



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
Programa de Pós-Graduação em Física

Tese de Doutorado

**Soluções Analíticas para a Equação de Schrödinger Radial
com o Termo Centrífugo Sujeita a um Potencial Arbitrário**

Flávio Jamil Souza Ferreira

2014

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

INSTITUTO DE FÍSICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**Soluções Analíticas para a Equação de Schrödinger Radial
com o Termo Centrífugo Sujeita a um Potencial Arbitrário**

Flávio Jamil Souza Ferreira

Orientador: Prof. Dr. Frederico Vasconcellos Prudente

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Física.

Salvador - 2014

**Soluções Analíticas para a Equação de Schrödinger Radial com o Termo
Centrífugo Sujeita a um Potencial Arbitrário**

Copyright 2014

by

Flávio Jamil Souza Ferreira

Resumo

Inspirado na aproximação idealizada por Pekeris para o termo centrífugo, elaboramos um método de resolução para a equação de Schrödinger radial com momento angular não nulo, sujeita à uma função potencial $V(r)$. Os autovalores para a energia de estados rovibracionais ligados, serão apresentados para diversas funções potenciais que possuem relevância em algum setor da física. Especificamente, serão estudados os potenciais Hulburt - Hirschfelder, Rydberg, Linnett, Wu - Yang, Frost - Musulin, Pöschl - Teller, Rosen - Morse, Morse - Feshbach, e Manning - Rosen. Em seguida, por meio de um método mais elegante chamado Método de Fatorização, confirmaremos os resultados obtidos por meio da primeira aproximação, bem como uma estrutura de álgebra de Lie em termos de operadores de levantamento e abaixamento será construída.

Abstract

Inspired by Pekeris approximation to the centrifugal term, we developed a method of resolution for the Schrödinger radial equation with angular momentum non null, subject to a potential function $V(r)$ having a structure to be defined. The eigenvalues for the energy of rovibrational bound states are presented for various potential functions that are relevant in some area of physics. Hirschfelder, Rydberg, Linnett, Wu - Yang, Frost - Musulin, Pöschl - Teller, Rosen - Morse, Morse - Feshbach, and Manning - Rosen Specifically, Hurlbut potential will be studied. Then, by means of a more elegant method called factorization method, confirm the results obtained by the first approximation and a structure of Lie algebra operators in terms of raising and lowering is constructed.

Agradecimentos

A DEUS por tudo. Para Ivana e Morgana eterno amor. Ao Prof. Frederico Vasconcellos Prudente pela orientação e dedicação ao trabalho. Em geral a todos do Instituto de Física da UFBA. Em especial ao Prof. Stoian Ivanov Zlatev que ao longo da minha trajetória acadêmica muito me inspirou com seu jeito "búlgaro" de trabalhar. Por fim, ao CNPq pelo suporte financeiro.

"To recognise the perfect mathematical harmony underlying the laws of space, we must discard the particular dimensional number $n = 3$. Not only in geometry, but to a still more astonishing degree in physics, has it become more and more evident that as soon as we have succeeded in unravelling fully the natural laws which govern reality, we find them to be expressible by mathematical relations of surpassing simplicity and architectonic perfection. It seems to me be one of the chief objects of mathematical instruction to develop the faculty of perceiving this simplicity and harmony, which we cannot fail to observe in the theoretical physics of the present day."

Hermann Weyl in Space Time Matter.

Sumário

1	Introdução	1
2	Soluções aproximadas para a equação de Schrödinger radial	7
2.1	Morse revisitado	7
2.2	Procedimento geral	12
2.3	Hulburt-Hirschfelder	15
2.4	Rydberg	20
2.4.1	Método I	21
2.4.2	Método II	23
2.5	Linnett	25
2.6	Wu - Yang	28
2.7	Frost - Musulin	28
2.8	Pöschl - Teller	30
2.8.1	Forma trigonométrica	30
2.8.2	Forma hiperbólica	37
2.9	Rosen - Morse	42
2.10	Morse - Feshbach	47
2.11	Manning - Rosen	49
3	O Método de Fatorização	53
3.1	Teoria	53
3.2	Técnica de Fatorização	61
4	Aplicações Físicas do Método de Fatorização	70
4.1	Pöschl - Teller - Forma Trigonométrica	70
4.2	Pöschl - Teller - Forma Hiperbólica	75
4.3	Morse	78
4.4	Manning - Rosen	82
4.5	Rosen - Morse	86
5	Outras soluções para a equação de Schrödinger radial	91
5.1	Woods - Saxon	91
5.2	Woods - Saxon esférico	94

5.3	Hulthén	96
5.4	Eckart	98
6	Conclusões e perspectivas	101
A	Mecânica Quântica Supersimétrica	105
	Referências Bibliográficas	117

Glossário

(ESR): Equação de Schrödinger Radial

(MIA): Método de Interação Assintótica

(MQS): Mecânica Quântica Supersimétrica

(NU): Nikiforov - Uvarov

(MF): Método de Fatorização

Capítulo 1

Introdução

Em mecânica clássica, o estudo do movimento relativo de um sistema de duas partículas de massas m_1 e m_2 e posições \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 , sujeitas a uma força derivada a partir de uma função potencial $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, que depende apenas da distância entre as partículas, pode ser reduzido ao movimento de uma única partícula fictícia com um Hamiltoniano, em termos de novas variáveis dinâmicas, tendo a forma

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})$$

sendo $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ a massa reduzida do sistema e $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Desta forma, em mecânica quântica o movimento de uma partícula de massa reduzida μ sem spin, submetida a um potencial central $V(r)$ e com função de onda $\Psi(r, \theta, \phi)$ pode ser descrito através da equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi).$$

Após a separação de variáveis em termos de coordenadas esféricas e fazendo $\Psi(r, \theta, \phi) = Y_l^m(\theta, \phi) R_{nl}(r)/r$, onde $Y_l^m(\theta, \phi)$ são os harmônicos esféricos correspondendo a parte angular e $R_{n,l}(r)$ são funções correspondendo a parte radial, esta equação pode ser reduzida a equação de Schrödinger radial (ESR)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r), \quad (1.1)$$

onde l é o momento angular do sistema. O sucesso desta equação para a descrição quântica do átomo de hidrogênio, principalmente a previsão do valor para a sua energia de ionização $E_I = -13,6$ eV, demonstra que o caminho para uma correta descrição de qualquer sistema quântico não relativístico de duas partículas sem spin que interagem entre si, através de um potencial que depende apenas da distância entre as partículas se dá através da resolução desta equação.

Contudo, apenas alguns sistemas quânticos tais como o átomo de hidrogênio e o oscilador harmônico podem ser resolvidos de forma exata, nos obrigando a recorrer a métodos de aproximação e/ou numérico para a resolução da equação de Schrödinger radial mais o termo centrífugo.

Neste sentido, a busca por soluções analíticas ou algébricas para a equação (1.1) sujeita a diversas funções potencial $V(r)$, em todos os tempos têm envolvido diferentes comunidades de físicos. A principal característica para a obtenção destas soluções reside na necessidade de substituir o termo centrífugo por uma aproximação, de forma que possamos obter uma equação, normalmente hipergeométrica, a qual seja solúvel.

De fato, C. L. Pekeris [1] é o pioneiro neste sentido, quando conseguiu obter soluções analíticas para a ESR sujeita ao potencial de Morse [2] com $l \neq 0$, mediante uma aproximação para o termo centrífugo.

Aproximadamente quarenta anos depois, R. L. Greene e C. Aldrich [3] propuseram outra aproximação para o termo centrífugo, capaz de resolver a equação (1.1) utilizando métodos variacionais com o potencial de Hulthén [4]. Os níveis de energia obtidos para os estados $2p$, $3p$, $3d$, $4p$, $4d$ e $4f$ possuíam uma excelente concordância quando comparado com resultados obtidos através de métodos numéricos.

Desde então, a maior parte dos trabalhos que visam substituir o termo centrífugo por alguma aproximação, buscando encontrar soluções para a equação (1.1) com valores arbitrários para os números quânticos n e l , e sujeita a diversas funções potencial $V(r)$, são similares ou variantes das aproximações proposta por Pekeris e por Greene e Aldrich.

A função potencial proposta por C. Eckart [5] tem suscitado o interesse em alguns pesquisadores na busca por soluções para a equação de Schrödinger radial, incluindo o termo centrífugo com potenciais tipo Eckart, onde a função potencial tratada não possui

necessariamente a mesma expressão matemática que a função proposta por Eckart na Ref. [5]. Através de uma aproximação para o termo centrífugo, foram encontradas soluções para a equação (1.1) de estado ligado [6, 7, 8] e espalhamento [9, 10]. Empregando o método de interação assintótica (MIA) [11], foram determinadas na Ref. [12] soluções para a ESR com quaisquer valores do número quântico l . Por meio de uma aproximação modificada para o termo centrífugo a ESR foi resolvida aproximadamente em [13], usando a condição de estrutura invariante da mecânica quântica supersimétrica (MQS) [14].

Após o trabalho de Greene e Aldrich, outras aproximações para o termo centrífugo foram surgindo com o intuito de resolver a equação de Schrödinger radial com o potencial de Hulthén, sob diferentes perspectivas: em [15] fazendo uso da MQS, em [16, 17, 18] por meio do método exato de quantização (MEQ) [19, 20]. Baseado no método de Nikiforov - Uvarov (NU) exposto no livro texto [21], a equação de Schrödinger radial sujeita ao potencial de Hulthén foi tratada nas Refs. [22, 23, 24], o MIA fora empregado em [25, 26], e, por fim, soluções de estado ligado foram determinadas nas Refs. [27, 28].

Recentemente, foram apresentadas soluções analíticas [29] para a ESR com o potencial de Pöschl - Teller [30], fazendo uso do MIA. Através de diferentes aproximações para o termo centrífugo no espírito de [1, 3], os autovalores para a energia foram encontrados em [31, 32], para uma outra função potencial chamada segundo potencial de Pöschl - Teller [33].

Em 1986, D. Schiöberg [34] sugeriu uma função potencial empírica chamada de potencial Hiperbólico, com o intuito de superar algumas dificuldades do potencial de Morse na descrição quântica de uma molécula diatômica. A partir disso, um crescente interesse têm surgido para a resolução da ESR com ($l \neq 0$), sempre empregando algum tipo de aproximação para o termo centrífugo inspirada em [1, 3]. Soluções analíticas e de espalhamento foram obtidas em [35, 36, 37] e [38], respectivamente. Através do método de NU, soluções de estado ligado para a equação (1.1) foram obtidas em [39]. Fazendo uso do MIA os níveis de energia para a a equação de Schrödinger radial foram encontrados em [40].

Em seu trabalho a respeito do comportamento quântico de vibrações de moléculas poliatômicas N. Rosen e P. M. Morse [41] propuseram um função potencial, para a qual, em [42] soluções analíticas para a ESR foram obtidas para quaisquer valores do número

quântico de momento angular orbital l .

Ainda no espírito das ideias de Pekeris e Greene e Aldrich, buscando obter soluções para a ESR com a função potencial proposta por M. Mannin e N. Rosen [43] através de aproximações para o termo centrífugo, em [44, 45] foram obtidas soluções de estado ligado e de espalhamento em [46, 47]. Empregando o método NU, os autovalores da energia e as correspondentes funções de onda normalizadas foram determinadas em [48] para o caso unidimensional e em [49] para D - dimensões. O método exato de quantização e a mecânica quântica supersimétrica foram determinantes para a obtenção do espectro de energia em [50] e [51], respectivamente.

Embora a aproximação para o termo centrífugo proposta por Pekeris, por Greene e Aldrich e as suas variantes tenham possibilitado encontrar bons resultados e fornecido um avanço significativo na busca por soluções para a ESR incluindo o termo centrífugo, até o momento elas têm permitido tratar, na maioria dos casos, uma classe restrita de funções potencial $V(r)$ do tipo exponencial. Isto pode levar a acreditar que para funções potencial tendo uma expressão matemática diferente ou combinações de diferentes funções matemáticas não será possível empregar tais aproximações.

Podemos citar por exemplo, que para o potencial proposto por Hulburt e Hirschfelder [52, 53] dado por

$$V(r) = D_e \left[(1 - e^{-x})^2 + cx^3 e^{-2x} (1 + bx) \right],$$

onde temos um produto de funções exponencial e um polinômio, o espectro de energia obtido analiticamente a partir do solução da equação (1.1) para esta função potencial ainda é desconhecido na literatura. Além disso, por diversas vezes métodos gráficos são necessários para encontrar uma melhor aproximação para o termo centrífugo, a qual possa resolver a ESR submetida a um potencial $V(r)$.

Neste espírito, iremos propor uma aproximação para o termo centrífugo mais geral, baseada principalmente nas idéias de Pekeris [1], i) que seja capaz de tratar funções potencial $V(r)$ mais geral que tipo-exponencial, ii) proporcione obter funções de onda fisicamente aceitáveis, e iii) não seja necessário recorrer a métodos gráficos para a obtenção de uma aproximação adequada para o termo centrífugo. A partir disso, um método de resolução

da equação de Schrödinger radial sujeita a um potencial arbitrário $V(r)$, para quaisquer valores dos números quânticos principal (n) e angular (l) será estabelecido.

Além dos métodos outrora citados nas Refs. [11, 14, 17, 19, 20] empregados para a resolução da equação de Schrödinger, também temos a nossa disposição um método que merece destaque: o Método de Fatorização (MF) [54].

Historicamente o MF foi idealizado por E. Schrödinger [55], numa tentativa de resolver o problema do átomo de hidrogênio algebricamente. De certo, Schrödinger fora inspirado pelas idéias de H. Weyl [56] para o tratamento de harmônicos esféricos com spin e pela abordagem de P. A. M. Dirac [57] para o problema do oscilador harmônico.

Não obstante, se nomes como Schrödinger, Weyl e Dirac foram os responsáveis pela ideia inicial à respeito do MF, podemos atribuir a L. Infeld e T. E. Hull em seus trabalhos [54, 58, 59] o estabelecimento da teoria no cenário físico e matemático, principalmente em [54] onde temos a mais completa exposição sobre a teoria do MF. Desde então, o Método de Fatorização tem sido amplamente difundido em diversos ramos da física e matemática, sendo ao longo dos anos constantemente aperfeiçoado.

A relação entre operadores (*ladder*) autoadjuntos e o MF foi realizada nas Refs. [60, 61, 62], onde a fatorização aparece como parte de um esquema mais geral de estudo, aplicado para o problema do momento angular orbital em D - dimensões. Enquanto isso, W. Miller Jr., em seu livro texto [63], modificou a teoria exposta por Infeld e Hull em [54], com o objetivo de usar o MF como ferramenta para associar determinadas funções especiais correspondente à sua álgebra de Lie, ideia esta seguida por B. Kaufman [64] e D. Basu [65]. Através de uma série de trabalhos, M. Humi [66] conseguiu estender o MF para equações diferenciais ordinárias de n -ésima ordem, bem como uma generalização do MF para equações diferenciais acopladas.

Para tratar autoequações do tipo Sturm-Liouville, às quais o Método de Fatorização não pode ser aplicado diretamente, dentro da estrutura da teoria de perturbações, N. Bessis e G. Bessis [67] conseguiram realizar uma extensão do procedimento de aproximação idealizado por Infeld e Hull, bem como o uso de operadores autoadjuntos para a obtenção de determinados elementos de matrizes. Por meio de uma extensão natural e intuitiva da álgebra do oscilador harmônico, o Método de Fatorização por diversas vezes tem sido expresso

em uma forma algébrica mais geral [68, 69, 70]. Além disso, uma conexão entre os diversos tipos de fatorização através de álgebras satélites foi estudada em [71, 72]. Atualmente o MF vêm sendo estudado, principalmente, no cenário da MQS [14].

Embora muito tenha sido feito no sentido de desenvolver o MF e relacioná-lo com outras teorias físicas e matemáticas, o artigo de Infeld e Hull [54] continua sendo o principal pilar da teoria, e será empregado neste trabalho para reafirmar os resultados obtidos por meio da resolução da ESR com ($l \neq 0$) sujeita a diversos potenciais físicos utilizando o método desenvolvido na primeira parte da tese.

Esta tese é organizada da seguinte maneira. No próximo capítulo apresentamos uma aproximação generalizada para o termo centrífugo, a partir disto desenvolvemos um método de resolução para a equação (1.1) sujeita à uma função potencial $V(r)$. Aplicações físicas do método serão consideradas obtendo o espectro de energia para uma extensa classe de funções potencial. No capítulo 3 é apresentado resumidamente o Método de Fatorização e no capítulo 4 reafirmamos os resultados obtidos no capítulo anterior mediante o MF, bem como será criada uma estrutura de álgebra de Lie em termos de operadores de levantamento e abaixamento. O capítulo 5 é reservado para o tratamento de funções potencial que não possuem a forma exigida para a aplicação do MF, porém podem ser resolvidas através do método desenvolvido na primeira parte da tese. Conclusões e perspectivas estão contidas no capítulo 6. No apêndice, é apresentada uma introdução da Mecânica Quântica Supersimétrica

Capítulo 2

Soluções aproximadas para a equação de Schrödinger radial

Inspirado no trabalho de Pekeris [1], neste capítulo iremos propor uma expansão generalizada para o termo centrífugo para a resolução da equação (1.1) submetida a uma função potencial $V(r)$ tendo uma estrutura a ser definida. Iniciaremos fazendo uma revisão à respeito da referência [1] para, em seguida, formalmente apresentarmos a metodologia, a qual servirá de base para o método. Posteriormente aplicações físicas serão consideradas resolvendo a equação (1.1) com diversas funções potencial que possuem relevância em alguma área da física.

2.1 Morse revisitado

Em 1929 Philip M. Morse propôs a seguinte função potencial

$$V(r) = D_e \exp[-2a(r - r_e)] - 2D_e \exp[-a(r - r_e)],$$

sendo D_e a energia de dissociação, a uma constante física tendo a dimensão de inverso do comprimento, e r_e a distância internuclear de equilíbrio. Os níveis de energia vibracional encontrado através da solução exata da equação (1.1), com $l = 0$ e submetida a função potencial de Morse expressa os valores experimentais muito precisamente para um sistema quântico de moléculas diatômicas.

Portanto, considere a equação (1.1) com o potencial de Morse

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - D_e \exp[-2a(r - r_e)] + 2D_e \exp[-a(r - r_e)]) R - \frac{l(l+1)R}{r^2} = 0, \quad (2.1)$$

onde E é a energia e μ a massa reduzida.

Para a resolução da equação (2.1) iremos realizar a seguinte mudança de variáveis

$$y = \exp[-a(r - r_e)], \quad -a(r - r_e) = \ln y, \quad \frac{dy}{dr} = -ay, \quad \text{e} \quad \frac{d^2 y}{dr^2} = a^2 y. \quad (2.2)$$

Mediante estas transformações, as condições de contorno para a função de onda radial, $R(r)$, exigem que a mesma deva ser finita e analítica no intervalo $[0, \infty)$, domínio da variável r , a qual fisicamente representa a distância entre os núcleos das moléculas.

Logo, usando a substituição (2.2) juntamente com a regra da cadeia do cálculo

$$\frac{d^2 R}{dr^2} = \frac{d^2 R}{dy^2} \left(\frac{dy}{dr}\right)^2 + \frac{dR}{dy} \left(\frac{d^2 y}{dr^2}\right) = a^2 y^2 \frac{d^2 R}{dy^2} + a^2 y \frac{dR}{dy}, \quad (2.3)$$

na equação (2.1), obtemos

$$\frac{d^2 R}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{dR}{dy} + \frac{2\mu}{(a\hbar)^2} \left[\frac{E}{y^2} + \frac{2D_e}{y} - D_e - \frac{A}{y^2} \left(\frac{r_e}{r}\right)^2 \right] R = 0 \quad (2.4)$$

com $A = l(l+1)\hbar^2/2\mu r_e^2$.

Seguindo Pekeris [1], devemos usar a seguinte identidade

$$\left(\frac{r_e}{r}\right)^2 = \left(1 - \frac{\ln y}{ar_e}\right)^{-2}, \quad (2.5)$$

a qual pode ser facilmente verificada considerando $y = \exp[-a(r - r_e)]$:

$$\left(1 - \frac{\ln \exp[-a(r - r_e)]}{ar_e}\right)^{-2} = \left[\frac{ar_e + a(r - r_e)}{ar_e}\right]^{-2} = \left(\frac{r}{r_e}\right)^{-2} = \left(\frac{r_e}{r}\right)^2.$$

Desta forma, com o intuito de obter uma aproximação para o termo centrífugo, iremos expandir a função

$$f(y) = \left(1 - \frac{\ln y}{ar_e}\right)^{-2}$$

em uma série de Taylor

$$f(y) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (y - \alpha)^n \quad \text{com} \quad c_n = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n f(y)}{dy^n} \right|_{y=\alpha}.$$

Neste caso, os coeficientes da expansão, com $\alpha = 1$ e $n = 0, 1, 2$, são dados por

$$c_0 = 1, \quad c_1 = \frac{2}{ar_e} \quad \text{e} \quad c_2 = \frac{6}{(ar_e)^2} - \frac{2}{ar_e}.$$

Esta série de Taylor, com termos até a segunda ordem, leva a

$$\begin{aligned} \left(\frac{r_e}{r}\right)^2 &\approx 1 + \frac{2}{ar_e}(y-1) + \frac{1}{2!} \left[\frac{6}{(ar_e)^2} - \frac{2}{ar_e} \right] (y-1)^2 \\ &\approx 1 - \frac{3}{ar_e} + \frac{3}{(ar_e)^2} + \left[\frac{4}{ar_e} - \frac{6}{(ar_e)^2} \right] y + \left[\frac{3}{(ar_e)^2} - \frac{1}{ar_e} \right] y^2. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Substituindo a aproximação (2.6) em (2.4), obtemos a equação

$$\frac{d^2 R}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{dR}{dy} + \frac{2\mu}{(a\hbar)^2} \left(\frac{E-C}{y^2} + \frac{2D_e - C_1}{y} - D_e - C_2 \right) R = 0, \quad (2.7)$$

com

$$C = A - \frac{3A}{ar_e} + \frac{3A}{(ar_e)^2}, \quad C_1 = \frac{4A}{ar_e} - \frac{6A}{(ar_e)^2}, \quad \text{e} \quad C_2 = \frac{3A}{(ar_e)^2} - \frac{A}{ar_e}, \quad (2.8)$$

as quais são as constantes encontradas por Pekeris em [1].

A equação (2.7) é muito semelhante à equação obtida por Morse na Ref. [2] para $l = 0$. Assim, o objetivo real da aproximação proposta por Pekeris para o termo centrífugo foi o de obter uma equação diferencial semelhante a ESR com o potencial de Morse, porém, sem o termo centrífugo ($l = 0$).

Introduzindo a função $F(y)$ através da relação $R(y) = e^{-dy}(2dy)^{b/2}F(y)$, na equação (2.7), e a multiplicando por e^{dy} à esquerda e por $(2dy)^{2/b}$ à direita, obtemos

$$e^{dy} R''(2dy)^{2/b} + \frac{e^{dy} R'(2dy)^{2/b}}{y} + \frac{2\mu e^{dy}}{(a\hbar)^2} \left(\frac{E-C}{y^2} + \frac{2D_e - C_1}{y} - D_e - C_2 \right) R(2dy)^{2/b} = 0.$$

Usando as expressões

$$\begin{aligned} e^{dy} R''(y)(2dy)^{2/b} &= (2dy)F''(y) - 2d(2dy)F'(y) + \frac{b}{y}(2dy)F'(y) + d^2(2dy)F(y) \\ &\quad - \frac{bd}{y}(2dy)F(y) + \frac{b(b-2)}{4y^2}(2dy)F(y), \end{aligned}$$

e

$$e^{dy} \frac{1}{y} R'(y)(2dy)^{2/b} = \frac{1}{y}(2dy)F'(y) + \frac{b}{2}y^{-2}(2dy)F(y) - \frac{d}{y}(2dy)F(y),$$

teremos que

$$(2dy)F''(y) + (2dy)F'(y) \left(\frac{b}{y} - 2d + \frac{1}{y} \right) + (2dy)F(y) \left(d^2 - \frac{d}{y} - \frac{bd}{y} + \frac{b^2}{4y^2} \right) + \left(\frac{E-c}{y^2} + \frac{2D_e - c_1}{y} - D_e - c_2 \right) (2dy)F(y) \frac{2\mu}{(a\hbar)^2} = 0.$$

Realizando mais uma mudança de variáveis na equação acima, considere $z = 2dy$, com $F'(y) = (2d)F'(z)$ e $F''(y) = (2d)^2F''(z)$, então

$$zF''(z) + F'(z)(b+1-z) + F(z) \left(\frac{z}{4} - \frac{1}{2} - \frac{b}{2} + \frac{b^2}{4z} \right) + F(z) \left[\frac{2(E-c)\mu}{z(a\hbar)^2} + \frac{(2D_e - c_1)\mu}{d(a\hbar)^2} - \frac{\mu(D_e + c_2)z}{2d^2(a\hbar)^2} \right] = 0. \quad (2.9)$$

Esta equação deve se reduzir à uma equação diferencial de solução conhecida. Para que isso ocorra devemos comparar e eliminar alguns termos nas expressões para $F(z)$ em (2.9).

Do ponto de vista matemático estaremos eliminando termos indesejáveis que tornariam impossível a redução da equação diferencial (2.9) à uma equação de solução conhecida, neste caso, uma equação hipergeométrica. Do ponto de vista físico, após a comparação matemática dos termos, obtemos uma "quantização" para os valores da energia, visto que o número quântico principal, n , será determinado mediante tal condição.

Assim, comparando os termos em z e z^{-1} na equação (2.9), para eliminar os termos indesejáveis obtemos as seguintes condições

$$d^2 = \frac{2\mu(D_e + c_2)}{(a\hbar)^2} \quad \text{e} \quad b^2 = -\frac{8(E-c)\mu}{(a\hbar)^2}. \quad (2.10)$$

Portanto, usando as relações acima na equação (2.9) podemos obter a seguinte equação hipergeométrica confluyente

$$zF''(z) + (b+1-z)F'(z) + nF(z) = 0, \quad (2.11)$$

onde

$$n = \left[\frac{(2D_e - c_1)\mu}{d(a\hbar)^2} - \frac{1}{2}(b+1) \right] = \frac{1}{2}(k - b - 1), \quad (2.12)$$

é um número inteiro não negativo ($n = 0, 1, 2, \dots$), ou seja, o número quântico principal.

A equação hipergeométrica confluyente (2.11) possui como solução os polinômios de Laguerre generalizados [73]. Usando o valor de b imposto em (2.10), e o fato que $b =$

$k - 1 - 2n$, obtemos $b^2 = (k - 1 - 2n)^2 = -8(E - c)\mu/(a\hbar)^2$. Logo, o espectro de energia será

$$\begin{aligned} E_n &= E_{ele} - D_e = \frac{(a\hbar)^2}{8\mu} \left[\frac{8\mu c}{(a\hbar)^2} - (k - 1 - 2n)^2 \right] \\ &= c - \frac{(D_e - c_1/2)^2}{(D_e + c_2)} + \frac{a\hbar(D_e - c_1/2)}{\sqrt{2\mu(D_e + c_2)}} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{(a\hbar)^2}{2\mu} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2, \end{aligned} \quad (2.13)$$

expressão esta que foi obtida por Pekeris em [1]. O valor de $k = 2\mu(2D_e - c_1)/d(a\hbar)^2$ deve ser maior que um para que tenhamos um espectro de energia discreto. Os valores positivos de b são os únicos para os quais R será finito sobre o intervalo $0 \leq z < \infty$. Isto significa que n pode ter qualquer valor no intervalo $0 \leq 2n \leq (k - 1)$. A dependência do termo centrífugo está contida nas constantes C_1 , C_2 e C_3 dadas em (2.8).

A solução da equação (2.11) será dada por $F(z) = L_n^b(z)$ que, explicitamente, é dada por

$$L_n^b(z) = e^z \frac{z^{-b}}{n!} \frac{d^n}{dz^n} \left(e^{-z} z^{n+b} \right) = e^{2dy} \frac{(2dy)^{-b}}{(2d)^n n!} \frac{d^n}{dy^n} \left[e^{-2dy} (2dy)^{n+b} \right],$$

e a função de onda normalizada será obtida mediante a seguinte expressão $R(y) = e^{-dy} (2dy)^{b/2} F(y)$, isto é,

$$R(r) = \left(\frac{2da}{N_{nn}} \right)^{1/2} \frac{\exp(-d \exp[-a(r - r_e)])}{(2d \exp[-a(r - r_e)])^{-(k-2n-1)/2}} L_n^b(z), \quad (2.14)$$

com constante de normalização

$$N_{nn} = [\Gamma(k - n)]^2 \sum_{s=0}^n \frac{\Gamma(k - 2n + s - 1)}{\Gamma(s - 1)}$$

conforme Morse demonstrou na Ref. [2].

Na próxima seção iremos estabelecer uma generalização para a aproximação em série de Taylor (2.6) formulada por Pekeris [1]. Esta generalização nos proporciona criar um método de resolução para a equação (1.1) sujeita a uma função potencial $V(r)$, e permite expandir o termo centrífugo em termos de qualquer função f propriamente definida.

2.2 Procedimento geral

Considere a aproximação de Pekeris para o termo centrífugo (2.6),

$$\begin{aligned} \left(\frac{r_e}{r}\right)^2 &= \left(1 - \frac{\ln y}{ar_e}\right)^{-2} \\ &= 1 + \frac{2}{ar_e}(y-1) + \frac{1}{2!} \left[\frac{6}{(ar_e)^2} - \frac{2}{ar_e} \right] (y-1)^2 + \dots \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde $y = \exp[-a(r - r_e)]$, r_e é a distância internuclear em equilíbrio, e a é relacionado à largura do potencial e possui dimensão física de inverso do comprimento. Em [74] demonstramos que é possível realizar uma generalização para a expansão (2.15) mediante uma redefinição da variável y e das constantes físicas a e r_e . Considere a seguinte função

$$F(y) = \left(\frac{r_0}{r}\right)^m = \left(1 \pm \frac{f^{-1}(y)}{ar_0}\right)^{-m}, \quad (2.16)$$

sendo $y = f[\pm a(r - r_0)]$, f e a sua inversa f^{-1} são funções analíticas à serem definidas, a e r_0 constantes físicas tendo a dimensão física de inverso do comprimento e comprimento, respectivamente, e m um número real.

A expansão em série de Taylor para a função (2.16), é dada por

$$F(y) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (y - \alpha)^n \quad \text{com} \quad c_n = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n F(y)}{dy^n} \right|_{y=\alpha}. \quad (2.17)$$

Considerando o raio de convergência da série como sendo \mathcal{R} , então F será infinitamente derivável em $(\alpha - \mathcal{R}, \alpha + \mathcal{R})$.

Claramente podemos perceber que a aproximação para o termo centrífugo (2.15) proposta por Pekeris, pode ser obtida através de (2.17) com $\alpha = 1$, $y = \exp[-a(r - r_e)]$, e os coeficientes c_n podem ser obtidos através de (2.17) tomando $F(y)$ em (2.16) com $f^{-1}(y) = \ln y$ e $r_0 = r_e$. O valor escolhido de $\alpha = 1$ não é ao acaso, este valor nos garante que a série será calculada na posição de equilíbrio estável $r = r_e$ e pertence ao domínio da função $f^{-1}(y) = \ln y$.

Considerando termos até $n = 2$ em (2.17), temos que

$$\begin{aligned} F(y) = \left(\frac{r_0}{r}\right)^2 &\approx c_0 + (y - \alpha)c_1 + \frac{c_2}{2!}(y - \alpha)^2 \\ &\approx c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2}c_2 + (c_1 - \alpha c_2)y + \frac{c_2}{2}y^2. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Substituindo a aproximação (2.18) na equação de Schrödinger radial (1.1), obtemos a equação de Schrödinger reduzida

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (W - V_{ef}) R = 0 \quad (2.19)$$

com

$$W = E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right) \quad (2.20)$$

sendo a energia renormalizada, e

$$V_{ef} = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2} \left[(c_1 - \alpha c_2)y + \frac{c_2}{2} y^2 \right] \quad (2.21)$$

o potencial efetivo.

Como vimos na seção 2.1 no caso tratado por Pekeris [1], a equação

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - \frac{D_e}{\exp[2a(r-r_e)]} + \frac{2D_e}{\exp[a(r-r_e)]} \right) R - \frac{l(l+1)}{r^2} = 0, \quad (2.22)$$

após a substituição da aproximação (2.15) com os três primeiros termos, terá a forma

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - C + \frac{(2D_e - C_1)}{\exp[a(r-r_e)]} - \frac{(D_e - C_2)}{\exp[2a(r-r_e)]} \right] R = 0. \quad (2.23)$$

Neste caso, a energia renormalizada e o potencial efetivo, respectivamente, serão dados por

$$W = E - C \quad \text{e} \quad V_{ef} = \frac{(D_e - C_2)}{\exp[2a(r-r_e)]} - \frac{(2D_e - C_1)}{\exp[a(r-r_e)]}$$

sendo

$$C = A - \frac{3A}{ar_e} + \frac{3A}{(ar_e)^2}, \quad C_1 = \frac{4A}{ar_e} - \frac{6A}{(ar_e)^2}, \quad \text{e} \quad C_2 = \frac{3A}{(ar_e)^2} - \frac{A}{ar_e},$$

com $A = l(l+1)\hbar^2/2\mu r_e^2$.

No caso geral, os passos que guiarão a resolução da equação (1.1), submetida a uma função potencial $V(r)$ e mediante o uso da aproximação (2.18), são:

1. Após a substituição da função potencial $V(r)$ na equação (1.1), deve-se definir as funções f e a sua inversa f^{-1} na expressão geral (2.16).
2. A função f deve concordar com as funções que constituem o potencial $V(r)$, de forma que, após substituir a expansão (2.18) em (1.1), a função f possa ser absorvida por $V(r)$ gerando um potencial efetivo V_{ef} solúvel.

3. Com a escolha das funções f e f^{-1} devemos realizar a expansão em série de Taylor Eq. (2.17) em torno de $y = \alpha$. O valor escolhido para α deve pertencer ao domínio da função inversa f^{-1} definida previamente em (2.16).
4. Após a substituição da expansão (2.18) na equação (1.1) devemos agrupar os termos da seguinte forma: os termos constantes da expansão em série serão absorvidos na expressão para a energia renormalizada W em (2.20) e os outros termos da expansão contendo a função f serão absorvidos pelo potencial efetivo V_{ef} na expressão (2.21). A nova equação de Schrödinger obtida em (2.19) poderá ser resolvida, mediante o mesmo método de resolução usado para o tratamento da equação (1.1) sem o termo centrífugo ($l = 0$).

Conforme demonstraremos ao longo da tese, o método proposto nesta seção será capaz de resolver a equação (1.1) com diferentes funções potencial importantes para diversas áreas da física.

Na sequência deste capítulo demonstramos que uma boa parte da discussão usada na seção anterior para o tratamento da equação (1.1) com a função potencial de Morse, irá servir de base para resolvermos a equação de Schrödinger radial, utilizando o método proposto nesta seção, para os seguintes potenciais: Hulburt-Hirschfelder [52], Rydberg [75], Linnett [79], Wu - Yang [78], Frost - Musulin [79]. Estes potenciais possuem uma forma de resolução para a equação (1.1) bastante semelhante à que usamos para o potencial de Morse nesta seção. Logo, muito do que foi feito na seção anterior será reaproveitado nas próximas seções.

De fato, iremos demonstrar que a equação (1.1), para cada um dos potenciais citados no parágrafo anterior, reduzir-se à uma equação do tipo (2.9), e, após a comparação e eliminação de alguns termos, esta última se tornará uma equação semelhante a (2.11), com número quântico principal tendo a forma (2.12) e, conseqüentemente, um espectro de energia semelhante a expressão (2.13), com exceção para o valor das constantes (2.8).

Em seguida iremos tratar a equação (1.1) com uma outra série de potenciais, tais como Pöschl - Teller [30], Rosen - Morse [41], Morse - Feshbach [86], e Manning - Rosen [43], demonstrando que a aproximação generalizada desenvolvida nesta tese pode ser usada

para uma ampla classe de potenciais.

2.3 Hulburt-Hirschfelder

Para a maioria das moléculas diatômicas quatro constantes espectroscópicas, ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , e α_e , são conhecidas e listadas em tabelas [75]. Portanto, para que seja possível ajustar precisamente a curva de energia potencial obtida experimentalmente, se faz necessário que a função que irá representar a energia potencial contenha ao menos todas as quatro constantes espectroscópicas outrora citadas, mais a posição de equilíbrio estável r_e .

Neste sentido, H. M. Hulburt e J. O. Hirschfelder [52] modificaram a função potencial de Morse, como uma forma de introduzir mais duas constantes espectroscópicas na função energia potencial, de modo que esta pode ser considerada como tendo a forma

$$V(r) = D_e \left[(1 - e^{-x})^2 + cx^3 e^{-2x} (1 + bx) \right], \quad (2.24)$$

onde

$$x = \frac{\omega_e}{2(B_e D_e)^{1/2}} \frac{(r - r_e)}{r_e} = a(r - r_e).$$

As relações das constantes b e c com as constantes espectroscópicas foi definida por Dunham [76] através do método WKB, e possuem explicitamente a seguinte forma

$$b = 2 + \left[\frac{(7/12)}{c} - \frac{(D_e a_2 / a_0)}{c} \right] \quad \text{e} \quad c = 1 + a_1 \sqrt{\frac{D_e}{a_0}},$$

com

$$a_0 = \frac{\omega_e^2}{4B_e}, \quad a_1 = -1 - \frac{\alpha_e \omega_e}{6B_e^2}, \quad \text{e} \quad a_2 = \frac{5}{4} a_1^2 - \frac{2}{3} \frac{x_e \omega_e}{B_e}.$$

Além disso, na função potencial (2.24) temos as seguintes constantes espectroscópicas: D_e energia de dissociação, B_e constante rotacional, ω_e frequência mínima, a uma constante relacionada a profundidade do potencial, r_e a distância internuclear em equilíbrio, α_e , e $x_e \omega_e$.

Substituindo o potencial (2.24) na equação (1.1), temos que

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left\{ E - D_e (1 - \exp[-a(r - r_e)])^2 - c D_e a^3 (r - r_e)^3 \exp[-2a(r - r_e)] [1 \right. \\ \left. + ab(r - r_e)] - A \left(\frac{r_e}{r} \right)^2 \right\} R = 0, \end{aligned} \quad (2.25)$$

onde $A = l(l+1)\hbar^2/2\mu r_e^2$. Expandindo as potências e agrupando alguns termos nesta equação obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - D_e + 2D_e \exp[-a(r - r_e)] + C_0 \exp[-2a(r - r_e)] + C_1 \exp[-2a(r - r_e)]r_e \left(\frac{r_e}{r}\right)^{-1} \\ + C_2 \exp[-2a(r - r_e)]r_e^2 \left(\frac{r_e}{r}\right)^{-2} + C_3 \exp[-2a(r - r_e)]r_e^3 \left(\frac{r_e}{r}\right)^{-3} \\ + C_4 \exp[-2a(r - r_e)]r_e^4 \left(\frac{r_e}{r}\right)^{-4} - A \left(\frac{r_e}{r}\right)^2] R = 0, \end{aligned} \quad (2.26)$$

sendo as constantes dadas por:

$$\begin{aligned} C_0 = -D_e - bcD_e a^4 r_e^4 + cD_e a^3 r_e^3, \quad C_1 = -3cD_e a^3 r_e^2 + 4bcD_e a^4 r_e^3, \quad C_2 = 3cD_e a^3 r_e \\ - 6bca^4 D_e r_e^2, \quad C_3 = -cD_e a^3 + 4bcD_e a^4 r_e, \quad \text{e } C_4 = -bcD_e a^4. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Para resolver a equação (2.26) iremos usar a aproximação (2.6) para o termo centrífugo. Os outros termos serão expandidos usando o método proposto na seção anterior.

Embora a função (2.16) já represente uma identidade generalizada para o termo centrífugo, iremos utilizar neste caso a seguinte variante

$$\tilde{y} = f(u) = \exp[a(r - r_e)] \text{ e } f^{-1}(\tilde{y}) = \ln \tilde{y}, \quad (2.28)$$

onde se fizermos, $r_0 = r_e$, teremos a seguinte identidade

$$\left(\frac{r_e}{r}\right)^{-m} = \left(1 + \frac{\ln \tilde{y}}{ar_e}\right)^m. \quad (2.29)$$

Fazendo a expansão em série de Taylor (2.17), com $\alpha = 1$ e $n = 0, 1, 2$, temos os seguintes coeficientes

$$c_0 = 1, \quad c_1 = \frac{m}{nr_e} \text{ e } c_2 = -\frac{m}{nr_e} - \frac{m(m-1)}{(nr_e)^2}. \quad (2.30)$$

Assim, para os casos $m = 1, 2, 3, 4$, as aproximações para o termo $(r_e/r)^{-m}$ são

$$\begin{aligned} \left(\frac{r_e}{r}\right)^{-4} &\approx 1 - \frac{6}{ar_e} + \frac{6}{(ar_e)^2} + \left[\frac{12}{(ar_e)^2} - \frac{8}{ar_e}\right] \frac{1}{y} + \left[\frac{6}{(ar_e)^2} - \frac{2}{ar_e}\right] \frac{1}{y^2} \\ \left(\frac{r_e}{r}\right)^{-3} &\approx 1 - \frac{9}{2ar_e} + \frac{3}{(ar_e)^2} - \left[\frac{6}{(ar_e)^2} - \frac{6}{ar_e}\right] \frac{1}{y} + \left[\frac{3}{(ar_e)^2} - \frac{3}{2ar_e}\right] \frac{1}{y^2} \\ \left(\frac{r_e}{r}\right)^{-2} &\approx 1 - \frac{3}{ar_e} + \frac{1}{(ar_e)^2} - \left[\frac{2}{(ar_e)^2} - \frac{4}{ar_e}\right] \frac{1}{y} + \left[\frac{1}{(ar_e)^2} - \frac{1}{ar_e}\right] \frac{1}{y^2} \\ \left(\frac{r_e}{r}\right)^{-1} &\approx 1 - \frac{3}{2ar_e} + \frac{2}{ar_e} \frac{1}{y} - \frac{1}{2ar_e} \frac{1}{y^2}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Para obter estas aproximações foi usada a seguinte relação:

$$\tilde{y} = \exp[a(r - r_e)] = \left[(\exp[a(r - r_e)])^{-1} \right]^{-1} = (\tilde{y}^{-1})^{-1} = (\exp[-a(r - r_e)])^{-1} = y^{-1}.$$

Logo, mediante as aproximações (2.31), a equação (2.26), torna-se

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left\{ E - D_e - \frac{C_1}{2a} + \frac{C_2}{a^2} - \frac{C_2 r_e}{a} + \frac{3C_3 r_e}{a^2} - \frac{3C_3 r_e^2}{2a} + \frac{6C_4 r_e^2}{a^2} - \frac{2C_4 r_e^3}{a} \right. \\ & - A + \frac{3A}{ar_e} - \frac{3A}{(ar_e)^2} + \exp[-a(r - r_e)] \left[2D_e + \frac{2C_1 r_e}{ar_e} - \frac{2C_2}{a^2} + \frac{4C_2 r_e}{a} - \frac{6C_3 r_e}{a^2} \right. \\ & \left. \left. + \frac{6C_3 r_e^2}{a} + \frac{12C_4 r_e^2}{a^2} - \frac{8C_4 r_e^3}{a} - \frac{4A}{ar_e} + \frac{6A}{(ar_e)^2} \right] + \exp[-2a(r - r_e)] [-D_e + C_1 r_e \right. \\ & - bcD_e a^4 r_e^4 + cD_e a^3 r_e^3 - \frac{3C_1}{2a} + C_2 r_e^2 - \frac{3C_2 r_e}{a} + \frac{C_2}{a^2} + c_3 r_e^3 - \frac{9C_3 r_e^2}{2a} + \frac{3C_3 r_e}{a^2} \\ & \left. \left. + C_4 r_e^4 - \frac{6C_4 r_e^3}{a} + \frac{6C_4 r_e^2}{a^2} - \frac{3A}{(ar_e)^2} + \frac{A}{ar_e} \right] \right\} R = 0. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Reescrevendo esta equação na forma sintética dada pela equação (2.19), temos que

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[W + \frac{(2D_e - \tilde{C}_1)}{\exp[a(r - r_e)]} - \frac{(D_e + \tilde{C}_2)}{\exp[2a(r - r_e)]} \right] R = 0, \quad (2.33)$$

sendo a energia renormalizada e o potencial efetivo dados, respectivamente, por:

$$W = E - \tilde{C} \quad \text{e} \quad V_{ef} = \frac{(D_e + \tilde{C}_2)}{\exp[2a(r - r_e)]} - \frac{(2D_e - \tilde{C}_1)}{\exp[a(r - r_e)]},$$

e as constantes \tilde{C} , \tilde{C}_1 , e \tilde{C}_2 são expressas por:

$$\begin{aligned} \tilde{C} &= D_e + \frac{C_1}{2a} + \frac{C_2 r_e}{a} - \frac{C_2}{a^2} + \frac{3C_3 r_e^2}{2a} - \frac{3C_3 r_e}{a^2} + \frac{2C_4 r_e^3}{a} - \frac{6C_4 r_e^2}{a^2} + A - \frac{3A}{ar_e} \\ & \quad + \frac{3A}{(ar_e)^2}, \\ -\tilde{C}_1 &= \frac{2C_1}{a} + \frac{4C_2 r_e}{a} - \frac{2C_2}{a^2} - \frac{6C_3 r_e}{a^2} + \frac{6C_3 r_e^2}{a} + \frac{12C_4 r_e^2}{a^2} - \frac{4A}{ar_e} - \frac{8C_4 r_e^3}{a} + \frac{6A}{(ar_e)^2}, \\ -\tilde{C}_2 &= C_1 r_e - \frac{3C_1}{2a} + C_2 r_e^2 - \frac{3C_2 r_e}{a} + \frac{C_2}{a^2} + C_3 r_e^3 - \frac{9C_3 r_e^2}{2a} + \frac{3C_3 r_e}{a^2} - \frac{6C_4 r_e^3}{a} \\ & \quad + C_4 r_e^4 + \frac{6C_4 r_e^2}{a^2} - \frac{3A}{(ar_e)^2} + \frac{A}{ar_e} - bcD_e a^4 r_e^4 + cD_e a^3 r_e^3. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Realizando a substituição da equação (2.2), juntamente com a expressão (2.3), na equação (2.33), temos

$$\frac{d^2 R}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{dR}{dy} + \frac{2\mu}{(a\hbar)^2} \left(\frac{W}{y^2} + \frac{2D_e - \tilde{C}_1}{y} - D_e - \tilde{C}_2 \right) R = 0. \quad (2.35)$$

Note que esta equação é praticamente idêntica a equação (2.7), com exceção do valor das constantes (2.34). Assim, seguindo os mesmos passos usados para a resolução da equação (2.7) no caso do potencial de Morse, claramente iremos obter a seguinte equação diferencial

$$zF''(z) + F'(z)(b+1-z) + F(z) \left[\frac{d}{2}y - \frac{1}{2} - \frac{b}{2} + \frac{b^2}{8dy} \right] + F(z) \left[\frac{(W-C)\mu}{d(a\hbar)^2 y} + \frac{(2D_e - C_1)\mu}{d(a\hbar)^2} - \frac{(D_e + C_2)\mu}{d(a\hbar)^2} y \right].$$

Comparando as expressões para $F(z)$ com os termos y e y^{-1} , temos que

$$\begin{aligned} \bullet \quad \frac{d}{2} &= \frac{C_2\mu}{d(a\hbar)^2} & \longrightarrow & \quad d^2 = \frac{2(D_e + C_2)\mu}{(a\hbar)^2} \\ \bullet \quad \frac{b^2}{8d} &= -\frac{(W-C)\mu}{d(a\hbar)^2} & \longrightarrow & \quad b^2 = -\frac{8(W-C)\mu}{(a\hbar)^2}, \end{aligned}$$

e, usando as expressões acima, obtemos uma equação diferencial hipergeométrica confluyente da mesma forma que (2.11), com número quântico principal

$$n = \left[\frac{(2D_e - C_1)\mu}{d(a\hbar)^2} - \frac{1}{2}(b+1) \right] = \frac{1}{2}(k - b - 1), \quad b = k - 1 - 2n,$$

ou seja,

$$(k - 1 - 2v)^2 = -\frac{8(W-C)\mu}{(a\hbar)^2}$$

com k sendo dado por

$$k = \frac{2(2D_e - C_1)\mu}{d(a\hbar)^2} = \frac{2(2D_e - C_1)\mu}{a\hbar\sqrt{2(D_e + C_2)\mu}},$$

e o espectro de energia tem a forma

$$E_n = \tilde{C} - \frac{(D_e - \tilde{C}_1/2)^2}{(D_e + \tilde{C}_2)} + \frac{a\hbar(D_e - \tilde{C}_1/2)}{\sqrt{\mu(D_e + \tilde{C}_2)}} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{(a\hbar)^2}{2\mu} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (2.36)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$

Conforme brevemente explicitado no início da seção, a função potencial proposta por Hulburt-Hirschfelder possui uma superioridade, se comparada com a função potencial proposta por Morse, no que se refere ao número de constantes espectroscópicas. Para um melhor entendimento desta superioridade, convém antes realizar uma digressão à respeito da importância das constantes espectroscópicas para curvas de energia potencial.

A correta representação da energia potencial de um conjunto de átomos como uma função da distância interatômica é de fundamental importância na estrutura molecular. Uma gama de informações sobre a estrutura de uma molécula está resumida na sua curva de energia potencial. O mínimo da energia potencial determina o comprimento da camada e possíveis estruturas moleculares. A segunda derivada fornece as forças constantes e estas determinam os níveis vibracional e rotacional da molécula. Constantes de amortecimentos dependem de derivadas mais altas. A procura por curva de energia potencial que explique corretamente as características de uma molécula diatômica não é uma tarefa fácil. O método mais usado é representar a curva de energia potencial através de funções propriamente definidas empíricas ou semi-empíricas.

De acordo com Varshni [53] iremos enumerar os critérios que uma função potencial deve satisfazer, esses critérios são divididos em necessários e desejáveis, são eles;

1. Deve tender assintoticamente para um valor finito quando $r \rightarrow \infty$.
2. Deve ter um mínimo em $r = r_e$.
3. Pode se tornar infinita em $r = 0$. Esta condição não necessita ser muito severa, porque os resultados são praticamente os mesmos se U se tornar muito grande em $r = 0$. Além disso se a estrutura nuclear e as forças forem levadas em conta, este critério não é exatamente verdadeiro. Contudo, para proposta de estudo as mudanças nas curvas de potenciais em distâncias internucleares de 10^{-12} cm não possuem importância.
4. Os três critérios anteriores fornecem uma forma convencional das curvas de energia potencial. Todavia, esta não é a única forma para as curvas. Curvas de energias potencial com ao menos um máximo entre os mínimos principais e o limite de dissociação são conhecidos, portanto não devemos excluir a existência de múltiplos máximos e mínimos.
5. V_e é finita em $r = r_e$, sendo $V_e = V(r_e)$, ou seja, o valor funcional do potencial molecular na posição de equilíbrio estável.
6. $V_e = V_e^0$ em $r = 0$ onde V_e^0 é a conhecida energia atômica unificada.

7. $V_e \propto -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$ para r grande.

8. $\frac{dV_e}{dr}$ em $r = 0$.

9. Os termos de Wan der Waals devem introduzir expressões da forma $1/r^n$.

As condições de 1 – 3 são necessárias e as restantes desejáveis. Baseado nestas condições Hulburt-Hirschfelder [52], construiu a função potencial (2.24) como uma forma de obter um melhor ajuste para a curva de energia potencial de algumas moléculas diatômicas, obtendo resultados melhores que a função de Morse.

Por fim, podemos afirmar que o espectro de energia obtido (2.36), concorda exatamente com a forma esperada para o espectro de energia de moléculas diatômicas, dado por

$$E = E_{ele} + hc \left[\omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - x_e \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + y_e \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^3 \dots \right] + hc \left\{ \left[B_v \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 + const. \right] + D_v \left(j + \frac{1}{2} \right)^4 + \dots \right\}$$

com

$$B_v = B_e - \alpha_e \left(v + \frac{1}{2} \right) + \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \dots$$

$$D_v = D_e + \beta_e \left(v + \frac{1}{2} \right) + \dots,$$

conforme Hezberg [75].

A solução da equação (2.25) e, conseqüentemente, seu espectro de energia (2.36) até o momento eram desconhecidos na literatura.

2.4 Rydberg

Nesta seção iremos resolver a equação (1.1) com o potencial proposto por Rydberg [77]:

$$V(r) = -D_e (1 + ar) e^{-ar} \quad (2.37)$$

onde a é uma constante tendo a dimensão de inverso do comprimento e D_e a energia de dissociação. O potencial (2.37) possui um valor mínimo de $-D_e$ em $r = 0$, sendo bastante semelhante a função de onda radial $R_{20}(r)$ para o átomo de hidrogênio.

Na subseção 2.4.1 iremos resolver a equação (1.1) com a função (2.37), que denominamos de Método I. Enquanto que na subseção 2.4.2 faremos uma modificação independente em sua forma, com o intuito de introduzir a constante espectroscópica r_e , diretamente em (2.37).

2.4.1 Método I

A equação (1.1) com o potencial (2.37) é dada por

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + D_e e^{-ar} + aD_e r_e \left(\frac{r_e}{r} \right)^{-1} e^{-ar} \right] R - \frac{l(l+1)}{r_e^2} \left(\frac{r_e}{r} \right)^2 R = 0, \quad (2.38)$$

que, devido a presença do termo centrífugo, não possui solução analítica. Portanto, seguindo o método proposto, iremos substituir as funções

$$\tilde{y} = \exp[-a(r - r_e)] \text{ e } f^{-1}(\tilde{y}) = \ln \tilde{y}, \quad (2.39)$$

na equação (2.16), com $r_0 = r_e$ e $m = 2$, sendo que mudamos a notação para evitar alguma possível confusão. Neste caso, temos a seguinte identidade

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^2 = \left(1 - \frac{\ln \tilde{y}}{ar_e} \right)^{-2}. \quad (2.40)$$

Através da equação (2.17), com termos $n = 0, 1, 2$, $r_0 = r_e$ e $\alpha = 1$, obtemos os coeficientes

$$c_0 = 1, \quad c_1 = \frac{2}{ar_e} \text{ e } c_2 = \frac{6}{(ar_e)^2} - \frac{2}{ar_e},$$

levando a seguinte aproximação para a identidade (2.40):

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^2 \approx 1 - \frac{3}{ar_e} + \frac{3}{(ar_e)^2} + \left[\frac{4e^{ar_e}}{ar_e} - \frac{6e^{ar_e}}{(ar_e)^2} \right] e^{-ar} + \left[\frac{3e^{2ar_e}}{(ar_e)^2} - \frac{e^{2ar_e}}{ar_e} \right] e^{-2ar}. \quad (2.41)$$

O outro termo na equação (2.38), por outro lado pode ser expandido de forma semelhante a (2.29) com os coeficientes dados por (2.30), usada para resolver a equação (1.1) com o potencial de Hulbert - Hirschfelder. Assim, considerando as funções (2.39) com $m = -1$ em (2.29), obtemos a identidade

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^{-1} = \left(1 - \frac{\ln \tilde{y}}{ar_e} \right). \quad (2.42)$$

Usando (2.30), com $n = 0, 1, 2$, $r_0 = r_e$ e $\alpha = 1$, podemos obter os coeficientes como sendo

$$c_0 = 1, \quad c_1 = -\frac{1}{ar_e} \quad \text{e} \quad c_2 = \frac{1}{ar_e},$$

e a aproximação para a identidade (2.42) é dada por

$$\left(\frac{r_e}{r}\right)^{-1} \approx 1 + \frac{3}{2ar_e} - \frac{2e^{ar_e}}{ar_e}e^{-ar} + \frac{e^{2ar_e}}{2ar_e}e^{-2ar}. \quad (2.43)$$

Para que possamos obter um potencial efetivo solúvel e não modificar a estrutura da função potencial (2.37) com a introdução de mais termos, devemos descartar os termos em $y^2 = e^{-2ar}$ na aproximação (2.43), se considerarmos a aproximação (2.43) completa, teríamos um potencial efetivo V_{ef} da forma

$$V_{ef} = C_3e^{-3ar} + C_2e^{-2ar} - (D_e - C_1)e^{-ar}$$

o que difere da forma original do potencial de Rydberg, e pode nos levar a um espectro de energia não tendo a forma esperada para moléculas diatômicas. Assim, substituindo as aproximações (2.41) e

$$\left(\frac{r_e}{r}\right)^{-1} \approx 1 + \frac{3}{2ar_e} - \frac{2e^{ar_e}}{ar_e}e^{-ar},$$

em (2.38) obtemos a equação

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[W + (D_e - C_1)e^{-ar} - C_2e^{-2ar} \right] R = 0, \quad (2.44)$$

sendo a energia renormalizada e o potencial efetivo, respectivamente, dados por

$$W = E - C \quad \text{e} \quad V_{ef} = C_2e^{-2ar} - (D_e - C_1)e^{-ar},$$

com as constantes

$$\begin{aligned} C &= B - \frac{3B}{ar_e} + \frac{3B}{(ar_e)^2}, \quad C_1 = \frac{4Be^{ar_e}}{ar_e} - \frac{6Be^{ar_e}}{(ar_e)^2} - A - \frac{3A}{2ar_e} \quad \text{e} \quad C_2 = \frac{2Ae^{ar_e}}{ar_e} \\ &\quad + \frac{3Be^{2ar_e}}{(ar_e)^2} - \frac{Be^{2ar_e}}{ar_e}, \end{aligned} \quad (2.45)$$

sendo $A = aD_e r_e$ e $B = l(l+1)\hbar^2/2\mu r_e^2$.

Para a resolução da equação (2.44), iremos realizar a seguinte mudança de variáveis

$$y = e^{-ar}, \quad r = -\frac{1}{a} \ln y, \quad \frac{dy}{dr} = -ay, \quad \text{e} \quad \frac{d^2y}{dr^2} = a^2y,$$

e, a partir da regra da cadeia (2.3), a equação (2.44) se torna

$$\frac{d^2 R}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{dR}{dy} + \frac{2\mu}{(a\hbar)^2} \left[\frac{W}{y^2} + \frac{(D_e - C_1)}{y} - C_2 \right] R = 0. \quad (2.46)$$

Como podemos perceber, a equação diferencial obtida, (2.46), é semelhante à equação (2.7) para o potencial de Morse e a equação (2.35) para o potencial de Hulbert e Hirschfelder. Então, sem perda de generalidade podemos seguir os mesmos passos e obter as constantes

$$d^2 = \frac{2\mu C_2}{(a\hbar)^2} \text{ e } b^2 = -\frac{8(E - C)\mu}{(a\hbar)^2}, \quad (2.47)$$

as quais tornam a equação (2.46) uma equação diferencial semelhante a equação (2.13), sendo

$$n = \left[\frac{(D_e - C_1)\mu}{d(a\hbar)^2} - \frac{1}{2}(b + 1) \right] = \frac{1}{2}(k - b - 1)$$

um número inteiro não negativo, ou seja, o número quântico principal. Usando as relações (2.47) temos que $(k - 1 - 2n)^2 = -8(E - C)\mu/(a\hbar)^2$. Logo, o espectro de energia possui a forma

$$E_n = C - \frac{(D_e - C_1)^2}{2C_2} + \frac{a\hbar(D_e - C_1)}{2\sqrt{2\mu C_2}} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{(a\hbar)^2}{2\mu} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2$$

com as constantes C , C_1 e C_2 dadas em (2.45). Como podemos perceber a expressão acima corresponde a forma esperada do espectro de energia para moléculas diatômicas.

A função energia potencial proposta por Rydberg (2.37) foi usada na Ref. [78] como um potencial interatômico para metais, onde os parâmetros do potencial foram calculados usando os dados experimentais para a energia de vaporização, a constante da rede, e a compressibilidade. Em [79], a função energia potencial (2.37) foi estendida para tratar moléculas triatômicas e poliatômicas.

2.4.2 Método II

Neste momento, seguindo a perspectiva de que uma função potencial ideal deva conter ao menos cinco constantes espectroscópicas, iremos realizar uma pequena modificação na forma do potencial proposto por Rydberg (2.37), de forma que a constante espectroscópica r_e seja introduzida diretamente na função energia potencial. Então o potencial de

Rydberg modificado é dado por

$$V(r) = -D_e [1 + a(r - r_e)] e^{-a(r - r_e)} = -\tilde{D}_e e^{-a(r - r_e)} - ar D_e e^{-a(r - r_e)} \quad (2.48)$$

sendo $\tilde{D}_e = D_e - ar_e D_e$.

A equação (1.1) com o uso de (2.48), tomará a seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \tilde{D}_e \exp[-a(r - r_e)] + a D_e r_e \exp[-a(r - r_e)] \left(\frac{r_e}{r} \right)^{-1} \right] R - \frac{l(l+1)}{r_e^2} \\ \times \left(\frac{r_e}{r} \right)^2 R = 0. \end{aligned} \quad (2.49)$$

O termo centrífugo em (2.49) será substituído por (2.6), enquanto o outro termo também pode ser expandido em uma série semelhante a aproximação de Pekeris. Substituindo as funções $y = \exp[-a(r - r_e)]$ e $f^{-1}(y) = \ln y$ em (2.16), com $m = -1$ e $r_0 = r_e$, obtemos a identidade

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^{-1} = \left(1 - \frac{\ln y}{ar_e} \right),$$

através de (2.17), com $n = 0, 1, 2$ e $\alpha = 1$, e os coeficientes dados por

$$c_0 = 1, \quad c_1 = -\frac{1}{ar_e} \quad \text{e} \quad c_2 = \frac{1}{ar_e},$$

nesse caso a aproximação (2.18) é dada por

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^{-1} \approx 1 + \frac{3}{2ar_e} - \frac{2}{ar_e} \exp[-a(r - r_e)] + \frac{1}{2ar_e} \exp[-2a(r - r_e)]. \quad (2.50)$$

Usando os mesmos argumentos de antes, ou seja, de que o potencial efetivo V_{ef} não deve ter sua forma alterada, devemos desprezar os termos em $\exp[-2a(r - r_e)]$ na aproximação (2.50). Assim, substituindo (2.6) e

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^{-1} \approx 1 + \frac{3}{2ar_e} - \frac{2}{ar_e} \exp[-a(r - r_e)],$$

na equação (2.49), obtemos

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[W + (\tilde{D}_e - C_1) \exp[-a(r - r_e)] - C_2 \exp[-2a(r - r_e)] \right] R = 0, \quad (2.51)$$

sendo a energia renormalizada e o potencial efetivo dados por

$$W = E - C \quad \text{e} \quad V_{ef} = C_2 \exp[-2a(r - r_e)] - (\tilde{D}_e - C_1) \exp[-a(r - r_e)],$$

com constantes

$$C = B - \frac{3B}{ar_e} + \frac{3B}{(ar_e)^2}, \quad C_1 = \frac{4B}{ar_e} - \frac{6B}{(ar_e)^2} - A - \frac{3A}{2ar_e}, \quad \text{e } C_2 = \frac{2A}{ar_e} - \frac{B}{ar_e} + \frac{3B}{(ar_e)^2}, \quad (2.52)$$

sendo $A = aD_e r_e$ e $B = l(l+1)\hbar^2/2\mu r_e^2$.

Para a resolução da equação (2.51), iremos usar a substituição (2.2) e a regra da cadeia (2.3), de modo a obtermos

$$\frac{d^2 R}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{dR}{dy} + \frac{2\mu}{(a\hbar)^2} \left[\frac{W}{y^2} + \frac{(\tilde{D}_e - C_1)}{y} - C_2 \right] R = 0. \quad (2.53)$$

Como podemos perceber, a equação (2.53) é idêntica à equação (2.46). Logo, seguindo os mesmos passos, temos que

$$d^2 = \frac{2\mu C_2}{(a\hbar)^2} \quad \text{e } b^2 = -\frac{8(E - C)\mu}{(a\hbar)^2}, \quad (2.54)$$

as quais tornam a equação (2.53) uma equação diferencial de Laguerre semelhante a equação (2.13), sendo o número quântico principal dado por

$$n = \left[\frac{(\tilde{D}_e - C_1)\mu}{d(a\hbar)^2} - \frac{1}{2}(b+1) \right] = \frac{1}{2}(k - b - 1),$$

com n sendo um número inteiro não negativo. Usando as relações (2.54) temos que $(k - 1 - 2n)^2 = -8(E - C)\mu/(a\hbar)^2$. Desta forma o espectro de energia é dado por

$$E_n = C - \frac{(\tilde{D}_e - C_1)^2}{2C_2} + \frac{a\hbar(\tilde{D}_e - C_1)}{2\sqrt{2\mu}C_2} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{(a\hbar)^2}{2\mu} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (2.55)$$

com as constantes C , C_1 e C_2 expressas em (2.52). Observando a discussão realizada no final da seção 2.3, devido a presença da constante espectroscópica r_e em (2.48), esperamos que esta função potencial possua uma certa superioridade com relação a função original (2.37), no que se refere a construção de curvas de energia potencial empírica para algumas moléculas diatômicas.

2.5 Linnett

J. W. Linnett [80] investigou a seguinte função potencial

$$V(r) = \frac{a}{r^m} - be^{-nr}. \quad (2.56)$$

A equação (1.1) com o potencial de Linnett (2.56) se torna, então,

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{a}{r_e^m} \left(\frac{r_e}{r} \right)^m + be^{-nr} \right] R - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0. \quad (2.57)$$

O termo centrífugo pode ser expandido mediante a substituição das seguintes funções $\tilde{y} = \exp[-n(r-r_e)]$ e $f^{-1}(\tilde{y}) = \ln \tilde{y}$ em (2.16), com $a = n$ e $r_0 = r_e$. Então obtemos a identidade

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^2 = \left(1 - \frac{\ln \tilde{y}}{nr_e} \right)^{-2}.$$

Usando (2.17), com $\alpha = 1$, obtemos os coeficientes

$$c_0 = 1, \quad c_1 = \frac{2}{nr_e} \quad \text{e} \quad c_2 = \frac{6}{(nr_e)^2} - \frac{2}{nr_e}, \quad (2.58)$$

e a aproximação (2.18) com $\alpha = 1$ será dada por

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^2 \approx 1 - \frac{3}{nr_e} + \frac{3}{(nr_e)^2} + \left[\frac{4e^{nr_e}}{nr_e} - \frac{6e^{nr_e}}{(nr_e)^2} \right] y + \left[\frac{3e^{2nr_e}}{(nr_e)^2} - \frac{e^{2nr_e}}{nr_e} \right] y^2. \quad (2.59)$$

Usando as funções $\tilde{y} = \exp[-n(r-r_e)]$ e $f^{-1}(\tilde{y}) = \ln \tilde{y}$ em (2.16), com $a = n$ e $r_0 = r_e$, obtemos a identidade

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^m = \left(1 - \frac{\ln \tilde{y}}{nr_e} \right)^{-m},$$

através de (2.17) com $\alpha = 1$, temos que

$$c_0 = 1, \quad c_1 = \frac{m}{nr_e} \quad \text{e} \quad c_2 = -\frac{m}{nr_e} - \frac{m(m-1)}{(nr_e)^2},$$

e a aproximação (2.18) é

$$\begin{aligned} \left(\frac{r_e}{r} \right)^m \approx & 1 - \frac{3m}{2nr_e} + \frac{m(m+1)}{2(nr_e)^2} + \left[\frac{3m}{nr_e} - \frac{m(m+1)}{(nr_e)^2} \right] e^{nr_e} y + \frac{1}{2} \left[\frac{m(m+1)}{(nr_e)^2} \right. \\ & \left. - \frac{m}{nr_e} \right] e^{2nr_e} y^2. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Note que, para a dedução das expansões (2.59) e (2.60), usamos a identidade $\tilde{y} = e^{-n(r-r_e)} = e^{nr_e} e^{-nr} = e^{nr_e} y$.

Substituindo as aproximações (2.59) e (2.60) na equação (2.57), obtemos

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(W + C_1 e^{-nr} - C_2 e^{-2nr} \right) R = 0 \quad (2.61)$$

sendo a energia renormalizada e o potencial efetivo dados por

$$W = E - C \quad \text{e} \quad V_{ef} = C_2 e^{-2nr} - C_1 e^{-nr},$$

com as constantes

$$\begin{aligned} C &= A - \frac{3A}{nr_e} + \frac{3A}{(nr_e)^2} + B - \frac{3mB}{2nr_e} + \frac{m(m+1)B}{2(nr_e)^2}, \quad C_1 = b - \frac{4Ae^{nr_e}}{nr_e} - \frac{3mBe^{nr_e}}{nr_e} \\ &+ \frac{m(m+1)Be^{nr_e}}{(nr_e)^2} + \frac{6Ae^{nr_e}}{(nr_e)^2}, \quad \text{e} \quad -C_2 = \frac{mBe^{2nr_e}}{2nr_e} - \frac{m(m+1)Be^{2nr_e}}{2(nr_e)^2} - \frac{3Ae^{2nr_e}}{(nr_e)^2} \\ &+ \frac{Ae^{2nr_e}}{nr_e}, \end{aligned} \quad (2.62)$$

onde $A = l(l+1)\hbar^2/2\mu r_e^2$ e $B = a/r_e^m$. Para resolver a equação (2.61), iremos realizar a seguinte mudança de variáveis,

$$y = e^{-nr}, \quad r = -\frac{1}{n} \ln y, \quad \frac{dy}{dr} = -ny, \quad \text{e} \quad \frac{d^2y}{dr^2} = n^2y \quad (2.63)$$

e utilizar a regra da cadeia (2.3). Logo, obtemos

$$\frac{d^2R}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{dR}{dy} + \frac{2\mu}{(n\hbar)^2} \left(\frac{W}{y^2} + \frac{C_1}{y} - C_2 \right) R = 0 \quad (2.64)$$

Como podemos perceber, a equação (2.64) é idêntica a outras equações outrora obtidas. Sem necessidade de realizar novamente todo o cálculo, obtemos as seguintes constantes

$$d^2 = \frac{2\mu C_2}{(n\hbar)^2} \quad \text{e} \quad b^2 = -\frac{8(E-C)\mu}{(n\hbar)^2}, \quad (2.65)$$

com número quântico principal

$$\tilde{n} = \left[\frac{\mu C_1}{d(n\hbar)^2} - \frac{1}{2}(b+1) \right] = \frac{1}{2}(k-b-1), \quad \tilde{n} = 0, 1, 2, \dots,$$

e, usando as expressões (2.65), obtemos o espectro de energia

$$E_n = C - \frac{(n\hbar)^2}{32\mu} \left(\frac{C_1}{C_2} \right)^2 + \frac{n\hbar}{\sqrt{8\mu}} \left(\tilde{n} + \frac{1}{2} \right) \frac{C_1}{\sqrt{C_2}} - \frac{(n\hbar)^2}{2\mu} \left(\tilde{n} + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (2.66)$$

com as constantes dadas em (2.62). Conforme já explicitado, o espectro de energia (2.66) possui exatamente a forma esperada para os níveis de energia de moléculas diatômicas. Indicando que o método proposto na tese conduz ao espectro de energia esperado.

2.6 Wu - Yang

A função potencial de Wu e Yang [81], possui a forma

$$V(r) = ae^{-mr} - \frac{b}{r^n}. \quad (2.67)$$

Como podemos perceber o potencial de Wu - Yang é bastante semelhante ao potencial de Linnett, tendo como diferença o fato de que os termos atrativos e repulsivos foram permutados, bem como os seus expoentes. Desta forma, evitando repetir todo o cálculo, iremos apenas enunciar o espectro de energia e o valor das constantes, que são dados por,

$$E_n = C - \frac{(n\hbar)^2}{32\mu} \left(\frac{C_1}{C_2} \right)^2 + \frac{n\hbar}{\sqrt{8\mu}} \left(\tilde{n} + \frac{1}{2} \right) \frac{C_1}{\sqrt{C_2}} - \frac{(n\hbar)^2}{2\mu} \left(\tilde{n} + \frac{1}{2} \right)^2$$

com o número quântico principal dado por

$$\tilde{n} = \frac{C_1\mu}{d(a\hbar)^2} - \frac{1}{2}(b+1) = \frac{1}{2}(k-b-1), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

e as constantes:

$$\begin{aligned} C &= A - \frac{3A}{mr_e} + \frac{3A}{(mr_e)^2} + B - \frac{2nB}{mr_e} - \frac{n(n-1)B}{(mr_e)^2}, \quad C_1 = -a + \frac{2n(n-1)Be^{mr_e}}{(mr_e)^2} \\ &+ \frac{3nBe^{mr_e}}{mr_e} - \frac{4Ae^{mr_e}}{mr_e} + \frac{6Ae^{mr_e}}{(mr_e)^2}, \quad e \quad -C_2 = -\frac{nBe^{2mr_e}}{mr_e} - \frac{n(n-1)Be^{2mr_e}}{(mr_e)^2} \\ &- \frac{3Ae^{2mr_e}}{(mr_e)^2} + \frac{Ae^{2mr_e}}{mr_e}. \end{aligned}$$

2.7 Frost - Musulin

A. A. Frost e B. Musulin [82] propuseram a seguinte função potencial

$$V(r) = e^{-ar} \left(\frac{1}{r} - b \right). \quad (2.68)$$

A equação (1.1) com a função potencial (2.68) é dada por

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{e^{-ar}}{r_e} \left(\frac{r_e}{r} \right) + be^{-ar} \right] R - \frac{l(l+1)}{r_e^2} \left(\frac{r_e}{r} \right)^2 R = 0. \quad (2.69)$$

O termo centrífugo na equação acima pode ser expandido numa série idêntica à aproximação (2.59), com $a = n$, assim

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^2 \approx 1 - \frac{3}{ar_e} + \frac{3}{(ar_e)^2} + \frac{4e^{ar_e y}}{ar_e} - \frac{6e^{ar_e y}}{(ar_e)^2} + \frac{3e^{2ar_e y^2}}{(ar_e)^2} - \frac{e^{2ar_e y^2}}{ar_e}. \quad (2.70)$$

Para o outro termo, (r_e/r) na equação (2.69) podemos usar (2.60) com $m = 1$ e $n = a$, logo

$$\left(\frac{r_e}{r}\right) \approx 1 - \frac{3}{2ar_e} + \frac{1}{(ar_e)^2} - \frac{2}{(ar_e)^2}e^{ar_e}y + \left[\frac{1}{(ar_e)^2} - \frac{1}{2ar_e}\right]e^{2ar_e}y^2, \quad (2.71)$$

onde foi usada a identidade: $\tilde{y} = e^{-a(r-r_e)} = e^{ar_e}e^{-ar} = e^{ar_e}y$, na obtenção da expressão acima.

De acordo com os mesmos argumentos de antes, iremos desprezar os termos em y^2 , na aproximação (2.71), isto é

$$\left(\frac{r_e}{r}\right) \approx 1 - \frac{3}{2ar_e} + \frac{1}{(ar_e)^2} - \frac{2}{(ar_e)^2}e^{ar_e}y.$$

Assim, substituindo (2.70) e a aproximação acima na equação (2.69), obtemos

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(W + C_1e^{-ar} - C_2e^{-2ar} \right) R = 0 \quad (2.72)$$

sendo a energia renormalizada e o potencial efetivo dados por

$$W = E - C \quad \text{e} \quad V_{ef} = C_2e^{-2ar} - C_1e^{-ar},$$

com constantes

$$\begin{aligned} C &= A - \frac{3A}{ar_e} + \frac{3A}{(ar_e)^2}, \quad C_1 = b - \frac{1}{r_e} + \frac{3}{2ar_e} - \frac{1}{(ar_e)^2} - \frac{4Ae^{ar_e}}{ar_e} + \frac{6Ae^{ar_e}}{(ar_e)^2}, \quad \text{e} \\ -C_2 &= -\frac{2}{(ar_e)^2}e^{ar_e} + \frac{3Ae^{2ar_e}}{(ar_e)^2} - \frac{Ae^{2ar_e}}{ar_e}, \end{aligned} \quad (2.73)$$

onde $A = l(l+1)\hbar^2/2\mu r_e^2$.

Para a resolução da equação (2.72) iremos realizar a mudança de variáveis (2.63) com $a = n$. Então, obtemos

$$\frac{d^2R}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{dR}{dy} + \frac{2\mu}{a^2\hbar^2} \left(\frac{W}{y^2} + \frac{C_1}{y} - C_2 \right) R = 0. \quad (2.74)$$

Esta equação é bastante semelhante a outras equações já obtidas neste capítulo. Portanto, sem necessidade de repetir os cálculos, temos que o espectro de energia possui a forma

$$E_n = C - \frac{C_1^2}{4C_2} + \frac{a\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{C_1}{\sqrt{C_2}} - \frac{(a\hbar)^2}{2\mu} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (2.75)$$

com o número quântico principal $n = 0, 1, 2, \dots$ sendo dado por

$$n = \left[\frac{C_1\mu}{d(a\hbar)^2} - \frac{1}{2}(b+1) \right] = \frac{1}{2}(k-b-1).$$

Se fizermos $b = 0$ e redefinirmos a constante a na função potencial (2.68), teríamos um potencial tipo - Yukawa.

Todos os potenciais tratados até o momento foram construídos com o objetivo de obter um melhor ajuste para a curva de energia potencial para determinadas moléculas diatômicas, e, conseqüentemente, obter valores mais próximos da realidade para as constantes espectroscópicas, ver Varshni [53].

Observando o que fora feito, à luz da discussão realizada no final da seção 2.3 dedicada ao potencial de Hulburt-Hirschfelder, podemos afirmar que o espectro de energia obtido para as funções potencial estudadas até o momento estão em perfeita concordância com a literatura, indicando que o método estabelecido na tese de fato obteve quantidades física aceitáveis.

2.8 Pöschl - Teller

Nesta seção resolvemos a equação (1.1) com o potencial proposto por G. Pöschl e E. Teller [30], sob as formas trigonométrica e hiperbólica. Demonstramos que será possível obter dois potenciais efetivos V_{ef} , os quais nos conduzem à duas soluções distintas para a ESR com ($l \neq 0$), correspondendo a cada forma do potencial.

2.8.1 Forma trigonométrica

Seja a função potencial de Pöschl - Teller na forma trigonométrica

$$V(r) = \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} \left[\frac{\chi(\chi - 1)}{\text{sen}^2[\rho(r - r_0)]} + \frac{\sigma(\sigma - 1)}{\text{cos}^2[\rho(r - r_0)]} \right], \quad (2.76)$$

com $\chi > 1$ e $\sigma > 1$. A função possui singularidades em $r = r_0$ e $(r - r_0) = \pi/2\rho$, sendo governada pelo parâmetros: χ , σ , e ρ . As constantes χ e σ controlam o grau de assimetria do potencial. O potencial será perfeitamente simétrico se $\chi = \sigma$; os parâmetro ρ e r_0 já foram definidos.

A equação (1.1), com o potencial (2.76), é dada por

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} E - \frac{\rho^2 \chi(\chi - 1)}{\text{sen}^2[\rho(r - r_0)]} - \frac{\rho^2 \sigma(\sigma - 1)}{\text{cos}^2[\rho(r - r_0)]} \right] R - \frac{l(l + 1)}{r_0^2} \left(\frac{r_0}{r} \right)^2 R = 0. \quad (2.77)$$

De acordo com o que vêm sendo discutido, devemos usar uma aproximação para o termo centrífugo. Portanto, substituindo as funções $y = \csc[\rho(r - r_0)]$ e $f^{-1}(y) = \csc^{-1} y$ na equação (2.16), com $a = \rho$ e $m = 2$, temos a seguinte identidade

$$\left(\frac{r_0}{r}\right)^2 = \left(1 + \frac{\csc^{-1} y}{\rho r_0}\right)^{-2}$$

Usando (2.17), com $n = 0, 1, 2$, obtemos os coeficientes:

$$\begin{aligned} c_0 &= \left(\frac{\rho r_0 + \csc^{-1} \alpha}{\rho r_0}\right)^{-2}, \quad c_1 = \frac{2(\rho r_0 + \csc^{-1} \alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^4 - \alpha^2)^{1/2}}, \quad e \\ c_2 &= \frac{6(\rho r_0 + \csc^{-1} \alpha)^{-4}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^4 - \alpha^2)} - \frac{2(\rho r_0 + \csc^{-1} \alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^2 - 1)^{3/2}} - \frac{2(\rho r_0 + \csc^{-1} \alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^6 - \alpha^4)^{1/2}}. \end{aligned} \quad (2.78)$$

A função $f^{-1}(y) = \csc^{-1} y$ possui como domínio o intervalo $(-\infty, -1] \cup (1, \infty)$ e imagem $(-\pi, -\pi/2]$ ou $(0, \pi/2]$, podendo também ser definida sob a forma,

$$\csc^{-1} y = \frac{\pi}{2} - \sec^{-1} y. \quad (2.79)$$

Logo, devemos escolher um número no domínio da função inversa da cossecante, que denominamos α .

Para que possamos resolver a equação (2.77), usando a aproximação (2.18), devemos desprezar os termos em $y = \csc[\rho(r - r_0)]$, isto é,

$$\left(\frac{r_0}{r}\right)^2 \approx c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + \frac{1}{2} \frac{c_2}{\sin^2[\rho(r - r_0)]}. \quad (2.80)$$

Se considerassémos o termo em y , iriam aparecer termos do tipo $(c_1 - \alpha c_2) y = (c_1 - \alpha c_2) / \sin[\rho(r - r_0)]$. A introdução do termo $1/\sin[\rho(r - r_0)]$ iria malograr nosso objetivo de obter um potencial efetivo solúvel V_{ef} .

Substituindo a aproximação (2.80) na equação (2.77), temos que

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} W - \frac{\rho^2 \tilde{\chi}(\tilde{\chi} - 1)}{\sin^2[\rho(r - r_0)]} - \frac{\rho^2 \sigma(\sigma - 1)}{\cos^2[\rho(r - r_0)]} \right] R = 0 \quad (2.81)$$

sendo

$$W = E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right) \quad (2.82)$$

a energia renormalizada, e

$$V_{ef} = \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} \left[\frac{\tilde{\chi}(\tilde{\chi} - 1)}{\text{sen}^2[\rho(r - r_0)]} + \frac{\sigma(\sigma - 1)}{\text{cos}^2[\rho(r - r_0)]} \right] \quad (2.83)$$

o potencial efetivo, com a constante renormalizada dada sob a forma

$$\rho^2 \tilde{\chi}(\tilde{\chi} - 1) = \rho^2 \chi(\chi - 1) - \frac{l(l+1)c_2}{2r_e^2}. \quad (2.84)$$

Resolvendo a equação (2.84) e usando o valor de c_2 disposto em (2.78), obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\chi} &= \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \left[1 + 4\chi(\chi - 1) - \frac{2l(l+1)c_2}{(\rho r_0)^2} \right]^{1/2} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left\{ 1 + 4\chi(\chi - 1) - 4l(l+1) \left[\frac{3(\rho r_0 + \text{csc}^{-1} \alpha)^{-4}}{(\alpha^4 - \alpha^2)} - \frac{(\rho r_0 + \text{csc}^{-1} \alpha)^{-3}}{(\alpha^2 - 1)^{3/2}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{(\rho r_0 + \text{csc}^{-1} \alpha)^{-3}}{(\alpha^6 - \alpha^4)^{1/2}} \right] \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.85)$$

Seja a seguinte substituição $z = \text{sen}^2[\rho(r - r_0)]$ na equação (2.81), juntamente com a expressão

$$\frac{d^2 R}{dr^2} = 4z(1-z) \frac{d^2 R}{dz^2} + 2(1-2z) \frac{dR}{dz}.$$

Logo

$$z(1-z) \frac{d^2 R}{dz^2} + \left(\frac{1}{2} - z \right) \frac{dR}{dz} + \frac{1}{4} \left[\frac{k^2}{\rho^2} - \frac{\tilde{\chi}(\tilde{\chi} - 1)}{z} - \frac{\sigma(\sigma - 1)}{1-z} \right] R(z) = 0, \quad (2.86)$$

sendo $k^2 = 2\mu W/\hbar^2$.

A possibilidade de introduzir a nova variável z exige uma discussão, pois a substituição $z = \text{sen}^2[\rho(r - r_0)]$ não estabelece uma correspondência injetiva entre as variáveis r e z . A função potencial de Pöschl - Teller trigonométrica é periódica e consiste de uma série de poços separados por paredes de largura finita e altura infinita. Portanto, estas paredes representam obstáculos impenetráveis para a partícula. Sendo assim, devemos restringir nosso estudo para o intervalo $0 \leq \rho(r - r_0) \leq \pi/2$, e resolver a equação de Schrödinger para este intervalo, com as seguintes condições de contorno; $R(z = 0) = 0$ e $R(z = 1) = 0$, que tornam a transformação $z = \text{sen}^2[\rho(r - r_0)]$ injetiva [83, 84].

Portanto, baseado nesta discussão podemos admitir soluções para a equação (2.86) sob a forma

$$R(z) = (1-z)^\nu z^\beta F(z). \quad (2.87)$$

A substituição $z = \text{sen}^2[\rho(r - r_0)]$ claramente satisfaz as condições de contorno para a função de onda radial, conforme a discussão anterior.

Assim, multiplicando (2.86) por $(1 - z)^{-\nu} z^{-\beta}$ à direita e usando as expressões

$$(1 - z)^{-\nu} z^{-\beta} \frac{dR}{dz} = F'(z) + F(z) \left[\frac{\beta}{z} - \frac{\nu}{(1 - z)} \right] \quad (2.88)$$

e

$$(1 - z)^{-\nu} z^{-\beta} \frac{d^2 R}{dz^2} = F''(z) + F'(z) \left[\frac{2\beta}{z} - \frac{2\nu}{(1 - z)} \right] + F(z) \left[\frac{\beta(\beta - 1)}{z^2} - \frac{2\beta\nu}{z(1 - z)} + \frac{\nu(\nu - 1)}{(1 - z)^2} \right], \quad (2.89)$$

obtemos

$$z(1 - z) \frac{d^2 F}{dz^2} + \left[2\beta + \frac{1}{2} - (2\beta + 2\nu + 1)z \right] \frac{dF}{dz} + \left[\frac{\beta(\beta - 1/2)}{z} - \frac{\nu(\nu - 1/2)}{(1 - z)} + (\beta + \nu)^2 \right] F(z) + \frac{1}{4} \left[\frac{k^2}{\rho^2} - \frac{\tilde{\chi}(\tilde{\chi} - 1)}{z} - \frac{\sigma(\sigma - 1)}{(1 - z)} \right] F(z) = 0. \quad (2.90)$$

Para que a equação (2.90) se torne uma equação hipergeométrica devemos impor as seguintes condições; $\beta \left(\beta - \frac{1}{2} \right) = \tilde{\chi}(\tilde{\chi} - 1)/4$ e $\nu \left(\nu - \frac{1}{2} \right) = \sigma(\sigma - 1)/4$. Estas condições nos levam aos seguintes valores para β e ν : $\beta = \tilde{\chi}/2$ e $\nu = \sigma/2$.

Mediante estas condições a equação (2.90) torna-se

$$z(1 - z) \frac{d^2 F}{dz^2} + \left[\left(\tilde{\chi} + \frac{1}{2} \right) + (\tilde{\chi} + \sigma + 1)z \right] \frac{dF}{dz} + \frac{1}{4} \left[\frac{k^2}{\rho^2} + (\tilde{\chi} + \sigma)^2 \right] F(z) = 0. \quad (2.91)$$

Esta é a equação hipergeométrica de Gauss [73], com três pontos regulares de singularidade em; $z = 0, 1, \infty$. A solução da equação (2.91), analítica em uma vizinhança de $z = 0$, é a função hipergeométrica $F(z) = {}_2F_1(\zeta, \eta, \kappa, z)$

$$F(z) = 1 + \frac{\zeta \cdot \eta}{1 \cdot \kappa} z + \frac{\zeta(\zeta + 1)\eta(\eta + 1)}{1 \cdot 2 \cdot \kappa(\kappa + 1)} z^2 + \dots, \quad (2.92)$$

com os parâmetros ζ , η e κ dados por:

$$\zeta = \frac{1}{2} \left(\tilde{\chi} + \sigma + \frac{k}{\rho} \right), \quad \eta = \frac{1}{2} \left(\tilde{\chi} + \sigma - \frac{k}{\rho} \right), \quad \text{e} \quad \kappa = \tilde{\chi} + \frac{1}{2}. \quad (2.93)$$

A partir da definição da função hipergeométrica (2.92), podemos perceber que o parâmetro κ nunca pode ser zero ou um inteiro negativo. Por outro lado, se ζ ou η são iguais

a 0 ou inteiro negativo, a série pode ser truncada e a função hipergeométrica se tornará um polinômio, no caso um polinômio de Jacobi. O intervalo de convergência da função hipergeométrica é dado por $|z| < 1$, e $z = 1$, para $\kappa > \zeta + \eta$, e $|z| = -1$, para $\kappa > \zeta + \eta - 1$. Logo, se $\zeta = -n$, os parâmetros (2.93) nos levam á $\eta = \tilde{\chi} + \sigma + n$, e se, inversamente, $\eta = -n$, encontramos $\zeta = \tilde{\chi} + \sigma + n$, desde que, a função hipergeométrica (2.92) é invariante sob a permuta dos parâmetros ζ e η , isto é, ${}_2F_1(\zeta, \eta, \kappa, z) = {}_2F_1(\eta, \zeta, \kappa, z)$. Ambas as condições nos levam a mesma solução. Assim, inserindo o valor de $\zeta = -n$ nos parâmetros (2.93) e usando as expressões $k^2 = 2\mu W/\hbar^2$ e (2.82) para W , obtemos a seguinte expressão para o espectro de energia

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu}(\tilde{\chi} + \sigma + 2n)^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right) \\ &= \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu}(\tilde{\chi} + \sigma + 2n)^2 + \frac{l(l+1)(\rho\hbar)^2}{2\mu} \left\{ (\rho r_0 + \csc^{-1} \alpha)^{-2} \left[\frac{3(\rho r_0 + \csc^{-1} \alpha)^{-2}}{(\alpha^2 - 1)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 1 \right] - (\rho r_0 + \csc^{-1} \alpha)^{-3} \left[\frac{\alpha^2}{(\alpha^2 - 1)^{3/2}} + \frac{2}{(\alpha^2 - 1)^{1/2}} + \frac{1}{(\alpha^2 - 1)^{1/2}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.94)$$

sendo que foi usado o valor das constantes c_0 , c_1 e c_2 dadas em (2.78), com $n = 0, 1, 2, \dots$, conforme [83, 84].

A função de onda radial será obtida mediante a expressão (2.87), com a função $F(z)$ dada por (2.92). Logo

$$R(z) = \sum_{n=0}^{\infty} N_n z^{\tilde{\chi}/2} (1-z)^{\sigma/2} {}_2F_1 \left(-n, \tilde{\chi} + \sigma + n, \tilde{\chi} + \frac{1}{2}, z \right), \quad (2.95)$$

e a constante de normalização N_n será obtida mediante a condição de normalização $\int_0^{\infty} |R(r)|^2 dr = 1$, isto é,

$$\frac{|N_n|^2}{2\rho} \int_0^1 \left({}_2F_1 \left(-n, \tilde{\chi} + \sigma + n, \tilde{\chi} + \frac{1}{2}, z \right) \right)^2 z^{\tilde{\chi}-1/2} (1-z)^{\sigma-1/2} dz = 1. \quad (2.96)$$

O fator de $-1/2$ nos expoentes se deve a mudança de variáveis adotada $z = \text{sen}^2[\rho(r - r_0)]$, a qual, obtemos: $dz = 2\rho \text{sen}[\rho(r - r_0)] \cos[\rho(r - r_0)] dr = 2\rho z^{1/2} (1-z)^{1/2} dr$. Usando os valores dos parâmetros em (2.93), temos que $\tilde{\chi} - 1/2 = \kappa - 1$ e $\sigma - 1/2 = \eta - \kappa + \zeta = \eta - \kappa - n$. Assim, mediante estas expressões, a integral (2.96) torna-se

$$\frac{|N_n|^2}{2\rho} \int_0^1 \left({}_2F_1 \left(-n, \tilde{\chi} + \sigma + n, \tilde{\chi} + \frac{1}{2}, z \right) \right)^2 z^{\kappa-1} (1-z)^{\eta-\kappa-n} dz = 1.$$

De acordo com Wang e Guo na Ref. [73], a integral acima possui como resultado

$$\int_0^1 ({}_2F_1(-n, \eta, \kappa, z))^2 z^{\kappa-1} (1-z)^{\eta-\kappa-n} dz = \frac{\Gamma(\eta+n)\Gamma(\eta-\kappa+1)(\Gamma(\kappa))^2}{\Gamma(\eta)\Gamma(\kappa+n)\Gamma(\eta+n+1)} n!, \quad (2.97)$$

logo a constante de normalização é dada por

$$N_n = \left[\frac{\Gamma(\eta)\Gamma(\kappa+n)\Gamma(\eta+n+1)}{\Gamma(\eta+n)\Gamma(\eta-\kappa+1)(\Gamma(\kappa))^2} \frac{2\rho}{n!} \right]^{1/2} \quad (2.98)$$

O grande trunfo da aproximação generalizada para o termo centrífugo elaborada nesta tese, se deve ao fato que é possível expandir o termo centrífugo em termos de qualquer função f propriamente definida. Com isto é possível obter uma aproximação para o termo centrífugo, de forma que, mediante a escolha da função f , podemos combinar os termos da aproximação generalizada com os termos pertencentes a função potencial a ser estudada. Portanto, a aproximação (2.80) não é a única a qual o termo centrífugo pode ser expresso, de tal maneira que possamos encontrar soluções para a equação (1.1), com o potencial de Pöschl - Teller na forma trigonométrica (2.76).

De fato, se considerarmos as funções $y = \sec[\rho(r - r_0)]$ e $f^{-1}(y) = \sec^{-1} y$ em (2.16), com $a = \rho$ e $m = 2$, temos

$$\left(\frac{r_0}{r} \right)^2 = \left(1 + \frac{\sec^{-1} y}{\rho r_0} \right)^{-2},$$

e através de (2.17), os coeficientes possuem a forma

$$c_0 = \left(\frac{\rho r_0 + \sec^{-1} \alpha}{\rho r_0} \right)^{-2}, \quad c_1 = -\frac{2(\rho r_0 + \sec^{-1} \alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^4 - \alpha^2)^{1/2}}, \quad e \quad c_2 = -\frac{6(\rho r_0 + \sec^{-1} \alpha)^{-4}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^4 - \alpha^2)} \\ + \frac{2(\rho r_0 + \sec^{-1} \alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^2 - 1)^{3/2}} + \frac{2(\rho r_0 + \sec^{-1} \alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^6 - \alpha^4)^{1/2}}. \quad (2.99)$$

A aproximação (2.18), com $n = 0, 1, 2$, é dada por

$$\left(\frac{r_0}{r} \right)^2 \approx c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + \frac{c_2}{2 \cos^2[\rho(r - r_0)]}. \quad (2.100)$$

De acordo com a discussão anterior, os termos em $y = \sec[\rho(r - r_0)]$ foram descartados, como uma forma de obter um potencial efetivo V_{ef} solúvel. Conforme a definição (2.79), o domínio da função inversa da secante é definido como sendo $(-\infty, -1] \cup [1, \infty)$ e a imagem é $[0, \pi/2) \cup [\pi, 3\pi/2)$, ou seja, $[0, \pi/2)$ se $y \geq 1$ e $[\pi, 3\pi/2)$ se $y \leq -1$. Logo, seja α um número pertencente ao domínio da função $\sec^{-1} \alpha$.

Substituindo a aproximação (2.100) na equação (2.77), e seguindo os mesmos passos, obtemos

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} W - \frac{\rho^2 \chi(\chi - 1)}{\text{sen}^2[\rho(r - r_0)]} - \frac{\rho^2 \tilde{\sigma}(\tilde{\sigma} - 1)}{\text{cos}^2[\rho(r - r_0)]} \right] R = 0, \quad (2.101)$$

sendo a energia renormalizada dada por

$$W = E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right)$$

e o potencial efetivo

$$V_{ef} = \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} \left[\frac{\chi(\chi - 1)}{\text{sen}^2[\rho(r - r_0)]} - \frac{\tilde{\sigma}(\tilde{\sigma} - 1)}{\text{cos}^2[\rho(r - r_0)]} \right],$$

com

$$\rho^2 \tilde{\sigma}(\tilde{\sigma} - 1) = \rho^2 \sigma(\sigma - 1) - \frac{l(l+1)c_2}{2r_e^2}.$$

As raízes desta equação são

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma} &= \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \left[1 + 4\sigma(\sigma - 1) - \frac{2l(l+1)c_2}{(\rho r_0)^2} \right]^{1/2} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left\{ 1 + 4\sigma(\sigma - 1) - 4l(l+1) \left[\frac{(\rho r_0 + \sec^{-1} \alpha)^{-3}}{(\alpha^2 - 1)^{3/2}} - \frac{3(\rho r_0 + \sec^{-1} \alpha)^{-4}}{(\alpha^4 - \alpha^2)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(\rho r_0 + \sec^{-1} \alpha)^{-3}}{(\alpha^6 - \alpha^4)^{1/2}} \right] \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.102)$$

Sem necessidade de repetir todo o cálculo, podemos perceber que o espectro de energia é

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} (\chi + \tilde{\sigma} + 2n)^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right) \\ &= \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} (\chi + \tilde{\sigma} + 2n)^2 + \frac{l(l+1)(\rho\hbar)^2}{2\mu} \left\{ (\rho r_0 + \sec^{-1} \alpha)^{-2} \left[-\frac{3(\rho r_0 + \sec^{-1} \alpha)^{-2}}{(\alpha^2 - 1)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 1 \right] + \left[\frac{\alpha^2}{(\alpha^2 - 1)^{3/2}} + \frac{1}{(\alpha^2 - 1)^{1/2}} + \frac{2}{(\alpha^2 - 1)^{1/2}} \right] (\rho r_0 + \sec^{-1} \alpha)^{-3} \right\}, \end{aligned} \quad (2.103)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$, e a função de onda radial possui a forma

$$R(z) = \sum_{n=0}^{\infty} N_n z^{\chi/2} (1-z)^{\tilde{\sigma}/2} {}_2F_1 \left(-n, \chi + \tilde{\sigma} + n, \chi + \frac{1}{2}, z \right),$$

com a constante de normalização sendo dada por

$$N_n = \left[\frac{\Gamma(\eta)\Gamma(\kappa+n)\Gamma(\eta+n+1)}{\Gamma(\eta+n)\Gamma(\eta-\kappa+1)(\Gamma(\kappa))^2} \frac{2\rho}{n!} \right]^{1/2},$$

com parâmetros:

$$\zeta = -n, \quad \eta = \chi + \tilde{\sigma} + n, \quad \text{e} \quad \kappa = \chi + \frac{1}{2}.$$

2.8.2 Forma hiperbólica

Seja o potencial de Pöschl - Teller na forma hiperbólica

$$V(r) = \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} \left[\frac{\chi(\chi-1)}{\sinh^2[\rho(r-r_0)]} - \frac{\sigma(\sigma+1)}{\cosh^2[\rho(r-r_0)]} \right], \quad (2.104)$$

onde r_0 , μ , e ρ são as constantes físicas definidas na seção anterior, com $\chi > 1$ e $\sigma > 1$. Sob as transformações $\sigma \rightarrow -\sigma - 1$ e $\chi \rightarrow -\chi + 1$, a função potencial (2.104) permanece inalterada.

A equação (1.1) sujeita ao potencial (2.104) é

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} E - \frac{\rho^2 \chi(\chi-1)}{\sinh^2[\rho(r-r_0)]} + \frac{\rho^2 \sigma(\sigma+1)}{\cosh^2[\rho(r-r_0)]} \right] R - \frac{l(l+1)}{r_0^2} \left(\frac{r_0}{r} \right)^2 R = 0. \quad (2.105)$$

Substituindo as funções $y = \text{sech}[\rho(r-r_0)]$ e $f^{-1}(y) = \text{sech}^{-1}y$ em (2.16), com $m = 2$ e $a = \rho$, obtemos a identidade

$$\left(\frac{r_0}{r} \right)^2 = \left(1 + \frac{\text{sech}^{-1}y}{\rho r_0} \right)^{-2}.$$

Através de (2.17), com $n = 0, 1, 2$, temos os coeficientes

$$\begin{aligned} c_0 &= \left(\frac{\rho r_0 + \text{sech}^{-1}\alpha}{\rho r_0} \right)^{-2}, \quad c_1 = \frac{2(\rho r_0 + \text{sech}^{-1}\alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^2 - \alpha^4)^{1/2}}, \quad \text{e} \quad c_2 = \frac{6(\rho r_0 + \text{sech}^{-1}\alpha)^{-4}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^2 - \alpha^4)} \\ &+ \frac{2(\rho r_0 + \text{sech}^{-1}\alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(1 - \alpha^2)^{3/2}} - \frac{2(\rho r_0 + \text{sech}^{-1}\alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^4 - \alpha^6)^{1/2}}, \end{aligned} \quad (2.106)$$

sendo α um número limitado ao intervalo $(0, 1]$, domínio da função inversa da secante hiperbólica, o que pode ser percebido claramente se considerarmos a expressão

$$y = \text{sech}^{-1}x = \ln \left[\frac{1}{x} \pm \left(\frac{1-x^2}{x^2} \right)^{1/2} \right],$$

a qual corresponde á uma outra definição da função inversa da cosecante hiperbólico, sendo sua imagem dada por $y \geq 0$.

Para que possamos resolver a equação (2.105) usando a aproximação (2.18), devemos desprezar os termos em $y = \text{sech}[\rho(r - r_0)]$, isto é, devemos considerar a seguinte aproximação

$$\left(\frac{r_0}{r}\right)^2 \approx c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + \frac{c_2}{2 \cosh^2[\rho(r - r_0)]}, \quad (2.107)$$

como uma forma de obtermos um potencial efetivo solúvel. Se considerássemos a expansão completa da série, iriam aparecer termos do tipo $(c_1 - \alpha c_2) y = (c_1 - \alpha c_2) / \cosh[\rho(r - r_0)]$.

Substituindo a aproximação (2.107) na equação (2.105), obtemos

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} W - \frac{\rho^2 \chi(\chi - 1)}{\sinh^2[\rho(r - r_0)]} + \frac{\rho^2 \tilde{\sigma}(\tilde{\sigma} + 1)}{\cosh^2[\rho(r - r_0)]} \right] R = 0, \quad (2.108)$$

sendo a energia renormalizada

$$W = E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right), \quad (2.109)$$

e o potencial efetivo

$$V_{ef} = \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} \left[\frac{\chi(\chi - 1)}{\sinh^2[\rho(r - r_0)]} + \frac{\tilde{\sigma}(\tilde{\sigma} + 1)}{\cosh^2[\rho(r - r_0)]} \right],$$

com a constante renormalizada dada por

$$\rho^2 \tilde{\sigma}(\tilde{\sigma} + 1) = \rho^2 \sigma(\sigma + 1) - \frac{l(l+1)c_2}{2r_e^2},$$

e suas raízes

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma} &= \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \left[1 + 4\sigma(\sigma + 1) - \frac{2l(l+1)c_2}{(\rho r_0)^2} \right]^{1/2} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left\{ 1 + 4\sigma(\sigma + 1) - 4l(l+1) \left[\frac{(\rho r_0 + \text{sech}^{-1}\alpha)^{-3}}{(1 - \alpha^2)^{3/2}} + \frac{3(\rho r_0 + \text{sech}^{-1}\alpha)^{-4}}{(\alpha^2 - \alpha^4)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{(\rho r_0 + \text{sech}^{-1}\alpha)^{-3}}{(\alpha^4 - \alpha^6)^{1/2}} \right] \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.110)$$

Para resolver a equação (2.108), consideramos a seguinte mudança de variáveis $z = \cosh^2[\rho(r - r_0)]$, juntamente com

$$\frac{d^2 R}{dr^2} = 4z(z - 1) \frac{d^2 R}{dz^2} + (4z - 2) \frac{dR}{dz}.$$

Logo mediante as substituições acima, a equação (2.108), pode ser reescrita como

$$z(1-z)\frac{d^2R}{dz^2} + \left(\frac{1}{2}-z\right)\frac{dR}{dz} + \frac{1}{4}\left[i^2\frac{k^2}{\rho^2} - \frac{\chi(\chi-1)}{1-z} - \frac{\tilde{\sigma}(\tilde{\sigma}+1)}{z}\right]R(z) = 0 \quad (2.111)$$

sendo $k^2 = 2\mu W/\hbar^2$.

Estamos procurando solução para a equação (2.111) da forma (2.87). Então, multiplicando a equação (2.111) por $(1-z)^{-\nu}z^{-\beta}$ à direita e usando as expressões (2.88) e (2.89), obtemos

$$z(1-z)\frac{d^2F}{dz^2} + \left[2\beta + \frac{1}{2} - (2\beta + 2\nu + 1)z\right]\frac{dF}{dz} + \left[\frac{\beta(\beta-1/2)}{z} - (\beta + \nu)^2 + \frac{\nu(\nu-1/2)}{(1-z)}\right]F(z) + \frac{1}{4}\left[i^2\frac{k^2}{\rho^2} - \frac{\chi(\chi-1)}{1-z} - \frac{\tilde{\sigma}(\tilde{\sigma}+1)}{z}\right]F(z) = 0. \quad (2.112)$$

Para que tenhamos uma equação hipergeométrica devemos impor as seguintes condições; $\nu(\nu - \frac{1}{2}) = \chi(\chi - 1)/4$ e $\beta(\beta - \frac{1}{2}) = \tilde{\sigma}(\tilde{\sigma} + 1)/4$, que nos levam aos seguintes valores para ν e β : $\nu = \chi/2$ e $\beta = -\tilde{\sigma}/2$.

Desta forma, obtemos a equação

$$z(1-z)\frac{d^2F}{dz^2} + \left[\left(\tilde{\sigma} + \frac{1}{2}\right) - (\chi + \tilde{\sigma} + 1)z\right]\frac{dF}{dz} + \frac{1}{4}\left[i^2\frac{k^2}{\rho^2} - (\chi + \tilde{\sigma})^2\right]F(z) = 0 \quad (2.113)$$

cuja solução analítica em uma vizinhança de $z = 0$ é a função hipergeométrica (2.92), com os parâmetros dados por;

$$\zeta = \frac{1}{2}\left(\chi + \tilde{\sigma} + i\frac{k}{\rho}\right), \quad \eta = \frac{1}{2}\left(\chi + \tilde{\sigma} - i\frac{k}{\rho}\right), \quad \text{e } \kappa = \tilde{\sigma} + \frac{1}{2}. \quad (2.114)$$

Usando os mesmo argumentos da seção anterior à respeito da invariância da função hipergeométrica (2.92), com respeito a permuta dos parâmetros ζ e η e a expressão $k^2 = 2\mu W/\hbar^2$ juntamente com o valor de W em (2.109), obtemos o espectro de energia como sendo

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu}(\tilde{\sigma} - \chi - 2n)^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2}\left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2}c_2\right) \\ &= -\frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu}(\tilde{\sigma} - \chi - 2n)^2 + \frac{l(l+1)(\rho\hbar)^2}{2\mu}\left\{(\rho r_0 + \text{sech}^{-1}\alpha)^{-2}\left[\frac{3(\rho r_0 + \text{sech}^{-1}\alpha)^{-2}}{(1-\alpha^2)}\right.\right. \\ &\quad \left.\left.+ 1\right] + \left[\frac{\alpha^2}{(1-\alpha^2)^{3/2}} - \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/2}} - \frac{2}{(1-\alpha^2)^{1/2}}\right](\rho r_0 + \text{sech}^{-1}\alpha)^{-3}\right\}, \quad (2.115) \end{aligned}$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$. A função de onda radial é dada por

$$R(z) = \sum_{n=0}^{\infty} R_n (1-z)^{\chi/2} z^{\tilde{\sigma}/2} {}_2F_1 \left(-n, \chi + \tilde{\sigma} + n, \chi + \frac{1}{2}, z \right), \quad (2.116)$$

e a constante de normalização N_n é obtida mediante a integral

$$\frac{|N_n|^2}{2\rho} \int_0^1 \left({}_2F_1 \left(-n, \chi + \tilde{\sigma} + n, \chi + \frac{1}{2}, z \right) \right)^2 z^{\chi-1/2} (1-z)^{\tilde{\sigma}-1/2} dz = 1. \quad (2.117)$$

O sinal negativo de $\tilde{\sigma}$ foi transferido para a expressão (2.110) e o fator $1/i = 1/\sqrt{-1}$ surge devido ao termo $dz = 2\rho iz^{1/2}(1-z)^{1/2}dr$. Usando os valores dos parâmetros em (2.114), temos que $\chi - 1/2 = \kappa - 1$ e $\tilde{\sigma} - 1/2 = \eta - \kappa + \zeta = \eta - \kappa - n$. Assim, mediante estas expressões, a integral (2.117) torna-se

$$\frac{|N_n|^2}{2\rho} \int_0^1 \left({}_2F_1 \left(-n, \chi + \tilde{\sigma} + n, \chi + \frac{1}{2}, z \right) \right)^2 z^{\kappa-1} (1-z)^{\eta-\kappa-n} dz = 1.$$

Então, a partir de (2.97), obtemos

$$N_n = \left[\frac{\Gamma(\eta)\Gamma(\kappa+n)\Gamma(\eta+n+1)}{\Gamma(\eta+n)\Gamma(\eta-\kappa+1)(\Gamma(\kappa))^2 n!} \frac{2\rho}{n!} \right]^{1/2}.$$

Procedendo de forma semelhante à seção anterior, podemos obter uma outra aproximação para o termo centrífugo da ESR com o potencial de Pöschl - Teller na forma hiperbólica. Se considerarmos as funções $y = \operatorname{cosech}[\rho(r - r_0)]$ e $f^{-1}(y) = \operatorname{cosech}^{-1}y$ em (2.16), com $a = \rho$ e $m = 2$, temos a identidade

$$\left(\frac{r_0}{r} \right)^2 = \left(1 + \frac{\operatorname{cosech}^{-1}y}{\rho r_0} \right)^{-2},$$

e através de (2.17), com $n = 0, 1, 2$, podemos obter os coeficientes;

$$\begin{aligned} c_0 &= \left(\frac{\rho r_0 + \operatorname{cosech}^{-1}\alpha}{\rho r_0} \right)^{-2}, \quad c_1 = \frac{2(\rho r_0 + \operatorname{cosech}^{-1}\alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^4 + \alpha^2)^{1/2}}, \quad e \\ c_2 &= \frac{2(\rho r_0 + \operatorname{cosech}^{-1}\alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^2 + 1)^{3/2}} + \frac{6(\rho r_0 + \operatorname{cosech}^{-1}\alpha)^{-4}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^4 + \alpha^2)} - \frac{2(\rho r_0 + \operatorname{cosech}^{-1}\alpha)^{-3}}{(\rho r_0)^{-2}(\alpha^6 + \alpha^4)^{1/2}}, \end{aligned}$$

com $\alpha \neq 0$ sendo um número no domínio da função inversa da cosecante hiperbólico, o que pode ser percebido facilmente se usarmos a definição

$$y = \operatorname{cosech}^{-1}x = \ln \left[\frac{1}{x} \pm \left(\frac{1+x^2}{x^2} \right)^{1/2} \right],$$

com imagem $y \geq 0$.

A aproximação (2.18) com $n = 0, 1, 2$, possui a forma

$$\left(\frac{r_0}{r}\right)^2 \approx c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + \frac{c_2}{2 \sinh^2[\rho(r - r_0)]}, \quad (2.118)$$

sendo que o termo em $y = \operatorname{cosech}[\rho(r - r_0)]$ foi descartado. Substituindo a aproximação (2.118) na equação (2.105), e seguindo os mesmos passos, obtemos a seguinte equação

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} W - \frac{\rho^2 \tilde{\chi}(\tilde{\chi} - 1)}{\sinh^2[\rho(r - r_0)]} + \frac{\rho^2 \sigma(\sigma + 1)}{\cosh^2[\rho(r - r_0)]} \right] R = 0,$$

com

$$W = E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right)$$

e

$$V_{ef} = \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} \left[\frac{\tilde{\chi}(\tilde{\chi} - 1)}{\sinh^2[\rho(r - r_0)]} - \frac{\sigma(\sigma + 1)}{\cosh^2[\rho(r - r_0)]} \right]$$

sendo as expressões para a energia renormalizada e o potencial efetivo, respectivamente, com a constante renormalizada, dada por

$$\rho^2 \tilde{\chi}(\tilde{\chi} - 1) = \rho^2 \chi(\chi - 1) - \frac{l(l+1)c_2}{2r_e^2},$$

cujas raízes são

$$\begin{aligned} \tilde{\chi} &= \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \left[1 + 4\chi(\chi - 1) - \frac{2l(l+1)c_2}{(\rho r_0)^2} \right]^{1/2} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left\{ 1 + 4\chi(\chi - 1) - 4l(l+1) \left[\frac{(\rho r_0 + \operatorname{cosech}^{-1}\alpha)^{-3}}{(\alpha^2 + 1)^{3/2}} + \frac{3(\rho r_0 + \operatorname{cosech}^{-1}\alpha)^{-4}}{(\alpha^4 + \alpha^2)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{(\rho r_0 + \operatorname{cosech}^{-1}\alpha)^{-3}}{(\alpha^6 + \alpha^4)^{1/2}} \right] \right\}^{1/2}. \end{aligned}$$

Sem necessidade de repetir todo o cálculo podemos, perceber que o espectro de energia é dado por

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} (\sigma - \tilde{\chi} - 2n)^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right) \\ &= -\frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} (\sigma - \tilde{\chi} - 2n)^2 + \frac{l(l+1)(\rho\hbar)^2}{2\mu} \left\{ (\rho r_0 + \operatorname{cosech}^{-1}\alpha)^{-3} \left[\frac{\alpha^2}{(\alpha^2 + 1)^{3/2}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{(\alpha^2 + 1)^{1/2}} - \frac{2}{(1 + \alpha^2)^{1/2}} \right] + (\rho r_0 + \operatorname{cosech}^{-1}\alpha)^{-2} \left[\frac{3(\rho r_0 + \operatorname{cosech}^{-1}\alpha)^{-2}}{(\alpha^2 + 1)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. 1 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.119)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$. A função de onda radial é

$$R(z) = \sum_{n=0}^{\infty} N_n (1-z)^{\tilde{\chi}/2} z^{\sigma/2} {}_2F_1 \left(-n, \tilde{\chi} + \sigma + n, \chi + \frac{1}{2}, z \right), \quad (2.120)$$

com a constante de normalização N_n dada por

$$N_n = \left[\frac{\Gamma(\eta)\Gamma(\kappa+n)\Gamma(\eta+n+1)}{\Gamma(\eta+n)\Gamma(\eta-\kappa+1)(\Gamma(\kappa))^2} \frac{2\rho}{n!} \right]^{1/2},$$

tendo como parâmetros

$$\zeta = -n, \quad \eta = \tilde{\chi} + \sigma + n, \quad \text{e} \quad \kappa = \chi + \frac{1}{2},$$

sendo que $\sigma = |\sigma|$, ou seja, consideramos apenas valores positivos de σ .

A motivação para a redefinição das constantes a e r_e , principalmente a distância internuclear em equilíbrio, partiu de considerações físicas, em especial na Ref. [84]. Obviamente o parâmetro ajustável r_0 será relacionado a distância internuclear em equilíbrio r_e calculando a primeira derivada da função potencial (2.76) ou (2.100), e obtendo o seu valor crítico.

2.9 Rosen - Morse

N. Rosen e P. M. Morse [41] propuseram uma função energia potencial para descrever o movimento de moléculas poliatômicas, com uma aplicação especial para o cálculo dos estados vibracionais relacionados à molécula da amônia. Tal função possui a seguinte forma

$$V(r) = B \tanh \left(\frac{r - r_e}{d} \right) - C \operatorname{sech}^2 \left(\frac{r - r_e}{d} \right) \quad (2.121)$$

onde B e C são a profundidade do potencial, r_e é a posição de equilíbrio estável e d possui a dimensão de comprimento.

A equação (1.1) com a função energia potencial (2.121) é dada por

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - B \tanh \left(\frac{r - r_e}{d} \right) + C \operatorname{sech}^2 \left(\frac{r - r_e}{d} \right) \right) R - \frac{l(l+1)}{r_e^2} \left(\frac{r_e}{r} \right)^2 R = 0.$$

Realizando a mudança de variáveis $z = (r - r_e)/d$ e usando as derivadas $R'(r) = d^{-1}R'(z)$ e $R''(r) = d^{-2}R''(z)$, chegamos a equação

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + \left[\frac{2E\mu d^2}{\hbar^2} - \frac{2\mu B d^2}{\hbar^2} \tanh z + \frac{2\mu C d^2}{\hbar^2} \operatorname{sech}^2 z - \frac{l(l+1)d^2}{r_e^2} \left(\frac{r_e}{r} \right)^2 \right] R = 0. \quad (2.122)$$

Substituindo as funções $y = \tanh[(r - r_e)/d] = \tanh z$ e $f^{-1}(y) = \tanh^{-1} y$ em (2.16), com $a = 1/d$, $r_0 = r_e$, e $m = 2$, obtemos a identidade

$$\left(\frac{r_e}{r}\right)^2 = \left(1 + \frac{d \tanh^{-1} y}{r_e}\right)^{-2}. \quad (2.123)$$

Através de (2.17), com $n = 0, 1, 2$, obtemos os coeficientes

$$\begin{aligned} c_0 &= \left(\frac{r_e + d \tanh^{-1} \alpha}{r_e}\right)^{-2}, \quad c_1 = -\frac{2dr_e^2 (r_e + d \tanh^{-1} \alpha)^{-3}}{(1 - \alpha^2)}, \quad e \\ c_2 &= -\frac{4d\alpha r_e^2 (r_e + d \tanh^{-1} \alpha)^{-3}}{(1 - \alpha^2)^2} + \frac{6(dr_e)^2 (r_e + d \tanh^{-1} \alpha)^{-4}}{(1 - \alpha^2)^2}, \end{aligned} \quad (2.124)$$

com a aproximação (2.18) dada sob a forma

$$\begin{aligned} \left(\frac{r_e}{r}\right)^2 &\approx c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + (c_1 - \alpha c_2) \tanh z + \frac{c_2}{2} \tanh^2 z \\ &\approx c_0 - \alpha c_1 + \frac{c_2}{2} + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + (c_1 - \alpha c_2) \tanh z - \frac{c_2}{2} \operatorname{sech}^2 z. \end{aligned} \quad (2.125)$$

sendo α um número limitado ao intervalo $|\alpha| < 1$, domínio da função $f^{-1}(y) = \tanh^{-1} y$.

Uma outra forma de obter a identidade (2.123), seria considerar a seguinte relação

$$\tanh^{-1} y = \frac{1}{2} \ln \frac{1+y}{1-y}$$

com $|y| < 1$, e portanto,

$$\left(\frac{r_e}{r}\right)^2 = \left(1 + \frac{d}{2r_e} \ln \frac{1+y}{1-y}\right)^{-2}.$$

Certamente iremos obter a mesma aproximação (2.125), por meio das expressões (2.17) e (2.18).

Substituindo a aproximação (2.125) em (2.122), temos que

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + \left(-W - \beta \tanh z + \gamma \operatorname{sech}^2 z\right) R = 0, \quad (2.126)$$

sendo

$$-W = \frac{2E\mu d^2}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)d^2}{r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{c_2}{2} + \frac{\alpha^2}{2} c_2\right) \quad (2.127)$$

a energia renormalizada e o potencial efetivo

$$V_{ef} = \beta \tanh z - \gamma \operatorname{sech}^2 z, \quad (2.128)$$

com

$$\beta = \frac{2\mu B d^2}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)d^2}{r_e^2} (c_1 - \alpha c_2) \quad \text{e} \quad \gamma = \frac{2\mu C d^2}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)d^2}{2r_e^2} c_2 \quad (2.129)$$

sendo os coeficientes renormalizados do potencial efetivo (2.128).

Seguindo Rosen e Morse na Ref. [41], estamos procurando soluções para a equação (2.126) sob a forma $R(z) = e^{az} \cosh^{-b} z F(z)$. portanto, multiplicando a equação (2.126) por e^{-az} à esquerda e por $\cosh^b z$ à direita, e usando

$$\begin{aligned} e^{-az} \frac{d^2 R}{dz^2} \cosh^b z &= \frac{d^2 F}{dz^2} + (2a - 2b \tanh z) \frac{dF}{dz} + (a^2 - b)F(z) - 2ab \tanh z F(z) \\ &\quad + b(b+1) \tanh^2 z F(z), \end{aligned} \quad (2.130)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F}{dz^2} + 2(a - b \tanh z) \frac{dF}{dz} + (a^2 + b^2 - W) F(z) - (2ab - \beta) \tanh z F(z) + [\gamma - a(b \\ + 1)] \operatorname{sech}^2 z F(z) = 0. \end{aligned} \quad (2.131)$$

Neste ponto devemos impor duas condições para a equação (2.131), tais condições se adequam exatamente na discussão da seção 1.1, à respeito da quantização dos níveis de energia, ou seja, condições impostas a equação diferencial de forma que a mesma se torne uma equação hipergeométrica. Estas condições são dadas por

$$2ab = \beta \quad \text{e} \quad a^2 + b^2 = W, \quad (2.132)$$

e podem ser satisfeitas mediante a seguinte escolha para a e b

$$a = -\frac{1}{2} [(W + \beta)^{1/2} - (W - \beta)^{1/2}] \quad \text{e} \quad b = \frac{1}{2} [(W + \beta)^{1/2} + (W - \beta)^{1/2}].$$

Desta forma, usando as condições (2.132) em (2.131), obtemos

$$\frac{d^2 F}{dz^2} + 2(a - b \tanh z) \frac{dF}{dz} + [\gamma - b(b+1)] \operatorname{sech}^2 z F(z) = 0. \quad (2.133)$$

Realizando a mudança de variáveis $u = \frac{1}{2}(1 + \tanh z)$, e, usando

$$\frac{d^2 F}{dz^2} = \frac{1}{4} \operatorname{sech}^4 z \frac{d^2 F}{du^2} - \operatorname{sech}^2 z \tanh z \frac{dF}{du},$$

em (2.133), obtemos a seguinte equação

$$\frac{1}{4}\operatorname{sech}^2 z \frac{d^2 F}{du^2} - \tanh z \frac{dF}{du} + [a - b(2u - 1)] \frac{dF}{du} + [\gamma - b(b + 1)] F = 0.$$

Neste ponto, usando a relação $\operatorname{sech}^2 z = 1 - \tanh^2 z = 1 - (2u - 1)^2 = 4u(1 - u)$, chegamos a equação

$$u(1 - u) \frac{d^2 F}{du^2} + [a + b + 1 - 2(b + 1)u] \frac{dF}{du} + [\gamma - b(b + 1)] F(u) = 0. \quad (2.134)$$

A solução desta equação é a função hipergeométrica (2.92), com os parâmetros dados por:

$$\zeta = b + \frac{1}{2} - \left(\gamma + \frac{1}{4}\right)^{1/2}, \quad \eta = b + \frac{1}{2} + \left(\gamma + \frac{1}{4}\right)^{1/2}, \quad \text{e } \kappa = a + b + 1. \quad (2.135)$$

A substituição $u = \frac{1}{2}(1 + \tanh z)$ claramente satisfaz as condições de contorno para a função de onda radial, as quais são: $u \rightarrow 1 (z \rightarrow \infty)$ e $u \rightarrow 0 (z \rightarrow 0)$. Como resultado destas condições de contorno a função de onda $R(z) = e^{az} \cosh^{-b} z F(z)$, a qual pode ser colocada sob a forma

$$R(z) = 2^{2b} u^{a+b} (1 - u)^{-a+b} F(u), \quad (2.136)$$

mediante a substituição

$$\begin{aligned} e^{az} \cosh^{-b} z &= \left(\frac{2e^z}{e^z + e^{-z}}\right)^{a+b} \left(\frac{2e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right)^{-a+b} \\ &= \left(\frac{2e^z}{e^z + e^{-z}}\right)^{a+b} \left(2 - \frac{2e^z}{e^z + e^{-z}}\right)^{-a+b} = 2^{2b} u^{a+b} (1 - u)^{-a+b}. \end{aligned}$$

Portanto, seguindo a discussão de Rosen e Morse [41], para garantir que a série hipergeométrica (2.92) permaneça finita em $u = 0$, devemos fazer com que $\zeta = -n$, sendo $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Logo

$$b = \left(\gamma + \frac{1}{4}\right)^{1/2} - n - \frac{1}{2}. \quad (2.137)$$

Usando a primeira relação em (2.132) podemos perceber que a outra constante a possui a forma

$$a = -\frac{\beta}{(4\gamma + 1)^{1/2} - 2n - 1}. \quad (2.138)$$

Os valores permitidos para a energia são dados através da segunda condição em (2.132), juntamente com a expressão para a energia renormalizada W em (2.127). Então, temos

$$-E_n = \frac{(\beta\hbar)^2}{2\mu d^2 \left[(4\gamma + 1)^{1/2} - 2n - 1 \right]^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu d^2} \left[\left(\gamma + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{c_2}{2} + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right), \quad (2.139)$$

com os valores de β e γ dados em (2.129) e o número quântico principal possuindo os seguintes valores $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

A função de onda radial, solução da equação (2.126), é dada por

$$R_n(z) = \sum_{n=0}^{\infty} N_n e^{az} \cosh^{-b} z {}_2F_1 \left[-n, \eta, \kappa, \frac{1}{2}(1 + \tanh z) \right], \quad (2.140)$$

sendo a constante de normalização N_n é obtida mediante a condição de normalização

$$d|N_n|^2 \int e^{2az} \cosh^{-2b} z \left({}_2F_1 \left[-n, \eta, \kappa, \frac{1}{2}(1 + \tanh z) \right] \right)^2 dz = 1. \quad (2.141)$$

Substituindo a expressão (2.136) com $u = \frac{1}{2}(1 + \tanh z)$, $du = 2u(1-u)dz$, $k = a + b - 1$, $\sigma = b - a - 1$, $\varpi = \eta - \zeta = 2(\gamma + \frac{1}{4})^{1/2}$, e $\kappa = a + b + 1$ na integral (2.141), temos que

$$\begin{aligned} 1 &= 2^{2b-1} d|N_n|^2 \int_0^1 u^{a+b-1} (1-u)^{b-a-1} \left({}_2F_1(-n, \varpi - n, \kappa, u) \right)^2 du \\ &= 2^{2b-1} d|N_n|^2 \int_0^1 u^k (1-u)^\sigma \left({}_2F_1(-n, \varpi - n, \kappa, u) \right)^2 du. \end{aligned}$$

Usando (2.97), encontramos a constante de normalização dada por

$$N_n = \frac{d^{-1/2}}{2^{b-1/2}} \left[\frac{(\lambda + 1)\Gamma(n + k + 1)\Gamma(n + k + \lambda + 2)}{\Gamma(k + 1)^2\Gamma(n + \lambda + 2)} \right]^{1/2}. \quad (2.142)$$

No caso especial em que $\alpha = 0$, a aproximação (2.125) toma a forma

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^2 \approx 1 + \frac{3d^2}{r_e^2} - \frac{2d}{r_e} \tanh z - \frac{3d^2}{r_e^2} \operatorname{sech}^2 z.$$

Assim, substituindo a aproximação acima na equação (2.122) e seguindo os mesmos passos, iremos obter a seguinte expressão para o espectro de energia

$$-E_n = \frac{(\beta\hbar)^2}{2\mu d^2 \left[(4\gamma + 1)^{1/2} - 2n - 1 \right]^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu d^2} \left[\left(\gamma + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(1 + \frac{3d^2}{r_e^2} \right)$$

com as constantes β e γ dadas por

$$\beta = \frac{2\mu B d^2}{\hbar^2} - \frac{2l(l+1)d^3}{r_e^3} \text{ e } \gamma = \frac{2\mu C d^2}{\hbar^2} + \frac{3l(l+1)d^4}{r_e^4}.$$

2.10 Morse - Feshbach

P. M. Morse e H. Feshbach [86] propuseram a seguinte função potencial

$$V(r) = V_0 \cosh^2 \sigma \left(\tanh \left(\frac{r - \sigma d}{d} \right) + \tanh \sigma \right)^2, \quad (2.143)$$

a qual possui um mínimo ($V = 0$) em $r = 0$. Para V_0 positivo quando $r \rightarrow \infty$, a função potencial tende assintoticamente para o valor $V_0 e^{2\sigma}$, e quando $r \rightarrow -\infty$, tende assintoticamente para o valor $V_0 e^{-2\sigma}$.

A função potencial (2.143), após algumas manipulações, pode ser escrita na seguinte forma

$$V(r) = V_0 \sinh 2\sigma \tanh \left(\frac{r - \sigma d}{d} \right) - V_0 \cosh^2 \sigma \operatorname{sech}^2 \left(\frac{r - \sigma d}{d} \right) + V_0 \cosh 2\sigma. \quad (2.144)$$

Esta função potencial é muito semelhante ao potencial (2.121) proposto por Rosen e Morse, se considerarmos $B = V_0 \sinh 2\sigma$ e $C = V_0 \cosh^2 \sigma$. Logo, quase todo o tratamento dedicado para resolver a equação (1.1), com o potencial de Rosen e Morse, será reaproveitado aqui.

Substituindo (2.144) na equação (1.1), temos que

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - V_0 \sinh 2\sigma \tanh \left(\frac{r - \sigma d}{d} \right) + V_0 \cosh^2 \sigma \operatorname{sech}^2 \left(\frac{r - \sigma d}{d} \right) \right. \\ \left. - V_0 \cosh 2\sigma \right) R - \frac{l(l+1)}{r_e^2} \left(\frac{r_e}{r} \right)^2 R = 0. \end{aligned} \quad (2.145)$$

Fazendo $B = V_0 \sinh 2\sigma$, $C = V_0 \cosh^2 \sigma$, e adicionando o termo $V_0 \cosh 2\sigma$ a nova expressão para a energia $E' = E - V_0 \cosh 2\sigma$, obtemos

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + \left[\frac{2E' \mu d^2}{\hbar^2} - \frac{2\mu B d^2}{\hbar^2} \tanh z + \frac{2\mu C d^2}{\hbar^2} \operatorname{sech}^2 z - \frac{l(l+1)d^2}{r_e^2} \left(\frac{r_e}{r} \right)^2 \right] R = 0, \quad (2.146)$$

com $z = (r - \sigma d)/d$, esta equação é praticamente idêntica a equação (2.122) considerando $r_e = \sigma d$. Portanto, sem a necessidade de repetir todos os detalhes iremos explicitar apenas os termos mais importantes.

Após a substituição da aproximação (2.125) em (2.146) obtemos

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + \left(-W - \beta \tanh z + \gamma \operatorname{sech}^2 z \right) R = 0,$$

sendo

$$-W = \frac{2E'\mu d^2}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{\sigma^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{c_2}{2} + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right)$$

a energia renormalizada e o potencial efetivo

$$V_{ef} = \beta \tanh z - \gamma \operatorname{sech}^2 z$$

com

$$\beta = \frac{2\mu V_0 d^2 \sinh 2\sigma}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{\sigma^2} (c_1 - \alpha c_2) \quad \text{e} \quad \gamma = \frac{2\mu V_0 d^2 \cosh^2 \sigma}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{2\sigma^2} c_2.$$

Assim, seguindo os mesmos passos, temos que o espectro de energia é dado por

$$\begin{aligned} -E_n &= \frac{(\beta\hbar)^2}{2\mu d^2 \left[(4\gamma + 1)^{1/2} - 2n - 1 \right]^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu d^2} \left[\left(\gamma + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 \\ &\quad - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu(\sigma d)^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{c_2}{2} + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right) - \frac{V_0 \hbar^2}{2\mu} \cosh 2\sigma. \end{aligned}$$

onde os coeficientes c_0 , c_1 , e c_2 possuem a forma

$$\begin{aligned} c_0 &= \left(\frac{\sigma d + d \tanh^{-1} \alpha}{\sigma d} \right)^{-2}, \quad c_1 = -\frac{2\sigma^2 d^3 (\sigma d + d \tanh^{-1} \alpha)^{-3}}{(1 - \alpha^2)}, \quad \text{e} \\ c_2 &= -\frac{4\alpha\sigma^2 d^3 (\sigma d + d \tanh^{-1} \alpha)^{-3}}{(1 - \alpha^2)^2} + \frac{6\sigma^2 d^3 (\sigma d + d \tanh^{-1} \alpha)^{-4}}{(1 - \alpha^2)^2}. \end{aligned}$$

e $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Em seu livro texto [86] Morse-Feshbach estudaram a função potencial (2.143), com o objetivo principal de analisar a função energia potencial quando ela possui um mínimo que tende assintoticamente para um valor finito em $x \rightarrow \infty$ ou em $x \rightarrow -\infty$, no caso tratado unidimensional os valores permitidos para a energia seram discretos apenas em alguns poços do potencial onde a partícula possui algum estado ligado. Como uma forma de demonstrar que o método proposto na tese funciona para uma ampla classe de funções potencial, e visando tratar o caso tridimensional não tratado por Morse-Fershbach, a função potencial (2.143) foi incluída na tese.

2.11 Manning - Rosen

Considere a função energia potencial proposta por M. F. Manning e N. Rosen [43]

$$V(r) = \frac{1}{kd^2} \left[\frac{\beta(\beta - 1) \exp[-2(r - r_e)/d]}{(1 - \exp[-(r - r_e)/d])^2} - \frac{A \exp[-(r - r_e)/d]}{1 - \exp[-(r - r_e)/d]} \right], \quad (2.147)$$

que também pode ser escrita na seguinte forma

$$V(r) = \frac{\beta(\beta - 1)}{4kd^2} \operatorname{cosech}^2 \left[\frac{(r - r_e)}{2d} \right] - \frac{\nu}{dk} \coth \left[\frac{(r - r_e)}{2d} \right] + \frac{\nu}{dk}, \quad (2.148)$$

conforme Infeld e Hull em [54], sendo

$$\nu = \frac{[A + \beta(\beta - 1)]}{2d}, \quad k = \frac{2\mu}{\hbar^2}, \quad \text{e} \quad \beta = \frac{\omega_e}{4(B_e D_e)^{1/2}}.$$

Todas as constantes físicas na função potencial (2.147) possuem o mesmo significado outrora explicitado ao longo da tese.

Substituindo (2.148) na equação (1.1), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{dr^2} + \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} E - \frac{\nu}{d} + \frac{\nu}{d} \coth \left[\frac{(r - r_e)}{2d} \right] - \frac{\beta(\beta - 1)}{4d^2} \operatorname{cosech}^2 \left[\frac{(r - r_e)}{2d} \right] \right) R + \\ - \frac{l(l + 1)}{r_e^2} \left(\frac{r_e}{r} \right)^2 R = 0. \end{aligned} \quad (2.149)$$

Realizando a mudança de variáveis $z = (r - r_e)/2d$, com $R'(r) = R'(z)/2d$ e $R''(r) = R''(z)/4d^2$, temos que

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{dz^2} + \left[\frac{8\mu d^2}{\hbar^2} E - 4d\nu - 4d\nu \coth z - \beta(\beta - 1) \operatorname{cosech}^2 z - \frac{4l(l + 1)d^2}{r_e^2} \right. \\ \left. \times \left(\frac{r_e}{r} \right)^2 \right] R = 0. \end{aligned} \quad (2.150)$$

De acordo com o método de aproximação proposto na tese, consideremos as funções $y = \coth[a(r - r_e)] = \coth z$ e $f^{-1}(y) = \coth^{-1} y$ em (2.16), com $a = 1/2d$, $r_0 = r_e$, e $m = 2$. Então, obtemos a seguinte identidade

$$\left(\frac{r_e}{r} \right)^2 = \left(1 + \frac{2d \coth^{-1} y}{r_e} \right)^{-2},$$

onde os coeficientes (2.17) são dados por

$$\begin{aligned} c_0 &= \left(\frac{r_e + 2d \coth^{-1} \alpha}{r_e} \right)^{-2}, \quad c_1 = -\frac{4d(r_e + 2d \coth^{-1} \alpha)^{-3}}{r_e^{-2}(1 - \alpha^2)}, \quad \text{e} \\ c_2 &= -\frac{8d\alpha(r_e + 2d \coth^{-1} \alpha)^{-3}}{r_e^{-2}(1 - \alpha^2)^2} + \frac{24d^2(r_e + 2d \coth^{-1} \alpha)^{-4}}{r_e^{-2}(1 - \alpha^2)^2}, \end{aligned} \quad (2.151)$$

e a aproximação (2.18) tendo a seguinte forma

$$\begin{aligned} \left(\frac{r_e}{r}\right)^2 &\approx c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + (c_1 - \alpha c_2) \coth z + \frac{c_2}{2} \coth^2 z \\ &\approx c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + \frac{c_2}{2} + (c_1 - \alpha c_2) \coth z + \frac{c_2}{2} \operatorname{cosech}^2 z, \end{aligned} \quad (2.152)$$

sendo α um número no intervalo $|\alpha| > 1$, domínio da função inversa da cotangente hiperbólica.

Substituindo a aproximação (2.152) na equação (2.150), temos

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + \left(-W - B \coth z - A \operatorname{cosech}^2 z\right) R = 0, \quad (2.153)$$

sendo a energia renormalizada dada por

$$W = -\frac{8\mu d^2 E}{\hbar^2} + 4d\nu + \frac{4l(l+1)d^2}{r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + \frac{c_2}{2}\right), \quad (2.154)$$

e o potencial efetivo

$$V_{ef} = B \coth z + A \operatorname{cosech}^2 z, \quad (2.155)$$

com

$$A = \beta(\beta - 1) + \frac{4l(l+1)d^2}{r_e^2} c_2 \quad \text{e} \quad B = -4d\nu + \frac{4l(l+1)d^2}{r_e^2} (c_1 - \alpha c_2), \quad (2.156)$$

sendo os coeficientes renormalizados do potencial efetivo (2.155).

Introduzindo a função $F(z)$, por meio da relação $R(z) = e^{az} \sinh^{-b} z F(z)$ na equação (2.153), e a multiplicando por e^{-pz} à esquerda e por $\sinh^a z$ à direita, juntamente com a expressão

$$\begin{aligned} e^{-az} R''(z) \sinh^b z &= F'' + 2aF' - 2b \coth z F' + (a^2 - b)F - 2ab \coth z \\ &\quad + b(b+1) \coth^2 z F, \end{aligned}$$

obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F}{dz^2} + 2(a - b \coth z)F' + (a^2 + b^2 - W)F - \coth z(2ab - B)F + [-A + b(b \\ + 1)] \operatorname{cosech}^2 z F = 0. \end{aligned} \quad (2.157)$$

Para que esta equação se torne uma equação hipergeométrica devemos impor as condições

$$2ab = B \quad \text{e} \quad a^2 + b^2 = W \quad (2.158)$$

Estas condições podem ser satisfeitas mediante a seguinte escolha para a e b

$$a = -\frac{1}{2} \left[(W + B)^{1/2} - (W - B)^{1/2} \right] \quad \text{e} \quad b = \frac{1}{2} \left[(W + B)^{1/2} + (W - B)^{1/2} \right].$$

Desta forma, usando a primeira condição (2.158) na equação (2.157), obtemos

$$\frac{d^2 F}{dz^2} + 2(a - b \coth z) F' + [b(b + 1) - A] \operatorname{cosech}^2 z F = 0 \quad (2.159)$$

Seja agora a mudança de variáveis $u = \frac{1}{2}(1 - \coth z)$. Usando

$$\frac{d^2 F}{dz^2} = \frac{d^2 F}{du^2} \left(\frac{du}{dz} \right)^2 + \frac{dF}{du} \left(\frac{d^2 u}{dz^2} \right) = \frac{1}{4} \operatorname{cosech}^4 z \frac{d^2 F}{du^2} - \operatorname{cosech}^2 z \coth z \frac{dF}{du}$$

na equação (2.159), chegamos a equação

$$u(1 - u) \frac{d^2 F}{du^2} + [-a + b + 1 - 2(b + 1)u] \frac{dF}{du} - [b(b + 1) - A] F = 0. \quad (2.160)$$

A solução desta equação é a função hipergeométrica (2.88) com os parâmetros ζ , η , e κ dados por

$$\zeta = b + \frac{1}{2} - \left(A + \frac{1}{4} \right)^{1/2}, \quad \eta = b + \frac{1}{2} + \left(A + \frac{1}{4} \right)^{1/2}, \quad \text{e} \quad \kappa = -a + b + 1. \quad (2.161)$$

A substituição $u = \frac{1}{2}(1 - \coth z)$, claramente satisfaz as condições de contorno para a função de onda radial, as quais são: $u \rightarrow 1 (z \rightarrow \infty)$ e $u \rightarrow 0 (z \rightarrow 0)$. Como resultado destas condições de contorno, a função de onda $R(z) = e^{az} \sinh^{-b} z F(z)$, a qual pode ser escrita sob a forma

$$R(z) = (-1)^{-a+b} 2^{2b} u^{-a+b} (1 - u)^{a+b}, \quad (2.162)$$

mediante a substituição

$$\begin{aligned} \frac{e^{2az}}{\sinh^{2b} z} &= \left(\frac{2e^{-z}}{e^z - e^{-z}} \right)^{-a+b} \left(\frac{2e^z}{e^z - e^{-z}} \right)^{a+b} \\ &= \left(\frac{2e^{-z}}{e^z - e^{-z}} \right)^{-a+b} \left(2 + \frac{2e^{-z}}{e^z - e^{-z}} \right)^{a+b} = (-1)^{-a+b} 2^{2b} u^{-a+b} (1 - u)^{a+b}. \end{aligned}$$

Para garantir que a série hipergeométrica (2.92) permaneça finita, devemos fazer com que $\zeta = -n$ seja um inteiro negativo. Neste caso a função será um polinômio de Jacobi, e portanto,

$$b = \left(A + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2}. \quad (2.163)$$

Da primeira relação em (2.158) percebemos que a outra constante a possui a forma

$$a = -\frac{B}{(4A+1)^{1/2} - 2n - 1}. \quad (2.164)$$

O espectro de energia é determinado através da segunda relação em (2.158), juntamente com a expressão para a energia renormalizada W (2.154), ou seja,

$$\begin{aligned} -E_n = & \frac{(\hbar B)^2}{8\mu d^2 \left[(4A+1)^{1/2} - 2n - 1 \right]^2} + \frac{\hbar^2}{8\mu d^2} \left[\left(A + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 \\ & - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(1 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + \frac{c_2}{2} \right) - 2[A + \beta(\beta - 1)]. \end{aligned} \quad (2.165)$$

A função de onda radial é dada por

$$R_n(z) = \sum_{n=0}^{\infty} N_n e^{az} \sinh^{-b} z {}_2F_1 \left[-n, (4A+1)^{1/2} - n, a - b - 1, \frac{1}{2}(1 - \coth z) \right], \quad (2.166)$$

a constante N_n será obtida mediante a condição de normalização

$$d|N_n|^2 \int e^{2az} \sinh^{-2b} z \left({}_2F_1 \left[-n, \eta, \kappa, \frac{1}{2}(1 - \coth z) \right] \right)^2 dz = 1, \quad (2.167)$$

substituindo a expressão (2.162) com $u = \frac{1}{2}(1 - \coth z)$, $du = -2u(1-u)dz$, $k = -a + b - 1$, $\sigma = a + b - 1$, $\varpi = \eta - \zeta = 2(A + \frac{1}{4})^{1/2}$, e $\kappa = -a + b + 1$ na integral (2.167) temos que

$$\begin{aligned} 1 &= (-1)^{-a+b+1} 2^{2b-1} |N_n|^2 \int_0^1 u^{-a+b-1} (1-u)^{a+b-1} ({}_2F_1(-n, \varpi - n, \kappa, u))^2 du \\ &= (-1)^{-a+b+1} 2^{2b-1} |N_n|^2 \int_0^1 u^k (1-u)^\sigma ({}_2F_1(-n, \varpi - n, \kappa, u))^2 du \end{aligned}$$

usando o resultado (2.142), obtemos a constante de normalização

$$N_n = \frac{(-1)^{a-b-1}}{2^{b-1/2} d^{1/2}} \left[\frac{(\lambda+1)\Gamma(n+k+1)\Gamma(n+k+\lambda+2)}{\Gamma(k+1)^2\Gamma(n+\lambda+2)} \right]^{1/2}. \quad (2.168)$$

No capítulo 4 iremos aplicar o MF para resolver a equação de Schrödinger reduzida (2.19) com as funções potencial tratadas neste capítulo, ou seja, iremos reafirmar os resultados obtidos e determinar o tipo de fatorização ideal para a equação (2.19) com cada função energia potencial estudada.

Capítulo 3

O Método de Fatorização

Neste capítulo apresentamos de forma detalhada a formulação matemática do Método de Fatorização desenvolvido por Infeld e Hull. A abordagem usada seguirá exatamente as ideias expostas na Ref. [54]. Em um primeiro momento será realizada uma introdução a respeito do MF, enfatizando a importância do mesmo para a resolução de determinados tipos de equações diferenciais que permeiam a física e a matemática. Em seguida, uma estrutura matemática baseada em termos de operadores de levantamento e abaixamento é apresentada, e de posse de alguns teoremas obtemos soluções ortonormalizadas.

Aplicações físicas serão consideradas no capítulo 4 resolvendo a equação de Schrödinger reduzida (2.19), com as funções potencial estudadas no capítulo 2.

3.1 Teoria

O Método de Fatorização idealiza uma técnica para a solução de problemas de autovalor que frequentemente surgem, seja no cenário físico, como por exemplo na mecânica quântica e na teoria eletromagnética, seja no cenário matemático, na resolução de equações diferenciais de segunda ordem denominadas hipergeométricas ou polinômios ortogonais.

Portanto, de forma natural, surgem equações diferenciais do tipo

$$\frac{d^2y}{dx^2} + r(x, m)y + \lambda y = 0, \quad (3.1)$$

sendo $r(x, m)$ uma função que caracteriza o problema em particular, m um número in-

teiro não negativo, o qual surge durante o processo de separação de variáveis, sendo seu valor restrito a determinadas condições de contorno e λ o autovalor procurado mediante as mesmas condições de contorno. Na maior parte dos casos, λ terá autovalores discretos $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_l, \dots$

Assim, um problema típico de autovalor pode ser representado por um conjunto de pontos num plano (l, m) . Para toda reta conectando o conjunto de pontos e paralelo ao eixo m irá existir um único λ_l . Para todo ponto no plano (l, m) irá existir uma função $y_l^m(x)$ ortonormalizada satisfazendo determinadas condições de contorno.

O método clássico para encontrar tais soluções $y_l^m(x)$ consiste em primeiro encontrar uma solução geral da equação diferencial, e então, determinar os valores especiais de λ , os quais permitam que estas soluções satisfaçam as condições de contorno: portanto a função $y_l^m(x)$ pertencendo a cada ponto sobre a rede será obtida. Esta função pode ser normalizada e finalmente usada, por exemplo, para calcular probabilidades de transição e valores esperados.

O MF amplia e unifica a forma tradicional para a resolução de equações diferenciais do tipo (3.1), levando diretamente aos autovalores e ao processo de obtenção de autofunções normalizadas. O próprio processo poderá, então, ser usado para calcular as probabilidades de transição.

O MF trata a equação diferencial de primeira ordem original diretamente ou substitui a equação diferencial de segunda ordem, por um par de equações diferenciais de primeira ordem sob a forma

$$\left(k(x, m+1) - \frac{d}{dx}\right) Y_l^m = (\lambda - L(m+1))^{1/2} Y_l^{m+1} \quad (3.2)$$

e

$$\left(k(x, m) + \frac{d}{dx}\right) Y_l^m = (\lambda - L(m))^{1/2} Y_l^{m-1}. \quad (3.3)$$

Para sistematizar nosso procedimento, iremos considerar equações diferenciais que possam ser expressas na forma padrão (3.1). Tal equação pode ser fatorada se puder ser substituída por cada uma das seguintes equações;

$$+H^{m+1} - H^{m+1}y(\lambda, m) = (\lambda - L(m+1))y(\lambda, m) \quad (3.4)$$

e

$${}^{-}H^m + H^m y(\lambda, m) = (\lambda - L(m)) y(\lambda, m), \quad (3.5)$$

onde

$$\pm H^m = k(x, m) \pm \frac{d}{dx}. \quad (3.6)$$

Conforme pode ser notado, a equação (3.4), pode ser obtida a partir da equação (3.5), permutando a ordem dos operadores H e mudando m para $m + 1$, exceto na função $y(\lambda, m)$.

A ideia fundamental do MF é estabelecida por meio de quatro teoremas:

Teorema I

Se $y(\lambda, m)$ é uma solução de uma equação diferencial do tipo (3.1), então

$$y(\lambda, m + 1) = {}^{-}H^{m+1} y(\lambda, m) \quad (3.7)$$

e

$$y(\lambda, m - 1) = {}^{+}H^m y(\lambda, m) \quad (3.8)$$

são também soluções correspondendo ao mesmo λ mas tendo diferentes valores de m .

Portanto, se temos uma solução é possível usar os operadores H para levantar ou abaixar para encontrar outras soluções. Continuando o processo, podemos obter uma cadeia de soluções pertencendo a um λ fixo. Para provar o teorema acima, multiplicamos (3.4) por ${}^{-}H^{m+1}$ e (3.5) por ${}^{+}H^m$. O resultado tem a forma

$${}^{-}H^{m+1} + H^{m+1} \left({}^{-}H^{m+1} y(\lambda, m) \right) = (\lambda - L(m + 1)) {}^{-}H^{m+1} y(\lambda, m) \quad (3.9)$$

e

$${}^{+}H^m - H^m + H^m y(\lambda, m) = (\lambda - L(m)) {}^{+}H^m y(\lambda, m). \quad (3.10)$$

Comparando (3.9) com (3.5), podemos perceber que $y(\lambda, m + 1)$ é uma solução da equação diferencial com m substituído por $m + 1$. Da mesma forma, $y(\lambda, m - 1)$ é uma solução com m substituído por $m - 1$. É possível interpretar as expressões (3.4) e (3.5) da seguinte forma: partindo um passo acima na cadeia e depois um passo abaixo, chegaremos na solução da

qual partimos, mas multiplicado por $\lambda - L(m + 1)$ ou $\lambda - L(m)$. Naturalmente, através das expressões (3.9) e (3.10) podemos obter uma solução, que se anula identicamente; esta situação importante, que não viola o *Teorema I*, irá ser considerada no *Teorema IV*.

Em um sentido restrito as expressões (3.7) e (3.8) são equivalentes à equação diferencial original (3.1) ou às equações (3.4) e (3.5). A restrição sendo favorável no sentido que, com a interpretação adequada para (3.7) e (3.8), ela nos leva a considerar apenas aquelas soluções de (3.1) que são quadraticamente integráveis e, devido a interpretação probabilística da função de onda na mecânica quântica, iremos nos concentrar apenas naquelas soluções as quais satisfaçam esta condição.

O próximo teorema garante que os operadores de levantamento e abaixamento, H , sejam mutuamente autoadjuntos.

Teorema II

$$\int_a^b \varphi(-H^m f) dx = \int_a^b ({}^+H^m \varphi) f dx$$

Se φf se anula nos extremos do intervalo e o integrando for contínuo no intervalo.

Para uma descrição mais aprofundada sobre operadores autoadjuntos e a sua relação com o MF, sugerimos consultar [60, 61, 62].

Estamos interessado em equações diferenciais cujos coeficientes possuam singularidades, apenas, nos extremos do intervalo da variável independente. A integrabilidade quadrática de uma solução irá depender inteiramente do comportamento da solução próximo dos extremos e, então, a condição de que o módulo quadrado da solução seja integrável será, essencialmente, uma condição de contorno adicionado ao problema. Assim, estudando o comportamento da solução e os operadores H próximo e nos pontos extremos do intervalo, poderemos estabelecer o próximo teorema para cada tipo de fatorização encontrada

Teorema III

Se $y(\lambda, m)$ é quadraticamente integrável sobre todo o intervalo de x e $L(m)$ é uma função a qual incrementa de acordo com m ($0 < m$), então o operador H em (3.5) irá produzir uma função que também será quadraticamente integrável e se anula nos extremos do intervalo. Se $L(m)$ for uma função que decrementa de acordo com m ($0 < m$), então o operador H em (3.6) irá produzir uma

função que também será quadraticamente integrável e se anula nos extremos do intervalo.

A seguir, por meio de um teorema, iremos estabelecer as condições para que o autovalor λ exista, antes, porém, iremos dividir nosso problema em duas classes:

Classe I será caracterizada pelo fato que $L(m)$ é uma função incrementando com os valores de m . Devemos perceber que esta situação usualmente nos leva à uma cadeia finita de soluções pertencendo a $m = 0, 1, 2, \dots, l$; para um conjunto discreto de valores de λ dentre os λ_l ($l = 0, 1, 2, 3, \dots$), à disposição.

Classe II de soluções irá surgir quando $L(m)$ é uma função decrementando com os valores de m . Iremos, então, obter uma cadeia infinita de soluções pertencendo a $m = l, l+1, l+2, \dots$ para cada valor de λ dentre os λ_l ($l = 0, 1, 2, 3, \dots$), à disposição. Portanto,

Teorema IV

Quando $L(m)$ é uma função incrementando com o número inteiro m para $0 < m \leq M$, e $\lambda \leq$ o maior de $L(M)$, $L(M+1)$, então, uma condição necessária para soluções quadraticamente integráveis será que

$$\lambda = \lambda_l = L(l+1)$$

sendo l um inteiro e $m = 0, 1, 2, \dots, l$. Para a Classe I e,

Teorema IV

Quando $L(m)$ é uma função decrementando com o número inteiro m para $0 < m \leq M$, e $\lambda \leq L(0)$, então uma condição necessária para soluções quadraticamente integráveis será que

$$\lambda = \lambda_l = L(l)$$

sendo l um inteiro e $m = l, l+1, l+2, \dots$. Para a Classe II.

Provaremos o *Teorema IV* para a *Classe I*. Devido o *Teorema III* $y(\lambda, m+1) = -H^{m+1}y(\lambda, m)$ será uma boa solução, ou zero, se a mesma se anular nos extremos do intervalo. Portanto, podemos escrever

$$\begin{aligned} \int_b^a y^2(\lambda, m+1)dx &= \int_b^a -H^{m+1}y(\lambda, m) - H^{m+1}y(\lambda, m)dx \\ &= \int_b^a y(\lambda, m)^+ H^{m+1} - H^{m+1}y(\lambda, m)dx \\ &= (\lambda - L(m+1)) \int_b^a y^2(\lambda, m)dx. \end{aligned}$$

Da mesma forma, temos que

$$\int_b^a y^2(\lambda, m+2)dx = (\lambda - L(m+2))(\lambda - L(m+1)) \int_b^a y^2(\lambda, m)dx$$

este argumento pode ser continuado, desde que $L(m)$ é uma função incrementando com m , iremos chegar em algum valor de m ou $l+1$ com a contradição

$$\int_b^a y^2(\lambda, l+1)dx < 0,$$

a menos que $y(\lambda, l+1) \equiv 0$, ou seja, ${}^-H^{l+1}y(\lambda, l) \equiv 0$. Neste caso, devido a equação (3.2) obtemos $\lambda = \lambda_l = L(l+1)$, esta condição fixa λ em termos de l , um dos possíveis valores de m , os outros valores de m sendo menores que l . Estes serão os autovalores exigidos para λ . Para a *Classe II* a prova é semelhante e os resultados são ${}^+H^l y(\lambda, l) \equiv 0$ e $\lambda = \lambda_l = L(l)$.

Por fim, estabelecemos um teorema que diz respeito à normalização das autofunções.

Quando o *Teorema III* é satisfeito podemos arranjar os operadores H para preservar não apenas a integrabilidade quadrática das autofunções, mas também sua normalização. Escrevemos, ao invés de (3.4) e (3.5) as seguintes expressões

$${}^+\mathcal{H}_l^{m+1} - \mathcal{H}_l^{m+1} Y_l^m = Y_l^m \quad \text{e} \quad {}^-\mathcal{H}_l^m + \mathcal{H}_l^m Y_l^m = Y_l^m, \quad (3.11)$$

ao invés de (3.7) e (3.8), teremos

$$Y_l^{m+1} = {}^-\mathcal{H}_l^{m+1} Y_l^m \quad \text{e} \quad Y_l^{m-1} = {}^+\mathcal{H}_l^m Y_l^m, \quad (3.12)$$

sendo

$$\pm \mathcal{H}_l^m = \begin{cases} \{L(l+1) - L(m)\}^{-1/2 \pm H^m} & \text{para a Classe I} \\ \{L(l) - L(m)\}^{-1/2 \pm H^m} & \text{para a Classe II.} \end{cases} \quad (3.13)$$

a notação acima indica que as soluções dependem apenas de l ao invés de λ . Portanto, podemos enunciar o quinto e último teorema.

Teorema V

Os operadores \mathcal{H} definidos anteriormente preservam a normalização das autofunções, quando estas são normalizáveis.

De posse destes teoremas estamos prontos para escrever os autovalores e as autofunções normalizadas de uma equação diferencial, quando esta pode ser fatorada. Ou seja, teremos funções $k(x, m)$ e $L(m)$ correspondendo a um dado $r(x, m)$. Vamos considerar em detalhe o problema da *Classe I*. Neste caso, $L(m)$ é uma função incrementando de m e estamos interessado em casos quando $\lambda \leq \max\{L(m), L(m+1)\}$.

Os autovalores, a partir do *Teorema IV*, são $\lambda_l = L(l+1)$, com $m = 0, 1, 2, \dots$. Além disso, temos que

$$\left(k(x, l+1) - \frac{d}{dx}\right) Y_l^l = 0. \quad (3.14)$$

De acordo com o *Teorema IV*, esta é uma condição necessária para a existência de autofunções normalizáveis. Portanto, integrando a expressão (3.14) iremos obter

$$\begin{aligned} Y_l^l &= \exp\left(\int_b^a k(x, l+1)dx + c\right) = e^c \exp\left(\int k(x, l+1)dx\right) \\ &= C \exp\left(\int k(x, l+1)dx\right) \end{aligned} \quad (3.15)$$

sendo $C = e^c$ uma constante de normalização determinada através da condição de ortonormalidade

$$\int_a^b (Y_l^l)^2 dx = 1. \quad (3.16)$$

As outras soluções normalizadas são encontradas por

$$Y_l^{m-1} = {}^+ \mathcal{H}_l^m Y_l^m = (L(l+1) - L(m))^{-1/2} \left(k(x, m) + \frac{d}{dx}\right) Y_l^m. \quad (3.17)$$

Apenas as soluções para o qual $l \geq m$ satisfazem as condições de contorno, pois, apenas desta forma, teremos $L(l+1) - L(m+1) \geq 0$. Para problemas da *Classe II* temos que $l \leq m$. Caso as soluções sejam funções analíticas, teremos $L(l) - L(m) \geq 0$. Sendo $L(m)$ uma função decrementando por valores de m , temos

$$\left(k(x, l+1) + \frac{d}{dx}\right) Y_l^l = 0.$$

Integrando a expressão acima temos que

$$Y_l^l = C \exp\left(-\int k(x, l)dx\right)$$

sendo C uma constante de integração, determinada através da condição de ortonormalidade (3.16). As outras soluções normalizadas são dadas por

$$Y_l^{m+1} = -\mathcal{H}_l^{m+1}Y_l^m = (L(l) - L(m+1))^{-1/2} \left(k(x, m+1) - \frac{d}{dx} \right) Y_l^m. \quad (3.18)$$

Note que permutando os papéis de l e m durante a fatorização, o problema irá mudar *Classe I* para a *Classe II* e vice-versa.

A distinção entre *Classe I* e *Classe II* será não uma propriedade das autofunções mas inerente ao próprio (MF). Para alguns problemas será útil conhecer ambas as fatorizações, enquanto que, para a maioria dos problemas apenas uma fatorização será necessária, ou seja, aquela que irá fornecer a normalização fisicamente correta.

Por fim, iremos fazer uma observação relacionada ao mecanismo da fatorização conhecida como fatorização artificial. Isto será necessário quando um dado $R(x, m)$ não possui a forma de um dos seis tipos básicos de fatorização definidos por Infeld e Hull, a diferença sendo na forma como m aparece em $R(x, m)$.

Existem três possibilidades as quais podem aparecer juntas mas que iremos tratar separadamente. Por escolha iremos tratar apenas problemas da *Classe I*.

Para a primeira possibilidade considere a seguinte forma para a função $R(x, m) = r(x, m) + f(m)$, onde $r(x, m)$ é um dos seis tipos de fatorização possíveis e $f(m)$ é uma função arbitrária de m . Para tratar tal exemplo definamos $\lambda' = \lambda + f(m)$. Assim, teremos que resolver a seguinte equação

$$\frac{d^2y}{dx^2} + r(x, m)y + \lambda'y = 0.$$

Para soluções normalizáveis, $\lambda' = L(l+1)$, e podemos descer na cadeia de soluções gerada por Y_l^m , as quais pertence ao autovalor $\lambda = L(lm+1) - f(m)$.

A segunda possibilidade é que podemos introduzir uma nova função $r(x, m, \nu)$, a qual é um tipo padrão se considerarmos ν como um parâmetro, mas com a seguinte forma $r(x, m, \nu) = R(x, m)$. Então, teremos que resolver a equação

$$\frac{d^2y}{dx^2} + r(x, m, \nu)y + \lambda y = 0$$

e obter uma solução $Y_l^m(\nu)$ dependendo do parâmetro ν , bem como m e $\lambda = L(l+1)$. As soluções exigidas terão a forma $Y_l^m(m)$. Parte da dependência desta solução com m

tem sido proporcionada através dos operadores de levantamento e abaixamento, enquanto o restante desta dependência tem sido introduzida no final das operações de levantamento, colocando $\nu = m$.

A terceira possibilidade será $R(x, m) = R(x) = r(x, m)$ com $m = p$, tal que a solução exigida seja aquela da equação na sua forma padrão (3.1), com o valor especial p de m .

Ainda que uma fatorização direta não seja possível, existe ainda alguma forma de fatorização artificial cuja descoberta segue o roteiro: a lista de tipos de fatorização poderá ser utilizada de acordo com a dependência de $r(x, m)$ com x seja a mesma como aquela dada por $R(x, m)$. A dependência com m poderá, então, usualmente ser ajustada por meio dos métodos anteriores, tal que a fatorização seja atingida e as soluções encontradas.

3.2 Técnica de Fatorização

De posse dos teoremas enunciados na seção anterior, podemos nos dedicar ao problema de encontrar a fatorização de uma equação diferencial escrita sob a forma padrão (3.1), isto é, as funções $k(x, m)$ e $L(m)$ correspondendo a uma certa função $r(x, m)$. Iremos perceber que existem seis tipos de fatorização, cada uma correspondendo a uma forma especial da função $r(x, m)$.

Se, na expressão fatorada (3.4), substituímos as expressões para os operadores H em (3.6) e compararmos com a expressão (3.1), temos que

$$\begin{aligned} {}^+H^{m+1} - H^{m+1}y(\lambda, m) &= \left[k(x, m+1) + \frac{d}{dx} \right] \left[k(x, m+1) - \frac{d}{dx} \right] y(\lambda, m) \\ &= k^2(x, m+1)y(\lambda, m) + y(\lambda, m) \frac{dk(x, m+1)}{dx} - \frac{d^2y(\lambda, m)}{dx^2}. \end{aligned}$$

Esta expressão deve ser igual a $[\lambda - L(m+1)]y(\lambda, m)$, logo

$$k^2(x, m+1)y(\lambda, m) + y(\lambda, m) \frac{dk(x, m+1)}{dx} + L(m+1)y(\lambda, m) = \frac{d^2y(\lambda, m)}{dx^2} + \lambda y(\lambda, m),$$

ou seja,

$$k^2(x, m+1) + \frac{dk(x, m+1)}{dx} + L(m+1) = -r(x, m). \quad (3.19)$$

Procedendo da mesma forma na expressão fatorada (3.5) e usando (3.6), obtemos

$$k^2(x, m) - \frac{dk(x, m)}{dx} + L(m) = -r(x, m). \quad (3.20)$$

Subtraindo as expressões (3.19) e (3.20), temos que

$$k^2(x, m+1) - k^2(x, m) + \frac{dk(x, m+1)}{dx} - \frac{dk(x, m)}{dx} = L(m) - L(m+1). \quad (3.21)$$

Esta será obviamente uma condição necessária a ser satisfeita por $k(x, m)$ e $L(m)$. Sendo também uma condição suficiente, desde que quaisquer funções $k(x, m)$ e $L(m)$, que satisfaçam a equação (3.21), nos levará, sem nenhuma ambigüidade, através das expressões (3.19) e (3.20), a uma função $r(x, m)$ e, então, a uma equação cuja fatorização seja conhecida.

Iremos, agora, encontrar todas as funções $k(x, m)$ e $L(m)$ que satisfazem (3.21).

Para tal, iremos propor inicialmente uma solução do tipo

$$k(x, m) = k_0 + mk_1 \quad (3.22)$$

com k_0 e k_1 funções apenas de x . Substituindo esta expressão em (3.21), obtemos

$$\begin{aligned} L(m) - L(m+1) &= [k_0 + (m+1)k_1]^2 - (k_0 + mk_1)^2 + \frac{dk_0}{dx} + (m+1)\frac{dk_1}{dx} + \frac{dk_0}{dx} \\ &\quad + m\frac{dk_1}{dx}. \end{aligned}$$

Agrupando os termos

$$\begin{aligned} L(m) - L(m+1) &= \left[(m+1)^2 \left(k_1^2 + \frac{dk_1}{dx} \right) + 2(m+1) \left(k_0k_1 + \frac{dk_0}{dx} \right) \right] - \left[m^2 \left(k_1^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + k_1' \right) + 2m \left(k_0k_1 + \frac{dk_0}{dx} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.23)$$

a solução mais geral para esta equação será

$$L(m) = -m^2 \left(k_1^2 + \frac{dk_1}{dx} \right) - 2m \left(k_0k_1 + \frac{dk_0}{dx} \right) + \tilde{\mathbf{I}}, \quad (3.24)$$

onde $\tilde{\mathbf{I}}$ é uma função de x e m . Estamos interessados apenas em conhecer $L(m)$ em (3.24) para valores inteiros de m . Então podemos ter $\tilde{\mathbf{I}} = f(x)$, sendo $f(x)$ uma função arbitrária de x . Mas como a expressão para $L(m)$ deve existir para todos os valores de m , a função $L(m)$ deverá ser uma função apenas de m , e os coeficientes de potências de m à direita devem separadamente ser igual a constantes.

Podemos, então, tomar $f(x) = 0$ sem perda de generalidade. Desta forma temos que

$$\left(k_1^2 + \frac{dk_1}{dx}\right) = -a^2 \quad (3.25)$$

e

$$\left(k_0 k_1 + \frac{dk_0}{dx}\right) = \begin{cases} -ca & \text{se } a \neq 0 \\ b & \text{se } a = 0. \end{cases}, \quad (3.26)$$

sendo a , b e c constantes. Assim, a partir de (3.24), obtemos

$$L(m) = \begin{cases} am^2 + 2ca^2m & \text{se } a \neq 0 \\ -2bm & \text{se } a = 0 \end{cases} \quad (3.27)$$

A solução de (3.25) e (3.26) pode ser dada sob diversas formas, mais precisamente teremos seis tipos diferentes de fatorização, sendo que, para cada tipo de fatorização encontrada, devemos determinar expressões explícitas para $r(x, m)$ e $L(m)$.

Assim, a primeira forma de fatorização, a qual chamaremos de tipo (A), será obtida resolvendo a equação diferencial (3.25), mais precisamente a seguinte integral

$$\frac{1}{a^2} \int \frac{dk_1}{\left(1 + \frac{k_1^2}{a^2}\right)} = - \int dx. \quad (3.28)$$

Para resolver esta integral devemos realizar a seguinte mudança de variáveis $k_1 = a \cot \theta$ e $dk_1 = -a \operatorname{csc}^2 \theta d\theta$, que nos conduz a seguinte integral

$$-\frac{1}{a^2} \int \frac{a \operatorname{csc}^2 \theta d\theta}{(1 + \cot^2 \theta)} = - \int dx$$

tendo como solução

$$k_1 = a \cot[a(x + c)]. \quad (3.29)$$

Se usarmos uma outra mudança de variáveis na integral (3.28) sob a forma $k_1 = a \tan \theta$ e $dk_1 = a \sec^2 \theta d\theta$, obtemos a seguinte solução $k_1 = a \tan[a(-x + c)]$.

A função k_0 será encontrada mediante a solução da equação diferencial (3.26) para o caso $a \neq 0$, isto é,

$$k_0 = ca \cot[a(x + p)] + \frac{d}{\operatorname{sen}[a(x + p)]}. \quad (3.30)$$

Portanto, usando as expressões (3.29) e (3.30), obtemos a função $k(x, m)$, expressão (3.22), como sendo dada por

$$k(x, m) = ca \cot[a(x + p)] + \frac{d}{\operatorname{sen}[a(x + p)]} + am \cot[a(x + c)]. \quad (3.31)$$

Para a fatorização do tipo (A), podemos determinar a função $r(x, m)$ através da equação (3.20), usando as funções (3.22) e (3.27). Logo

$$\begin{aligned} -r(x, m) &= \{ac \cot[a(x + p)] + d \operatorname{csc}[a(x + p)]\}^2 + 2m \{ac \cot[a(x + p)] + d \operatorname{csc}[a(x + p)]\} \\ &\quad + a \cot[a(x + p)] + m^2 a^2 \cot^2[a(x + p)] + ca^2 \operatorname{csc}^2[a(x + p)] \\ &\quad + ad \operatorname{csc}[a(x + p)] \cot[a(x + p)] + ma^2 \operatorname{csc}^2[a(x + p)] + a^2 m^2 + 2ca^2 m \\ &= (a^2 m^2 + 2cma^2) \operatorname{csc}^2[a(x + p)] + (ac)^2 \{ \operatorname{csc}^2[a(x + p)] - 1 \} + (d^2 + ca^2 \\ &\quad + ma^2) \operatorname{csc}^2[a(x + p)] + \frac{\cos[a(x + p)]}{\operatorname{sen}^2[a(x + p)]} (2acd + 2adm + ad) \\ &= \operatorname{csc}^2[a(x + p)](a^2 m^2 + 2cma^2 + d^2 + ca^2 + ma^2 + (ac)^2) - (ac)^2 + (ad \\ &\quad + 2adm + 2acd) \frac{\cos[a(x + p)]}{\operatorname{sen}^2[a(x + p)]} \\ &= \frac{a^2 m^2 + 2cma^2 + d^2 + ca^2 + ma^2 + (ac)^2}{\operatorname{sen}^2[a(x + p)]} + \frac{\cos[a(x + p)]}{\operatorname{sen}^2[a(x + p)]} (2acd + ad \\ &\quad + 2adm) - (ac)^2 \\ &= \frac{a^2(m + c)(m + c + 1) + d^2 + 2ad(m + c + 1/2)\cos[a(x + p)]}{\operatorname{sen}^2[a(x + p)]} - (ac)^2. \end{aligned}$$

Finalmente, temos que a função $r(x, m)$ terá a forma

$$r(x, m) = -\frac{a^2(m + c)(m + c + 1) + d^2 + 2ad(m + c + 1/2)\cos[a(x + p)]}{\operatorname{sen}^2[a(x + p)]} \quad (3.32)$$

e $L(m)$ será dada por

$$L(m) = a^2(m + c)^2, \quad (3.33)$$

sendo a , c , d e p constantes. Por conveniência temos escolhido $(ac)^2$ ao invés de 0 para $\mathbf{1} = f(x)$ em (3.24), por isso o termo $(ac)^2$ não aparece em (3.32).

A segunda forma de fatorização, a qual chamaremos de tipo (B), será um tanto quanto óbvia e a demonstração torna-se evidente. Claramente podemos admitir $k_1 = ia$ como uma solução para (3.25). Usando este valor para k_1 em (3.26), iremos obter a expressão

para k_0 . Entretanto, a sua solução será uma soma de duas soluções, a primeira será dada calculando a integral

$$\frac{dk_0}{dx} + iak_0 = 0.$$

Conforme (3.26) para o caso $a = 0$ e fazendo $b = 0$, a sua solução será $k_0 = de^{-iax}$. A outra solução será dada através da equação diferencial

$$\frac{dk_0}{dx} + iak_0 = -ca.$$

De acordo com (3.26), para o caso $a \neq 0$, o qual, obviamente pode ser $k_0 = cia$. Assim, a solução da expressão (3.26) será a soma das duas soluções $k_0 = cia + de^{-iax}$ e $k_1 = ia$, assim (3.22) é dada por

$$k(x, m) = cia + de^{-iax} + ima. \quad (3.34)$$

Usando a expressão acima em (3.20) podemos determinar a função $r(x, m)$, logo

$$\begin{aligned} -r(x, m) &= \left(cia + de^{-iax} + mia \right)^2 + iae^{-iax} + a^2m^2 + 2ca^2m \\ &= d^2e^{2ax} - 2ad \left(m + c + \frac{1}{2} \right) e^{ax} - (ac)^2 \\ &= d^2e^{2ax} - 2ad \left(m + c + \frac{1}{2} \right) e^{ax} \end{aligned} \quad (3.35)$$

e a função $L(m)$ em (3.27) será

$$L(m) = -a^2(m + c)^2, \quad (3.36)$$

sendo que substituímos $-ia$ por a e somamos $-(ac)^2$ para $L(m)$.

A terceira forma de fatorização, a qual chamaremos de tipo (C), será expressa com a condição $a = 0$ na equação (3.25). Então, resolvendo a integral

$$k_1^2 + \frac{dk_1}{dx} = 0,$$

obtemos a função

$$k_1 = \frac{1}{x - c} = \frac{1}{x}$$

sendo $c = 0$. Usando este valor para k_1 em (3.26), com a condição $a = 0$, temos que

$$\frac{dk_0}{dx} = b - \frac{k_0}{x}.$$

Para resolver a equação diferencial (do tipo homogênea) acima, precisamos realizar a seguinte mudança de variáveis $k_0 = kt$, então, $dk_0 = tdx + dt$. Mediante esta substituição, obtemos a equação diferencial

$$\int \frac{dt}{b-2t} = \int \frac{dx}{x},$$

que possui como solução

$$k_0 = \frac{b}{2}x + \frac{d}{x}$$

e a expressão para $k(x, m)$ em (3.22) é

$$k(x, m) = \frac{b}{2}x + \frac{d}{x} + \frac{m}{x}.$$

Usando (3.20) juntamente com a função acima temos

$$\begin{aligned} -r(x, m) &= \left(\frac{b}{2}x + \frac{d}{x}\right)^2 + \frac{2m}{x} \left(\frac{b}{2}x + \frac{d}{x}\right) + \frac{m^2}{x^2} - \frac{b}{2} + \frac{d+m}{x^2} - 2bm \\ &= \frac{(bx)^2}{4} + \frac{m^2}{x^2} + \frac{md}{x^2} + \frac{m}{x^2} + \frac{d^2}{x^2} + \frac{md}{x^2} + \frac{d}{x^2} + b(d-m) - \frac{b}{2} \\ &= \frac{(bx)^2}{4} + \frac{(m+d)(m+d+1)}{x^2} + b(d-m) - \frac{b}{2} \\ &= -\frac{(bx)^2}{4} - \frac{(m+c)(m+c+1)}{x^2} + b(m-c) \end{aligned} \quad (3.37)$$

e

$$L(m) = -2bm + \frac{b}{2}, \quad (3.38)$$

sendo que substituímos c por d em (3.37) e somamos $b/2$ para $L(m)$.

A quarta forma de fatorização, do tipo (D), é dada através da solução trivial para (3.25), ou seja, $k_1 = 0$. Assim, usando essa expressão em (3.26) obtemos $k_0 = bx + d$, e a expressão (3.22) será

$$k(x, m) = bx + d. \quad (3.39)$$

As funções $r(x, m)$ e $L(m)$ são prontamente dadas por

$$r(x, m) = -(bx + d)^2 + b(2m + 1) \text{ e } L(m) = -2bm. \quad (3.40)$$

Com isso temos a nossa disposição os quatro principais tipos de fatorização

$$(A) \begin{cases} r(x, m) = -\frac{a^2(m+c)(m+c+1)+d^2+2ad(m+c+1/2)\cos[a(x+p)]}{\text{sen}^2[a(x+p)]} \\ k(x, m) = ca \cot[a(x+p)] + \frac{d}{\text{sen}[a(x+p)]} + am \cot[a(x+p)] \\ L(m) = a^2(m+c)^2 \end{cases} \quad (3.41)$$

$$(B) \begin{cases} r(x, m) = -d^2 e^{2ax} + 2ad \left(m + c + \frac{1}{2}\right) e^{ax} \\ k(x, m) = de^{-iax} - m - c \\ L(m) = -a^2(m+c)^2 \end{cases} \quad (3.42)$$

$$(C) \begin{cases} r(x, m) = -\frac{(bx)^2}{4} - \frac{(m+c)(m+c+1)}{x^2} + b(m-c) \\ k(x, m) = \frac{b}{2}x + \frac{d}{x} + \frac{m}{x} \\ L(m) = -2bm + \frac{b}{2} \end{cases} \quad (3.43)$$

$$(D) \begin{cases} r(x, m) = -(bx+d)^2 + b(2m+1) \\ k(x, m) = bx+d \\ L(m) = -2bm \end{cases} \quad (3.44)$$

sendo as soluções (A) e (B) para $a \neq 0$ e as soluções (C) e (D) para $a = 0$. Estes resultados não são independentes: (B), (C) e (D) podem ser considerado formas limite de (A). Contudo, as formas individuais são cada uma importante o bastante para serem exibidas separadamente. Estas expressões determinam $k(x, m)$ através da expressão (3.22) e um $L(m)$ através da equação (3.27), o qual, por sua vez determina uma expressão para $r(x, m)$ por meio de (3.20).

Podemos demonstrar que potências cada vez mais altas de m não nos levará a nada de novo. Entretanto, para alguns casos, podemos encontrar uma generalização muito útil em uma outra direção. Seja

$$k(x, m) = \frac{k_{-1}}{m} + k_0 + mk_1. \quad (3.45)$$

Ao invés da relação (3.21), teríamos

$$\begin{aligned} L(m) - L(m+1) &= \left[-(m+1)^2 \left(k_1^2 + \frac{dk_1}{dx} \right) - 2(m+1) \left(k_0 k_1 + \frac{dk_0}{dx} \right) \right] - 2k_0 \frac{k_{-1}}{m} \\ &\quad - \frac{k_{-1}^2}{m^2} - \left[-(m+2)^2 \left(k_1^2 + \frac{dk_1}{dx} \right) - 2(m+2) \left(k_0 k_1 + \frac{dk_0}{dx} \right) \right] \\ &\quad - 2k_0 \frac{k_{-1}}{m+1} - \frac{k_{-1}^2}{(m+1)^2} - m^{-1} \frac{dk_{-1}}{dx} + (m+1)^{-1} \frac{dk_{-1}}{dx}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Multiplicando a expressão acima por $m(m+1)^2$, encontramos que o lado esquerdo se torna um polinômio em m mais outro termo da forma: k_{-1}^2/m . Portanto, a equação, (3.46) poderá ser satisfeita apenas se

$$k_{-1} = q \text{ e } \frac{dk_{-1}}{dx} = 0.$$

Não será necessário considerar o caso $q = 0$, já que isto nos leva a casos outrora discutido.

Nos resta ainda considerar $k_0 = 0$. Neste caso temos a seguinte condição

$$k_1^2 + \frac{dk_1}{dx} = -a^2 \quad (3.47)$$

a qual nos fornece os últimos dois tipos de fatorização.

Para o tipo de fatorização (E) temos que

$$k_1 = a \cot[a(x+p)], \quad k_0 = 0, \quad \text{e} \quad k_{-1} = q.$$

Então, a equação (3.45) nos fornece

$$k(x, m) = \frac{q}{m} + am \cot[a(x+p)].$$

Substituindo esta expressão para $k(x, m)$ em (3.20), obtemos

$$\begin{aligned} -r(x, m) &= \left\{ \frac{q}{m} + am \cot[a(x+p)] \right\}^2 + a^2 m \csc[a(x+p)] + (am)^2 - \frac{q^2}{m^2} \\ &= 2aq \cot[a(x+p)] + a^2 m(m+1) \csc^2[a(x+p)], \end{aligned}$$

e a função $L(m)$ será dada por

$$L(m) = a^2 m^2 - \frac{q^2}{m^2}.$$

A sexta e última forma de fatorização, do tipo (F), será obtida fazendo $a = 0$ em (3.47), a qual nos fornece a seguinte solução para a equação diferencial

$$k_1 = \frac{1}{x}, \quad k_0 = 0, \quad k_{-1} = q$$

e a expressão (3.45) possui a forma

$$k(x, m) = \frac{q}{m} + \frac{m}{x}.$$

Usando esta expressão para $k(x, m)$ em (3.20), obtemos

$$\begin{aligned} -r(x, m) &= \left(\frac{q}{m} + \frac{m}{x} \right)^2 + \frac{m}{x^2} - \frac{q^2}{m^2} \\ &= 2\frac{q}{x} + \frac{m(m+1)}{x^2}, \end{aligned}$$

com

$$L(m) = -\frac{q^2}{m^2}.$$

Finalmente, obtemos os dois últimos tipos de fatorização

$$(E) \quad \begin{cases} r(x, m) = -2aq \cot[a(x+p)] - a^2m(m+1) \csc^2[a(x+p)] \\ k(x, m) = \frac{q}{m} + am \cot[a(x+p)] \\ L(m) = a^2m^2 - \frac{q^2}{m^2} \end{cases} \quad (3.48)$$

$$(F) \quad \begin{cases} r(x, m) = -2\frac{q}{x} - \frac{m(m+1)}{x^2} \\ L(m) = -\frac{q^2}{m^2} \\ k(x, m) = \frac{q}{m} + \frac{m}{x} \end{cases} \quad (3.49)$$

Deve ser notado que, em cada tipo, as funções $k(x, m)$ e $r(x, m)$, possuem, de fato, as propriedades necessárias para provar o *Teorema III*. No próximo capítulo teremos algumas aplicações físicas utilizando o MF para a resolução da equação (1.1) com as funções de energia potencial tratadas no capítulo 2, de forma a reafirmar os resultados obtidos anteriormente na presente tese.

Capítulo 4

Aplicações Físicas do Método de Fatorização

Neste capítulo aplicamos o Método de Fatorização para resolver a equação (1.1) com algumas das funções de energia potencial tratadas no capítulo 2. Seguiremos de perto, em alguns momentos, a abordagem usada por Infeld e Hull [54]. Não será necessário a utilização de todas as seis formas de fatorização descritas no capítulo 3, mas apenas aquela que nos for mais conveniente será abordada.

4.1 Pöschl - Teller - Forma Trigonométrica

No capítulo 2 foi demonstrado que a equação de Schrödinger radial com o potencial de Pöschl - Teller (2.76) podia ser transformada, mediante a aproximação (2.80) para o termo centrífugo, em uma equação com a forma

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} W - V_{ef} \right) R = 0 \quad (4.1)$$

sendo

$$W = E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right) \quad (4.2)$$

a energia renormalizada, e

$$V_{ef} = \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} \left[\frac{\tilde{\chi}(\tilde{\chi}-1)}{\text{sen}^2[\rho(r-r_0)]} + \frac{\sigma(\sigma-1)}{\text{cos}^2[\rho(r-r_0)]} \right] \quad (4.3)$$

o potencial efetivo, com a constante renormalizada $\tilde{\chi}$ dada por (2.85).

Se compararmos a equação (4.1) com a expressão geral (3.1), iremos perceber que

$$r(r, m) = -\frac{\rho^2 \tilde{\chi}(\tilde{\chi} - 1)}{\text{sen}^2[\rho(r - r_0)]} - \frac{\rho^2 \sigma(\sigma - 1)}{\text{cos}^2[\rho(r - r_0)]} \quad \text{e} \quad \lambda = \frac{2\mu}{\hbar^2} W. \quad (4.4)$$

Portanto, seguindo Infeld e Hull [54], devemos usar a fatorização do tipo (A). Para isso devemos transformar a expressão para $r = r(x, m)$ em (3.41) em uma forma idêntica à expressão (4.4). Para tal, devemos fazer $a = 2\rho$, $c = 0$, $d = 2ga$, $x = r$ e $p = -r_0$, na expressão (3.41), isto é

$$\begin{aligned} -r(r, m) &= \left[\frac{(am)^2}{2} + amd + \frac{ma^2}{2} + \frac{d^2}{2} + \frac{ad}{2} + \frac{(am)^2}{2} - amd + \frac{ma^2}{2} + \frac{d^2}{2} - \frac{ad}{2} \right] \\ &\quad \times \left(\text{sen}^2[a(x + p)] \right)^{-1} + \left[\frac{(am)^2}{2} + amd + \frac{ma^2}{2} + \frac{d^2}{2} + \frac{ad}{2} - \frac{(am)^2}{2} \right. \\ &\quad \left. + amd - \frac{ma^2}{2} - \frac{d^2}{2} + \frac{ad}{2} \right] \frac{\text{cos}[a(x + p)]}{\text{sen}^2[a(x + p)]} \\ &= \frac{a^2}{2} \left(m^2 + \frac{2md}{a} + m + \frac{d^2}{a^2} + \frac{d}{a} \right) \frac{(1 + \text{cos}[a(x + p)])}{(1 - \text{cos}^2[a(x + p)])} + \frac{a^2}{2} \left(m^2 - \frac{2md}{a} \right. \\ &\quad \left. + m + \frac{d^2}{a^2} - \frac{d}{a} \right) \frac{(1 - \text{cos}[a(x + p)])}{(1 - \text{cos}^2[a(x + p)])} \\ &= \frac{\rho^2(m + g)(m + g + 1)}{\text{sen}^2[\rho(r - r_0)]} + \frac{\rho^2(m - g)(m - g + 1)}{\text{cos}^2[\rho(r - r_0)]}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Comparando esta expressão com o potencial efetivo (4.3), podemos identificar $m + g + 1$ e $m - g + 1$ com $\tilde{\chi}$ e σ , respectivamente, tal que $2m + 2 = \tilde{\chi} + \sigma$.

Usando a expressão para $k(x, m)$ dada em (3.41), para a fatorização do tipo (A), com $a = 2\rho$, $c = 0$, $d = 2ga$, $x = r$ e $p = -r_0$, obtemos

$$\begin{aligned} k(r, m) &= \frac{d}{\text{sen}[a(x + p)]} + am \cot[a(x + p)] \\ &= \frac{am}{2} \left(\frac{1 + \text{cos}[a(x + p)]}{\text{sen}[a(x + p)]} - \frac{1 - \text{cos}[a(x + p)]}{\text{sen}[a(x + p)]} \right) + \frac{d}{2} \left(\frac{1 + \text{cos}[a(x + p)]}{\text{sen}[a(x + p)]} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1 + \text{cos}[a(x + p)]}{\text{sen}[a(x + p)]} \right) \\ &= \frac{a}{2} \left(m + \frac{d}{a} \right) \cot \left[\frac{a}{2}(x + p) \right] - \frac{a}{2} \left(m - \frac{d}{a} \right) \tan \left[\frac{a}{2}(x + p) \right] \\ &= (m + g)\rho \cot[\rho(r - r_0)] - (m - g)\rho \tan[\rho(r - r_0)]. \end{aligned} \quad (4.6)$$

A partir da expressão para $L(m)$ em (3.41), com $a = 2\rho$ e $c = 0$, temos que

$$L(m) = a^2(m + c)^2 = 4\rho^2 m^2. \quad (4.7)$$

Esta expressão para $L(m)$ nos garante que estamos tratando problemas de *Classe I*, pois $L(m)$ está incrementando por valores de m , de tal forma que os autovalores, conforme o *Teorema IV*, possuem a forma

$$\lambda = L(l + 1) = L(m + n + 1) = 4\rho^2(m + n + 1)^2 = 4\rho^2(l + 1)^2 \quad (4.8)$$

sendo $l = m + n$ com $n = 0, 1, 2, \dots$. Usando o valor de λ em (4.4) obtemos os níveis de energia

$$\begin{aligned} \frac{2\mu}{\hbar^2} W &= 4\rho^2(m + n + 1)^2 \\ E_n &= \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} (\tilde{\chi} + \sigma + 2n)^2 + \frac{l(l + 1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right), \end{aligned} \quad (4.9)$$

sendo que usamos o valor da energia renormalizada W em (4.2) e as constantes c_0 , c_1 , e c_2 dadas em (2.78). A expressão obtida para a energia (4.9) concorda exatamente com a expressão para o espectro de energia (2.94) encontrado no capítulo 2.

A ação dos operadores de abaixamento e levantamento sob a função de onda radial $R(r)$, dadas através das expressões (3.2) e (3.3), neste caso possuem a forma

$$\begin{aligned} {}^+H^m R_l^m &= \left[\rho(m + g + 1) \cot[\rho(r - r_0)] - \rho(m - g + 1) \tan[\rho(r - r_0)] - \frac{d}{dr} \right] R_l^m \\ &= [\lambda - L(m + 1)]^{1/2} R_l^{m+1}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

e

$$\begin{aligned} {}^-H^m R_l^m &= \left[\rho(m + g) \cot[\rho(r - r_0)] - \rho(m - g) \tan[\rho(r - r_0)] + \frac{d}{dr} \right] R_l^m \\ &= [\lambda - L(m)]^{1/2} R_l^{m-1}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

De posse das expressões (4.10) e (4.11), juntamente com (4.7) para a função $L(m)$, podemos construir as seguintes expressões

$$\begin{aligned} {}^+H^m R_l^m &= (\lambda - L(m + 1))^{1/2} R_l^{m+1} = \left[\frac{2\mu W}{\hbar^2} - 4\rho^2(m + 1)^2 \right]^{1/2} R_l^{m+1} \\ &= \left[\frac{2\mu W}{(\rho\hbar)^2} - 4(m + 1)^2 \right]^{1/2} R_l^{m+1} = h_+ R_l^{m+1}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

e

$$\begin{aligned} -H^m R_l^m &= (\lambda - L(m))^{1/2} R_l^{m-1} = \left(\frac{2\mu W}{\hbar^2} - 4\rho^2 m^2 \right)^{1/2} R_l^{m-1} \\ &= \left[\frac{2\mu W}{(\rho\hbar)^2} - 4m^2 \right]^{1/2} R_l^{m-1} = h_- R_l^{m-1} \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde

$$h_+ = \left[\frac{2\mu W}{(\rho\hbar)^2} - 4(m+1)^2 \right]^{1/2} \quad \text{e} \quad h_- = \left[\frac{2\mu W}{(\rho\hbar)^2} - 4m^2 \right]^{1/2}. \quad (4.14)$$

A constante 2ρ foi absorvida pelas funções de onda radial $R_l^{m+1}(r)$ e $R_l^{m-1}(r)$ como uma constante de normalização.

Estamos interessados em construir a álgebra de Lie para a equação diferencial (4.1), a qual representa a ESR com o potencial de Pöschl - Teller, seguindo a perspectiva de Miller na Ref. [63]. Desta feita, as expressões (4.12) e (4.13) determinam claramente a forma de atuação dos operadores $-H^m$ e $+H^m$ sobre a função radial $R_l^m(r)$, bem como demonstram que são operadores de abaixamento e levantamento, respectivamente. Com estas expressões calculamos o comutador entre os operadores $-H^m$ e $+H^m$, com o objetivo principal de estabelecer a realização dos operadores de levantamento e abaixamento, como geradores da álgebra de Lie, e obter explicitamente o autovalor do operador $^3H^m$.

De fato, W. Miller [63] foi um dos principais responsáveis pela associação do MF à grupos de simetria, em especial para a álgebra de Lie. Como sabemos, as funções especiais, que surgem no estudo de modelos matemáticos de fenômenos físicos e as identidades as quais estas funções obedecem são, em muitos casos governadas, por grupos de simetria [83].

O primeiro passo para a construção da estrutura de uma álgebra de Lie é o cálculo das relações de comutação entre os operadores constituintes da álgebra,

$$\begin{aligned} [+H^m, -H^m] R_l^m &= +H^m (-H^m R_l^m) - -H^m (+H^m R_l^m) \\ &= \left[(\lambda - L(m))^{1/2} (\lambda - L(m))^{1/2} - (\lambda - L(m+1))^{1/2} \right. \\ &\quad \left. (\lambda - L(m+1))^{1/2} \right] R_l^m \\ &= (L(m+1) - L(m)) R_l^m. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Neste ponto, usando o valor de $L(m)$ obtido em (4.7) na expressão acima, temos que

$$[+H^m, -H^m] R_l^m = \left[4\rho^2(m+1)^2 - 4\rho^2 m^2 \right] R_l^m = 2m' R_l^m,$$

com $m' = 4(2m + 1)$. Logo

$$\left[{}^+H^m, -H^m \right] R_l^m = 2 \left({}^3H^m R_l^m \right) = 2m' R_l^m, \quad (4.16)$$

onde a constante ρ^2 no autovalor m' foi absorvida na função de onda radial $R_l^m(r)$ como constante de normalização.

A relação de comutação entre os operadores $-H^m$ e ${}^+H^m$ expressa em (4.16) é idêntica à relação de comutação entre os operadores J_+ e J_- , elementos que constituem os geradores de rotações infinitesimais da álgebra de Lie do grupo $SO(3)$ [83]. Seguindo esta perspectiva, nos resta ainda especificar os outros elementos geradores da álgebra de Lie, isto é: $\{ {}^1H^m, {}^2H^m, {}^3H^m \}$.

Definindo o valor de $m' = 4(m + 1)$ como sendo o autovalor do operador ${}^3H^m$, juntamente com (4.12) e (4.13), permite-nos estabelecer completamente a realização dos operadores $\{ {}^+H^m, -H^m, {}^3H^m \}$ como geradores de uma álgebra de Lie, bem como sua atuação sobre as funções de onda radial $R_l^m(r)$.

Contudo, nos resta ainda calcular o comutador entre os operadores $\{ {}^3H^m, {}^+H^m \}$ e $\{ {}^3H^m, -H^m \}$, de forma que possamos obter as mesmas relações de comutação da álgebra de Lie do grupo $SO(3)$. Então

$$\begin{aligned} \left[{}^3H^m, {}^+H^m \right] R_l^m &= {}^3H^m \left({}^+H^m R_l^m \right) - {}^+H^m \left({}^3H^m R_l^m \right) \\ &= \left[(\lambda - L(m + 1))^{1/2} (m' + 1) - m' (\lambda - L(m + 1))^{1/2} \right] R_l^{m+1} \\ &= (\lambda - L(m + 1))^{1/2} R_l^{m+1} \\ &= {}^+H^m R_l^m(r), \end{aligned}$$

onde usamos (4.10). Assim

$$\left[{}^3H^m, {}^+H^m \right] = {}^+H^m. \quad (4.17)$$

Da mesma forma, usando a expressão (4.11),

$$\begin{aligned} \left[{}^3H^m, -H^m \right] R_l^m &= {}^3H^m \left(-H^m R_l^m \right) - -H^m \left({}^3H^m R_l^m \right) \\ &= \left[(\lambda - L(m))^{1/2} (m' - 1) R_l^{m-1} - m' (\lambda - L(m))^{1/2} \right] R_l^{m-1} \\ &= -(\lambda - L(m))^{1/2} R_l^{m-1} \\ &= -{}^-H^m R_l^m(r), \end{aligned}$$

temos que

$$\left[{}^3H^m, -H^m \right] = -{}^{-}H^m. \quad (4.18)$$

A construção dos operadores ${}^1H^m$ e ${}^2H^m$ seguirá a forma tradicional para a sua definição, ou seja, em termos dos operadores de levantamento e abaixamento ${}^+H^m$ e ${}^{-}H^m$ [83]. Assim

$${}^1H^m = \frac{1}{2} \left({}^+H^m + {}^{-}H^m \right) \quad \text{e} \quad {}^2H^m = \frac{1}{2i} \left({}^+H^m - {}^{-}H^m \right), \quad (4.19)$$

não sendo difícil demonstrar que os operadores acima, juntamente com o operador ${}^3H^m$, satisfazem a relação de comutação fundamental para os geradores de rotações infinitesimais de uma álgebra de Lie:

$$\left[{}^lH^m, {}^jH^m \right] = i\epsilon_{ljk} {}^kH^m, \quad l, j, k = 1, 2, 3. \quad (4.20)$$

4.2 Pöschl - Teller - Forma Hiperbólica

A equação de Schrödinger (2.105), com a função potencial de Pöschl - Teller na sua forma hiperbólica, mediante uma aproximação para o termo centrífugo, foi transformada em

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}W - V_{ef} \right) R = 0, \quad (4.21)$$

sendo a energia renormalizada dada por

$$W = E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right), \quad (4.22)$$

e o potencial efetivo

$$V_{ef} = \frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu} \left[\frac{\chi(\chi-1)}{\sinh^2[\rho(r-r_0)]} + \frac{\tilde{\sigma}(\tilde{\sigma}+1)}{\cosh^2[\rho(r-r_0)]} \right]. \quad (4.23)$$

Se compararmos a equação (4.21) com a expressão geral (3.1), iremos perceber que

$$r(r, m) = -\frac{\rho^2\chi(\chi-1)}{\sinh^2[\rho(r-r_0)]} - \frac{\rho^2\tilde{\sigma}(\tilde{\sigma}+1)}{\cosh^2[\rho(r-r_0)]} \quad \text{e} \quad \lambda = \frac{2\mu}{\hbar^2}W. \quad (4.24)$$

Procedendo da mesma forma que realizamos para a função potencial de Pöschl - Teller na forma trigonométrica, iremos escolher $a = 2i\rho$, $c = 0$, $d = 2ig\rho$, $x = r$ e $p = -r_0$.

Portanto

$$\begin{aligned}
-r(r, m) &= \frac{(am)^2 + ma^2 + d^2}{\text{sen}^2[a(x+p)]} + \frac{(2adm + ad)\cos[a(x+p)]}{\text{sen}^2[a(x+p)]} \\
&= \frac{a^2(m + d/a)(m + d/a + 1)}{4 \text{sen}^2[a(x+p)/2]} + \frac{a^2(m - d/a)(m - d/a + 1)}{4 \cos^2[a(x+p)/2]} \\
&= \frac{4i^2\rho^2}{4} \left(m + \frac{2ig\rho}{2i\rho}\right) \left(m + \frac{2ig\rho}{2i\rho} + 1\right) \left(\text{sen}^2\left[2i\rho\frac{(r-r_0)}{2}\right]\right)^{-1} + \\
&\quad + \frac{4i^2\rho^2}{4} \left(m - \frac{2ig\rho}{2i\rho}\right) \left(m - \frac{2ig\rho}{2i\rho} + 1\right) \left(\cos^2\left[2i\rho\frac{(r-r_0)}{2}\right]\right)^{-1} \\
&= -\frac{\rho^2(m+g)(m+g+1)}{\sinh^2[\rho(r-r_0)]} - \frac{\rho^2(m-g)(m-g+1)}{\cosh^2[\rho(r-r_0)]}, \tag{4.25}
\end{aligned}$$

sendo que usamos as seguintes relações entre funções trigonométricas e hiperbólicas:

$$\text{sen}(ix) = \frac{(e^x - e^{-x})i}{2} = i \sinh x \quad \text{e} \quad \cos(ix) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} = \cosh x,$$

com $i = \sqrt{-1}$ sendo o número imaginário. Comparando a expressão (4.25) com o potencial efetivo (4.23) podemos identificar $m+g$ e $m-g$ com o $-\chi$ e $\tilde{\sigma}$, tal que: $2m = \tilde{\sigma} - \chi$.

Usando a expressão para $k(x, m)$, dada em (3.41), para a fatorização do tipo (A), obtemos

$$\begin{aligned}
k(x, m) &= \frac{a}{2} \left(m + \frac{d}{a}\right) \cot\left[\frac{a}{2}(x+p)\right] - \frac{a}{2} \left(m - \frac{d}{a}\right) \tan\left[\frac{a}{2}(x+p)\right] \\
&= \frac{2i\rho}{2} \left[\left(m + \frac{2ig\rho}{2i\rho}\right) \cot\left[\frac{2i\rho(r-r_0)}{2}\right] - \left(m - \frac{2ig\rho}{2i\rho}\right) \tan\left[\frac{2i\rho(r-r_0)}{2}\right]\right] \\
&= \rho(m+g)i \frac{\cos[i\rho(r-r_0)]}{\text{sen}[i\rho(r-r_0)]} - \rho(m-g)i \frac{\text{sen}[i\rho(r-r_0)]}{\cos[i\rho(r-r_0)]} \\
&= (m+g)\rho \coth[\rho(r-r_0)] + (m-g)\rho \tanh[\rho(r-r_0)], \tag{4.26}
\end{aligned}$$

onde usamos as relações:

$$\cot(ix) = \frac{\cos(ix)}{\text{sen}(ix)} = \frac{\coth x}{i} \quad \text{e} \quad \tan(ix) = \frac{\text{sen}(ix)}{\cos(ix)} = i \tanh x.$$

Neste caso, a função $L(m)$ em (3.41) é dada por

$$L(m) = a^2(m+c)^2 = -4\rho^2 m^2, \tag{4.27}$$

que nos garante que estamos tratando com problemas de *Classe II*, ou seja, a função $L(m)$ esta decrementando por valores de m . Os autovalores, conforme o *Teorema IV*, são, então,

$$\lambda = L(l) = L(m-n) = -4\rho^2(m-n)^2 = -4\rho^2 l^2 = -\rho^2(2m-2n)^2, \tag{4.28}$$

sendo $l = m - n$ e $n = 0, 1, 2, \dots$. Usando o valor de λ em (4.24), juntamente com (4.22), podemos obter os níveis de energia

$$\begin{aligned} \frac{2\mu}{\hbar^2} W &= -\rho^2(2m - 2n)^2 \\ E_n &= -\frac{(\rho\hbar)^2}{2\mu}(\tilde{\sigma} - \chi - 2n)^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Esta é a mesma expressão para os níveis de energia encontrada no capítulo 2.

A ação dos operadores de abaixamento e levantamento sobre a função de onda radial $R(r)$, dadas através das expressões (3.2) e (3.3), possuem a forma

$$\begin{aligned} {}^+H^m R_l^m &= \left[\rho(m+g+1) \coth[\rho(r-r_0)] + \rho(m-g+1) \tanh[\rho(r-r_0)] - \frac{d}{dr} \right] R_l^m \\ &= [\lambda - L(m+1)]^{1/2} R_l^{m+1}, \end{aligned} \quad (4.30)$$

e

$$\begin{aligned} {}^-H^m R_l^m &= \left[\rho(m+g) \coth[\rho(r-r_0)] + \rho(m-g) \tanh[\rho(r-r_0)] + \frac{d}{dr} \right] R_l^m \\ &= [\lambda - L(m)]^{1/2} R_l^{m-1}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

De posse das expressões (4.30) e (4.31), as quais estabelecem a atuação dos operadores de levantamento e abaixamento sobre a função $R_l^m(r)$, juntamente com (4.28) para a função $L(m)$, podemos construir as seguintes expressões

$$\begin{aligned} {}^+H^m R_l^m &= (\lambda - L(m+1))^{1/2} R_l^{m+1} = \left[\frac{2\mu W}{\hbar^2} + 4\rho^2(m-n+1)^2 \right]^{1/2} R_l^{m+1} \\ &= \left[\frac{2\mu W}{(\rho\hbar)^2} + 4(m-n+1)^2 \right]^{1/2} R_l^{m+1} \\ &= h_+ R_l^{m+1}, \end{aligned} \quad (4.32)$$

e

$$\begin{aligned} {}^-H^m R_l^m &= (\lambda - L(m))^{1/2} R_l^{m-1} = \left[\frac{2\mu W}{\hbar^2} + 4\rho^2(m-n)^2 \right]^{1/2} R_l^{m-1} \\ &= \left[\frac{2\mu W}{(\rho\hbar)^2} + 4(m-n)^2 \right]^{1/2} R_l^{m-1} \\ &= h_- R_l^{m-1}, \end{aligned} \quad (4.33)$$

onde

$$h_+ = \left[\frac{2\mu W}{(\rho\hbar)^2} + 4(m-n+1)^2 \right]^{1/2} \quad \text{e} \quad h_- = \left[\frac{2\mu W}{(\rho\hbar)^2} + 4(m-n)^2 \right]^{1/2}, \quad (4.34)$$

são os autovalores e a constante física ρ foi absorvida pela função de onda radial $R_l^m(r)$, como uma constante de normalização nas expressões (4.32) e (4.33). Essas expressões representam claramente que os operadores ${}^+H^m$ e ${}^-H^m$ são operadores de levantamento e abaixamento, respectivamente.

Usando a expressão (4.15), a qual determina a relação de comutação entre os operadores ${}^+H^m$ e ${}^-H^m$, e o valor de $L(m)$ em (4.28), iremos obter uma expressão semelhante a (4.16) com $m' = -4(m+1)$. Os operadores ${}^1H^m$ e ${}^2H^m$ serão construídos mediante a forma (4.19), logo, será imediato que os operadores satisfaçam a relação de comutação (4.20).

Além do artigo de Infeld e Hull a respeito da aplicação do MF para tratar o potencial de Pöschl - Teller, temos também alguns trabalhos [84, 85, 86] que merecem destaque e confirma os resultados obtidos nesta tese. Porém, salientamos que nestes trabalhos não havia a inclusão do termo centrífugo.

4.3 Morse

No segundo capítulo demonstramos que a equação de Schrödinger radial com a função potencial de Morse mais o termo de momento angular podia ser expressa, por meio da expansão de Pekeris, como sendo

$$a^2 y^2 \frac{d^2 R}{dy^2} + a^2 y \frac{dR}{dy} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[(W - c) - (D_e + c_2)y^2 + (2D_e - c_1)y \right] R = 0. \quad (4.35)$$

Para obtermos esta equação, fizemos uso da seguinte mudanças de variáveis

$$y = e^{-a(r-r_e)} = e^{-au}, \quad u = -\frac{1}{a} \ln y, \quad \frac{dy}{du} = -ay, \quad \text{e} \quad \frac{d^2 y}{du^2} = a^2 y,$$

juntamente com a regra da cadeia

$$\frac{d^2 R}{du^2} = a^2 y^2 \frac{d^2 R}{dy^2} + a^2 y \frac{dR}{dy}.$$

Assim, mediante estas transformações podemos reescrever a equação (4.35) sob a forma

$$\frac{d^2 R}{du^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[(W - c) - (D_e + c_2)e^{-2au} + (2D_e - c_1)e^{-au} \right] R = 0. \quad (4.36)$$

Seguindo Infeld e Hull na Ref. [54] devemos usar o tipo B de fatorização. Para isso, devemos realizar algumas transformações, que são:

$$e^{-au} = \frac{(a\hbar)}{[8\mu(D_e + c_2)]^{1/2}} e^x, \quad \text{e} \quad x = -au + \ln \left\{ \frac{[8\mu(D_e + c_2)]^{1/2}}{a\hbar} \right\}, \quad \text{com} \quad dx = -adu.$$

Então a equação (4.36), mediante as transformações acima, se torna

$$\frac{d^2 R}{dx^2} + \left[-\frac{1}{4}e^{2x} + \left(s + \frac{1}{2} \right) e^x \right] R - m^2 R = 0, \quad (4.37)$$

sendo

$$m^2 = -\frac{2\mu}{a^2\hbar^2}(W - c) \quad \text{e} \quad s + \frac{1}{2} = \frac{(2D_e - c_1)\sqrt{\mu}}{a\hbar[2(D_e + c_2)]^{1/2}}. \quad (4.38)$$

Usando a expressão para $r(x, m)$ dada em (3.42) com $a = 1$, $c = 0$ e $d = 1/2$, temos que

$$r(x, m) = -\frac{1}{4}e^{2x} + \left(s + \frac{1}{2} \right) e^x \quad (4.39)$$

enquanto a função $k(x, m)$ em (3.42), com $m = s$, será dada por

$$k(x, m) = \frac{1}{2}e^x - s. \quad (4.40)$$

A função $L(m)$ será encontrada mediante a seguinte expressão

$$L(m) = -a^2(m + c)^2 = -s^2. \quad (4.41)$$

Como podemos perceber, $L(s)$ é uma função decrementando por valores de s . Naturalmente os valores de s , fornecidos através da expressão (4.38), não serão números inteiros, mas seguindo Infeld e Hull, é suficiente que $s - m = n = 0, 1, 2, \dots$. Assim, o espectro de energia possui a forma

$$\begin{aligned} m^2 &= (n - s)^2 = \left[n - \frac{(2D_e - c_1)\sqrt{\mu}}{a\hbar[2(D_e + c_2)]^{1/2}} + \frac{1}{2} \right]^2 \\ -\frac{2\mu}{a^2\hbar^2}(W - c) &= \frac{(2D_e - c_1)^2\mu}{(a\hbar)^2[2(D_e + c_2)]} + \frac{1}{4} - \frac{2n(2D_e - c_1)\sqrt{\mu}}{a\hbar[2(D_e + c_2)]^{1/2}} - \frac{(2D_e - c_1)\sqrt{\mu}}{a\hbar[2(D_e + c_2)]^{1/2}} \\ &\quad + n^2 + n, \end{aligned}$$

ou seja,

$$W = c - \frac{(D_e - c_1/2)^2}{(D_e + c_2)} + \frac{a\hbar(D_e - c_1/2)}{\sqrt{2\mu(D_e + c_2)}} \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{(a\hbar)^2}{2\mu} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2, \quad (4.42)$$

onde foram usadas as expressões (4.38).

A ação dos operadores de abaixamento e levantamento sobre a função de onda radial $R(x)$, dadas através das expressões (3.2) e (3.3), possuem a forma

$${}^+H^s R_l^s = \left[\frac{1}{2}e^x - s + \frac{d}{dx} \right] R_l^s = [\lambda - L(m+1)]^{1/2} R_l^{s+1} \quad (4.43)$$

e

$${}^-H^s R_l^s = \left[\frac{1}{2}e^x - s - \frac{d}{dx} \right] R_l^s = [\lambda - L(m)]^{1/2} R_l^{s-1}, \quad (4.44)$$

tendo em mente que para o potencial de Morse, $m = s$.

De posse das expressões (4.43) e (4.44), as quais estabelecem a atuação dos operadores de levantamento e abaixamento sobre a função $R_l^s(x)$, juntamente com (4.41) para a função $L(m)$, podemos construir as seguintes expressões

$$\begin{aligned} {}^+H^s R_l^s &= (\lambda - L(s+1))^{1/2} R_l^{s+1} = \left[\frac{2\mu}{(a\hbar)^2}(W - c) + a^2(s+1)^2 \right]^{1/2} R_l^{s+1} \\ &= \left[\frac{2\mu}{(a\hbar)^2}(W - c) + (s+1)^2 \right]^{1/2} R_l^{s+1} = h_+ R_l^{s+1} \end{aligned} \quad (4.45)$$

e

$$\begin{aligned} {}^-H^s R_l^s &= (\lambda - L(s))^{1/2} R_l^{s-1} = \left[\frac{2\mu}{(a\hbar)^2}(W - c) + s^2 \right]^{1/2} R_l^{s-1} \\ &= \left[\frac{2\mu}{(a\hbar)^2}(W - c) + s^2 \right]^{1/2} R_l^{s-1} = h_- R_l^{s-1}, \end{aligned} \quad (4.46)$$

sendo

$$h_+ = \left[\frac{2\mu}{(a\hbar)^2}(W - c) + (s+1)^2 \right]^{1/2} \quad \text{e} \quad h_- = \left[\frac{2\mu}{(a\hbar)^2}(W - c) + s^2 \right]^{1/2}. \quad (4.47)$$

Usando a expressão (4.15), a qual determina a relação de comutação entre os operadores ${}^+H^s$ e ${}^-H^s$, e o valor de $L(s)$ em (4.41), temos que

$$\begin{aligned} [{}^+H^s, {}^-H^s] R_l^s &= (L(s+1) - L(s)) R_l^s = [(s+1)^2 - s^2] R_l^s \\ &= (2s+1) R_l^s = 2s' R_l^s, \end{aligned} \quad (4.48)$$

com $s' = s + 1/2$. Assim

$$\left[{}^+H^s, -H^s \right] R_l^s = 2 \left({}^3H^s R_l^s \right) = 2s' R_l^m.$$

Por outro lado, a partir das expressões (4.43) e (4.44), temos que os comutadores entre os operadores $\{ {}^3H^s, +H^s \}$ e $\{ {}^3H^s, -H^s \}$ possuirão as mesmas formas que (4.17) e (4.18) com $m = s$. A construção dos operadores ${}^1H^s$ e ${}^2H^s$ seguirá a forma tradicional, ou seja,

$${}^1H^s = \frac{1}{2} \left({}^+H^s + -H^s \right) \quad \text{e} \quad {}^2H^s = \frac{1}{2i} \left({}^+H^s - -H^s \right),$$

e, de forma geral,

$$\left[{}^lH^m, {}^jH^m \right] = i\epsilon_{ljk} {}^kH^m, \quad \text{com } l, j, k = 1, 2, 3.$$

Como demonstrado no capítulo 2, a solução da ESR com as funções potencial Hulburt - Hirschfelder, Rydberg, Hylleraas, Linnett, Wu - Yang, e Frost - Musulin, possuem o espectro de energia semelhante ao obtido para o potencial de Morse, exceto as constantes que constituem os autovalores da energia. De certo isto já é esperado, pois, o espectro de energia de moléculas diatômicas necessariamente deve possuir esta forma, conforme Duham [76]. Assim, utilizaremos os resultados obtidos com o potencial de Morse para realizar a fatorização das funções potencial citadas. Com o intuito de evitar repetir todo o processo do MF iremos, apenas, explicitar algumas expressões que nos sejam fundamentais para a fatorização. As funções (4.39), (4.40) e (4.41) permanecem as mesmas, bem como a forma de obtenção do espectro de energia, reservando o valor das constantes como demonstrado no segundo capítulo. A diferença entre o espectro de energia de cada função energia potencial está no valor das constantes que se encontram na sua respectiva expressão para a energia.

Para a função potencial de Hulburt - Hirschfelder, obtemos uma equação idêntica a equação (4.35), portanto, todo o processo descrito acima se repetirá.

Para a função de Rydberg obtemos uma equação da forma

$$a^2 y^2 \frac{d^2 R}{dy^2} + a^2 y \frac{dR}{dy} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[(W - c) - c_2 y^2 + (D_e - c_1) y \right] R = 0,$$

a qual nos leva a obter

$$\frac{d^2 R}{du^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[(W - c) - c_2 e^{-2au} + (D_e - c_1) e^{-au} \right] R = 0,$$

sendo

$$e^{-au} = \frac{(a\hbar)}{(8\mu c_2)^{1/2}} e^x, \quad x = -au + \ln \left[\frac{(8\mu c_2)^{1/2}}{a\hbar} \right] \quad \text{com } dx = -adu.$$

A partir destas substituições, obtemos uma equação idêntica à (4.37), sendo

$$m^2 = -\frac{2\mu}{a^2\hbar^2}(W - c), \quad s + \frac{1}{2} = \frac{(2D_e - c_1)\sqrt{\mu}}{a\hbar(2c_2)^{1/2}},$$

e as expressões para $k(x, m)$, $r(x, m)$ e $L(m)$ permanecem as mesmas, resultando em fim na expressão para o espectro de energia (4.42).

Para os potenciais Hylleraas, Linnett, Wu - Yang e Frost - Musulin obtemos a seguinte expressão para a equação de Schrödinger radial

$$a^2 y^2 \frac{d^2 R}{dy^2} + a^2 y \frac{dR}{dy} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [(W - c) - c_2 y^2 + c_1 y] R = 0,$$

a qual nos leva a

$$\frac{d^2 R}{du^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [(W - c) - c_2 e^{-2au} + c_1 e^{-au}] R = 0$$

sendo

$$e^{-au} = \frac{(a\hbar)}{(8\mu c_2)^{1/2}} e^x \quad x = -au + \ln \left[\frac{(8\mu c_2)^{1/2}}{a\hbar} \right] \quad \text{com } dx = -adu.$$

Com estas substituições obtemos uma equação idêntica a (4.37), sendo

$$m^2 = -\frac{2\mu}{a^2\hbar^2}(W - c) \quad \text{e} \quad s + \frac{1}{2} = \frac{c_1\sqrt{\mu}}{a\hbar(2c_2)^{1/2}}.$$

As expressões para $k(x, m)$, $r(x, m)$ e $L(m)$ permanecem as mesmas, resultando em fim na expressão para o espectro de energia (4.42).

4.4 Manning - Rosen

Através dos resultados obtidos no capítulo 2, demonstramos que a equação de Schrödinger radial com o potencial de Manning - Rosen mais o termo rotacional pode ser expressa, mediante a aproximação generalizada, sob a forma

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + (W - V_{ef}) R = 0, \quad (4.49)$$

sendo a energia renormalizada dada por

$$\frac{\hbar^2}{8\mu d^2}W = E - 4\nu\frac{\hbar^2}{8\mu d} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2}c_2 + \frac{c_2}{2} \right) \quad (4.50)$$

e

$$V_{ef} = B \coth z + A \operatorname{cosech}^2 z, \quad (4.51)$$

o potencial efetivo com os seus coeficientes renormalizados B e A , dados em (2.156).

Para realizar a fatorização da equação (4.49), adotamos o tipo E de fatorização.

Usando a expressão para $r(x, m)$ em (3.48) com $x = r$, $p = -r_e$, e $a = ia$, temos que

$$\begin{aligned} r(x, m) &= -2aiq \cot[ia(r - r_e)] - i^2 a^2 m(m+1) \csc^2[ai(r - r_e)] \\ &= -2aiq \frac{\coth[a(r - r_e)]}{i} - i^2 a^2 m(m+1) i^2 \operatorname{cosech}^2[a(r - r_e)] \\ &= -2aq \coth[a(r - r_e)] - a^2 m(m+1) \operatorname{cosech}^2[a(r - r_e)]. \end{aligned} \quad (4.52)$$

De acordo com (3.48), a função $k(x, m)$ para a fatorização do tipo E, possui a forma

$$k(x, m) = \frac{q}{m} + aim \cot[ai(r - r_e)] = \frac{q}{m} + am \coth[a(r - r_e)].$$

Comparando o potencial efetivo (4.51) com a função (4.52), percebemos que a fatorização será possível apenas mediante as seguintes condições

$$B = \frac{2q}{a} \quad \text{e} \quad A = m(m+1).$$

Os autovalores são obtidos através da expressão para $L(m)$ em (3.48) com $a = ia$, logo

$$L(m) = -a^2 m^2 - \frac{q^2}{m^2} \quad \text{e} \quad \lambda = \frac{\hbar^2}{8\mu d^2} W. \quad (4.53)$$

Como podemos perceber a expressão (4.53) é uma função decrescendo por valores de m . Então, de acordo com o *Teorema IV*, estamos tratando de problemas de *Classe II*, o que impõem que

$$\lambda = L(l) = -a^2 l^2 - \frac{q^2}{l^2} = -a^2 (m-n)^2 - \frac{q^2}{(m-n)^2}, \quad \text{com} \quad l = m-n. \quad (4.54)$$

Para obtermos a mesma expressão para o espectro de energia encontrada no capítulo 2, por meio da resolução direta da equação (2.153), devemos restringir os valores de m através da seguinte condição

$$A = m(m+1), \quad \text{isto é,} \quad m^2 + m - A = 0.$$

Resolvendo este polinômio do segundo grau, obtemos as seguintes raízes:

$$m_1 = \frac{(4A+1)^{1/2}}{2} - \frac{1}{2} \text{ e } m_2 = -\frac{(4A+1)^{1/2}}{2} - \frac{1}{2}.$$

Apenas o valor da primeira raiz m_1 irá fornecer o espectro de energia idêntico a expressão encontrada no capítulo 2, a outra raiz m_2 é descartada. Neste caso

$$(m-n)^2 = \left[\frac{(4A+1)^{1/2}}{2} - \frac{1}{2} - n \right]^2 = \left[\left(A + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2.$$

Usando a expressão acima e o fato de que $q = aB/2$ em (4.54), obtemos

$$\begin{aligned} \lambda &= -a^2(m-n)^2 - \frac{q^2}{(m-n)^2} \\ &= -a^2 \left[\left(A + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 - \frac{a^2 B^2}{4} \left[\left(A + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^{-2} \\ &= -a^2 \left[\left(A + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 - \frac{a^2 B^2}{[(4A+1)^{1/2} - 2n - 1]^2}. \end{aligned}$$

Substituindo os valores de $a = 1/2d$ e λ em (4.53), com W dado em (4.50), na expressão anterior, temos que

$$\begin{aligned} -\frac{8\mu d^2 E}{\hbar^2} &= -\frac{4l(l+1)d^2}{r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + \frac{c_2}{2} \right) + a^2 \left[\left(A + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 \\ &\quad + \frac{a^2 B^2}{[(4A+1)^{1/2} - 2n - 1]^2} - 4d\nu \\ -E_n &= \frac{(\hbar B)^2}{8\mu d^2 [(4A+1)^{1/2} - 2n - 1]^2} + \frac{\hbar^2}{8\mu d^2} \left[\left(A + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 \\ &\quad - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(1 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + \frac{c_2}{2} \right) - 2[A + \beta(\beta - 1)], \end{aligned} \quad (4.55)$$

a qual representa a mesma expressão (2.165) para o espectro de energia.

A ação dos operadores de abaixamento e levantamento sobre a função de onda radial $R_l^m(r)$, dadas através das expressões (3.2) e (3.3), possuem a forma

$$\begin{aligned} +H^m R_l^m &= \left[\frac{q}{m+1} + a(m+1) \coth[a(r-r_e)] - \frac{d}{dr} \right] R_l^m \\ &= [\lambda - L(m+1)]^{1/2} R_l^{m+1}, \end{aligned} \quad (4.56)$$

e

$$\begin{aligned}
-H^m R_l^m &= \left[\frac{q}{m} + am \coth[a(r - r_e)] + \frac{d}{dr} \right] R_l^m \\
&= [\lambda - L(m)]^{1/2} R_l^{m-1}.
\end{aligned} \tag{4.57}$$

De posse das expressões (4.56) e (4.57), juntamente com (4.53) para a função $L(m)$, com $a = 1/2d$ e $q = B/4d$, podemos construir as seguintes expressões

$$\begin{aligned}
+H^m R_l^m &= (\lambda - L(m+1))^{1/2} R_l^{m+1} = \left[\frac{\hbar^2}{8\mu d^2} W + a^2(m+1)^2 + \frac{q^2}{(m+1)^2} \right]^{1/2} R_l^{m+1} \\
&= \left[\frac{\hbar^2}{8\mu d^2} W + \frac{(m+1)^2}{4d^2} + \frac{B^2}{16d^2(m+1)^2} \right]^{1/2} R_l^{m+1} \\
&= \left[\frac{(d\hbar)^2}{8\mu} W + \frac{(m+1)^2}{4} + \frac{B^2}{16(m+1)^2} \right]^{1/2} R_l^{m+1} \\
&= h_+ R_l^{m+1},
\end{aligned} \tag{4.58}$$

e

$$\begin{aligned}
-H^m R_l^m &= (\lambda - L(m))^{1/2} R_l^{m-1} = \left[\frac{\hbar^2}{8\mu d^2} W + (am)^2 + \frac{q^2}{m^2} \right]^{1/2} R_l^{m-1} \\
&= \left[\frac{\hbar^2}{8\mu d^2} W + \frac{m^2}{4d^2} + \frac{B^2}{(4dm)^2} \right]^{1/2} R_l^{m-1} \\
&= \left[\frac{(d\hbar)^2}{8\mu} W + \frac{m^2}{4} + \frac{B^2}{(4m)^2} \right]^{1/2} R_l^{m-1} \\
&= h_- R_l^{m-1},
\end{aligned} \tag{4.59}$$

onde

$$h_+ = \left[\frac{(d\hbar)^2}{8\mu} W + \frac{(m+1)^2}{4} + \frac{B^2}{16(m+1)^2} \right]^{1/2} \tag{4.60}$$

e

$$h_- = \left[\frac{(d\hbar)^2}{8\mu} W + \frac{m^2}{4} + \frac{B^2}{(4m)^2} \right]^{1/2} \tag{4.61}$$

são os autovalores para os operadores de levantamento e abaixamento. A constante d^2 foi absorvida nas funções de onda radial $R_l^{m+1}(r)$ e $R_l^{m-1}(r)$ como uma constante de normalização. As expressões (4.58) e (4.59) determinam claramente a forma de atuação dos

operadores ${}^+H^m$ e ${}^-H^m$ sobre a função radial $R_l^m(r)$, bem como demonstram que são operadores de levantamento e abaixamento, respectivamente.

Para encontrar o autovalor do operador ${}^3H^m$, devemos calcular o comutador (4.15), juntamente com a expressão para a função $L(m)$ em (4.53), ou seja,

$$\begin{aligned} [{}^+H^m, {}^-H^m] R_l^m &= \left[-a^2(m+1)^2 - \frac{q^2}{(m+1)^2} + a^2m^2 + \frac{q^2}{m^2} \right] R_l^m \\ &= (2m+1) \left[\frac{q^2}{m^2(m+1)^2} - a^2 \right] R_l^m = m' R_l^m. \end{aligned}$$

com

$$m' = \frac{(2m+1)}{2} \left[\frac{q^2}{m^2(m+1)^2} - a^2 \right].$$

Logo

$$[{}^+H^m, {}^-H^m] R_l^m = 2 \left({}^3H^m R_l^m \right) = 2m' R_l^m. \quad (4.62)$$

Após a definição dos operadores ${}^-H^m$, ${}^+H^m$ e ${}^3H^m$, a construção da álgebra de Lie de $SO(3)$ segue de acordo com a construção tradicional e não iremos repetir todo o processo.

4.5 Rosen - Morse

No capítulo 2 demonstramos que a equação de Schrödinger radial com a função potencial de Rosen - Morse, após a aproximação generalizada para o termo centrífugo, é dada por

$$\frac{d^2R}{dz^2} + \left(\frac{\hbar^2}{2\mu d^2} W - V_{ef} \right) R = 0, \quad (4.63)$$

sendo

$$\frac{\hbar^2}{2\mu d^2} W = -E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{c_2}{2} + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right) \quad (4.64)$$

a energia renormalizada e

$$V_{ef} = \beta \tanh z - \gamma \operatorname{sech}^2 z, \quad (4.65)$$

o potencial efetivo com β e γ sendo as constantes renormalizadas dada em (2.129).

De acordo com Infeld e Hull empregamos o método de fatorização do tipo E, substituindo os seguintes valores para as constantes $a = ia$, $x = r$, e $p = -r_e + i\pi/2a$ na função $r(x, m)$ em (3.48), de forma a termos

$$\begin{aligned} r(x, m) &= -2aiq \cot \left[ai \left(r - r_e + \frac{i\pi}{2a} \right) \right] - i^2 a^2 m(m+1) \csc^2 \left[ai \left(r - r_e - \frac{i\pi}{2a} \right) \right] \\ &= a^2 m(m+1) \operatorname{sech}^2[a(r - r_e)] - 2aq \tanh[a(r - r_e)]. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Para obtermos a expressão acima fizemos uso das relações

$$\begin{aligned} \cot \left[ai \left(r - r_e + \frac{i\pi}{2a} \right) \right] &= \frac{e^{[a(r-r_e+\frac{i\pi}{2a})]} + e^{[-a(r-r_e+\frac{i\pi}{2a})]}}{i \left(e^{[a(r-r_e+\frac{i\pi}{2a})]} - e^{[-a(r-r_e+\frac{i\pi}{2a})]} \right)} = \frac{i \left[e^{a(r-r_e)} - e^{-a(r-r_e)} \right]}{i^2 \left[e^{a(r-r_e)} + e^{-a(r-r_e)} \right]} \\ &= -i \tanh[a(r - r_e)] \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \csc \left[ai \left(r - r_e + \frac{i\pi}{2a} \right) \right] &= \frac{2}{i} \left(e^{[ai(r-r_e+\frac{i\pi}{2a})]} - e^{-[ai(r-r_e+\frac{i\pi}{2a})]} \right)^{-1} \\ &= \frac{2}{i^2 \{ e^{a(r-r_e)} + e^{-a(r-r_e)} \}} = -\operatorname{sech}[a(r - r_e)]. \end{aligned}$$

Comparando a expressão para $r(x, m)$ em (4.66) com o potencial efetivo (4.65), percebemos que devemos impor algumas condições à respeito das constantes renormalizadas do potencial efetivo (4.65), e das constantes que fazem parte do MF:

$$\beta = \frac{2q}{a} \quad \text{e} \quad \gamma = m(m+1), \quad (4.67)$$

pois, a fatorização apenas será possível por meio destas condições.

A função $k(x, m)$ em (3.48), com as constantes expressas anteriormente é dada por

$$\begin{aligned} k(x, m) &= \frac{q}{m} + iam \cot \left[ai \left(r - r_e + \frac{i\pi}{2a} \right) \right] = -i^2 am \tanh[a(r - r_e)] + \frac{q}{m} \\ &= am \tanh[a(r - r_e)] + \frac{q}{m}. \end{aligned} \quad (4.68)$$

A função $L(m)$, em (3.48),

$$L(m) = (ai)^2 m^2 - \frac{q^2}{m^2} = -(am)^2 - \frac{q^2}{m^2}, \quad \text{com} \quad \lambda = \frac{\hbar^2}{2\mu d^2} W. \quad (4.69)$$

Esta expressão nos indica que estamos tratando com um caso de fatorização de *Classe II*, pois a função $L(m)$ está decrementando por valores de m . Assim, de acordo com o *Teorema*

IV, os únicos valores permitidos para o espectro de energia são dados por

$$\lambda = L(l) = -a^2 l^2 - \frac{q^2}{l^2} = -a^2(m-n)^2 - \frac{q^2}{(m-n)^2}, \quad \text{com } l = m-n. \quad (4.70)$$

Para obtermos a mesma expressão para o espectro de energia encontrados no capítulo 2, devemos restringir os valores para m através da seguinte condição

$$\gamma = m(m+1) \quad \text{ou} \quad m^2 + m - \gamma = 0.$$

Resolvendo este polinômio do segundo grau, obtemos as raízes

$$m_1 = \frac{(4\gamma+1)^{1/2}}{2} - \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad m_2 = -\frac{(4\gamma+1)^{1/2}}{2} - \frac{1}{2}.$$

Apenas o valor da primeira raiz m_1 irá fornecer o espectro de energia idêntico à expressão encontrada previamente, sendo a outra raiz m_2 descartada. Assim, usando

$$(m-n)^2 = \left[\frac{(4\gamma+1)^{1/2}}{2} - \frac{1}{2} - n \right]^2 = \left[\left(\gamma + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2.$$

e o fato que $q = a\beta/2$, em (4.70), obtemos

$$\begin{aligned} \lambda &= -a^2(m-n)^2 - \frac{q^2}{(m-n)^2} \\ &= -a^2 \left[\left(\gamma + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 - \frac{a^2\beta^2}{4} \left[\left(\gamma + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^{-2} \\ &= -a^2 \left[\left(\gamma + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 - \frac{a^2\beta^2}{[(4\gamma+1)^{1/2} - 2n - 1]^2}. \end{aligned}$$

Usando o valor de $a = d^2$ e o valor de λ em (4.69), temos que:

$$\begin{aligned} \lambda &= -d^2 \left[\left(\gamma + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 - \frac{d^2\beta^2}{[(4\gamma+1)^{1/2} - 2n - 1]^2} \\ -\frac{2E\mu d^2}{\hbar^2} &= \frac{l(l+1)d^2}{r_e^2} \left(c_0 - \alpha c_1 + \frac{c_2}{2} + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right) + d^2 \left[\left(\gamma + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 \\ &\quad + \frac{d^2\beta^2}{[(4\gamma+1)^{1/2} - 2n - 1]^2}, \end{aligned}$$

ou seja, os níveis de energia são dados por

$$\begin{aligned} -E_n &= \frac{(\beta\hbar)^2}{2\mu d^2 [(4\gamma+1)^{1/2} - 2n - 1]^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu d^2} \left[\left(\gamma + \frac{1}{4} \right)^{1/2} - n - \frac{1}{2} \right]^2 \\ &\quad + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(1 + \frac{3d^2}{r_e^2} \right), \end{aligned}$$

corroborando mais uma vez os resultados do capítulo 2.

A ação dos operadores de levantamento e abaixamento na função de onda radial $R(r)$ é dada por

$$\begin{aligned} {}^+H^m R_l^m &= \left[a(m+1) \tanh[a(r-r_e)] + \frac{q}{m+1} - \frac{d}{dr} \right] R_l^m \\ &= [\lambda - L(m+1)]^{1/2} R_l^{m+1}(r), \end{aligned} \quad (4.71)$$

e

$$\begin{aligned} {}^-H^m R_l^m &= \left[am \tanh[a(r-r_e)] + \frac{q}{m} + \frac{d}{dr} \right] R_l^m \\ &= [\lambda - L(m)]^{1/2} R_l^{m-1}(r). \end{aligned} \quad (4.72)$$

Usando as expressões (4.71) e (4.72), juntamente com (4.69) para a função $L(m)$, com $a = d$ e $q = d\beta/2$, podemos construir as seguintes expressões

$$\begin{aligned} {}^+H^m R_l^m &= (\lambda - L(m+1))^{1/2} R_l^{m+1} \\ &= \left[\frac{\hbar^2}{2\mu d^2} W + a^2(m+1-n)^2 + \frac{q^2}{(m+1-n)^2} \right]^{1/2} R_l^{m+1} \\ &= \left[\frac{(d\hbar)^2}{2\mu} W + (m+1-n)^2 + \frac{\beta^2}{4(m+1-n)^2} \right]^{1/2} R_l^{m+1} \\ &= h_+ R_l^{m+1}(r), \end{aligned} \quad (4.73)$$

e

$$\begin{aligned} {}^-H^m R_l^m &= (\lambda - L(m))^{1/2} R_l^{m-1} = \left[\frac{\hbar^2}{2\mu d^2} W + a^2(m-n)^2 + \frac{q^2}{(m-n)^2} \right]^{1/2} R_l^{m-1} \\ &= \left[\frac{(d\hbar)^2}{2\mu} W + (m-n)^2 + \frac{\beta^2}{4(m-n)^2} \right]^{1/2} R_l^{m-1} \\ &= h_- R_l^{m-1}, \end{aligned} \quad (4.74)$$

com

$$h_+ = \left[\frac{(d\hbar)^2}{2\mu} W + (m+1-n)^2 + \frac{\beta^2}{4(m+1-n)^2} \right]^{1/2} \quad (4.75)$$

e

$$h_- = \left[\frac{(d\hbar)^2}{2\mu} W + (m-n)^2 + \frac{\beta^2}{4(m-n)^2} \right]^{1/2}. \quad (4.76)$$

Através de (4.15) e usando a expressão (4.69) para a função $L(m)$, podemos obter o autovalor do operador ${}^3H^m$, da seguinte forma

$$\begin{aligned} [{}^+H^m, {}^-H^m] R_l^m &= \left[-a^2(m+1)^2 - \frac{q^2}{(m+1)^2} + a^2m^2 + \frac{q^2}{m^2} \right] R_l^m \\ &= m' R_l^m. \end{aligned}$$

com

$$m' = \frac{(2m+1)}{2} \left[\frac{q^2}{m^2(m+1)^2} - a^2 \right].$$

Logo

$$[{}^+H^m, {}^-H^m] R_l^m = 2 \left({}^3H^m R_l^m \right) = 2m' R_l^m.$$

Após a definição dos operadores ${}^-H^m$, ${}^+H^m$ e ${}^3H^m$, a construção da álgebra de Lie de $SO(3)$, segue de acordo com a construção tradicional e não iremos repetir todo o processo.

Neste capítulo reafirmamos os resultados obtidos por meio do método de resolução estabelecido nesta tese. Além disso, desenvolvemos uma estrutura algébrica em termos de operadores autoadjuntos de levantamento e abaixamento.

Nestes resultados estão disponíveis todas as ferramentas para o cálculo de diversas quantidades físicas como, por exemplo, elementos de matriz e probabilidades de transição. Infeld e Hull [54] demonstraram como o cálculo de certas integrais que representam os elementos de matriz para estudar a estrutura fina no caso do átomo de hidrogênio, e a probabilidade de transição entre dois estados vibracionais para uma molécula diatômica no caso do potencial de Morse, são calculadas com extrema elegância, precisão e rapidez.

Capítulo 5

Outras soluções para a equação de Schrödinger radial

Neste capítulo determinamos a solução da equação (1.1) com algumas funções potencial para as quais, a equação de Schrödinger radial não possu, a *priori*, a forma exigida (3.1) para a aplicação do MF, porém possuem fundamental importância para algumas áreas da física.

5.1 Woods - Saxon

Roger D. Woods e David S. Saxon [91], buscando estudar a seção de choque para o espalhamento elástico de prótons em um núcleo pesado, propôs a seguinte função potencial

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp[(r - R_0)/a_0]}, \quad (5.1)$$

sendo V_0 a profundidade do potencial, R_0 a medida do raio nuclear e a_0 determina a difusidade da superfície nuclear. Neste caso, a equação de Schrödinger radial (1.1), com o potencial (5.1), é dada por

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \frac{V_0}{1 + \exp[(r - R_0)/a_0]} \right] R - \frac{l(l+1)}{R_0^2} \left(\frac{R_0}{r} \right)^2 R = 0. \quad (5.2)$$

Realizando a mudança de variáveis $u = a(r - R_0)$, sendo $R'(r) = aR'(u)$ e $R''(r) = a^2R''(u)$,

a equação (5.2) toma a forma

$$\frac{d^2 R}{du^2} + \frac{2\mu}{(a\hbar)^2} \left(E + \frac{V_0}{1+e^u} \right) R - \frac{l(l+1)}{(aR_0)^2} \left(\frac{R_0}{r} \right)^2 R = 0. \quad (5.3)$$

De acordo com o método proposto nesta tese, devemos escolher funções apropriadas. Portanto, considere as funções $y = \tanh[(r - R_0)/2a_0] = \tanh u/2$ e $f^{-1}(y) = \tanh^{-1} y$ na equação (2.16), com $m = 2$, $a = 1/a_0$, e $r_0 = R_0$. Então

$$\left(\frac{R_0}{r} \right)^2 = \left(1 + \frac{2a_0 \tanh^{-1} y}{R_0} \right)^{-2},$$

Os coeficientes (2.17) são dados por:

$$\begin{aligned} c_0 &= \left[\frac{(R_0/2a_0) + \tanh^{-1} \alpha}{(R_0/2a_0)} \right]^{-2}, \quad c_1 = -\frac{2(R_0/2a_0)^2 [(R_0/2a_0) + \tanh^{-1} \alpha]^{-3}}{(1 - \alpha^2)}, \quad e \\ c_2 &= -\frac{4\alpha(R_0/2a_0)^2 [(R_0/2a_0) + \tanh^{-1} \alpha]^{-3}}{(1 - \alpha^2)^2} + \frac{6(R_0/2a_0)^2 [(R_0/2a_0) + \tanh^{-1} \alpha]^{-4}}{(1 - \alpha^2)^2}, \end{aligned}$$

e a aproximação (2.18) é

$$\begin{aligned} \left(\frac{R_0}{r} \right)^2 &\approx c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + (c_1 - \alpha c_2) \tanh \frac{u}{2} + \frac{c_2}{2} \tanh^2 \frac{u}{2} \\ &\approx c_0 + c_1 + c_2 - (c_1 + c_2)\alpha + \frac{\alpha^2}{2} c_2 - \frac{2(c_1 + c_2 - \alpha c_2)}{1 + e^u} + \frac{2c_2}{(1 + e^u)^2}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Substituindo (5.4) em (5.3), obtemos a equação

$$\frac{d^2 R}{du^2} + \left[-W + \frac{\tilde{V}_0}{(1+e^u)} + \frac{\tilde{V}_1}{(1+e^u)^2} \right] R = 0, \quad (5.5)$$

sendo

$$-W = \frac{2\mu}{(a\hbar)^2} E - \frac{l(l+1)}{(aR_0)^2} \left[c_0 + c_1 + c_2 - (c_1 + c_2)\alpha + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right], \quad (5.6)$$

a energia renormalizada e o potencial efetivo

$$V_{ef} = -\frac{\tilde{V}_0}{(1+e^u)} - \frac{\tilde{V}_1}{(1+e^u)^2},$$

com

$$\tilde{V}_0 = \left[\frac{2\mu V_0}{(a\hbar)^2} + \frac{2l(l+1)(c_1 + c_2 - \alpha c_2)}{(aR_0)^2} \right] \quad e \quad \tilde{V}_1 = -\frac{2l(l+1)\alpha c_2}{(aR_0)^2}$$

sendo os coeficientes renormalizados do potencial efetivo.

Para resolver a equação (5.5) iremos realizar a seguinte mudança de variáveis: $z = (1 + e^u)^{-1}$ com $e^u = z^{-1} - 1 = (1 - z)/z$. Então, usando a regra da cadeia

$$\frac{d^2 R}{du^2} = \frac{d^2 R}{dz^2} [-z(1-z)]^2 + \frac{dR}{dz} [z(1-z)(1-2z)], \quad (5.7)$$

obtemos a seguinte equação

$$z(1-z)\frac{d^2 R}{dz^2} + (1-2z)\frac{dR}{dz} + \left[\frac{-W + \tilde{V}_0 z + \tilde{V}_1 z^2}{z(1-z)} \right] R = 0. \quad (5.8)$$

Estamos procurando soluções para a equação (5.8) sob a forma

$$R(z) = (1-z)^\nu z^\beta F(z) \quad (5.9)$$

então, chegamos de fato a seguinte expressão

$$z(1-z)\frac{d^2 F}{dz^2} + [(2\beta+1) - z(2\beta+2\nu+2)]\frac{dF}{dz} + \left[\beta(\beta-1)\frac{(1-z)}{z} - 2\beta\nu \right. \\ \left. + \nu(\nu-1)\frac{z}{(1-z)} - \nu\frac{(1-2z)}{1-z} - \beta\frac{(1-2z)}{z} \right] F + \left[\frac{-\sigma^2 + \gamma^2 z + \epsilon^2 z^2}{z(1-z)} \right] F = 0.$$

Se escolhermos $\beta = \sigma$ e $\nu^2 = \sigma^2 - \gamma^2 - \epsilon^2 = W - \tilde{V}_0 - \tilde{V}_1$ e realizarmos algumas manipulações algébricas, a equação acima se torna uma equação hipergeométrica da forma

$$z(1-z)F''(z) + [(2\beta+1) - z(2\beta+2\nu+2)]F'(z) - (\beta+\nu)(\beta+\nu+1)F = 0, \quad (5.10)$$

tendo como solução a função hipergeométrica $F(z) = {}_2F_1(\zeta, \eta, \kappa, z)$, dada por

$$F(z) = 1 + \frac{\zeta \cdot \eta}{1 \cdot \kappa} z + \frac{\zeta(\zeta+1)\eta(\eta+1)}{1 \cdot 2 \cdot \kappa(\kappa+1)} z^2 + \dots, \quad (5.11)$$

com parâmetros:

$$\zeta = \beta + \nu, \quad \eta = \beta + \nu + 1, \quad \kappa = 2\beta + 1.$$

Os valores de estados ligados para a energia são encontrados usando o parâmetro $\zeta = \beta + \nu$ e o valor de $\nu^2 = \sigma^2 - \gamma^2 - \epsilon^2 = W - \tilde{V}_0 - \tilde{V}_1$. Logo

$$-E_n = \frac{(a\hbar)^2}{2\mu} \left\{ \frac{n}{2} + \frac{1}{2n} \left[\frac{2\mu V_0}{(a\hbar)^2} + \frac{2l(l+1)(c_1 + c_2 - 2\alpha c_2)}{(aR_0)^2} \right] \right\}^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R_0^2} [c_0 + c_1 \\ + c_2 - (c_1 + c_2)\alpha + \frac{\alpha^2}{2} c_2]. \quad (5.12)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$. A função de onda radial é dada por

$$R(z) = \sum_{n=0}^{\infty} N_n z^\beta (1-z)^\nu {}_2F_1(-n, \beta + \nu + 1, 2\beta + 1, z), \quad (5.13)$$

com constante de normalização

$$N_n = \left[\frac{\Gamma(\eta - 1)\Gamma(\kappa + n - 1)\Gamma(\eta + n - 1)}{\Gamma(\eta + n - 1)\Gamma(\eta - \kappa + 1)(\Gamma(\kappa - 1))^2 n!} a \right]^{1/2}.$$

5.2 Woods - Saxon esférico

Uma análise mais elaborada de dados experimentais, têm fornecido a seguinte forma para o potencial real

$$V(r) = -V_0 f(r) + \left(\frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 C_0 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r) \mathbf{l.s}, \quad (5.14)$$

onde o segundo termo representa o acoplamento spin-órbita.

Definindo

$$f(r) = \frac{1}{1 + \exp[a(r - r_0)]},$$

então, a função potencial (5.14), se torna

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + e^u} - \varrho \left(\frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 \frac{C_0}{r} \frac{ae^u}{(1 + e^u)^2} \quad (5.15)$$

sendo

$$\varrho = \mathbf{l.s} = \begin{cases} l & \text{para } j = l + 1/2, \\ -l - 1 & \text{para } j = l - 1/2. \end{cases}$$

o termo de acoplamento spin-órbita. A equação (1.1) com a função potencial (5.15) possui a forma

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{du^2} + \frac{2\mu}{(a\hbar)^2} \left[E + \frac{V_0}{1 + e^u} + \varrho \left(\frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 \frac{C_0}{r} \frac{ae^u}{(1 + e^u)^2} \right] R - \frac{l(l+1)}{(aR_0)^2} \\ \times \left(\frac{R_0}{r} \right)^2 R = 0. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Considerando as seguintes funções $y = \exp[-a(r - R_0)] = e^{-u}$ e $f^{-1}(y) = \ln y$, com $m = -1$ e $a = 1/a_0$ na equação (2.16), obtemos a identidade

$$\left(\frac{R_0}{r} \right) = \left(1 - \frac{\ln y}{aR_0} \right)^{-1},$$

e os coeficientes (2.18), com $n = 0, 1, 2$, são

$$\begin{aligned}\tilde{c}_0 &= \left(1 - \frac{a_0 \ln \tilde{\alpha}}{R_0}\right)^{-1}, \quad \tilde{c}_1 = \frac{2a_0}{\tilde{\alpha}R_0} \left(1 - \frac{a_0 \ln \tilde{\alpha}}{R_0}\right)^{-3}, \quad e \\ \tilde{c}_2 &= \frac{6a_0^2}{(\tilde{\alpha}R_0)^2} \left(1 - \frac{a_0 \ln \tilde{\alpha}}{R_0}\right)^{-4} - \frac{2a_0}{\tilde{\alpha}^2 R_0} \left(1 - \frac{a_0 \ln \tilde{\alpha}}{R_0}\right)^{-3}.\end{aligned}$$

Portanto, a aproximação para o termo (R_0/r) tem a forma

$$\left(\frac{R_0}{r}\right) \approx \tilde{c}_0 - \tilde{\alpha}\tilde{c}_1 + \frac{\tilde{\alpha}^2}{2}\tilde{c}_2 + (\tilde{c}_1 - \tilde{\alpha}\tilde{c}_2)e^{-u} \quad (5.17)$$

sendo que os termos em e^{-2u} foram descartados como uma forma de obter um potencial efetivo solúvel V_{ef} , e também como uma forma de não destruir a estrutura da função potencial (5.15), com termo extra que não pertence ao potencial original (5.15).

Assim, substituindo as aproximações (5.4) e (5.17) na equação de Schrödinger (5.16), obtemos

$$\frac{d^2 R}{du^2} + \left[-W + \frac{\tilde{V}_0}{(1+e^u)} + \frac{(\tilde{V}_1 + \vartheta e^u)}{(1+e^u)^2}\right] R = 0 \quad (5.18)$$

sendo

$$-W = \frac{2\mu}{(a\hbar)^2} E - \frac{l(l+1)}{(aR_0)^2} \left[c_0 + c_1 + c_2 - (c_1 + c_2)\alpha + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right] \quad (5.19)$$

a energia renormalizada e o potencial efetivo

$$V_{ef} = -\frac{\tilde{V}_0}{(1+e^u)} - \frac{(\tilde{V}_1 + \vartheta e^u)}{(1+e^u)^2}, \quad (5.20)$$

com

$$\begin{aligned}\tilde{V}_0 &= \frac{2\mu V_0}{(a\hbar)^2} + \frac{2l(l+1)(c_1 + c_2 - \alpha c_2)}{(aR_0)^2}, \\ \tilde{V}_1 &= \frac{2\mu \varrho}{a} \left(\frac{1}{m_\pi c}\right)^2 \left(\frac{C_0}{R_0}\right) (\tilde{c}_1 - \tilde{\alpha}\tilde{c}_2) - \frac{2l(l+1)c_2}{(aR_0)^2} \\ \vartheta &= \frac{2\mu \varrho}{a} \left(\frac{1}{m_\pi c}\right)^2 \left(\frac{C_0}{R_0}\right) \left(\tilde{c}_0 - \tilde{\alpha}\tilde{c}_1 + \frac{\tilde{\alpha}^2}{2}\tilde{c}_2\right)\end{aligned} \quad (5.21)$$

os coeficientes renormalizados do potencial efetivo (5.20).

Para resolver a equação (5.18), realizamos a mesma mudança de variáveis de antes $z = (1 + e^u)^{-1}$ e usando a regra da cadeia (5.7), o que resulta na seguinte equação

$$z(1-z)\frac{d^2 R}{dz^2} + (1-2z)\frac{dR}{dz} + \left[\frac{-W + (\tilde{V}_0 + \vartheta)z + (\tilde{V}_1 - \vartheta)z^2}{z(1-z)}\right] R = 0.$$

Introduzindo a função $F(z)$ através de (5.9), chegamos a equação

$$z(1-z)\frac{d^2F}{dz^2} + [(2\beta+1) - z(2\beta+2\nu+2)]\frac{dF}{dz} + \left[\beta(\beta-1)\frac{(1-z)}{z} - 2\beta\nu + \nu(\nu-1)\frac{z}{(1-z)} - \nu\frac{(1-2z)}{1-z} - \beta\frac{(1-2z)}{z} \right] F + \left[\frac{-\sigma^2 + \gamma^2 z + \epsilon^2 z^2}{z(1-z)} \right] F = 0.$$

Se escolhermos $\beta = \sigma$ e $\nu^2 = \sigma^2 - \gamma^2 - \epsilon^2 = W - (\tilde{V}_0 + \vartheta) - (\tilde{V}_1 - \vartheta)$ na equação acima, obtemos uma equação muito semelhante a (5.10), tendo como solução a função hipergeométrica (5.11), com os parâmetros:

$$\zeta = \beta + \nu, \quad \eta = \beta + \nu + 1, \quad \kappa = 2\beta + 1.$$

O espectro de energia é determinado através do parâmetro $\zeta = \beta + \nu$, juntamente com o valor de $\nu^2 = \sigma^2 - \gamma^2 - \epsilon^2 = W - (\tilde{V}_0 + \vartheta) - (\tilde{V}_1 - \vartheta)$. Então

$$-E_n = \frac{(a\hbar)^2}{2\mu} \left(\frac{n}{2} + \frac{\tilde{V}_0 + \tilde{V}_1}{2n} \right)^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R_0^2} \left[c_0 + c_1 + c_2 - (c_1 + c_2)\alpha + \frac{\alpha^2}{2}c_2 \right],$$

com as constantes renormalizadas \tilde{V}_0 e \tilde{V}_1 dadas em (5.21) e $n = 1, 2, 3, \dots$. A função de onda radial, solução da equação (5.16), terá a forma (5.13). Alguns trabalhos que merecem destaque à respeito do potencial de Woods e Saxon podem ser encontrados em [92, 93, 94, 95, 96, 97, 98].

5.3 Hulthén

O potencial proposto por L. Hulthén [4] é dado por

$$V(r) = -\frac{\delta \exp[-\delta(r-r_0)]}{(1 - \exp[-\delta(r-r_0)])}, \quad (5.22)$$

onde as constantes físicas do potencial possuem o mesmo significado explicitado ao longo da tese. Assim, a equação (1.1) com o potencial (5.22) é dada por

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \frac{\delta \exp[-\delta(r-r_0)]}{(1 - \exp[-\delta(r-r_0)])} \right] R - \frac{l(l+1)}{r_0^2} \left(\frac{r_0}{r} \right)^2 R = 0. \quad (5.23)$$

Usando a substituição $u = -\delta(r-r_0)$, com $R'(r) = -\delta R'(u)$ e $R''(r) = \delta^2 R''(u)$, obtemos

$$\frac{d^2R}{du^2} + \frac{2\mu}{(\delta\hbar)^2} \left[E + \frac{\delta e^u}{(1 - e^u)} \right] R - \frac{l(l+1)}{(\delta r_0)^2} \left(\frac{r_0}{r} \right)^2 R = 0. \quad (5.24)$$

Realizando uma aproximação para o termo centrífugo, usando as funções; $y = \coth[a(r - r_0)]$ e $f^{-1}(y) = \coth^{-1} y$, com $a = \delta/2$, em (2.16), obtemos a identidade

$$\left(\frac{r_0}{r}\right)^2 = \left(1 + \frac{2 \coth^{-1} y}{\delta r_0}\right)^{-2}.$$

Os coeficientes (2.17) neste caso são dados, por

$$\begin{aligned} c_0 &= \left(\frac{\delta r_0 + 2 \coth^{-1} \alpha}{\delta r_0}\right)^{-2}, \quad c_1 = -\frac{4(\delta r_0 + 2 \coth^{-1} \alpha)^{-3}}{(\delta r_0)^{-3}(1 - \alpha^2)}, \quad e \\ c_2 &= \frac{24(\delta r_0 + 2 \coth^{-1} \alpha)^{-4}}{(\delta r_0)^{-2}(1 - \alpha^2)^2} - \frac{\delta \alpha (\delta r_0 + 2 \coth^{-1} \alpha)^{-3}}{(\delta r_0)^{-2}(1 - \alpha^2)}, \end{aligned}$$

e a aproximação (2.18) possui a forma

$$\begin{aligned} \left(\frac{r_0}{r}\right)^2 &\approx c_0 - \alpha c_1 + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + (c_1 - \alpha c_2) \coth\left(-\frac{u}{2}\right) + \frac{c_2}{2} \coth^2\left(-\frac{u}{2}\right) \\ &\approx c_0 + c_1 + \frac{c_2}{2} - (c_1 + c_2)\alpha + \frac{\alpha^2}{2} c_2 + \frac{2(c_1 + c_2 - \alpha c_2)e^u}{(1 - e^u)} + \frac{(2c_2)e^{2u}}{(1 - e^u)^2}, \end{aligned} \quad (5.25)$$

sendo α um número no intervalo $|\alpha| > 1$, domínio da função inversa da cotangente hiperbólica.

Substituindo a aproximação (5.25) na equação (5.24), temos que

$$\frac{d^2 R}{du^2} + \left[-W + \frac{V_1 e^u}{(1 - e^u)} + \frac{V_2 e^{2u}}{(1 - e^u)^2}\right] R = 0, \quad (5.26)$$

sendo a energia renormalizada dada por

$$-W = \frac{2\mu}{(\delta\hbar)^2} E - \frac{l(l+1)}{(\delta r_0)^2} \left[c_0 + c_1 + \frac{1}{2} c_2 - (c_1 + c_2)\alpha + \frac{\alpha^2}{2} c_2 \right],$$

e o potencial efetivo

$$V_{ef} = -\frac{V_1 e^{-u}}{(1 - e^{-u})} - \frac{V_2 e^{-2u}}{(1 - e^{-u})^2} \quad (5.27)$$

com

$$V_1 = \frac{2\mu}{\delta\hbar^2} - \frac{2l(l+1)(c_1 + c_2 - \alpha c_2)}{(\delta r_0)^2} \quad e \quad V_2 = -\frac{2l(l+1)c_2}{(\delta r_0)^2}$$

os coeficientes renormalizados.

Para resolver a equação (5.26) iremos realizar a seguinte mudança de variáveis, $z = (1 - e^u)^{-1}$ mais a regra da cadeia

$$\frac{d^2 R}{du^2} = \frac{d^2 R}{dz^2} [z(z-1)]^2 + \frac{dR}{dz} [z(z-1)(1-2z)].$$

Logo, a equação (5.26), torna-se

$$z(1-z) \frac{d^2 R}{dz^2} + (1-2z) \frac{dR}{dz} + \left[\frac{-W - V_1 - V_2 + (V_1 - 2V_2)z + V_2 z^2}{z(1-z)} \right] R = 0.$$

Introduzindo a função $F(z)$ na equação acima através de (5.9), obtemos

$$z(1-z) \frac{d^2 F}{dz^2} + [(2\beta + 1) - z(2\beta + 2\nu + 2)] \frac{dF}{dz} + \left[\beta(\beta - 1) \frac{(1-z)}{z} - 2\beta\nu \right. \\ \left. + \nu(\nu - 1) \frac{z}{(1-z)} - \nu \frac{(1-2z)}{1-z} - \beta \frac{(1-2z)}{z} \right] F + \left[\frac{-\sigma^2 + \gamma^2 z + \epsilon^2 z^2}{z(1-z)} \right] F = 0.$$

Escolhendo $\beta = \sigma = (W + V_1 + V_2)^{1/2}$ e $\nu^2 = \sigma^2 - \gamma^2 - \epsilon^2$ com $\gamma^2 = V_1 - 2V_2$, e $\epsilon^2 = V_2$, iremos obter uma equação igual a (5.10), cuja solução é a função hipergeométrica (5.11) com parâmetros:

$$\zeta = \beta + \nu, \quad \eta = \beta + \nu + 1, \quad \kappa = 2\beta + 1,$$

tendo como espectro de energia

$$-E_n = \frac{(\delta\hbar)^2}{2\mu} \left(\frac{n}{2} + \frac{\gamma^2 + \epsilon^2}{2n} \right)^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2} \left[c_0 + c_1 + \frac{1}{2}c_2 - (c_1 + c_2)\alpha + \frac{\alpha^2}{2}c_2 \right] \\ - \frac{(\delta\hbar)^2}{2\mu} (V_1 + V_2),$$

com o número quântico principal assumindo os valores $n = 1, 2, 3, \dots$

5.4 Eckart

C. Eckart [5] propôs a seguinte função potencial

$$V(r) = \frac{Ae^{2\pi(r-r_0)/d}}{1 + e^{2\pi(r-r_0)/d}} + \frac{Be^{2\pi(r-r_0)/d}}{(1 + e^{2\pi(r-r_0)/d})^2}. \quad (5.28)$$

A equação (1.1) com a função potencial de Eckart será dada por

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{Ae^{2\pi(r-r_0)/d}}{1 + e^{2\pi(r-r_0)/d}} - \frac{Be^{2\pi(r-r_0)/d}}{(1 + e^{2\pi(r-r_0)/d})^2} \right] R - \frac{l(l+1)}{r_\epsilon^2} \left(\frac{r_0}{r} \right)^2 R = 0. \quad (5.29)$$

De acordo com o método proposto, considere as funções $y = \tanh z = \tanh[\pi(r - r_0)/d]$ e $f^{-1}(y) = \tanh^{-1} y$ em (2.16), com $m = 2$ e $a = 2\pi/d$. Logo

$$\left(\frac{r_0}{r}\right)^2 = \left(1 + \frac{d \tanh^{-1} y}{\pi r_0}\right)^{-2}.$$

Através de (2.17) obtemos os coeficientes

$$\begin{aligned} c_0 &= \left(\frac{\pi r_0 + d \tanh^{-1} \alpha}{\pi r_0}\right)^{-2}, \quad c_1 = -\frac{2d(\pi r_0 + d \tanh^{-1} y)^{-3}}{(\pi r_0)^{-2}(1 - y^2)}, \quad e \\ c_2 &= -\frac{4d\alpha(\pi r_0 + d \tanh^{-1} \alpha)^{-3}}{(\pi r_0)^{-2}(1 - \alpha^2)^2} + \frac{6d(\pi r_0 + d \tanh^{-1} \alpha)^{-4}}{(\pi r_0)^{-3}(1 - \alpha^2)^2} \end{aligned}$$

com a aproximação (2.18) dada por

$$\left(\frac{r_0}{r}\right)^2 \approx c_0 - c_1 + \frac{c_2}{2} + \frac{\alpha^2}{2}c_2 - (c_1 - c_2)\alpha + \frac{2(c_1 - \alpha c_2)e^u}{1 + e^u} - \frac{2c_2 e^u}{(1 + e^u)^2}, \quad (5.30)$$

sendo que foram usadas as identidades

$$\tanh\left[\frac{\pi}{d}(r - r_0)\right] = \frac{2e^{2\pi(r-r_0)/d}}{1 + e^{2\pi(r-r_0)/d}} - 1 \quad \text{e} \quad \operatorname{sech}^2\left[\frac{\pi}{d}(r - r_0)\right] = \frac{4e^{2\pi(r-r_0)/d}}{(1 + e^{2\pi(r-r_0)/d})^2},$$

juntamente com a mudança de variáveis $u = 2\pi(r - r_0)/d$.

Substituindo (5.30) em (5.29), obtemos

$$R''(u) + \left[-W - \frac{\tilde{A}e^u}{1 + e^u} - \frac{\tilde{B}e^u}{(1 + e^u)^2}\right] R = 0 \quad (5.31)$$

sendo

$$-W = \frac{2\mu}{(a\hbar)^2}E - \frac{l(l+1)}{(ar_0)^2} \left[c_0 - \alpha c_1 + \frac{c_2}{2} + \frac{\alpha^2}{2}c_2 - (c_1 - \alpha c_2) \right] \quad (5.32)$$

a energia renormalizada e o potencial efetivo

$$V_{ef} = \frac{\tilde{A}e^u}{1 + e^u} + \frac{\tilde{B}e^u}{(1 + e^u)^2}$$

com

$$\tilde{A} = \left[\frac{2\mu}{(a\hbar)^2}A + \frac{2l(l+1)}{(ar_0)^2}(c_1 - \alpha c_2) \right] \quad \text{e} \quad \tilde{B} = \left[\frac{2\mu}{(a\hbar)^2}B - \frac{2l(l+1)c_2}{(ar_0)^2} \right],$$

os coeficientes renormalizados do potencial efetivo.

Para resolver a equação (5.31) iremos realizar a seguinte mudança de variáveis, $z = (1 + e^u)^{-1}$, e a regra da cadeia

$$\frac{d^2 R}{du^2} = \frac{d^2 R}{dz^2} [-z(1-z)]^2 + \frac{dR}{dz} [z(1-z)(1-2z)].$$

Logo, a equação (5.31) torna-se

$$z(1-z)\frac{d^2 R}{dz^2} + (1-2z)\frac{dR}{dz} + \left[\frac{-W - \tilde{A} + (\tilde{A} - \tilde{B})z + \tilde{B}z^2}{z(1-z)} \right] R = 0.$$

Estamos procurando soluções para a equação acima sob a forma (5.7). Assim

$$\begin{aligned} z(1-z)\frac{d^2 F}{dz^2} + [(2\beta+1) - z(2\beta+2\nu+2)]\frac{dF}{dz} + \left[\beta(\beta-1)\frac{(1-z)}{z} - 2\beta\nu \right. \\ \left. + \nu(\nu-1)\frac{z}{(1-z)} - \nu\frac{(1-2z)}{1-z} - \beta\frac{(1-2z)}{z} \right] F + \left[\frac{-\sigma^2 + \gamma^2 z + \epsilon^2 z^2}{z(1-z)} \right] F = 0. \end{aligned}$$

Usando o fato que se escolhermos $\beta = \sigma = (W + \tilde{A})^{1/2}$ e $\nu^2 = \sigma^2 - \gamma^2 - \epsilon^2 = (W + \tilde{A}) - (\tilde{A} - \tilde{B}) - \tilde{B} = W$, a equação acima se torna uma equação igual a (5.10), tendo como solução a função hipergeométrica (5.11) com parâmetros:

$$\zeta = \beta + \nu, \quad \eta = \beta + \nu + 1, \quad \kappa = 2\beta + 1.$$

O espectro de energia segue imediatamente como sendo dado por

$$\begin{aligned} -E_n = & \frac{(a\hbar)^2}{2\mu} \left\{ \frac{n}{2} + \frac{1}{2n} \left(\left[\frac{2\mu}{(a\hbar)^2} A + \frac{2l(l+1)}{(ar_0)^2} (c_1 - \alpha c_2) \right] \right) \right\}^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2} [c_0 + c_1 \\ & + c_2 - (c_1 + c_2)\alpha + \frac{\alpha^2}{2} c_2] - \left[A + \frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu r_0^2} (c_1 - \alpha c_2) \right] \end{aligned}$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$ e a função de onda radial possui a forma (5.16).

Convém notar que até o momento não conhecemos nenhum trabalho que trate a ESR com a função energia potencial de Eckart da forma que ele propôs na Ref. [5].

Capítulo 6

Conclusões e perspectivas

O problema da resolução de equações de onda (relativísticas e não - relativísticas), incluindo o termo centrífugo e sujeita a diversas funções potencial, é de fundamental importância para o estudo de diversos sistemas quânticos, pois quantidades físicas importantes como o espectro de energia e funções de onda são obtidas através da resolução da equação diferencial a ser estudada, quer seja, Schrödinger, Klein-Gordon ou Dirac. Desta forma, pesquisadores de diversas áreas tem demonstrado interesse no problema e suscitado o surgimento de novos métodos matemáticos para tratá-lo. Contudo, nenhum avanço realmente significativo havia surgido desde os trabalhos originais de Pekeris e Greene e Aldrich, no sentido de oferecer um método capaz de tratar equações de onda com uma função potencial $V(r)$, tendo uma estrutura matemática mais geral que tipo-exponencial e incluindo o termo centrífugo.

Nesta Tese propomos uma aproximação mais geral para o termo centrífugo, em termos de uma função f propriamente definida. A partir disso, estabelecemos um método de resolução para a equação de Schrödinger radial incluindo o termo centrífugo, submetida a uma função potencial $V(r)$.

O método demonstrou ser bastante poderoso e eficaz ao obter o espectro de energia para uma ampla classe de potenciais que possuem importância em algum campo da física, para valores arbitrários dos números quânticos n e l . Além disso, o método demonstrou ser extremamente versátil ao encontrar duas soluções para o mesmo potencial, no caso do

potencial de Pöschl - Teller, e a introdução da constante espectroscópica r_e diretamente na função potencial proposta por Rydberg.

O método estabelecido na Tese demonstrou possuir qualidades as quais consideramos que o tornem superior quando comparado com as aproximações que surgiram inspiradas nos trabalhos de Pekeris e de Greene e Aldrich. Em particular

1. A aproximação generalizada (2.17) possui um alto grau de controle e precisão, pois podemos usar termos para valores de n arbitrário, bastando eliminar os termos que não nos conduzem a um potencial efetivo da forma (2.21). Devido a liberdade que temos para a escolha do ponto de expansão α em (2.18), é possível torná-lo um fator de correção para o espectro de energia obtido.
2. O método é extremamente versátil, pois nos permite expandir o termo centrífugo em termos de qualquer função f propriamente definida.
3. O método nos conduz a funções de onda fisicamente aceitáveis, e proporciona obter a aproximação para o termo centrífugo matematicamente ideal, sendo desnecessário recorrer a métodos gráficos ou computacionais para obter tal aproximação.
4. O fato de interpretarmos a e r_0 como parâmetros ajustáveis, tendo dimensões de inverso do comprimento e comprimento, respectivamente, implica que a aproximação generalizada desenvolvida nesta Tese pode vir a ser usada em diversas áreas da ciência.

A aproximação generalizada desenvolvida nesta Tese demonstrou ser capaz de resolver a equação de Schrödinger radial com diferentes potenciais físicos $V(r)$, e adquiriu uma proporção que pode entrar em outros domínios. As perspectivas para o desenvolvimento e aplicação do método estabelecido aqui são diversas, dentre as quais destacamos

1. No âmbito da mecânica quântica não relativística, situações onde o termo centrífugo introduza complicações na solução do problema, a aproximação generalizada poderá vir a ser uma ferramenta útil.
2. Nos últimos anos, diversos métodos matemáticos tais como MIA, MQE, e NU têm surgido para resolver a equação de Schrödinger com uma função potencial $V(r)$. A

princípio, todos esses métodos podem ser adaptados para tratar o problema com o termo centrífugo por meio da aproximação generalizada desenvolvida na tese.

3. Há cinco décadas [87, 88] surgiu a ideia de simetria de spin e pseudospin dentro da estrutura do modelo de camadas nuclear. Esta ideia tem sido altamente usada para explicar um grande número de fenômenos em física nuclear e áreas relacionadas. A simetria de spin ocorre na equação de Dirac quando a diferença entre o módulo do potencial vetor $V(r)$ e o potencial escalar $S(r)$ é uma constante, isto é, $A(r) = V(r) - S(r)$, e a simetria de pseudospin ocorre quando a soma do módulo do potencial vetor $V(r)$ e o potencial escalar $S(r)$ é uma constante, isto é, $A(r) = V(r) + S(r)$. Para estudar tais fenômenos se faz necessário resolver a equação de onda relativística com um potencial $A(r)$, e o termo centrífugo deve ser introduzido por meio de aproximações. Logo, a aproximação desenvolvida nesta tese também pode vir a ser usada para tratar equações de onda relativísticas, reservando a devida interpretação para as constantes físicas a e r_0 .
4. Recentemente, o efeito da massa como uma função da posição tem recebido uma grande atenção [89, 90]. E, para estudar esse fenômeno, é preciso obter as soluções para a equação de Schrödinger. Neste contexto de massa variável, e o termo centrífugo é sempre incluído por meio de aproximações. Assim, a aproximação generalizada idealizada nesta tese pode também ser utilizada como ferramenta para tratar o problema.

Não obstante o desenvolvimento do método de resolução para a equação (1.1), uma parte considerável dos resultados obtidos foram reconfirmados através do MF, bem como toda uma estrutura de álgebra de Lie foi estabelecida em termos de operadores de levantamento e abaixamento. Estes resultados constituem as principais ferramentas para o cálculo de elementos de matriz e probabilidades de transição de uma forma mais precisa e rápida, sem a necessidade de recorrer ao cálculo de integrais.

Atualmente, o MF constitui a base fundamental para a estrutura matemática da Mecânica Quântica Supersimétrica ou apenas SUSYQM. De fato, Junker no livro [102] explica que a MQS nada mais é que casos particulares do MF, com a devida interpretação

que a condição de estrutura invariante idealizada por Gendenshtein [103] é equivalente a uma condição similar estabelecida pelo MF através do comutador (4.15), i.e,

$$R(a_{m+1}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} [L(m+1) - L(m)],$$

sendo $L(m+1)$ e $L(m)$ as funções dadas em (3.4) e (3.5). Além disso, A. Joseph [60, 61, 62], em sua busca por operadores autoadjuntos de levantamento e abaixamento, encontrou naturalmente que os espaços de Hilbert eram gradeados em dois subespaços. Ele também notou que o Hamiltoniano juntamente com estes operadores autoadjuntos formavam uma álgebra contendo anticomutadores, isto é, uma superálgebra [102]. No Apêndice se encontra um breve resumo contendo os princípios da MQS.

Apêndice A

Mecânica Quântica Supersimétrica

Neste Apêndice será apresentada a estrutura formal da MQS, a teoria exposta é baseada nos livros [14, 102]. Primeiramente apresentamos a construção da MQS realizando a fatorização de um Hamiltoniano geral, que se faz necessário a introdução de operadores de levantamento e abaixamento. Por meio de superpotenciais é possível obter a geração de uma hierarquia de Hamiltonianos isoespectrais. Por fim, apresentamos o conceito de supercargas e potenciais de estrutura similares.

1. Fatorização de um hamiltoniano geral

Seja a equação de Schrödinger para o estado fundamental,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_0^{(1)}(x) + V_1(x) \psi_0^{(1)}(x) = E_0^{(1)} \psi_0^{(1)}(x), \quad (\text{A.1})$$

onde a função $\psi_0^{(1)}(x)$ satisfaz todos os requisitos para uma função de onda em um espaço de Hilbert \mathcal{H} . Sem perda de generalidade podemos supor que a energia do estado fundamental, ou seja o autovalor do operador Hamiltoniano

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x), \quad (\text{A.2})$$

seja nulo para a função de onda no estado fundamental $\psi_0^{(1)}(x)$, logo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_0^{(1)}(x) + V_1(x) \psi_0^{(1)}(x) = 0 \quad (\text{A.3})$$

com o potencial tendo a forma

$$V_1(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_0''^{(1)}(x)}{\psi_0^{(1)}(x)}. \quad (\text{A.4})$$

Esta equação nos permite conhecer o potencial $V_1(x)$ a partir do estado fundamental $\psi_0^{(1)}(x)$. O Hamiltoniano (A.2) pode ser fatorado através da introdução dos seguintes operadores

$$A_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_1(x) \quad \text{e} \quad A_1^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_1(x), \quad (\text{A.5})$$

sendo o operador A_1^\dagger denominado conjugado hermitiano do operador A_1 .

Seja a seguinte hipótese

$$A_1 \psi_0^{(1)} = 0,$$

a qual equivale à expressão

$$H_1 \psi_0^{(1)} = A_1^\dagger A_1 \psi_0^{(1)} = 0. \quad (\text{A.6})$$

Portanto, a equação de Schrödinger (A.1) pode ser reescrita sob a forma de uma equação de autovalor

$$H_1 \psi_0^{(1)} = E_0^{(1)} \psi_0^{(1)},$$

e a expressão (A.3) afirma que necessariamente devemos ter $E_0^{(1)} = 0$, já que $\psi_0^{(1)}(x) \neq 0$. A suposição de que o estado fundamental seja nulo repousa no cerne da supersimetria, possuindo severas implicações para a teoria, principalmente, se existe ou não quebra de simetria e, caso exista, se é espontânea ou não [14, 102].

Explicitamente, a expressão (A.6) fornece-nos

$$\begin{aligned} A_1^\dagger A_1 \psi_0^{(1)} &= \left[-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_1(x) \right] \left[\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_1(x) \right] \psi_0^{(1)} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_0^{(1)}}{dx^2} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} [W_1(x) \psi_0^{(1)}] + W_1^2(x) \psi_0^{(1)} + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_1(x) \frac{d \psi_0^{(1)}}{dx} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_0^{(1)}}{dx^2} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_1'(x) \psi_0^{(1)} + W_1^2(x) \psi_0^{(1)}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Para que a expressão (A.7) seja igual a (A.3), com o Hamiltoniano dado por (A.2), devemos ter

$$V_1(x) = W_1^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_1'(x), \quad (\text{A.8})$$

que representa uma equação diferencial do tipo Ricatti, cuja solução possui a forma

$$W_1(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'^{(1)}}{\psi_0^{(1)}} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \left[\ln \psi_0^{(1)} \right]. \quad (\text{A.9})$$

A verificação segue imediatamente substituindo as expressões

$$W_1^2(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_0'^{(1)}}{\psi_0^{(1)}} \right)^2 \quad \text{e} \quad W_1'(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\psi_0''^{(1)}}{\psi_0^{(1)}} - \left(\frac{\psi_0'^{(1)}}{\psi_0^{(1)}} \right)^2 \right]$$

em (A.8) com o potencial $V_1(x)$ dado por (A.4).

A função $W_1(x)$ é denominada superpotencial e possui uma importância fundamental para a teoria. A partir da expressão (A.9) podemos determinar uma expressão explícita para o estado fundamental. Isto é,

$$\psi_0^{(1)} = N e^{\left(-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int W_1(x) dx \right)}$$

sendo $N = e^C$ e C uma constante de integração. Logo, o estado fundamental correspondente ao Hamiltoniano H_1 é dado por

$$\psi_0^{(1)}(x) \propto e^{\left(-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int W_1(x) dx \right)}, \quad (\text{A.10})$$

e pode ser completamente determinado a partir do conhecimento do superpotencial $W_1(x)$.

O próximo passo na construção da MQS é definir o novo Hamiltoniano H_2 (*partner* de H_1);

$$H_2 = A_1 A_1^\dagger,$$

de forma que

$$\begin{aligned} A_1 A_1^\dagger \psi_0^{(2)} &= \left[\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_1(x) \right] \left[-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_1(x) \right] \psi_0^{(2)} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_0^{(2)}}{dx^2} + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \left[W_1(x) \psi_0^{(2)} \right] + W_1^2(x) \psi_0^{(2)} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_1(x) \frac{d \psi_0^{(2)}}{dx} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_0^{(2)}}{dx^2} + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_1'(x) \psi_0^{(2)} + W_1^2(x) \psi_0^{(2)}. \end{aligned}$$

Portanto, obtemos

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) \quad \text{e} \quad V_2(x) = W_1^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_1'(x). \quad (\text{A.11})$$

Os potenciais $V_1(x)$ e $V_2(x)$ são conhecidos como *partner* na MQS. Imediatamente perceberemos que o autoestado correspondendo ao Hamiltoniano H_2 é dado por

$$\psi_0^{(2)}(x) = Ne^{\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int W_1(x) dx\right)}. \quad (\text{A.12})$$

As funções de onda (A.10) e (A.12) representam a solução dos Hamiltonianos H_1 e H_2 para os estados fundamentais $\psi_0^{(1)}(x)$ e $\psi_0^{(2)}(x)$, com $E_0^{(1)} = E_0^{(2)} = 0$.

Como iremos perceber a seguir, o espectro de energia e as autofunções dos Hamiltonianos H_1 e H_2 são relacionados através da ação dos operadores A_1 e A_1^\dagger . Seja a equação de Schrödinger para H_1

$$H_1\psi_n^{(1)} = A_1^\dagger A_1\psi_n^{(1)} = E_n^{(1)}\psi_n^{(1)},$$

multiplicando esta expressão à esquerda por A_1 , temos que

$$A_1 H_1 \psi_n^{(1)} = A_1 A_1^\dagger A_1 \psi_n^{(1)} = H_2 A_1 \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} A_1 \psi_n^{(1)},$$

ou seja,

$$H_2 A_1 \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} A_1 \psi_n^{(1)}.$$

Isto demonstra que $A_1 \psi_n^{(1)}(x)$ é uma autofunção de H_2 com autovalor $E_n^{(1)}$, isto é,

$$\psi_n^{(2)} = A_1 \psi_n^{(1)} \quad \text{com} \quad E_n^{(2)} = E_n^{(1)}.$$

Procedendo da mesma forma, a equação de Schrodinger para H_2 é dada por

$$H_2 \psi_n^{(2)} = A_1 A_1^\dagger \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \psi_n^{(2)}.$$

Multiplicando esta expressão à esquerda por A_1^\dagger , obtemos

$$A_1^\dagger H_2 \psi_n^{(2)} = A_1^\dagger A_1 A_1^\dagger \psi_n^{(2)} = H_1 A_1^\dagger \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} A_1^\dagger \psi_n^{(2)},$$

assim

$$H_1 A_1^\dagger \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} A_1^\dagger \psi_n^{(2)}.$$

Isto demonstra que $A_1^\dagger \psi_n^{(2)}$ é uma autofunção de H_1 com autovalor $E_n^{(2)}$, sendo

$$\psi_{n+1}^{(1)} = A_1^\dagger \psi_n^{(2)} \quad \text{com} \quad E_{n+1}^{(1)} = E_n^{(2)}.$$

Os Hamiltonianos H_1 e H_2 são isoespectrais, a menos do estado fundamental $E_0^{(1)} = 0$, o qual é único. Logo, temos a seguinte relação entre os autovalores e as autofunções dos Hamiltonianos H_1 e H_2

$$E_n^{(2)} = E_{n+1}^{(1)}, \quad \psi_n^{(2)} = c_n^{(2)} A_1 \psi_{n+1}^{(1)}, \quad \text{e} \quad \psi_{n+1}^{(1)} = c_n^{(1)} A_1^\dagger \psi_n^{(2)}.$$

As autofunções $\psi_n^{(2)}(x)$ e $\psi_{n+1}^{(1)}(x)$ podem ser normalizadas através do seguinte procedimento

$$\begin{aligned} \bullet \langle \psi_n^{(1)} | \psi_n^{(1)} \rangle &= \int dx \psi_n^{*(1)}(x) \psi_n^{(1)}(x) = |c_{n-1}^{(1)}|^2 \int dx \psi_{n-1}^{*(2)}(x) A_1 A_1^\dagger \psi_{n-1}^{(2)}(x) \\ &= |c_{n-1}^{(1)}|^2 \int dx \psi_{n-1}^{*(2)}(x) H_2 \psi_{n-1}^{(2)}(x) = |c_{n-1}^{(1)}|^2 E_{n-1}^{(2)} \int dx \psi_{n-1}^{*(2)}(x) \psi_{n-1}^{(2)}(x) \\ &= |c_{n-1}^{(1)}|^2 E_{n-1}^{(2)} = 1, \end{aligned}$$

logo

$$c_{n-1}^{(1)} = \frac{1}{[E_{n-1}^{(2)}]^{1/2}} \quad \rightarrow \quad c_n^{(1)} = \frac{1}{[E_n^{(2)}]^{1/2}},$$

sendo que foi usado o artifício de substituir n por $n + 1$, apenas uma mudança no índice mudo que simboliza a somatória das autofunções e autovalores. Da mesma maneira

$$\begin{aligned} \bullet \langle \psi_n^{(2)} | \psi_n^{(2)} \rangle &= \int dx \psi_n^{*(2)}(x) \psi_n^{(2)}(x) = |c_n^{(2)}|^2 \int dx \psi_{n+1}^{*(1)}(x) A_1^\dagger A_1 \psi_{n+1}^{(1)}(x) \\ &= |c_n^{(2)}|^2 \int dx \psi_{n+1}^{*(1)}(x) H_1 \psi_{n+1}^{(1)}(x) = |c_n^{(2)}|^2 E_{n+1}^{(1)} \int dx \psi_{n+1}^{*(1)}(x) \psi_{n+1}^{(1)}(x) \\ &= |c_n^{(2)}|^2 E_{n+1}^{(1)} = 1, \end{aligned}$$

então

$$c_n^{(2)} = \frac{1}{[E_{n+1}^{(1)}]^{1/2}}.$$

As autofunções normalizadas possuem a seguinte forma

$$\psi_n^{(2)}(x) = \frac{1}{[E_{n+1}^{(1)}]^{1/2}} A_1 \psi_{n+1}^{(1)}(x), \quad \psi_{n+1}^{(1)}(x) = \frac{1}{[E_n^{(2)}]^{1/2}} A_1^\dagger \psi_n^{(2)}(x).$$

O operador $A(A^\dagger)$ não apenas converte uma autofunção de $H_1(H_2)$ em uma autofunção de $H_2(H_1)$ com a mesma energia, mas também destrói (cria) um nodo extra na autofunção. Desde que a função de onda do estado H_1 é aniquilado por A , este estado não possui *partner*. Portanto, temos o seguinte quadro, uma vez tendo conhecimento sobre todas as autofunções de H_1 , podemos obter as autofunções de H_2 usando o operador A , e,

vice-versa. Através de A^\dagger podemos reconstruir todas as autofunções de H_1 a partir de H_2 , exceto o estado fundamental. Vale a pena notar uma relação que poderá vir a ser útil, o comutador dos operadores A_1 e A_1^\dagger

$$\begin{aligned} [A_1^\dagger, A_1] \psi &= \left[-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_1(x) \right] \left[\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_1(x) \right] \psi - \left[\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_1(x) \right] \\ &\quad \times \left[-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_1(x) \right] \psi \\ &= -\hbar \sqrt{\frac{2}{m}} \left[\frac{d}{dx} W_1(x) \right] \psi. \end{aligned}$$

Portanto

$$[A_1^\dagger, A_1] = -\hbar \sqrt{\frac{2}{m}} W_1'(x) \quad \text{e} \quad [A_1, A_1^\dagger] = \hbar \sqrt{\frac{2}{m}} W_1'(x)$$

desta forma, podemos expressar os potenciais V_1 e V_2 sob a nova forma

$$V_1(x) = W_1^2(x) + \frac{1}{2} [A_1^\dagger, A_1], \quad V_2(x) = W_1^2(x) - \frac{1}{2} [A_1^\dagger, A_1]$$

2. Hierarquia de Hamiltonianos

Uma vez encontrada a função de onda do estado fundamental correspondendo ao Hamiltoniano H_1 , podemos encontrar o superpotencial $W_1(x)$. Também sabemos que a função de onda do Hamiltoniano *partner* H_2 é determinada a partir do primeiro estado excitado de H_1 através da aplicação do operador A_1 . Isto permiti-nos uma refatorização do segundo Hamiltoniano em termos de W_2 , a qual pode ser determinada a partir da função de onda do estado fundamental de H_2 , o *partner* desta refatorização é um outro Hamiltoniano H_3 .

Cada um dos novos Hamiltonianos possui estados ligados tal que, este processo possa ser continuado até que o número de estados ligados tenha sido exaurido. Portanto, se temos exatamente um potencial solúvel para H_1 , podemos determinar os autovalores e autoenergias para uma hierarquia de Hamiltonianos criada através de repetidas refatorizações. Inversamente, se conhecemos a função de onda do estado fundamental para todos os Hamiltonianos nesta hierarquia, podemos reconstruir as soluções do problema original. Para ser mais específico, temos percebido que se a energia do estado fundamental de um

Hamiltoniano H_1 é zero, então ele pode sempre ser escrito numa forma fatorável, sob a forma do produto de um par de operadores diferenciais lineares.

A origem da degenerescência dos Hamiltonianos H_1 e H_2 repousa na relação

$$A_1 H_1 = H_2 A_1 \quad (\text{A.13})$$

a qual será explorada de forma mais aprofundada. Considere a equação de autovalor para o hamiltoniano H_2

$$H_2 \psi_0^{(2)} = E_0^{(2)} \psi_0^{(2)} = 0,$$

desde que $A_1^\dagger \psi_0^{(2)} = 0$ com $E_0^{(2)} = 0$. Seja agora a equação de autovalor para o primeiro estado fundamental de H_2

$$H_2 \psi_1^{(2)}(x) = [A_2^\dagger A_2 + E_0^{(2)}] \psi_1^{(2)} = E_1^{(2)} \psi_1^{(2)}, \quad (\text{A.14})$$

sendo que foi admitido que o Hamiltoniano H_2 possui a forma $H_2 = A_2^\dagger A_2 + E_0^{(2)}$, multiplicando a expressão (A.14) à esquerda por A_2 , obtemos

$$A_2 H_2 \psi_1^{(2)} = A_2 [A_2^\dagger A_2 + E_0^{(2)}] \psi_1^{(2)} = [A_2 A_2^\dagger + E_0^{(2)}] A_2 \psi_1^{(2)} = E_1^{(2)} A_2 \psi_1^{(2)}.$$

Usando a relação que define a degenerescência fundamental (A.13), temos que

$$A_2 H_2 = H_3 A_2, \quad A_2 \psi_1^{(2)} = [E_1^{(2)} - E_0^{(2)}]^{1/2} \psi_0^{(3)}, \quad E_1^{(2)} = E_0^{(3)}.$$

Logo, podemos identificar o novo Hamiltoniano H_3 como sendo dado por

$$\begin{aligned} A_2 H_2 \psi_1^{(2)} &= H_3 A_2 \psi_1^{(2)} = [E_1^{(2)} - E_0^{(2)}]^{1/2} H_3 \psi_0^{(3)} \\ &= E_1^{(2)} [E_1^{(2)} - E_0^{(2)}]^{1/2} \psi_0^{(3)} = E_0^{(3)} [E_1^{(2)} - E_0^{(2)}]^{1/2} \psi_0^{(3)}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$H_3 \psi_0^{(3)} = E_0^{(3)} \psi_0^{(3)} \quad \text{com} \quad H_3 = A_2 A_2^\dagger + E_0^{(2)}. \quad (\text{A.15})$$

O Hamiltoniano H_3 possui como *partner* o Hamiltoniano H_2 expresso como

$$H_2 = A_2^\dagger A_2 + E_0^{(2)}. \quad (\text{A.16})$$

Portanto, por meio da indução matemática, chegamos a seguinte relação final

$$E_n^{(1)} = E_{n+1}^{(2)}, \quad \psi_n^{(2)} = [E_{n+1}^{(1)} - E_0^{(1)}]^{-1/2} A_1 \psi_{n+1}^{(1)}.$$

A partir da definição da nova forma para o Hamiltoniano H_2 , expressa em (A.16), podemos assumir

$$A_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_2(x) \quad \text{e} \quad A_2^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_2(x),$$

com o superpotencial dado por

$$W_2(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \left[\ln \psi_0^{(2)} \right].$$

O Hamiltoniano H_3 , expressão (A.15), *partner* de H_2 possui a forma

$$H_3 = A_2 A_2^\dagger + E_0^{(2)} = A_2 A_2^\dagger + E_1^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_3(x),$$

onde

$$\begin{aligned} V_3(x) &= W_2^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_2'(x) + E_1^{(1)} = V_2(x) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \left[\ln \psi_0^{(2)} \right] \\ &= V_1(x) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \left[\ln \psi_0^{(1)} \right] - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \left[\ln \psi_0^{(2)} \right] = V_1(x) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln \left[\psi_0^{(1)} \psi_0^{(2)} \right]. \end{aligned}$$

Além disso, $E_n^{(3)} = E_{n+1}^{(2)} = E_{n+2}^{(1)}$, e

$$\begin{aligned} \psi_n^{(2)} &= \left[E_{n+1}^{(2)} - E_0^{(2)} \right]^{-1/2} A_2 \psi_{n+1}^{(2)} \\ &= \left[E_{n+2}^{(1)} - E_1^{(1)} \right]^{-1/2} \left[E_{n+2}^{(1)} - E_0^{(1)} \right]^{-1/2} A_2 A_1 \psi_{n+2}^{(1)}. \end{aligned}$$

Introduzindo a notação onde os índices sobrescritos m correspondem ao hamiltoniano da hierarquia e o subscrito n correspondem ao estado de energia, fica claro que se o Hamiltoniano original H_1 possui p , com $p \geq 1$, estados ligados com autovalores $E_n^{(1)}$, e autofunções $\psi_n^{(1)}(x)$, com $0 \leq n \leq (p-1)$, então podemos sempre gerar uma hierarquia de Hamiltonianos. Portanto, podemos generalizar

$$H_m = A_m^\dagger A_m + E_{m-1}^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_m(x),$$

onde

$$A_m = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W_m(x), \quad W_m(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} \left[\ln \psi_0^{(m)} \right],$$

com os autovalores $E_n^{(m)} = E_{n+1}^{(m-1)} = \dots = -E_{n+m-1}^{(1)}$ e as autofunções dadas por

$$\psi_n^{(m)}(x) = \left[E_{n+m-1}^{(1)} - E_{m-2}^{(1)} \right]^{-1/2} \dots \left[E_{n+m-1}^{(1)} - E_0^{(1)} \right]^{-1/2} A_{m-1} \dots A_1 \psi_{n+m-1}^{(1)}(x),$$

sendo

$$V_m(x) = V_1(x) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \ln \left[\psi_0^{(1)} \dots \psi_0^{(m-1)} \right].$$

Assim, conhecendo todos os autovalores e autofunções de H_1 imediatamente conheceremos todos os autovalores e autofunções de uma hierarquia completa de hamiltonianos gerada através da ação dos operadores de levantamento e abaixamento A e A^\dagger .

3. Supercargas em MQS

A razão fundamental para a degenerescência do espectro de H_1 e H_2 pode ser compreendida, mais facilmente, a partir das propriedades algébricas da MQS. Isto é, considere a matriz Hamiltoniana sob a forma

$$H = \begin{vmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A_1^\dagger A_1 & 0 \\ 0 & A_1 A_1^\dagger \end{vmatrix}.$$

Esta matriz faz parte de uma álgebra fechada, a qual contém ambas os operadores bosônicos e fermiônicos com relações de comutação e anticomutação. Tal álgebra é composta principalmente pelos operadores

$$Q = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ A_1 & 0 \end{vmatrix} \quad \text{e} \quad Q^\dagger = \begin{vmatrix} 0 & A_1^\dagger \\ 0 & 0 \end{vmatrix},$$

as relações de comutação e anticomutação a seguir descrevem uma superálgebra fechada

$$[H, Q] = 0 = [H, Q^\dagger], \quad \{Q, Q^\dagger\} = H, \quad \text{e} \quad \{Q, Q\} = \{Q^\dagger, Q^\dagger\} = 0. \quad (\text{A.17})$$

O fato que as supercargas Q e Q^\dagger comutam com o Hamiltoniano H , resulta na degenerescência do espectro de H_1 e H_2 e indica que as supercargas são constantes de movimento, caso as mesmas não dependam explicitamente do tempo.

Os operadores Q e Q^\dagger podem ser interpretados como operadores que mudam os graus de liberdade bosônicos em fermiônicos e viceversa. Existem várias maneiras de classificar álgebras MQS na literatura [14, 102]. Uma delas é contar o número de geradores Hermitianos anticomutativos $Q_i, i = 1, 2, \dots, N$, tal que uma álgebra supersimétrica estendida tenha a forma

$$H = 2Q_1^2 = 2Q_2^2 = \dots = 2Q_N^2 = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N Q_i^2 \quad \text{sendo} \quad \{Q_i, Q_j\} = H\delta_{ij}.$$

Para $N = 2$ a MQS consiste de duas supercargas Q_1 e Q_2 e um hamiltoniano H , o qual obedece as seguintes relações $Q_1 Q_2 = -Q_2 Q_1$ e $H = 2Q_1^2$.

Introduzindo as duas supercargas complexas Q e Q^\dagger dadas por

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_1 + iQ_2) \quad \text{e} \quad Q^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_1 - iQ_2),$$

estes operadores juntamente com o hamiltoniano H formam a superálgebra $Q^2 = 0 = (Q^\dagger)^2$ com $\{Q, Q^\dagger\} = H$.

Seguindo a formulação original da MQS proposta por E. Witten [14, 102], será postulado a existência de um operador autoadjunto Z , o qual obedece as seguintes relações

$$[Z, H] = 0, \quad \{Z, Q\} = 0 = \{Z, Q^\dagger\}, \quad \text{e} \quad Z^2 = \mathbf{1}.$$

Isto é, Z deve comutar com H , anticomutar com as supercargas e definir uma involução unitária sobre H . Um operador satisfazendo as exigências acima é denominado um operador de Witten (ou índice de Witten). Tal operador pode ser construído sob a forma

$$Z = \frac{2}{H} Q Q^\dagger - \mathbf{1} = \frac{1}{iH} [Q_1, Q_2] = \frac{[Q_1, Q_2]}{\{Q_1, Q_2\}}.$$

Um outro operador a ser construído na MQS é dado por

$$P^\pm = \frac{1}{2}(\mathbf{1} \pm Z)$$

o qual corresponde a projeção ortogonal de H sobre o autoespaço do operador de Witten com autovalor ± 1 . O subespaço $H^\pm = P^\pm H$ é chamado de espaço de paridade de Witten positiva H^+ ou negativa H^- .

Assim, o espaço de Hilbert \mathcal{H} pode ser decomposto na forma de uma soma direta

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^+ \oplus \mathcal{H}^- = \left| \begin{array}{cc} H^+ & 0 \\ 0 & 0 \end{array} \right| + \left| \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 0 & H^- \end{array} \right| = \left| \begin{array}{cc} A_1^\dagger A_1 & 0 \\ 0 & A_1 A_1^\dagger \end{array} \right|$$

ou seja, $H^+ \cap H^- = 0$. Isto significa que, qualquer função de onda pertencente ao espaço de Hilbert \mathcal{H} pode ser expressa de uma única maneira, como uma soma de um elemento pertencente a H^+ e H^- . Autoestados de P^\pm são chamados estados de paridade positiva e negativa e são denotados por $\psi^{(\pm)}(x)$, ou seja,

$$P^\pm \psi^{(\pm)}(x) = \pm \psi^{(\pm)}(x).$$

Na notação matricial de supercargas, as funções de onda adquirem a forma

$$\psi_n^{(m)}(x) = \begin{vmatrix} \psi_n^{+(m)}(x) \\ \psi_n^{-(m)}(x) \end{vmatrix},$$

e os autoestados do operador paridade são denotados por

$$\psi^{(+)}(x) = \begin{vmatrix} \psi_n^{+(m)}(x) \\ 0 \end{vmatrix} \quad \text{e} \quad \psi^{(-)}(x) = \begin{vmatrix} 0 \\ \psi_n^{-(m)}(x) \end{vmatrix},$$

de forma que

$$\psi_n^{(m)}(x) = \psi^{(+)}(x) \oplus \psi^{(-)}(x) = \begin{vmatrix} \psi_n^{+(m)}(x) \\ 0 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 \\ \psi_n^{-(m)}(x) \end{vmatrix}.$$

Sendo conhecida a função de onda para o estado fundamental de H_1 é possível fatorizar o Hamiltoniano e encontrar o *partner* H_2 . Entretanto, a condição $E_0^{(1)} = 0$ impõe severas restrições a teoria principalmente no que se refere a quebra de simetria. Assim, a partir das soluções dos hamiltonianos H_1 e H_2 dadas por (A.10) e (A.12), temos as seguintes condições

$$A\psi_0^{(1)} = Ne^{-\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int W_1(x)dx\right)} = 0 \quad \text{e} \quad A^\dagger\psi_0^{(2)} = Ne^{\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int W_1(x)dx\right)} = 0. \quad (\text{A.18})$$

Se existe uma solução normalizável desta forma, então o hamiltoniano H_1 possui o autovalor do estado fundamental zero e não existe quebra de simetria, ou seja, é possível construir a MQS mediante a forma como a fizemos nas secções 6.1 e 6.2.

Na formulação de supercargas a afirmação (A.18) possui a forma

$$Q\psi_0^{(1)}(x) = Q^\dagger\psi_0^{(1)}(x) = 0\psi_0^{(1)}(x) = 0,$$

sendo

$$\psi_0^{(1)}(x) = \begin{vmatrix} \psi_0^{+(1)}(x) \\ \psi_0^{-(1)}(x) \end{vmatrix}.$$

Caso a simetria seja quebrada, não irá existir estado fundamental que seja aniquilado através das supercargas Q e Q^\dagger ou através dos operadores A e A^\dagger . Isto é, para termos uma MQS o estado de vácuo deve ser aniquilado.

4. Condição de Estrutura Invariante

A estrutura matemática que a MQS foi construída, pelo menos sob a forma como a entendemos atualmente, possui como base os trabalhos de Infeld e Hull [54] e A. Joseph [60, 61, 62], conforme afirmamos anteriormente. Entretanto, coube a L. E. Gendenshtein [103] estabelecer a condição de integrabilidade (estrutura invariante) para a MQS.

Explicitamente, a condição afirma que; se um par de potenciais *partner* $V_1(x)$ e $V_2(x)$, definidos respectivamente sob a forma (A.8) e (A.11), são similares em suas estruturas e diferem apenas por alguns parâmetros que aparecem em suas expressões, então eles possuem uma estrutura invariante. Mais precisamente, se dois potenciais *partner* $V_1(x)$ e $V_2(x)$ satisfazem a condição

$$V_2(x; a_1) = V_1(x; a_2) + R(a_1) \tag{A.19}$$

onde a_1 é um conjunto de parâmetros, a_2 é uma função de a_1 , isto é, $a_2 = f(a_1)$ e $R(a_1)$ é independente de x . Então, os potenciais $V_1(x)$ e $V_2(x)$ são ditos possuir uma estrutura invariante. Todo o espectro do hamiltoniano H_1 pode ser obtido algebricamente usando a condição de estrutura invariante (A.19).

Referências Bibliográficas

- [1] C. L. Pekeris, Phys. Rev. **45**, 98 (1933).
- [2] P. Morse, Phys. Rev. **34**, 57 (1929).
- [3] R. L. Greene and C. Aldrich, Phys. Rev. A **14**, 2363 (1976).
- [4] L. Hulthén, Ark. Mat. Astron. Fys. **28A**, 5 (1942); **29B**, 1 (1942).
- [5] C. Eckart, Phys. Rev. **35**, 1303 (1930).
- [6] Shi-Hai Dong, Wen-Chao Qiang, Guo-Hua Sun, and V. B. Bezerra, J. Phys. A Math.Theor. **40**, 10535 (2007).
- [7] F. Taskin and G. Koçak, Chin. Phys. B **19**, 090314 (2010).
- [8] Jerzy Stanek, Cent. Eur. Phys. **9**, 1503 (2011).
- [9] Chang-Yuan Chen, Dong-Sheng Sun, and Fa-Lin Lu, J. Phys. A Math. Theor. **41**, 035302 (2008).
- [10] Gao-Feng Wei, Chao-Yun Long, Xiao-Yong Duan, and Shi-Hai Dong, Phys. Scri. **77**, 035001 (2008).
- [11] Hakan Ciftci, Richard L. Hall, and Nasser Saad, J. Phys. A Math. Gen. **36**, 11807 (2003).
- [12] B. J. Falaye, Cent. Eur. J. Phys. **10**, 960 (2012).
- [13] Yong-Feng Diao, Liang-Zhong Yi, Tao Chen, and Chun-Sheng Jia, Mod. Phys. Lett. B **23**, 2269 (2009).

- [14] F. Cooper, A. Khare, and U. Sukhatme, *Phys. Rep.* **251**, 267 (1995).
- [15] Chun-Sheng Jia, Yong-Feng Diao, Liang-Zhong Yi, and Tao Chen, *Int. J. Mod. Phys. A* **24**, 4519 (2009).
- [16] Sameer. M. Ikhdair and Jamal Abu-Hasna, *Phys. Scr.*, **83**, 025002 (2011).
- [17] Xiao-Yan Gu and Jian-Qiang Sun, *J. Math. Phys.* **51**, 022106 (2010).
- [18] Wen-Chao Qiang, Yang Gao, and Run-Suo Zhou, *Cent. Eur. J. Phys.* **6**, 356 (2008).
- [19] Zhong-Qi Ma and Bo-Wei Xu, *Europhys. Lett.* **69**, 685 (2005).
- [20] Zhong-Qi Ma and Bo-Wei Xu, *Int. J. Mod. Phys. E* **14**, 599 (2005).
- [21] A. F. Nikiforov and V. B. Uvarov, *Special Function of Mathematical Physics* (Basel: Birkhauser 1988).
- [22] Sameer M. Ikhdair, *Eur. Phys. J. A* **39**, 307 (2009).
- [23] Sameer M. Ikhdair and R. Sever, *J. Math. Chem.* **42**, 461 (2006).
- [24] D. Agboola, *Phys. Scr.* **80**, 065304 (2009).
- [25] O. Bayrak, G. Kocak, and I. Boztosum, *J. Phys. A Math. Gen.* **39**, 11521 (2006).
- [26] O. Bayrak and I. Boztosum, *J. Mol. Struct.* **802**, 17 (2007).
- [27] Jerzy Stanek, *Cent. Eur. J. Chem.* **9**, 737 (2011).
- [28] Chun-Sheng Jia, Jian-Yi Liu, and Pinq-Quan Wang, *Phys. Lett. A* **372**, 4779 (2008).
- [29] B. J. Falaye, *Can. J. Phys.* **90**, 1259 (2012); **90**, 1259 (2012) (corrigendum).
- [30] G. Pöschl and E. Teller, *Z. Physik* **83**, 143 (1933).
- [31] Wen-Chao Qiang, Jing-Yang Wu, and Shi-Hai Dong, *Phys. Scr.* **79**, 065011 (2009).
- [32] Shi-Hai Dong, Wen-Chao Qiang, and J. García Ravelo, *Int. Journ. Mod. Phys.* **23**, 1537 (2008).

- [33] V. G. Bagrov and D. M. Gitman, *Exact Solution of Relativistic Wave Equations* (Kluwer Academic, Dordrecht, 1990).
- [34] D. Schiöberg, *Mol. Phys.* **59**, 1123 (1986).
- [35] Jun Lu, *Phys. Scr.* **72**, 349 (2005).
- [36] Shishan Dong, J. García-Ravelo and Shi-Hai Dong, *Phys. Scr.* **76**, 393 (2007).
- [37] Shishan Dong, S. G. Miranda, F. M. Enriquez, and Shi-Hai Dong, *Mod. Phys. Lett. B* **22**, 483 (2008).
- [38] Gao-Feng Wei, Wen-Chao Qiang, and Wen-Li Chen, *Cent. Eur. Jour. Phys.* **8**, 574 (2010).
- [39] Sameer M. Ikhdair and Ramazan Sever, *Ann. Phys.* **18**, 189 (2009).
- [40] B. J. Falaye, *Few. Bod. Sys.* **53**, 557 (2012).
- [41] N. Rosen and P. M. Morse, *Phys. Rev.* **42**, 210 (1932).
- [42] F. Taskin, *Int. J. Theor. Phys.* **48**, 2692 (2009).
- [43] M. F. Manning and N. Rosen, *Phys. Rev.* **44**, 953 (1933).
- [44] Wen-Chao Qiang and Shi-Hai Dong, *Phys. Scr.* **79**, 045004 (2009).
- [45] Wen-Chao Qiang and Shi-Hai Dong, *Phys. Lett. A* **368** 13 (2007).
- [46] Gao-Feng Wei, Chao-Yun Long and Shi-Hai Dong, *Phys. Lett. A* **372** 2592 (2008).
- [47] Wen-Chao Qiang, Kai Li and Wen-Li Chen, *J. Phys. A Math. Theor.* **42** 205306 (2009).
- [48] Sameer M. Ikhdair, *Phys. Scr.* **83**, 015010 (2011).
- [49] Sameer M. Ikhdair and Ramazan Sever, *Ann. Phys.* **17**, 897 (2008).
- [50] Xiao-Yan Gu and Shi-Hai Dong, *J. Math. Chem.* **49**, 2053 (2011).
- [51] Zhao-You Chen, Min Li, and Chun-Sheng Jia, *Mod. Phys. Lett. A* **24**, 1863 (2009).

- [52] Hugh M. Hulburt and Joseph O. Hirschfelder, *J. Chem. Phys.* **9**, 61 (1940).
- [53] Yatendra Pal Varshni, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 664 (1957).
- [54] L. Infeld and T. E. Hull, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 21 (1951).
- [55] E. Schrödinger - *Proc. Roy. Irish Acad.* **A46**, 9 (1940); **A46**, 183 (1941); **A47**, 53 (1941).
- [56] H. Weyl, *The Theory Groups and Quantum Mechanics* (E. P. Dutton and Company, Inc., New York, 1931, second edition).
- [57] P. A. M. Dirac, *Principles of Quantum Mechanics* (Clarendon Press Oxford, 1935, second edition).
- [58] L. Infeld, *Phys. Rev.* **59**, 737 (1941).
- [59] T. E. Hull and L. Infeld, *Phys. Rev.* **74**, 905 (1948).
- [60] A. Joseph, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 829 (1967).
- [61] C. A. Coulson and A. Joseph, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 838 (1967).
- [62] A. Joseph, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 845 (1968).
- [63] W. Miller Jr., *Lie Theory and Special Functions* (Academic Press, New York e London, 1968).
- [64] B. Kaufman, *J. Math. Phys.* **7**, 447 (1966).
- [65] D. Basu, *J. Math. Phys.* **12**, 1474 (1971).
- [66] M. Humi, *J. Math. Phys.* **9**, 1258 (1968); **27**, 76 (1986); *Proc. Camb. Phil. Soc.* **68**, 439 (1970); *J. Phys. A Math. Gen.* **20**, 1323 (1987); **20**, 4577 (1987); **38**, 6351 (2005).
- [67] N. Bessis e G. Bessis, *Phys.Rev. A* **42**, 1096 (1990); **44**, 5503 (1991); **46**, 6824 (1992); *J. Phys. A Math. Gen.* **20**, 5745 (1987); **22**, 4499 (1989); *J. Math. Phys.* **35**, 6244 (1994); G. Hadinger, N.Bessis, e G. Bessis, *J. Math. Phys.* **15**, 716 (1994).

- [68] N. A. Alves and E. D. Filho, *J. Phys. A Math. Gen.* **21**, 3215 (1988).
- [69] A. Stahlhofen and K. Bleuler, *Nuov. Cimen.* **104**, 447 (1989).
- [70] A. Mitra, P. K. Roy, A. Lahiri, B. Bagchi, *Int. J. Theor. Phys.* **28**, 911 (1989).
- [71] A. Del Sol Mesa and C. Quesne, *J. Phys. A Math. Gen.* **33**, 4059 (2000).
- [72] A. Del Sol Mesa and C. Quesne, *J. Phys. A Math. Gen.* **35**, 2857 (2002).
- [73] Z. X. Wang and D. R. Guo, *Special Functions* (World Scientific, 1989).
- [74] F. J. S. Ferreira and F. V. Prudente, *Phys. Let. A* **377**, 3027 (2013).
- [75] G. Herzberg, *Spectra of Diatomic Molecules* (D. Van Nostrand Company, Inc., Princeton, 1963).
- [76] J. L. Dunham, *Phys. Rev.* **41**, 713 (1932); **41**, 721 (1932).
- [77] R. Rydberg, *Z. Physik* **73**, 376 (1931); **80**, 514 (1933).
- [78] Y. P. Varshni and F. J. Bloore, *Phys. Rev.* **129**, 115 (1963).
- [79] William F. Sheehan, *J. Phys. Chem.* **69**, 923 (1965).
- [80] J. W. Linnett, *Trans. Farad. Soc.* **36**, 1123 (1940); **38**, 1 (1942).
- [81] C. K. Wu and C. T. Yang, *J. Chem. Phys.* **48**, 295 (1944).
- [82] A. A. Frost and B. Musulin, *J. Chem. Phys.* **22**, 1017 (1954).
- [83] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics* (Springer, 1994).
- [84] F. Constantinescu and E. Magyari, *Problems in Quantum Mechanics* (Pergamon International Library, 1978).
- [85] Charles L. Beckel, *J. Chem. Phys.* **27**, 998 (1957).
- [86] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw - Hill, New York, 1953), Pt. II, pp. 1650 - 1655.

- [87] Wu - Ki Tung, *Group Theory in Physics*,(World Scientific).
- [88] A. O. Barut, Akira Inomata, and Raj Wilson, J. Phys. A Math. Gen. **20**, 4083 (1987).
- [89] A. O. Barut, Akira Inomata, and Raj Wilson, J. Phys. A Math. Gen. **20**, 4075 (1987).
- [90] C. Quesne, J. Phys. A Math. Gen. **21**, 4487 (1988).
- [91] A. Arima, M. Harvey, and K. Shimizu, Phys. Lett. B **30**, 517 (1969).
- [92] K. T. Hecht and A. Adler, Nucl. Phys. A **137**, 129 (1969).
- [93] T. Gora and F. Williams, Phys. Rev. **177**, 11979 (1969).
- [94] O. von Roos, Phys. Rev. B **27**, 7547 (1983).
- [95] Roger D. Woods and David S. Saxon, Phys. Rev. **95**, 577 (1954).
- [96] Ayse Berkdemir, Cünet Berkdemir, and Ramazan Sever, Mod. Phys. Lett. A **21**, 2087 (2006).
- [97] Sameer M. Ikhdair and Ramazan Sever, Int. J. Mod. Phys. A **25**, 3941 (2010).
- [98] M. R. Pahlavani and S. A. Alavi, Moder. Phys. Lett. A **27**, 1250167 (2012).
- [99] Cüneyt Berkdemir, Ayse Berkdemir, and Ramazan Sever, J. Math. Chem. **43**, 944 (2008).
- [100] M. R. Pahlavani and S. A. Alavi, Commun. Theor. Phys. **58**, 739 (2012).
- [101] Sameer M. Ikhdair and Ramazan Sever, Cent. Eur. J. Phys. **8**, 652 (2010).
- [102] H. Feizi, M. R. Shojaei, and A. A. Rajabi, Eur. Phys. J. Plus **127**, 41 (2012).
- [103] George Junker, *Supersymmetric Methods in Quantum and Statistical Physics*, (Springer).
- [104] L. E. Gendemshtein, JETP Lett. **38**, 356 (1985).