0(x)|^2 \right)$$
(3.19)

Considerando que $\varphi_0(x)$ é de quadrado integrável e está normalizada, ou seja, sa-

bendo que:

$$\lim_{x \to \pm \infty} |\varphi_0(x)|^2 = 0 \qquad e \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\varphi_0(x)|^2 = 1$$

e integrando a equação (3.19) sobre todo o eixo encontramos:

$$B_1 = \langle \varphi_0 | V_1(x) | \varphi_0 \rangle \tag{3.20}$$

que é a correção de primeira ordem para a energia do estado fundamental do sistema.

Para determinar o coeficiente $W_1(x)$ da expansão (3.12) de W(x), uma vez tendo determinado B_1 por meio de (3.20), fazemos uso da condição $W_n(0) = 0$ de modo que, integrando a equação (3.19), encontramos:

$$W_1(x) = |\varphi_0(x)|^{-2} \int_0^x dy |\varphi_0(y)|^2 \left[B_1 - V_1(y)\right]$$
(3.21)

e com isso, a energia e a função de onda do estado fundamental do sistema em *primeira* ordem de aproximação serão, respectivamente:

$$E_0 = B_0 + \delta B_1 = B_0 + \delta \langle \varphi_0 | V_1(x) | \varphi_0 \rangle$$
(3.22)

е

$$\psi_0(x) = e^{-\int^x dy [W_0(y) + \delta W_1(y)]} = e^{-\int^x dy W_0(y)} \left[1 - \delta \int^x dy W_1(y) \right]$$
(3.23)

Ordem n

Para encontrar a energia e a função de onda em *n*-ésima ordem de aproximação, com $n \ge 2$, devemos seguir, ordem a ordem, um procedimento idêntico ao do caso de primeira ordem. A cada ordem para a qual seguimos esse procedimento, devemos encontrar a correção à energia e o coeficiente da expansão de W(x) correspondente a essa ordem. Assim ao chegar a uma ordem $n \ge 2$ qualquer, devemos ter em mãos os resultados de todas as ordens anteriores.

De maneira idêntica àquela em que chegamos à correção de primeira ordem à energia (3.20), mas utilizando (3.16) ao invés de (3.15), chegamos a:

$$B_n = \langle \varphi_0 | \left[V_n(x) - \sum_{k=1}^{n-1} W_k(x) W_{n-k}(x) \right] | \varphi_0 \rangle$$
(3.24)

que é a correção de ordem n à energia do estado fundamental do sistema e, da mesma forma para $W_n(x)$:

$$W_n(x) = |\varphi_0(x)|^{-2} \int_0^x dy |\varphi_0(y)|^2 \left[B_n - V_n(y) + \sum_{k=1}^{n-1} W_k(y) W_{n-k}(y) \right]$$
(3.25)

Assim, a energia e a função de onda do estado fundamental do sistema em n-ésima ordem de aproximação serão, respectivamente:

$$E_0 = B_0 + \delta B_1 + \delta^2 B_2 + \ldots + \delta^n B_n$$
(3.26)

е

$$\psi_0(x) = e^{-\int^x dy \left[W_0(y) + \delta W_1(y) + \delta^2 W_2(x) + \dots + \delta^n W_n(x) \right]}$$
(3.27)

3.2.2 Reparametrização de Potenciais

Conforme a seção 3.2.1, um dos primeiros passos para aplicar a teoria de perturbações logarítmica é escrever o potencial V(x) na forma (3.8), ou seja, na forma de uma série de potências em δ , sendo δ algum parâmetro do qual depende o potencial. Nem sempre, porém, o potencial depende de algum parâmetro da forma conveniente para a aplicação do método. Uma possibilidade de escapar disso é trocar o potencial original V(x) por um novo potencial $V(x;\delta)$ que depende de δ de modo conveniente e de modo que, para um certo $\delta = \delta_1$, tenhamos $V(x;\delta_1) = V(x)$. Sendo assim, o potencial $V(x;\delta)$ é chamado de *potencial reparametrizado*. Além da condição $V(x; \delta_1) = V(x)$, há um outro fator a ser considerado ao se determinar a forma, isto é, a dependência em δ de um potencial reparametrizado. Esse fator é a forma do potencial reparametrizado quando $\delta = \delta_0$, onde δ_0 é o valor em torno do qual as expansões em série de potências estão sendo feitas. No caso da seção 3.2.1 as expansões foram todas tomadas em torno de $\delta_0 = 0$, mas poderíamos, é claro, ter considerado outro valor de δ_0 . Se o potencial reparametrizado for tal que $V(x; \delta_0) = V_0(x)$, onde $V_0(x)$ seja um potencial para o qual conhecemos bem a solução da equação de Schrödinger para o estado fundamental, então a resolução da equação de ordem zero (3.14) pode se tornar muito mais simples.

Na aplicação da Teoria de Perturbações Logarítmica sempre efetuamos os cálculos tratando δ como um parâmetro pequeno (tipicamente $\delta \ll 1$). Isso, porém, não é necessariamente verdade. Conforme a forma da reparametrização, por exemplo, o valor de $\delta = \delta_1$ para o qual $V(x; \delta_1) = V(x)$ pode levar as séries a divergirem. Um procedimento frequentemente sugerido [11] [19] [20] [21] [24] para contornar isso consiste em substituir as séries divergentes por aproximantes de Padé e tomar esses aproximantes como resultado.

Exemplo 3.3 (Oscilador Anarmônico do Tipo x^4). Um exemplo de aplicação da Teoria de Perturbações Logarítmica empregando a reparametrização do potencial é apresentado em [19] e depois reapresentado no livro [11] pelo mesmo autor. Nesse exemplo é resolvido o problema do potencial de oscilador anarmônico $V(x) = \frac{1}{4}x^4$ que, sendo reparametrizado como:

$$V(x;\delta) = \left[\left(\frac{1}{4}\right)^{1/3}\right]^{2+\delta} \left(x^2\right)^{1+\delta}$$
(3.28)

fornece, por meio do método da Teoria de Perturbações Logarítmica em primeira ordem de aproximação, o seguinte resultado para a energia do estado fundamental:

$$E_0 = \left(\frac{1}{4}\right)^{1/3} \left[1 + \frac{1}{2}\psi(3/2)\right]$$
(3.29)

onde $\psi(z) \equiv \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)}$ é a função digama.

Substituindo o valor da função digama em (3.29) para obter a energia do estado fundamental, encontramos $E_0 = 0,6415$ que difere em cerca de 4% do resultado numérico dado em [11]. Com isso, comparando esse resultado com aquele obtido para o mesmo potencial $\frac{1}{4}x^4$ pelo Método Variacional, conforme apresentado no exemplo 3.2 da seção 3.1.2, vemos que, nesse caso, a aproximação em primeira ordem na Teoria de Perturbações Logarítmica é pior do que aquela encontrada pelo Método Variacional, mesmo quando se aplica este método com apenas um único parâmetro. Esperamos, é claro, melhorar esse resultado para maiores ordens de aproximação.

1 /.

4 Aplicações

4.1 Superpotenciais do Tipo $W(x) = gx^{2n+1}$

Vamos considerar superpotenciais do tipo:

$$W(x) = gx^{2n+1} \tag{4.1}$$

isto é, na forma de monômios com potências ímpares de x. Utilizando a equação de Riccati (2.8), sabemos que os potenciais associados a esse tipo de superpotencial são:

$$V_{\pm}(x) = W(x)^2 \pm W'(x) = g^2 x^{4n+2} \pm g(2n+1)x^{2n}$$
(4.2)

O exemplo mais simples de superpotenciais da forma (4.1) ocorre para n = 0. Nesse caso os potenciais parceiros associados são, conforme (4.2):

$$V_{\pm}(x) = g^2 x^2 \pm g \tag{4.3}$$

que são os potenciais de osciladores harmônicos deslocados.

Para o caso de qualquer $n \ge 0$ em superpotenciais como (4.1), é possível encontrar um estado fundamental normalizável por meio de (2.32). Esse estado fundamental normalizado, associado ao sistema definido pelo potencial $V_{-}(x)$, é dado por:

$$\psi_0^-(x) = \mathcal{N}e^{-\int^x dy W(y)} = \left(\frac{g(n+1)^{2n+1}}{\Gamma\left(\frac{1}{2(n+1)}\right)^{2(n+1)}}\right)^{1/4(n+1)} e^{-g(x^2)^{n+1}/2(n+1)}$$
(4.4)

onde o fator de normalização correspondente foi calculado explicitamente.

Conforme explicado na seção 2.3.4 do capítulo 2, esperamos que para superpotenciais que obedecem à regra $W(x) \leq 0$ para $x \leq 0$ a SUSI se manifeste. Este é precisamente o caso dos superpotenciais da forma (4.1) que são monômios com potências ímpares de x. Ao contrário, para monômios com potências pares de x devemos observar a quebra da SUSI. Para contornar isso podemos utilizar a função sinal $\varepsilon(x)$ e estudar superpotenciais da forma $W(x) = g\varepsilon(x)x^{2n}$, que é uma possibilidade ainda não explorada na literatura. Faremos isso nas próximas seções para n = 0 e n = 1.

4.2 Superpotencial $W(x) = g\varepsilon(x)$

Vamos considerar o superpotencial:

$$W(x) = g\varepsilon(x) \tag{4.5}$$

onde g é uma constante positiva e $\varepsilon(x) = \theta(x) - \theta(-x)$ é, em termos da função degrau de Heaviside, a função sinal.

Para esse superpotencial a equação de Riccati (2.8) fornece os seguintes potenciais parceiros supersimétricos:

$$V_{\mp}(x) = W(x)^2 \mp W'(x) = g^2 \mp 2g\delta(x)$$
(4.6)

onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac.

A forma desses potenciais pode ser vista na figura 4.1. Um deles, V_{-} , tem a forma

de um poço delta enquanto o outro, V_+ , é uma barreira delta. A equação de Schrödinger para os potenciais $V_{\pm}(x)$ é:

$$(p^2 + g^2 \pm 2g\delta(x))\psi^{\pm}(x) = E^{\pm}\psi^{\pm}(x)$$
(4.7)



Figura 4.1: Potenciais parceiros SUSI associados ao superpotencial $W(x) = g\varepsilon(x)$.

Utilizando a representação do operador momento no espaço das posições, $p = -i\frac{d}{dx}$, e rearranjando os termos de forma conveniente, reescrevemos (4.7) como:

$$-\psi^{\pm \prime\prime}(x) \pm 2g\delta(x)\psi^{\pm}(x) = (E^{\pm} - g^2)\psi^{\pm}(x)$$
(4.8)

Esse é o bem conhecido problema do poço delta de Dirac (no caso do potencial ser V_{-}) e da barreira delta de Dirac (no caso do potencial ser V_{+}). Procurando, para o caso do poço, soluções de (4.8) que sejam estados ligados, ou seja, com $(E^{-} - g^{2}) \leq 0$, encontramos:

$$E_0^- = 0$$

$$\psi_0^- = \sqrt{g} e^{-g|x|}$$
(4.9)

que é o estado fundamental com energia zero e também o único estado ligado desse sistema.

Todos os outros estados tem a forma de ondas planas com um espectro contínuo de energia. Tanto para o caso do poço quanto para o caso da barreira delta, as soluções da equação de Schrödinger (4.8) que são estados de espalhamento, ou seja, com $(E^{\pm} - g^2) > 0$ tem a forma de ondas planas sendo dadas por:

$$\psi_I^{\pm}(x) = \mathcal{A}_{\pm} e^{ikx} + \mathcal{B}_{\pm} e^{-ikx} \qquad , \qquad x \le 0 \qquad (4.10)$$

$$\psi_{II}^{\pm}(x) = \mathcal{C}_{\pm} e^{ikx} + \mathcal{D}_{\pm} e^{-ikx} \qquad , \qquad x \ge 0 \qquad (4.11)$$

onde $k = \sqrt{E^{\pm} - g^2}$ e as energias E^{\pm} podem assumir qualquer valor real positivo.

Assim, percebemos que o sistema definido pelo hamiltoniano H_{-} tem um estado fundamental de energia $E_0 = 0$ e infinitos estados com energias $E^- > 0$ tais que, para cada um desses valores $E^- \neq 0$ existe um valor de energia E^+ de H_+ satisfazendo $E^+ = E^-$. Essas são as primeiras características da manifestação da SUSI nesse sistema.

Se considerarmos o caso de uma partícula que se move sobre o eixo x da esquerda para a direita de modo que não possa haver nenhuma partícula sendo refletida do infinito positivo, então devemos escolher $\mathcal{D}_{\pm} = 0$ em (4.11). Além disso, impondo a condição de continuidade da solução da equação de Schrödinger em x = 0, encontramos que:

$$\mathcal{C}_{\pm} = \mathcal{A}_{\pm} + \mathcal{B}_{\pm} \tag{4.12}$$

e, integrando a equação de Schrödinger de $-\epsilon$ até $+\epsilon$ e depois tomando o limite $\epsilon \to 0$, chegamos a:

$$\mathcal{C}_{\pm} = \left(1 + i\frac{2(\mp g)}{k}\right)\mathcal{A}_{\pm} + \left(-1 + i\frac{2(\mp g)}{k}\right)\mathcal{B}_{\pm}$$
(4.13)

Solucionando o sistema formado por (4.12) e (4.13) para \mathcal{B}_{\pm} e \mathcal{C}_{\pm} em função de \mathcal{A}_{\pm} obtemos:

$$\mathcal{B}_{\pm} = i \frac{\frac{(\mp g)}{k}}{\left(1 - i \frac{(\mp g)}{k}\right)} \mathcal{A}_{\pm} \qquad e \qquad \mathcal{C}_{\pm} = \frac{1}{\left(1 - i \frac{(\mp g)}{k}\right)} \mathcal{A}_{\pm}$$
(4.14)

Podemos definir os coeficientes de reflexão e transmissão, que são, respectivamente, as probabilidades da partícula incidente ser refletida pelo potencial ou ser transmitida através dele, como:

$$R_{\pm} = \frac{|\mathcal{B}_{\pm}|^2}{|\mathcal{A}_{\pm}|^2} = \frac{\left(\frac{g}{k}\right)^2}{1 + \left(\frac{g}{k}\right)^2} = \frac{g^2}{E}$$
(4.15)

$$T_{\pm} = \frac{|\mathcal{C}_{\pm}|^2}{|\mathcal{A}_{\pm}|^2} = \frac{1}{1 + \left(\frac{g}{k}\right)^2} = \frac{E - g^2}{E}$$
(4.16)

Substituindo (4.14) em (4.10) e (4.11), temos:

$$\psi_I^{\pm}(x) = \mathcal{A}_{\pm} \left\{ e^{ikx} + i \frac{\frac{(\mp g)}{k}}{\left(1 - i \frac{(\mp g)}{k}\right)} e^{-ikx} \right\} \qquad , \qquad x \le 0 \qquad (4.17)$$

$$\psi_{II}^{\pm}(x) = \mathcal{A}_{\pm} \frac{1}{\left(1 - i\frac{(\mp g)}{k}\right)} e^{ikx} \qquad , \qquad x \ge 0 \qquad (4.18)$$

Para verificar que $\psi_I^{\pm}(x)$ e $\psi_{II}^{\pm}(x)$ podem ser relacionados, respectivamente, com $\psi_I^{\mp}(x)$ e $\psi_{II}^{\mp}(x)$ por meio de regras como (2.38) e (2.39), devemos aplicar sobre essas funções operadores A e A^{\dagger} e averiguar que isso converte uma função "+" em uma "-" e vice-versa. Fazendo isso para, por exemplo, o operador A atuando em $\psi_I^{-}(x)$ e desconsiderando fatores multiplicativos constantes como \mathcal{A}_{\pm} , temos:

$$A\psi_I^-(x) \propto \left(g\varepsilon(x) + \frac{d}{dx}\right) \left\{ e^{ikx} + i\frac{\frac{g}{k}}{\left(1 - i\frac{g}{k}\right)} e^{-ikx} \right\}$$
$$\propto \left\{ e^{ikx} + i\frac{\frac{-g}{k}}{\left(1 - i\frac{-g}{k}\right)} e^{-ikx} \right\}$$
$$\propto \psi_I^+(x)$$

o que equivale a satisfazer (2.38) para ψ_I^- .

Aplicando $A \in A^{\dagger}$ nas demais funções verificamos que as soluções (4.17) e (4.18) satisfazem relações do tipo (2.38) e (2.39), o que corresponde, juntamente com a equiparação de níveis de energia, à manifestação da SUSI nesse sistema.

4.3 Superpotencial $W(x) = g\varepsilon(x)x^2$

4.3.1 Buscando Soluções Analíticas da Equação de Schrödinger

Vamos considerar agora o superpotencial:

$$W(x) = g\varepsilon(x)x^2 \tag{4.19}$$

onde g é uma constante positiva e $\varepsilon(x) = \theta(x) - \theta(-x)$ é, em termos da função degrau de Heaviside, a função sinal.

Para esse superpotencial a equação de Riccati (2.8) fornece os seguintes potenciais parceiros supersimétricos:

$$V_{\mp}(x) = W(x)^2 \mp W'(x) = g^2 x^4 \mp 2g|x|$$
(4.20)

A forma desses potenciais pode ser vista na figura 4.2. Um fato curioso aqui é que o desenho de V_+ forma na origem uma continuação suave do desenho de V_- .

A equação de Schrödinger para esses potenciais é:

$$\left(p^2 + g^2 x^4 \pm 2g|x|\right)\psi^{\pm}(x) = E^{\pm}\psi^{\pm}(x) \tag{4.21}$$

Do mesmo modo que foi feito em (4.8), reescrevemos (4.21), agora para o potencial V_{-} , como:

$$-\psi''(x) + \left(g^2 x^4 - 2g|x|\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{4.22}$$



Figura 4.2: Potenciais parceiros SUSI associados ao superpotencial $W(x) = \varepsilon(x)x^2$.

onde os índices "--" foram omitidos para não carregar demais a notação.

Procurando para a equação (4.22), para o caso E = 0, soluções da forma $\psi(x) = \mathcal{N}e^{\alpha(x)}$, encontramos que, para $\alpha(x) = -\frac{1}{3}g|x|^3$, temos uma solução exata sem nós, correspondendo ao estado fundamental de energia zero de H_- . Esse é o primeiro passo para observar a manifestação da SUSI nesse sistema. Essa solução (já normalizada) é então:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} \frac{g^{1/6}}{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}} e^{-g|x|^3/3}$$
(4.23)

Inspirados pelo método analítico de resolução do problema do OHS e pela forma da solução já encontrada em (4.23), vamos supor que as soluções gerais sejam da forma¹:

$$\psi(x) = F(x)e^{-g|x|^3/3} \tag{4.24}$$

Substituindo (4.24) na equação de Schrödinger (4.22), temos:

$$F''(x) - 2g\varepsilon(x)x^2F'(x) + EF(x) = 0$$
(4.25)

¹No caso do OHS, as soluções são consideradas da forma $H(x)e^{-x^2/2}$ e a imposição das condições de contorno acaba restringindo as funções H(x) a serem os polinômios de Hermite $\mathcal{H}_n(x^2)$.

No caso do OHS esse passo levaria à equação de Hermite. No nosso caso levou à equação (4.25), que é, para uma escolha particular de parâmetros, a *equação tricon-fluente de Heun*.

A equação triconfluente de Heun é em geral dada por:

$$y''(z) + (-\gamma - 3z^2) y'(z) + (\alpha + \beta z - 3z) y(z) = 0$$
(4.26)
que, para $\gamma = 0, \ \alpha = \left(\frac{3}{2g}\right)^{2/3} E, \ \beta = 3 \ e \ z = \left(\frac{2g}{3}\right)^{1/3} x, \ se \ reduz \ à \ (4.25).$

Vamos tentar solucionar a equação (4.25) por meio do método de Frobenius. Começamos supondo que as soluções F(x) podem ser escritas na forma de uma série de potências como:

$$F(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j \tag{4.27}$$

Substituindo F(x) na forma (4.27) na equação diferencial (4.25), temos:

$$\sum_{j=0}^{\infty} j(j-1)a_j x^{j-2} - 2g\varepsilon(x) \sum_{j=0}^{\infty} ja_j x^{j+1} + E \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j = 0$$

e, redefinindo os índices de soma e rearranjando os termos convenientemente nessa expressão, chegamos a:

$$2a_2 + Ea_0 + \sum_{j=1}^{\infty} \left[(j+2)(j+1)a_{j+2} - 2g\varepsilon(x)(j-1)a_{j-1} + Ea_j \right] = 0$$

de modo que, dados a_0 e a_1 , a equação acima é satisfeita para coeficientes a_j , $j \ge 2$, dados por:
$$a_2 = -\frac{E}{2}a_0 , j = 2 (4.28)$$

$$a_j = \frac{2g\varepsilon(x)(j-3)a_{j-3} - Ea_{j-2}}{j(j-1)} , \qquad j \ge 3$$
(4.29)

Assim, a equação diferencial (4.25) é satisfeita por funções F(x) na forma dada em (4.27) com coeficientes $a_0 e a_1$ determinados por condições de contorno, a_2 dado por (4.28) $e a_j, j \ge 3$ dados por (4.29).

Se estivéssemos resolvendo a equação de Hermite para o problema do OHS, teríamos chegado, no lugar de (4.28) e (4.29), na relação:

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-E}{(j+1)(j+2)}a_j$$

e, para construir soluções que fossem funções de onda de quadrado integrável, exigiríamos, naquele caso, que a série H(x) (o análogo de F(x)) fosse truncada para um certo valor $j_{\text{máx}} = n$ tal que tivéssemos $a_{n+2} = 0$ e a_n fosse o último coeficiente não nulo da série. Isso podia ser alcançado para E = 2n+1, o que determinava os possíveis valores da energia e as autofunções correspondentes.

Voltando ao nosso caso, notamos que a relação (4.29), que determina os coeficientes da série F(x), é uma relação de recorrência de 3 índices e não permite escolher uma expressão para E que trunque a série em determinado ponto. Essa é a dificuldade que encontramos ao tentar resolver o problema associado ao potencial $V_{-}(x)$ dado em (4.20) e, para tentar contornar isso, partimos então para tentativas de encontrar soluções aproximadas.

4.3.2 Buscando Soluções Aproximadas pelo Método Variacional

Vamos empregar o Método Variacional conforme descrito na seção 3.1.2 do capítulo 3. Aqui vamos utilizar uma função tentativa da forma (3.1) com $f_j(x)$ dado por:

$$f_j(x) = x^{j-1} e^{-|x|^3/3} \tag{4.30}$$

sendo que estamos, a partir de agora, considerando unidades tais que g = 1. Mais tarde recolocaremos g nos devidos lugares.

Essa escolha de função tentativa é semelhante àquela que leva às soluções exatas do OHS (ver exemplo 3.1 na seção 3.1.2 do capítulo 3). Naquele caso os parâmetros variacionais encontrados são, a menos da normalização, os coeficientes dos polinômios de Hermite $\mathcal{H}_n(x^2)$. Ao escolher uma função tentativa com $f_j(x)$ conforme (4.30) a melhor situação possível seria se as soluções da equação triconfluente de Heun (4.25) que fazem com que (4.24) seja de quadrado integrável fossem algum polinômio de grau m, $\mathcal{F}_m(x)$. Se fosse assim bastaria considerar um número de parâmetros variacionais maior ou igual a m e o Método Variacional forneceria, com a função tentativa proposta, as soluções exatas do problema. Nesse caso os parâmetros α_j seriam então, a menos da normalização, os coeficientes desses polinômios $\mathcal{F}_m(x)$.

O que ocorre em geral porém, é que as soluções exatas da equação (4.25) são, conforme encontrado por meio do método de Frobenius, uma série com infinitos termos e não um polinômio. Nesse caso o que o Método Variacional fará então será aproximar essa série por um polinômio de grau m. Se utilizarmos um número muito grande de parâmetros variacionais, devemos encontrar, a menos da normalização, valores de α_j que se aproximam dos valores dos coeficientes da série.

A partir da equação de Riccati (4.20) com g = 1 temos:

$$V_{\pm}(x) = x^4 \pm 2|x| \tag{4.31}$$

Uma vez que escolhemos $f_j(x)$ real, os elementos de matriz S_{kl} e H_{kl} serão simétricos pela troca dos índices e, conforme (3.4), os elementos da matriz M para a nossa escolha de função tentativa, serão dados por:

$$M_{kl} = (ES_{kl} - H_{kl}) (4.32)$$

Para os potenciais parceiros (4.31), os elementos de matriz S_{kl} e H_{kl} são dados por:

$$S_{kl} = \langle f_k | f_l \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{-\frac{2}{3}|x|^3} x^{k+l-2}$$

$$(4.33)$$

$$(H_{\pm})_{kl} = \langle f_k | H_{\pm} | f_l \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{-\frac{2}{3}|x|^3} \left[-(l-1)(l-2)x^{k+l-4} + 2(l\pm 1)\varepsilon(x)x^{k+l-1} \right]$$

$$(4.34)$$

No caso de (k + l) ser um número ímpar, as integrais (4.33) e (4.34) acima tem integrandos que são funções ímpares e então, como a integração é sobre um intervalo simétrico, encontramos que $S_{kl} = (H_{\pm})_{kl} = 0$. Caso contrário, se (k+l) for um número par, encontramos:

$$S_{kl} = \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{k+l-4}{3}} \Gamma\left(\frac{k+l-1}{3}\right)$$
(4.35)

$$(H_{\pm})_{kl} = -2\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{k+l-3}{3}} \left[\frac{(l-1)(l-2) - (l\pm1)(k+l-3)}{(k+l-3)}\right] \Gamma\left(\frac{k+l}{3}\right)$$
(4.36)

e com isso determinamos, conforme (4.32) a forma da matriz M:

$$M_{\pm} = \begin{pmatrix} (M_{\pm})_{11} & 0 & (M_{\pm})_{13} & 0 & \dots & (M_{\pm})_{1m} \\ 0 & (M_{\pm})_{22} & 0 & (M_{\pm})_{24} & \dots & (M_{\pm})_{2m} \\ (M_{\pm})_{31} & 0 & (M_{\pm})_{33} & 0 & \dots & (M_{\pm})_{3m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (M_{\pm})_{m1} & (M_{\pm})_{m2} & (M_{\pm})_{m3} & (M_{\pm})_{m4} & \dots & (M_{\pm})_{mm} \end{pmatrix}$$
(4.37)

Nessa matriz todos os elementos nas posições (k, l) tais que (k+l) é impar são nulos

enquanto aqueles para os quais (k+l) é par são dados por (4.32) com S_{kl} e H_{kl} dados por (4.35) e (4.36).

Para encontrar os valores das energias devemos resolver a equação (3.5) com a matriz M dada em (4.37) acima. As tabelas 4.1 e 4.2 mostram alguns resultados encontrados para diferentes números de parâmetros variacionais. Nessas duas tabelas m é o número de parâmetros variacionais utilizado e os valores de energia foram calculados para g = 1. Para diferentes valores de g, porém, obteríamos simplesmente os mesmos valores da energia multiplicados por $g^{2/3}$.

Tabela 4.1: Valores de energia associados a H_{-} calculados com diferentes números de parâmetros variacionais.

m	E_0^-	E_1^-	E_2^-	E_3^-	E_4^-	E_5^-	E_6^-	E_7^-
1	0,00000							
2	0,00000	2,04441						
3	0,00000	2,04441	5,76541					
4	0,00000	1,97852	5,76541	$10,\!00191$				
5	0,00000	1,97852	$5,\!54135$	10,00191	$14,\!94174$			
6	0,00000	1,97115	$5,\!54135$	$9,\!49446$	$14,\!94174$	$20,\!37028$		
7	0,00000	1,97115	$5,\!51302$	$9,\!49446$	$14,\!06558$	$20,\!37028$	$26,\!29953$	
8	0,00000	1,96991	$5,\!51302$	$9,\!41370$	$14,\!06558$	19,02962	$26,\!29953$	$32,\!64399$
9	0,00000	1,96991	$5,\!50842$	$9,\!41370$	$13,\!90148$	19,02962	$24,\!43194$	$32,\!64399$
10	0,00000	1,96963	$5,\!50842$	$9,\!39868$	$13,\!90148$	18,73498	$24,\!43194$	$30,\!18755$

Tabela 4.2: Valores de energia associados a H_+ calculados com diferentes números de parâmetros variacionais.

m	E_0^+	E_1^+	E_2^+	E_3^+	E_4^+	E_5^+	E_6^+
1	2,31447						
2	$2,\!31447$	6,13324					
3	2,04493	6,13324	$10,\!54940$				
4	2,04493	$5,\!63655$	$10,\!54940$	$15,\!63469$			
5	$1,\!99066$	$5{,}63655$	$9,\!66470$	$15,\!63469$	$21,\!21933$		
6	$1,\!99066$	$5,\!53888$	$9,\!66470$	$14,\!30956$	$21,\!21933$	$27,\!28556$	
7	$1,\!97666$	$5,\!53888$	$9,\!46567$	$14,\!30956$	19,36916	$27,\!28556$	33,76558
8	$1,\!97666$	$5,\!51611$	9,46567	$13,\!98107$	19,36916	$24,\!86727$	33,76558
9	1,97235	$5,\!51611$	9,41524	$13,\!98107$	$18,\!85787$	$24,\!86727$	30,72924
10	$1,\!97235$	$5,\!51007$	$9,\!41524$	$13,\!89369$	$18,\!85787$	$24,\!13659$	30,72924

As tabelas 4.1 e 4.2 indicam a manifestação da supersimetria do sistema no que se refere à equiparação dos níveis de energia E_n^- e E_{n-1}^+ , n > 0, de H_- e H_+ . Como esperado, a energia do estado fundamental de H_- é zero e não tem um equivalente em H_+ . Além disso, para n > 0, aumentando o número de parâmetros variacionais, encontramos, principalmente nos primeiros níveis, energias E_n^- cada vez mais próximas de E_{n-1}^+ . Isso quer dizer que, quanto melhor for a aproximação que fizermos, mais próximos estaremos de satisfazer (2.37). Além disso, como para o estado fundamental de H_- a função tentativa de um parâmetro tem exatamente a forma da solução exata, o valor $E_0^- = 0$ encontrado também é o valor exato e (2.36) é naturalmente satisfeita.

Na figura 4.3 estão esquematizados os primeiros níveis de energia de H_- e de H_+ . Devemos lembrar os valores obtidos devem ser melhores quanto maior for o número de parâmetros utilizado e quanto mais baixo for o nível considerado. Assim, esperamos encontrar para o nível n = 4 uma aproximação muito mais pobre do que aquela feita para o nível n = 1 ou n = 0, por exemplo.



Figura 4.3: Esquema dos 5 primeiros níveis de energia de H_- e 4 primeiros de H_+ utilizando 6 parâmetros variacionais.

Os gráficos da figura 4.4 mostram as aproximações para as funções de onda dos

primeiros níveis, respectivamente, de H_- e H_+ . Essas aproximações foram obtidas com 6 parâmetros variacionais.



(b) Autofunções de H_+

Figura 4.4: Esboço das autofunções dos primeiros níveis de H_- e H_+ utilizando 6 parâmetros variacionais.

Como seria esperado, vemos que as funções de onda obtidas apresentam paridades bem definidas, intercalando soluções pares e ímpares e partindo de soluções pares para os estados fundamentais.

A seguir, avaliamos a diferença Δ entre o lado esquerdo e o lado direito da equação de Schrödinger (4.21). Essa diferença Δ é obtida simplesmente substituindo na equação de Schrödinger as aproximações para função de onda e energia encontradas por meio do método variacional e tomando a diferença entre o lado direito e o lado esquerdo, isto é:

$$\Delta = H\psi_n(x) - E_n\psi_n(x) \tag{4.38}$$

onde $\psi_n(x)$ e E_n são, respectivamente, as aproximações para a função de onda e para a energia do nível n do sistema descrito pelo hamiltoniano H.

A diferença Δ foi calculada substituindo as aproximações para função de onda e energia do primeiro estado excitado de H_- e depois do estado fundamental de H_+ e fazendo isso com 3 e depois com 6 parâmetros variacionais, representamos as diferenças obtidas nos gráficos da figura 4.5.



(a) Diferença Δ em função de x para o primeiro estado excitado de H_-



(b) Diferença Δ em função de x para o estado fundamental de H_+

Figura 4.5: Gráficos das diferenças entre o lado esquerdo e o lado direito da equação de Schrödinger (4.21).

Conforme escrito acima, um aumento no número de parâmetros variacionais leva a aproximações melhores, o que pode ser visto nos gráficos da figura 4.5 pela diferença entre os máximos das curvas correspondentes a diferentes números de parâmetros. Notamos ainda, que a aproximação melhora drasticamente para valores de x mais distantes da origem. Isso poderia estar relacionado à maior influência dos termos dos potenciais que contém |x| sobre o termo que contém x^4 em valores de x próximos da origem.

Os resultados para os valores de energia obtidos aqui por meio do Método Variacional podem ainda ser comparados com resultados numéricos. Os resultados numéricos necessários para essa comparação podem ser obtidos, por exemplo, por meio do Método do Abano do Rabo do Cão (do inglês, *Wag the Dog Method*), que é sugerido em [25] como um possível meio de determinar as autoenergias do OHS. Esse método consiste simplesmente em resolver numericamente a equação de Schrödinger para um valor de energia escolhido arbitrariamente e observar o comportamento assintótico da solução encontrada. Para isso convém ter alguma ideia de quanto vale a energia procurada. Então, escolhendo um certo valor de energia E_a (supostamente menor que o valor real da energia) e observando que a função que satizfaz a equação de Schrödinger diverge para $+\infty$ quando $x \to \pm \infty$ e depois escolhendo um outro valor de energia E_b (supostamente maior que o valor real da energia) para o qual a solução diverge para $-\infty$ quando $x \to \pm \infty$, esperamos que a energia E associada à solução normalizável, isto é, à solução que tende a zero para $x \to \pm \infty$, esteja entre E_a e E_b . Redefinindo o valor de E_a ou E_b como a média entre E_a e E_b e repetindo essa análise gráfica até atingir um intervalo suficientemente pequeno, determinamos o valor da energia Ecomo sendo o valor médio entre E_a e E_b .

Aqui a ideia que temos de quanto devem valer as energias associadas aos hamiltonianos H_- e H_+ resulta dos valores aproximados encontrados por meio do Método Variacional e listados nas tabelas 4.1 e 4.2. Assim, tomamos esses valores como referência e aplicamos o Método do Abano do Rabo do Cão. As tabelas 4.3 e 4.4 apresentam uma comparação entre os valores numéricos e os resultados obtidos com 10 parâmetros variacionais para os primeiros níveis de energia de H_- e H_+ . Além disso, como o valor $E_0^- = 0$ é exato, tendo sido calculado analiticamente, não nos preocupamos em exibí-lo na tabela 4.3.

Tabela 4.3: Comparação entre os valores de energia associados a H_- calculados por meio do Método Variacional com 10 parâmetros variacionais e numericamente.

	E_1^-	E_2^-	E_3^-	E_4^-	E_5^-	E_6^-	E_7^-
Variacional	$1,\!96963$	5,50842	9,39868	13,90148	18,73498	24,43194	$30,\!18755$
Valor Numérico	$1,\!96951$	$5,\!50718$	$9,\!39427$	$13,\!85837$	$18,\!64598$	$23,\!80719$	$29,\!23255$
Desvio(%)	0,00609	0,02252	0,04694	$0,\!31108$	$0,\!47731$	$2,\!62421$	3,26691

Tabela 4.4: Comparação entre os valores de energia associados a H_+ calculados por meio do Método Variacional com 10 parâmetros variacionais e numericamente.

	E_0^+	E_1^+	E_2^+	E_3^+	E_4^+	E_5^+	E_6^+
Variacional Valor Numérico	1,97235 1.96951	5,51007 5,50718	9,41524 9 39427	13,89369 13,85837	18,85787 18,64598	24,13659 23,80719	30,72924 29,23255
Desvio(%)	0,14420	0,05248	0,22322	0,25486	1,13638	1,38362	5,11994

O desvio entre os valores obtidos por meio do Método Variacional e os valores numéricos tende a aumentar para níveis de energia mais altos. Isso mostra que, conforme esperávamos, temos aproximações melhores para os primeiros níveis de energia. Para os 6 primeiros níveis de energia de H_- e para os 4 primeiros níveis de H_+ vemos que os valores encontrados por meio do Método Variacional diferem por menos de 1% dos valores numéricos correspondentes. Além disso, comparando os resultados numéricos dados nas tabelas 4.3 e 4.4, conseguimos observar a concordância desses valores com a equiparação de níveis de energia em até 5 casas decimais, o que está relacionado à manifestação da SUSI nesse sistema.

4.3.3 Buscando Soluções Aproximadas pela Teoria de Perturbações Logarítmica

Vamos agora empregar a Teoria de Perturbações Logarítmica conforme descrito na seção 3.2 do capítulo 3.

Na Teoria de Perturbações Logarítmica a energia E_0^{\pm} do estado fundamental de H_{\pm} e o superpotencial $W_{\pm}(x)$ ² em *n*-ésima ordem de aproximação são, conforme (3.26) e (3.25), escritos na forma de expansões em série de potências de δ como:

$$E_0^{\pm} = \sum_{m=0}^n B_m^{\pm} \delta^m$$
 (4.39)

$$W_{\pm}(x) = \sum_{m=0}^{n} W_{m}^{\pm}(x)\delta^{m}$$
(4.40)

Os potenciais $V_{\pm}(x)$ com g = 1 (ver equação (4.31)), podem ser reparametrizados em termos de δ como:

$$V_{\pm}(x;\delta) = (x^2)^{1+\delta} \pm (4x^2)^{\delta/2}$$
(4.41)

sendo que, para $\delta = 0$, temos o caso de dois osciladores harmônicos deslocados parceiros SUSI e, para $\delta = 1$, temos novamente os potenciais parceiros gerados pelo superpotencial $W(x) = \varepsilon(x)x^2$, que é o problema que estamos interessados em resolver. Para outros valores de δ podemos obter potenciais de problemas diferentes, embora a convergência das séries associadas a esses outros problemas deva ser verificada com cuidado.

Expandindo os potenciais reparametrizados $V_{\pm}(x; \delta)$ dados por (4.41) em série de

²Aqui estamos usando índices "±" para os superpotenciais $W_{\pm}(x)$ que devem ser entendidos como os índices dos superpotenciais em uma hierarquia formada pelos hamiltonianos H_{\pm} (ver seção 2.3.5 do capítulo 2), isto é, $W_{\pm}(x)$ são tais que satisfazem uma equação de Riccati $V_{\pm} = W_{\pm}(x)^2 - W'_{\pm}(x)$.

Taylor até ordem n em torno de $\delta_0 = 0$, temos ³:

$$V_{\pm}(x;\delta) = \sum_{m=0}^{n} \frac{\delta^{m}}{m!} \left\{ x^{2} \left[\ln(x^{2}) \right]^{m} \pm \left[\ln 2 + \frac{1}{2} \ln(x^{2}) \right]^{m} \right\}$$

$$= \sum_{m=0}^{n} \frac{\delta^{m}}{m!} \left\{ x^{2} \left[\ln(x^{2}) \right]^{m} \pm \sum_{j=0}^{m} \frac{m!}{2^{j} j! (m-j)!} \left[\ln 2 \right]^{m-j} \left[\ln(x^{2}) \right]^{j} \right\}$$
(4.42)

Conforme (3.14), a equação da ordem zero de perturbação é:

$$(x^{2} \pm 1) - B_{0}^{\pm} = W_{0}^{\pm}(x)^{2} - W_{0}^{\pm\prime}(x)$$
(4.43)

sendo satisfeita por:

$$W_0^{\pm}(x) = x$$
 e $B_0^{\pm} = 1 \pm 1$ (4.44)

e sendo $\varphi_0^{\pm}(x)$, conforme (3.17), dado por:

$$\varphi_0^{\pm}(x) = \mathcal{N}e^{-x^2/2} \tag{4.45}$$

A equação da primeira ordem de perturbação, conforme (3.15), é por sua vez:

$$\left(x^{2}\ln\left(x^{2}\right) \pm \frac{1}{2}\ln\left(x^{2}\right) \pm \ln 2\right) - B_{1}^{\pm} = 2W_{0}^{\pm}(x)W_{1}^{\pm}(x) - W_{1}^{\pm\prime}(x)$$
(4.46)

e, tendo em vista (3.20) e (3.21), a correção de primeira ordem à energia B_1^{\pm} e o coeficiente $W_1^{\pm}(x)$ de $W_{\pm}(x)$ que satisfazem (4.46) são, respectivamente:

$$B_{1}^{\pm} = \frac{\langle \varphi_{0}^{\pm} | V_{1}^{\pm}(x) | \varphi_{0}^{\pm} \rangle}{\langle \varphi_{0}^{\pm} | \varphi_{0}^{\pm} \rangle} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^{2}} \left[x^{2} \ln \left(x^{2} \right) \pm \frac{1}{2} \ln \left(x^{2} \right) \pm \ln 2 \right]}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^{2}}}$$
(4.47)

³O surgimento de fatores contendo logaritmos em expansões como (4.42) seria talvez uma outra possível fonte de inspiração para o nome "teoria de perturbações *logarítmica*", mais restritiva, é claro, do que aquela mencionada na seção 3.2.1 do capítulo 3 logo após a equação (3.11).

(onde o denominador extra serve para garantir a normalização de $\varphi_0^{\pm}(x)$) e

$$W_{1}^{\pm}(x) = |\varphi_{0}^{\pm}(x)|^{-2} \int_{0}^{x} dy |\varphi_{0}^{\pm}(y)|^{2} \left[B_{1}^{\pm} - V_{1}^{\pm}(y)\right]$$

= $e^{x^{2}} \int_{0}^{x} dy e^{-y^{2}} \left[B_{1}^{\pm} - y^{2} \ln(y^{2}) \mp \frac{1}{2} \ln(y^{2}) \mp \ln 2\right]$ (4.48)

Assim, calculando B_1^{\pm} por meio de (4.47) e substituindo em (4.48) para encontrar $W_1^{\pm}(x)$, chegamos a:

$$B_1^{\pm} = \frac{1}{2}\psi(3/2) \pm \frac{1}{2}\psi(1/2) \pm \ln 2$$
(4.49)

е

$$W_1^{\pm}(x) = e^{x^2} \int_0^x dy e^{-y^2} \left[\frac{1}{2} \psi\left(\frac{3}{2}\right) \pm \frac{1}{2} \psi\left(\frac{1}{2}\right) - y^2 \ln\left(y^2\right) \mp \frac{1}{2} \ln\left(y^2\right) \right]$$
(4.50)

onde $\psi(z) \equiv \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)}$ é a função digama.

Fazendo n = 1, substituindo (4.49) em (4.39) e tomando $\delta = 1$, que corresponde a retornar ao problema original, as energias dos estados fundamentais de H_{\pm} em primeira ordem de aproximação são dadas por:

$$E_0^{\pm} = (1\pm1) + \left(\frac{1}{2}\psi\left(\frac{3}{2}\right) \pm \frac{1}{2}\psi\left(\frac{1}{2}\right) \pm \ln 2\right)$$
(4.51)

o que resulta em $E_0^- = 0,30685$ e $E_0^+ = 1,72964$.

Os melhores valores obtidos por meio do Método Variacional, conforme as tabelas 4.1 e 4.2, foram $E_0^- = 0,00000$ e $E_0^+ = 1,97235$. Lembramos que, no caso de E_0^- , o valor zero corresponde ao valor exato, tendo sido também calculado analiticamente na seção 4.3.1.

Ao comparar os resultados do Método Variacional com os da Teoria de Perturbações Logarítmica até primeira ordem, notamos que esses resultados ainda diferem significativamente. Esperamos porém que essa diferença se torne menor ao aplicar a Teoria de Perturbações Logarítmica para obter resultados em maiores ordens de aproximação. Cabe também notar que a escolha da forma dos potenciais reparametrizados pode influir no resultado obtido até determinada ordem. Nesse caso poderia haver uma escolha na forma da reparametrização que levasse a um resultado mais próximo daquele encontrado pelo Método Variacional já na primeira ordem.

5 Considerações Finais

Nesse trabalho apresentamos uma introdução à noção de SUSI e à MQ SUSI em 1 dimensão espacial. Para isso utilizamos o exemplo do OHS para introduzir o conceito de fatorização de hamiltonianos. Utilizando ainda o exemplo de osciladores harmônicos, o oscilador bosônico e o oscilador fermiônico, introduzimos como um primeiro caso de manifestação de SUSI na Mecânica Quântica o sistema do oscilador supersimétrico. Generalizando a idéia do oscilador supersimétrico, desenvolvemos o formalismo da MQ SUSI chegando às relações de comutação e anti-comutação que constituem a chamada super-álgebra. Introduzimos os conceitos de parceiros supersimétricos, quebra da supersimetria, hierarquia de hamiltonianos e invariância de forma.

Em um ponto intermediário desse trabalho nos dedicamos a expor dois métodos de aproximação úteis no tratamento de problemas em Mecânica Quântica. Primeiramente abordamos o bem conhecido Método Variacional e discutimos uma forma particular do seu emprego. Essa forma particular foi útil no capítulo seguinte ao tratar o problema do superpotencial $W(x) = g\varepsilon(x)x^2$, sendo responsável pelo melhor resultado aqui encontrado para esse problema. O segundo método apresentado foi o da Teoria de Perturbações Logarítmica, que é um método perturbativo intimamente relacionado com os conceitos da MQ SUSI. Vimos que esse método permite calcular recursivamente aproximações para a energia e para a função de onda do estado fundamental de um sistema e também para o superpotencial que fatoriza o hamiltoniano correspondente e, por meio da hierarquia de hamiltonianos, pode permitir encontrar também os estados excitados do sistema estudado. A Teoria de Perturbações Logarítmica foi também empregada no tratamento do problema do superpotencial $W(x) = g\varepsilon(x)x^2$ com a finalidade de comparação com o resultado encontrado por meio do Método Variacional.

Como aplicação dos conhecimentos expostos ao longo do trabalho propusemos uma nova classe de superpotenciais para os quais esperamos observar a manifestação de SUSI; os superpotenciais da forma $W(x) = g\varepsilon(x)x^{2n}$, com n = 0, 1, 2, ... Estudamos o caso mais simples do superpotencial $W(x) = g\varepsilon(x)$ que origina como potenciais parceiros, respectivamente, os bem conhecidos potenciais do poço e da barreira Delta de Dirac. Conforme esperado, observamos que a SUSI se manifesta nesse sistema com um estado fundamental de energia zero (o estado ligado associado ao potenciai do poço Delta) e um contínuo de estados de energia positiva para os dois potenciais parceiros (os estados de espalhamento do poço e da barreira).

Por fim, estudamos o problema do superpotencial $W(x) = g\varepsilon(x)x^2$. Esse superpotencial origina como potenciais parceiros dois osciladores anarmônicos. Para esse problema encontramos analiticamente um estado fundamental de energia zero para um dos potenciais parceiros. Demonstramos as dificuldades de se encontrar soluções analíticas para os estados excitados uma vez que a solução via Método de Frobenius da equação diferencial do problema conduzia a relações de recorrência de 3 termos entre os coeficientes da série, o que impossibilitava encontrar uma fórmula fechada para os níveis de energia quantizados do sistema. Com isso, empregamos o Método Variacional conforme exposto no capítulo anterior, levando a soluções aproximadas que concordaram com a manifestação da SUSI nesse sistema. Essa conclusão, porém, é limitada pela precisão do método que, por sua vez, depende, entre outros fatores, do número de parâmetros variacionais utilizado.

Com o intuito de empregar um caminho alternativo na resolução do problema, o que poderia eventualmente levar a um resultado melhor ou pelo menos reforçar o resultado do Método Variacional, empregamos a Teoria de Perturbações Logarítmica. O cálculo correspondente foi feito até primeira ordem de aproximação adotando uma reparametrização conveniente para os potenciais parceiros. O cálculo de segunda ordem seria muito semelhante àquele que deve ser feito para obter o resultado dado em [19] para um potencial do tipo x^4 . Entretanto, embora esse resultado exista na literatura, os detalhes do cálculo que leva ao mesmo não são expostos e, como estamos tratando um problema similar, entender os detalhes do cálculo seria essencial para fornecer resultados em maiores ordens de aproximação. Assim, até primeira ordem, a Teoria de Perturbações Logarítmica levou a resultados distantes daqueles encontrados pelo Método Variacional, mantendo esse último como aquele que forneceu o melhor resultado.

Como perspectivas no estudo da MQ SUSI podemos destacar a sua extensão para mais de uma dimensão espacial, incluindo, por exemplo, espaços não-comutativos. Dois exemplos interessantes na literatura que exploram essas possibilidades são [26] e [27]. Ambos mostram, entre outras coisas, a aplicação da MQ SUSI em 2 dimensões espaciais a problemas de partículas se movendo em um plano sob a ação de um potencial vetor $A^{\mu}(x)$ (problema de Landau e efeito Aharanov-Bohm). Outra possibilidade seria tentar estudar a MQ SUSI no contexto da Mecânica Quântica Relativística, o que parece ser um campo ainda inexplorado.

Referências Bibliográficas

- [1] Miyazawa, H., Prog. Theo. Phys. 36 (1966) 1266.
- [2] Wess, J. and Zumino, B., Nucl. Phys. **B70**, 39 (1974).
- [3] Coleman, S. and Mandula, J., *Phys. Rev.*, **159** (1967) 1251.
- [4] Haag, R., Lopuszanski, J. T., and Sohnius, M., Nucl. Phys., B88 (1975) 257.
- [5] Wess, J. and Bagger, J., Supersymmetry and Supergravity, Princeton University Press, 1992 (2nd ed).
- [6] Ryder, L. H., Quantum Field Theory. Cambridge University Press, 1996 (2nd ed).
- [7] Balin, D. and Love, A., Supersymmetric Gauge Field Theory and String Theory. IOP Publishing Ltd, 1994.
- [8] Witten, E., Nucl. Phys. **B185** (1981) 513.
- [9] Witten, E., Nucl. Phys. **B202** (1982) 253.
- [10] Valance, A., Morgan, T. J., and Bergeron, H., Am. Jour. Phys. 58 (1990)
 487-491.
- [11] Cooper, F., Khare, A. and Sukhatme, U., Supersymmetry in Quantum Mechanics. World Scientific, 2001.

- Bagchi, B. K., Supersymmetry in Quantum and Classical Mechanics. Chapman & Hall/CRC, 2001.
- [13] Das, A., Field Theory: A Path Integral Approach. World Scientific, 1993.
- [14] Drigo Filho, E., Supersimetria aplicada à Mecânica Quântica. Editora Unesp, 2009.
- [15] Sukumar, C. V., J. Phys. A: Math. Gen., 18 (1985) 2917-2936.
- [16] Slavyanov, S. Y. and Lay, W., Special Functions: a unified theory based on singularities. Oxford, 2000.
- [17] Atkins, P. W. and Friedman, R. S., Molecular Quantum Mechanics. Oxford, 1996 (3rd ed).
- [18] Gottfried, K. and Yan, T., Quantum Mechanics: Fundamentals. Springer, 2004 (2nd ed).
- [19] Cooper, F. and Roy, P., Delta Expansion for the Superpotential, Phys. Lett. A143 (1990) 202-206.
- [20] Bender, C. M., Milton, K. A., Moshe, M., Pinsky, S. S., and Simmons Jr., L.
 M., Phys. Rev. Lett., 58 (1987) 2615.
- [21] Bender, C. M., Milton, K. A., Moshe, M., Pinsky, S. S., and Simmons Jr., L.
 M., Phys. Rev., D37 (1988) 1472.
- [22] Imbo, T. and Sukhatme, U., Logarithmic Perturbation Expansions in Nonrelativistic Quantum Mechanics, Am. Jour. Phys. 52 (1984) 140-146
- [23] Lee, C., Phys. Lett., A267 (2000) 101-108.

- [24] Bender, C. M. and Orszag, S. A., Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers. McGraw-Hill, 1978.
- [25] Griffiths, D. J., Introduction to Quantum Mechanics. Pearson, 2005 (2nd ed).
- [26] Das, A., Falomir, H., Gamboa, J., and Méndez, F., arXiv:0809.1405v2 [hep-th] 6 Nov 2008.
- [27] Correa, F., Falomir, H., Jakubský, V., and Plyushchay, M. S., arXiv:0906.4055v4 [hep-th] 2 Feb 2010.
- [28] Arfken, G. B. and Weber, H. J., Mathematical Methods for Physicists. Elsevier, 2005 (6th ed).
- [29] Abramowitz, M. and Stegun, I. A., Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. Dover, 1972.
- [30] Gradshteyn, I. S, Ryzhik, I. M., Table of Integrals, Series and Products: Corrected and Enlarged Edition. Academic Press, Inc. San Diego, 1980.