

**JOÃO CESAR BOREGGIO DE ARAUJO**

**O FORMALISMO SUPERSIMÉTRICO E SUAS  
APLICAÇÕES EM MECÂNICA QUÂNTICA**

Dissertação apresentada para obtenção  
do grau de Mestre em Biofísica  
Molecular, Instituto de Biociências,  
Letras e Ciências Exatas da  
Universidade Estadual Paulista “Júlio  
de Mesquita Filho” – UNESP.

**ORIENTADOR: PROF. DR. ELSO DRIGO FILHO**

São José do Rio Preto – SP

2006

## AGRADECIMENTOS

*Agradeço acima de tudo à Deus por mais essa etapa concluída na minha vida, graças à Ele pude ter o privilégio de realizar este trabalho.*

*Agradeço depois à mulher mais importante na minha vida que é minha mãe, por ter realizado comigo esse trabalho, ter me incentivado, me apoiado e me feito chegar até aqui, sem ela com certeza não teria realizado 1% do que realizei na minha vida.*

*Um agradecimento muito especial faço ao meu orientador, prof<sup>o</sup> Elso, que foi muito mais que um simples orientador ou professor, foi realmente um educador, ensinando muito além das lições de física, ensinando belas lições de vida.*

*À prof<sup>a</sup> Glauce Rosângela Peglow Borges pela paciência e dedicação à este trabalho.*

*À minha namorada Juliana agradeço pela paciência e pelo amor, estando sempre ao meu lado me dando força e à sua família também, Márcia, Júlio e Rafael.*

*Aos meus amigos Pedro Acquaroni, Pedro Castro, Adaumir, Flávio, Marcelo, Marcelo Augusto, Eduardo, José Benedito, Rose, Jorge, Renato, Adriana, Jair, Aparecida, Augusto, Danilo, Leonardo e Rodrigo Calixto por me incentivarem, pelo carinho e companheirismo que sempre me deram.*

*Ao amigo Felipe Mikhail por seu companheirismo e palavras de incentivo.*

*Aos amigos Nabil, Roberto, Anai, Carlos, Plínio e Evaristo pelas lições de entusiasmo e pela alegria que transmitem.*

*Ao amigo Cesar Bochi por conseguir elucidar tão bem a bioquímica e pela paciência nas suas explicações.*

*À amiga Sônia Figueiredo pela ajuda na tradução dos textos e por sua amizade.*

*Aos professores João Ruggiero Neto, Marcio Francisco Colombo, Marinônio Cornélio, Marcelo Andrés Fossey, Gustavo Orlando Bonilla-Rodriguez, Raghuvir Krishnaswamy Arni, José Ramon Abrego, Johnny Rizzieri Olivieri, Walter Filgueira de Azevedo Jr., Jorge Chahine, Marco Antônio Cândido Ribeiro, Fernanda, Antônio Caliri, Eloi da Silva Feitosa e Vitor Barbanti Pereira Leite e as funcionários Ilva Cecílio Bernardes e Paulo Roberto Salinas sempre dispostos a ajudar na elaboração deste trabalho.*

*Aos professores José Roberto Ruggiero e Augusto Agostinho Neto pelas contribuições no Exame Geral de Qualificações.*

*Aos amigos de pós-graduação Ricardo, Carlos, Sidney, Ronaldo e André pelo apoio e contribuição.*

*Aos amigos de graduação Rafael e Fernando pela amizade e incentivo que sempre me deram.*

*Aos meus queridos alunos pelo carinho que sempre me dão.*

*Agradeço a todas as pessoas que estiveram comigo me incentivando à realização deste trabalho.*

## SUMÁRIO

RESUMO	6
ABSTRACT	7
I. INTRODUÇÃO	8
II. FORMALISMO SUPERSIMÉTRICO	12
III. OSCILADOR HARMÔNICO	19
IV. ÁTOMO DE HIDROGÊNIO	24
V. MÉTODO VARIACIONAL	34
VI. POTENCIAL DE LENNARD-JONES (12,6)	36
VI.1 Potencial de Lennard-Jones (12,6) com $l = 0$	38
VI.2 Potencial de Lennard-Jones (12,6) com $l \neq 0$	42
VI.3 Resultados obtidos na resolução do potencial de Lennard-Jones (12,6)	44
VI.4 Potencial de Lennard-Jones (12,6) com $l = 0$ para o primeiro estado excitado	48
VII. CONCLUSÕES	52
VIII. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	54

## **RESUMO**

Neste trabalho é apresentado o formalismo supersimétrico que consiste em uma generalização do método de fatorização para se encontrar a solução da equação de Schrödinger. O oscilador harmônico e o átomo de hidrogênio são resolvidos através deste formalismo. Para o potencial de Lennard-Jones (12,6) é utilizado o método variacional, onde utilizamos a supersimetria para encontrar uma função de onda que se assemelhe com a função real, este procedimento é feito através da escolha de um superpotencial que gere um potencial efetivo que se aproxima do potencial original. Com isto as autofunções e os autovalores para o estado fundamental e o primeiro estado excitado são encontrados. Alguns resultados numéricos obtidos são comparados com outros encontrados na literatura.

## **ABSTRACT**

In this work it is presented the supersymmetrical formalism that consists of a generalization of the factorization method to find the solution of Schrödinger equation. The harmonic oscillator and the hydrogen atom are decided through this formalism. For the potential of Lennard-Jones (12,6) the variational method is used, where we use the supersymmetry to find a wave function that is similar to the real function, this procedure is made through the choice of a superpotential that generates an effective potential that approaches to the original potential. With this the autofunctions and the autovalues for the fundamental state and the first state excited are found. Some gotten numerical results are compared with others found in the literature.

# **I    INTRODUÇÃO**

Até meados de 1900 a mecânica era uma área da física que poderia ser dita como determinista, ou seja, conhecidas as condições iniciais do problema, poderiam ser determinadas tanto a posição quanto o momento linear da partícula para um determinado instante  $t$ . De maneira geral, seria necessário solucionar a equação fundamental  $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$  (segunda lei de Newton) e para sistemas de massa constante a equação de Newton se torna  $\vec{F} = m \frac{d^2\vec{x}}{dt^2}$ . Porém após a teoria quântica que teve seu início em 1900 por Max Planck, juntamente com outras contribuições como o princípio da incerteza de Heisenberg e a dualidade onda-partícula proposta por de Broglie, a física, em especial a mecânica deixa de ser determinista e passa a ser probabilista. Assim, quando se determina a posição de uma certa partícula com uma determinada precisão, se comete um erro na determinação de seu momento linear.

Uma vez estabelecido que os elétrons devem ser tratados como onda e partícula, Erwin Schrödinger escreveu a equação de onda que descreve o movimento deste tipo de partícula, em especial, partículas num mundo de tamanho atômico, denominado mundo quântico. Neste contexto, a equação fundamental não é mais a equação fundamental de Newton, mas sim a equação de Schrödinger. Ao se resolver a equação de Schrödinger para



estruturas quânticas, se determinam as funções de onda (que estão associadas com a probabilidade de se encontrar o sistema em determinado estado) e os autovalores de energia (níveis de energia permitidos ao sistema) (ref. [4], [5] e [6]).

O objetivo deste trabalho é resolver a equação de Schrödinger no caso do oscilador harmônico, do átomo de hidrogênio e do potencial de Lennard-Jones (12,6) utilizando o formalismo supersimétrico. Esse formalismo apareceu no contexto de Física de Campos, ao relacionar partículas bosônicas e fermiônicas. Nesse caminho é possível resolver exata e analiticamente a equação de Schrodinger para alguns tipos de sistemas, como o oscilador harmônico e o átomo de hidrogênio. Estes potenciais serão resolvidos através deste formalismo supersimétrico que consiste em fatorizar o hamiltoniano original, lembrando que o hamiltoniano original é constituído por um operador diferencial de ordem 2, o método consiste em fatorizá-lo em dois operadores de ordem 1, chamados de operadores bosônicos. Ao se igualar o hamiltoniano fatorizado com o hamiltoniano original, deve se obter uma equação diferencial de primeira ordem não-linear denominada equação de Riccati. Ao resolver esta equação de Riccati se encontra um superpotencial que pode ser usado para determinar as autofunções e o autovalor de energia correspondente.

A supersimetria permite criar uma família de hamiltonianos e, através desta fatorização, determinar as autofunções e os autovalores de energia, ou seja, ela funciona como um método matemático de se resolver a equação de Schrödinger.

Porém quando aplicarmos o método para resolver o potencial de Lennard-Jones (12,6), que é um potencial muito utilizado em problemas físicos com interações intermoleculares, algumas interações interatômicas e até interação entre átomos de um gás nobre (ref. [7]), não é possível encontrar um superpotencial que satisfaça a equação de Riccati correspondente. Usaremos então o Método Variacional para determinar aproximadamente os níveis de energia. Este método será utilizado aliado à supersimetria, que ajudará a encontrar uma função teste que se aproxima da função real para o cálculo da minimização que é feita no método variacional.

Para se determinar esta função teremos que escolher um superpotencial que irá gerar um potencial efetivo parecido com o potencial original. Para isso foi utilizado recursos do software Mathematica que mostrou a comparação gráfica entre estes potenciais. Este software também realizou os cálculos de minimização que apareceram na resolução do potencial de Lennard-Jones (12,6).

No capítulo II é apresentado o formalismo supersimétrico e como este é aplicado à Mecânica Quântica, mostrando como as autofunções e os autovalores se relacionam na construção da hierarquia dos hamiltonianos.

No capítulo III apresenta-se o oscilador harmônico resolvido através do método da supersimetria. São determinados as autofunções e os autovalores para alguns níveis de energia.

No capítulo IV apresenta-se o átomo de hidrogênio resolvido também através do método da supersimetria e os autovalores de energia e as autofunções para o estado fundamental e alguns estados excitados.

No capítulo V apresenta-se o formalismo do método variacional.

No capítulo VI apresenta-se o potencial de Lennard-Jones (12,6). Os autovalores de energia são obtidos para este potencial utilizando o método variacional aplicado à supersimetria. Os resultados obtidos para este potencial e a comparação com valores encontrados na literatura são mostrados nesta mesma seção. Também são determinados os autovalores de energia para o primeiro estado excitado.

Por fim, no capítulo VII apresenta-se as conclusões obtidas com este trabalho.

## II FORMALISMO SUPERSIMÉTRICO

Uma introdução ao formalismo da Mecânica Quântica Supersimétrica pode ser encontrada, por exemplo, na referência [8]. Neste capítulo, concentramos a atenção no seu uso como método para resolver a equação de Schrödinger.

Dado um hamiltoniano  $H_1$  da seguinte forma:

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_1(r), \quad (2.1)$$

onde  $V_1(r)$  representa o potencial estudado. O método consiste em fatorizar este hamiltoniano em termos dos operadores bosônicos  $a_1^+$  e  $a_1^-$ , expressos da seguinte forma:

$$a_1^+ = -\frac{d}{dr} + w_1(r), \quad (2.2)$$

$$a_1^- = \frac{d}{dr} + w_1(r), \quad (2.3)$$

onde  $w_1(r)$  é chamado de superpotencial.

Podemos perceber que o hamiltoniano dado em (2.1) é um operador diferencial de ordem 2 e os operadores bosônicos dados em (2.2) e (2.3) são operadores diferenciais de ordem 1. Então faremos o produto de  $a_1^+$  e  $a_1^-$  e depois igualaremos com a equação (2.1), fatorizando assim o hamiltoniano dado em (2.1). Para simplificação dos cálculos adotaremos  $\hbar = 2m = 1$ .

Multiplicando as equações (2.2) e (2.3), temos:

$$a_1^+ a_1^- = -\frac{d^2}{dr^2} - w_1' + w_1^2, \quad (2.4)$$

onde a notação  $w_1'$  representa  $\frac{dw}{dr}$ .

Usando os operadores bosônicos dados em (2.2) e (2.3), podemos escrever  $H_1$  da seguinte forma:

$$H_1 = a_1^+ a_1^- + E_0^{(1)}, \quad (2.5)$$

o termo  $E_0^{(1)}$  (autovalor do estado fundamental para o primeiro hamiltoniano) foi adicionado para garantir que o hamiltoniano original tenha estado fundamental com autovalor zero.

Substituindo (2.1) e (2.4) em (2.5) e fazendo uma manipulação algébrica, obtemos:

$$w_1^2 - w_1' = V_1(r) - E_0^{(1)}, \quad (2.6)$$

A equação (2.6) é conhecida como equação de Riccati e sua solução implica em encontrar o superpotencial  $w_1$  e o autovalor  $E_0^{(1)}$ .

Invertendo agora os operadores bosônicos, iremos obter  $H_2$  (o segundo hamiltoniano), que é o companheiro supersimétrico de  $H_1$ :

$$H_2 = a_1^- a_1^+ + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dr^2} + w_1' + w_1^2 + E_0^{(1)}, \quad (2.7)$$

Porém  $H_2$  pode ser escrito em função de novos operadores bosônicos  $a_2^+$  e  $a_2^-$  da seguinte forma:

$$H_2 = a_2^+ a_2^- + E_0^{(2)}, \quad (2.8)$$

onde  $E_0^{(2)}$  corresponde ao autovalor do estado fundamental para o segundo hamiltoniano e os operadores  $a_2^+$  e  $a_2^-$  podem ser escritos da seguinte forma:

$$a_2^+ = -\frac{d}{dr} + w_2(r), \quad (2.9)$$

$$a_2^- = \frac{d}{dr} + w_2(r), \quad (2.10)$$

onde  $w_2(r)$  corresponde ao superpotencial para o segundo hamiltoniano.

Multiplicando as equações (2.9) e (2.10), obtemos:

$$a_2^+ a_2^- = -\frac{d^2}{dr^2} - w_2' + w_2^2, \quad (2.11)$$

e substituindo esta expressão na equação (2.8), obtemos:

$$H_2 = -\frac{d^2}{dr^2} - w_2' + w_2^2 + E_0^{(2)}. \quad (2.12)$$

Igualando a equação (2.7) com a equação (2.12), teremos:

$$w_1' + w_1^2 + E_0^{(1)} = -w_2' + w_2^2 + E_0^{(2)}, \quad (2.13)$$

onde  $w_1$  e  $E_0^{(1)}$  já são valores conhecidos de quando a equação (2.6) foi resolvida. Portanto teremos que encontrar o valor de  $w_2$  e  $E_0^{(2)}$  na equação (2.13) que é novamente uma equação de Riccati.

Depois de encontrado os valores de  $w_2$  e  $E_0^{(2)}$ , podemos inverter os operadores  $a_2^+$  e  $a_2^-$  e encontrar  $H_3$  que é o companheiro supersimétrico de

$H_2$ :

$$H_3 = a_2^- a_2^+ + E_0^{(2)} = -\frac{d^2}{dr^2} + w_2' + w_2^2 + E_0^{(2)}. \quad (2.14)$$

Porém  $H_3$  pode ser escrito em função de novos operadores bosônicos

$a_3^+$  e  $a_3^-$ :

$$H_3 = a_3^+ a_3^- + E_0^{(3)}, \quad (2.15)$$

sendo  $E_0^{(3)}$  o autovalor de energia do estado fundamental para o terceiro

hamiltoniano e os operadores  $a_3^+$  e  $a_3^-$  são dados da seguinte forma:

$$a_3^+ = -\frac{d}{dr} + w_3(r), \quad (2.16)$$

$$a_3^- = \frac{d}{dr} + w_3(r), \quad (2.17)$$

onde  $w_3(r)$  é o superpotencial para o terceiro hamiltoniano.

Multiplicando as equações (2.16) e (2.17) obtemos:

$$a_3^+ a_3^- = -\frac{d^2}{dr^2} - w_3' + w_3^2. \quad (2.18)$$

Substituindo a equação (2.18) na equação (2.15) obtemos:

$$H_3 = -\frac{d^2}{dr^2} - w_3' + w_3^2 + E_0^{(3)}, \quad (2.19)$$

e novamente iremos chegar a uma equação de Riccati (igualando (2.14)

com (2.19)) para encontrar o valor de  $w_3$  e  $E_0^{(3)}$ .

Poderemos aplicar este processo n vezes e construiremos assim toda uma família de hamiltonianos que estão relacionados pela supersimetria, ou seja, um é companheiro supersimétrico do outro. De uma forma geral teremos:

$$H_n = a_n^+ a_n^- + E_0^{(n)} = -\frac{d^2}{dr^2} - w_n' + w_n^2 + E_0^{(n)}, \quad (2.20)$$

onde

$$a_n^+ = -\frac{d}{dr} + w_n(r), \quad (2.21)$$

$$a_n^- = \frac{d}{dr} + w_n(r). \quad (2.22)$$

O objetivo de aplicar este formalismo na equação de Schödinger é encontrar os autovalores de energia e as autofunções ( $\psi$ ).

Se aplicarmos o operador  $a_1^-$  dado em (2.3) em  $\psi_0(r)$  teremos:

$$a_1^- \psi_0(r) = 0. \quad (2.23)$$

O mesmo pode ser feito para qualquer Hamiltoniano da hierarquia usando os operadores  $a_n^-$  e as funções  $\psi_0^{(n)}(r)$ .

Assim, obtemos após alguma manipulação algébrica que

$$\psi_0^{(n)} = e^{-\int w_n dr}. \quad (2.24)$$

Desta expressão, poderemos encontrar as autofunções de onda do estado fundamental para cada membro da hierarquia a partir dos superpotenciais encontrados na resolução das equações de Riccati.

Para encontrarmos a autofunção do primeiro estado excitado ( $\psi_1^{(1)}$ ) basta aplicar o operador  $a_1^+$  em  $\psi_0^{(2)}$  (função de onda do estado fundamental para o segundo hamiltoniano). Aplicando sucessivas vezes os operadores, podemos obter as autofunções de todos os níveis de energia:



$$\psi_1^{(1)} = a_1^+ \psi_0^{(2)}$$

$$\psi_2^{(1)} = a_1^+ \psi_1^{(2)} = a_1^+ a_2^+ \psi_0^{(3)}$$

$$\psi_3^{(1)} = a_1^+ \psi_2^{(2)} = a_1^+ a_2^+ \psi_1^{(3)} = a_1^+ a_2^+ a_3^+ \psi_0^{(4)}$$

•

•

•

$$\psi_n^{(1)} = a_1^+ a_2^+ a_3^+ \dots a_n^+ \psi_0^{(n+1)},$$

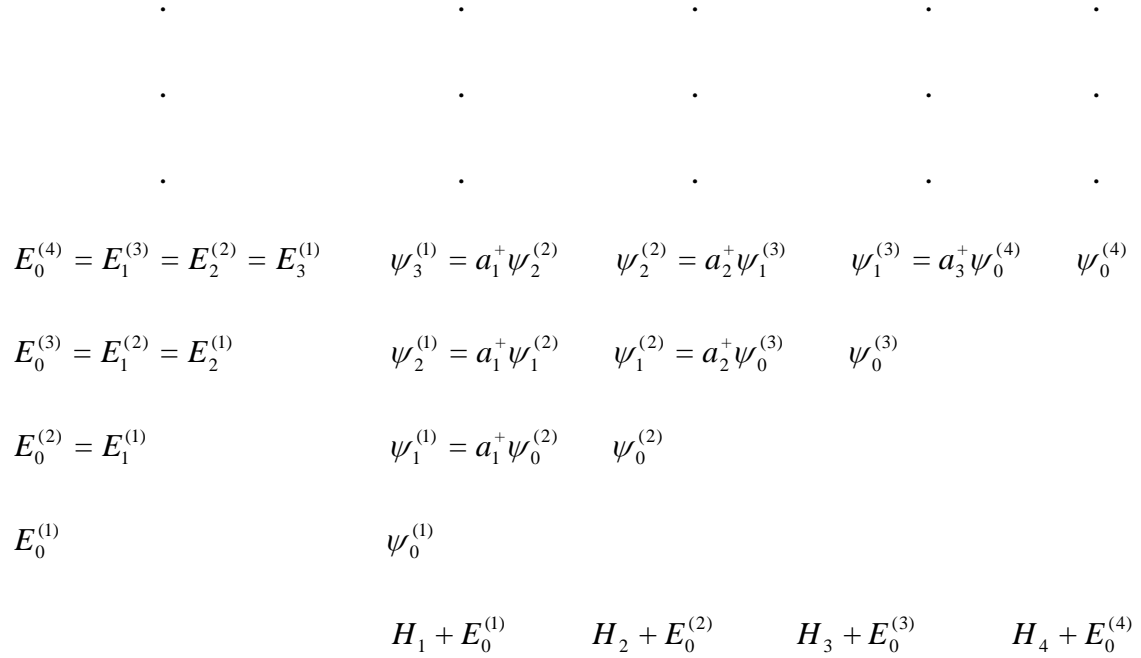
uma observação importante a se fazer é que não estamos levando em conta as condições de normalização das autofunções nestas igualdades. As constantes de normalização podem ser obtidas posteriormente, uma vez conhecidas as expressões das funções de onda.

Portanto, verifica-se que construindo toda a família de hamiltonianos, é possível obter os autovalores de energia e as autofunções para todos os níveis de energia.

A construção da hierarquia completa só é possível quando o superpotencial pode ser determinado para todos os membros. Nos capítulos III e IV resolveremos o oscilador harmônico e o átomo de hidrogênio, aplicando o formalismo aqui apresentando.

A figura 1 abaixo representa a relação entre as autofunções e os autovalores obtidos na construção da superfamília de hamiltonianos através

da supersimetria. Esta construção só pode ser feita completamente quando o potencial for exatamente solúvel.



**Figura 1:** hierarquia de Hamiltonianos e a relação entre as autofunções e autovalores de energia obtidos através da supersimetria.

Nos casos em que os potenciais não são exatamente solúveis como mostraremos no capítulo V, como o potencial de Lennard-Jones (12,6), aliaremos a supersimetria ao método variacional para obter os autovalores da energia.

As referências [11-19] mostram o formalismo supersimétrico e algumas de suas aplicações na mecânica quântica.

### III OSCILADOR HARMÔNICO

O primeiro exemplo estudado usando o método da supersimetria é o problema do oscilador harmônico (encontrar os níveis de energia e as autofunções). O hamiltoniano original tomando  $\hbar = 2m = 1$  é dado por:

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2. \quad (3.1)$$

Vamos agora fatorar o hamiltoniano dado em (3.1) através dos operadores bosônicos de criação e destruição como mostrado no capítulo II e encontrar um superpotencial  $w_1$  e um autovalor de energia  $E_0^{(1)}$ .

Teremos então que

$$w_1 = x, \quad (3.2)$$

e como

$$x^2 - E_0^{(1)} = x^2 - 1, \quad (3.3)$$

obtemos então o autovalor da energia:

$$E_0^{(1)} = 1. \quad (3.4)$$

Como o superpotencial e o autovalor foi encontrado, de acordo com a equação (2.7), temos:

$$H_1 = a_1^+ a_1^- + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 + 1 - 1 = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2. \quad (3.5)$$

Para obtermos o companheiro supersimétrico de  $H_1$ , basta invertermos os operadores:

$$H_2 = a_1^- a_1^+ + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2 + w_1' + E_0^{(1)}. \quad (3.6)$$

Esse hamiltoniano ( $H_2$ ) pode ser escrito em função de novos operadores  $a_2^+$  e  $a_2^-$ , de acordo com o processo descrito no capítulo anterior, mostrado nas equações (2.8), (2.9) e (2.10).

Deve-se lembrar que o autovalor de energia do estado fundamental para o segundo hamiltoniano tem o mesmo valor do autovalor de energia para o primeiro estado excitado do primeiro hamiltoniano.

Substituindo os valores encontrados para  $w_1$  e para  $E_0^{(1)}$  na equação de Riccati correspondente mostrado no capítulo 2, temos:

$$x^2 + 2 = w_2^2 - w_2' + E_0^{(2)}, \quad (3.7)$$

o que nos leva a novamente

$$w_2 = x, \quad (3.8)$$

teremos então

$$x^2 + 2 = x^2 - 1 + E_0^{(2)}, \quad (3.9)$$

e o autovalor

$$E_0^{(2)} = 3. \quad (3.10)$$

Desta forma, encontramos os valores dos níveis de energia  $E_0^{(1)}$  e  $E_0^{(2)}$  e os superpotenciais  $w_1$  e  $w_2$  que serão usados para encontrar as autofunções (de acordo com o formalismo supersimétrico mostrado no capítulo II).

Invertendo os operadores  $a_2^+$  e  $a_2^-$ , teremos o terceiro hamiltoniano ( $H_3$ ), como mostrado no capítulo II.

Substituindo os valores encontrados para  $w_2$  e para  $E_0^{(2)}$  dados pela equação de Riccati correspondente (ver capítulo II), teremos:

$$x^2 + 1 + 3 = w_3^2 - w_3' + E_0^{(3)}. \quad (3.11)$$

Se tomarmos novamente

$$w_3 = x, \quad (3.12)$$

teremos

$$x^2 + 4 = x^2 - 1 + E_0^{(3)}, \quad (3.13)$$

e o autovalor

$$E_0^{(3)} = 5. \quad (3.14)$$

Podemos escrever o quarto hamiltoniano invertendo os operadores  $a_3^+$  e  $a_3^-$  e podemos escrever esse hamiltoniano em função de novos operadores  $a_4^+$  e  $a_4^-$  e assim por diante, até construirmos o n-ésimo hamiltoniano. Porém de acordo com as equações (3.2), (3.8) e (3.12), podemos generalizar que todos os superpotenciais tem a forma:

$$w_n = x. \quad (3.15)$$

E de acordo com as equações (3.4), (3.10) e (3.14), podemos generalizar que todos os valores de energia dos estados fundamentais podem ser escritos da seguinte forma geral:

$$E_0^{(n)} = 2n - 1, \text{ p/ } n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.16)$$

Como já são conhecidos todos os superpotenciais, podemos determinar as autofunções, pois de acordo com o formalismo supersimétrico apresentado no capítulo II,

$$\psi_0^{(1)} = e^{-\int w_1 dx}, \quad (3.17)$$

substituindo  $w_1 = x$ , temos:

$$\psi_0^{(1)} = e^{-\int x dx}. \quad (3.18)$$

Como

$$\int x dx = \frac{x^2}{2}, \quad (3.19)$$

podemos reescrever a equação (3.18):

$$\psi_0^{(1)} = e^{-(x^2/2)}, \quad (3.20)$$

a menos da constante de normalização.

Como o superpotencial é o mesmo para toda a hierarquia de hamiltonianos, todas as funções de onda do estado fundamental serão iguais:

$$\psi_0^{(1)} = \psi_0^{(2)} = \psi_0^{(3)} = \dots = \psi_0^{(n)} = e^{-(x^2/2)}. \quad (3.21)$$

Podemos determinar então  $\psi_1^{(1)}$  (função de onda do primeiro estado excitado). De acordo com o formalismo supersimétrico, temos que

$$\psi_1^{(1)} = a_1^+ \psi_0^{(2)} = 2xe^{-\frac{x^2}{2}}. \quad (3.22)$$

Podemos determinar  $\psi_2^{(1)}$  (função de onda do segundo estado excitado) agora que já conhecemos  $\psi_1^{(1)}$  dado em (3.22):

$$\psi_1^{(2)} = a_2^+ \psi_0^{(3)} = 2xe^{-\frac{x^2}{2}} \quad (3.23)$$

$$\psi_2^{(1)} = a_1^+ \psi_1^{(2)} = (4x^2 - 2)e^{-\frac{x^2}{2}}. \quad (3.24)$$

Para determinar o terceiro estado excitado ( $\psi_3^{(1)}$ ), fazemos

$$\psi_1^{(3)} = a_3^+ \psi_0^{(4)} = 2xe^{-\frac{x^2}{2}} \quad (3.25)$$

$$\psi_2^{(2)} = a_2^+ \psi_1^{(3)} = (4x^2 - 2)e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (3.26)$$

$$\psi_3^{(1)} = a_1^+ \psi_2^{(2)} = (8x^3 - 12x)e^{-\frac{x^2}{2}}. \quad (3.27)$$

Podemos encontrar as autofunções e os autovalores para qualquer estado excitado através desse formalismo. Para o n-ésimo estado excitado a função de onda é dada (como já mostrado na capítulo II) por:

$$\psi_n^{(1)} = a_1^+ a_2^+ a_3^+ \dots a_n^+ \psi_0^{(n+1)}. \quad (3.28)$$

Os resultados obtidos para os autovalores e as autofunções coincidem com os resultados encontrados na literatura, vide por exemplo, referências [4], [5] e [6].

## IV ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

Aplicaremos o formalismo supersimétrico agora para resolver o átomo de hidrogênio. A equação de Schrödinger é analiticamente solúvel para este tipo de potencial.

O potencial é conhecido como potencial coulombiano e é dado por:

$$V(r) = -\frac{1}{r}, \quad (4.1)$$

onde  $r$  é a coordenada radial do átomo.

O hamiltoniano original correspondente à coordenada radial é dado por (ver ref. [4] e [5]).

$$H = -\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad (4.2)$$

onde  $l$  denota o número quântico de momento angular e o termo  $\frac{1}{r^2}$  é o termo usual de barreira centrífuga. Estes termos aparecem como resultado da mudança de coordenadas cartesianas para esféricas na equação de Schrödinger. Observamos que a variável  $r$  é a coordenada radial que está definida entre 0 e  $\infty$ . Ela é, portanto, diferente da coordenada  $x$  unidimensional usada até o momento. Entretanto, o formalismo pode ser usado sem restrição para estes casos. Estamos considerando  $e=1$  e  $\hbar = 2m = 1$ , seguindo as mesmas suposições feitas até agora.



Iremos escrever agora a família de hamiltonianos. De acordo com o formalismo apresentado no capítulo II, o primeiro hamiltoniano pode ser escrito como:

$$H_1 = a_1^+ a_1^- + E_0^{(1)}, \quad (4.3)$$

onde  $a_1^+$  e  $a_1^-$  são operadores bosônicos de criação e destruição e podem ser escritos como:

$$a_1^+ = -\frac{d}{dr} + w_1 \quad (4.4)$$

$$a_1^- = \frac{d}{dr} + w_1. \quad (4.5)$$

Substituindo as equações (4.4) e (4.5) na equação (4.3), temos:

$$H_1 = -\frac{d^2}{dr^2} + w_1^2 - w_1' + E_0^{(1)}. \quad (4.6)$$

Igualando o hamiltoniano original como o hamiltoniano fatorizado

$H_1$ , temos:

$$-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2} = -\frac{d^2}{dr^2} + w_1^2 - w_1' + E_0^{(1)} \quad (4.7)$$

$$w_1^2 - w_1' + E_0^{(1)} = -\frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (4.8)$$

A equação (4.8) é conhecida como equação de Riccati. Teremos que encontrar um superpotencial ( $w_1$ ) e um autovalor  $E_0^{(1)}$  que satisfaça a equação (4.8).

Partiremos de um superpotencial ( $w_1$ ) dado por:

$$w_1 = \left( -\frac{a}{r} + c \right), \quad (4.9)$$

onde  $a$  e  $c$  são constantes.

Dois pares de valores ( $a$ ,  $c$ ) satisfazem a equação, mas somente um par é aceitável, que é o par que satisfaz a condição de normalização da função de onda.

Substituindo o superpotencial sugerido na expressão (4.9) na equação (4.8) e resolvendo a equação, temos:

$$w_1 = \left( \frac{-l-1}{r} + \frac{1}{2l+2} \right) \quad (4.10)$$

e

$$E_0^{(1)} = -\left( \frac{1}{4l^2 + 8l + 4} \right) = -\frac{1}{4(l+1)^2}. \quad (4.11)$$

Substituindo os valores encontrados para  $w_1$  dado em (4.10) e para  $E_0^{(1)}$  dado em (4.11) na equação (4.6), temos:

$$H_1 = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l^2 + l}{r^2} - \frac{1}{r}. \quad (4.12)$$

De acordo com o formalismo supersimétrico se invertermos os operadores  $a_1^+$  e  $a_1^-$ , obteremos  $H_2$  (companheiro supersimétrico de  $H_1$ ):

$$H_2 = a_1^- a_1^+ + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dr^2} + w_1^2 + w_1' + E_0^{(1)}. \quad (4.13)$$

Porém, podemos escrever  $H_2$  em função de novos operadores  $a_2^+$  e  $a_2^-$ , onde:

$$a_2^+ = -\frac{d}{dr} + w_2 \quad (4.14)$$

$$a_2^- = \frac{d}{dr} + w_2. \quad (4.15)$$

Teremos então:

$$H_2 = a_2^+ a_2^- + E_0^{(2)}, \quad (4.16)$$

onde  $E_0^{(2)}$  corresponde ao autovalor de energia do estado fundamental para o segundo hamiltoniano.

Igualando a equação (4.16) com a equação (4.13), temos:

$$H_2 = a_1^- a_1^+ + E_0^{(1)} = a_2^+ a_2^- + E_0^{(2)}. \quad (4.17)$$

Substituindo as equações (4.4), (4.5), (4.14) e (4.15) na equação (4.17), temos:

$$w_1^2 + w_1' + E_0^{(1)} = w_2^2 - w_2' + E_0^{(2)}. \quad (4.18)$$

Substituindo os valores encontrados para  $w_1$  dado pela expressão (4.10) e para  $E_0^{(1)}$  dado pela expressão (4.11), temos:

$$\left(\frac{-l-1}{r} + \frac{1}{2l+2}\right)^2 + \left(\frac{-l-1}{r} + \frac{1}{2l+2}\right)' - \frac{1}{4(l+1)^2} = w_2^2 - w_2' + E_0^{(2)}. \quad (4.19)$$

Resolvendo a equação (4.19), encontramos os seguintes valores para o superpotencial  $w_2$  e o autovalor  $E_0^{(2)}$ :

$$w_2 = \left(\frac{-l-2}{r} + \frac{1}{2l+4}\right) \quad (4.20)$$

e

$$E_0^{(2)} = -\left(\frac{1}{4l^2 + 16l + 16}\right) = -\frac{1}{4(l+2)^2}. \quad (4.21)$$

Como

$$H_2 = -\frac{d^2}{dr^2} + w_2^2 - w_2' + E_0^{(2)}, \quad (4.22)$$

então substituindo os resultados obtidos na expressão (4.20) nas expressões (4.21) e (4.22), temos:

$$H_2 = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l^2 + 3l + 2}{r^2} - \frac{1}{r}. \quad (4.23)$$

Invertendo os operadores bosônicos  $a_2^+$  e  $a_2^-$ , obtemos  $H_3$  (companheiros supersimétricos de  $H_2$ ):

$$H_3 = a_2^- a_2^+ + E_0^{(2)} = -\frac{d^2}{dr^2} + w_2^2 + w_2' + E_0^{(2)} \quad (4.24)$$

e  $H_3$  pode ser escrito através de novos operadores  $a_3^+$  e  $a_3^-$  dados por:

$$a_3^+ = -\frac{d}{dr} + w_3 \quad (4.25)$$

$$a_3^- = \frac{d}{dr} + w_3, \quad (4.26)$$

então

$$H_3 = a_3^+ a_3^- + E_0^{(3)}, \quad (4.27)$$

onde  $E_0^{(3)}$  corresponde ao autovalor de energia do estado fundamental para o terceiro hamiltoniano.

Substituindo as expressões (4.27), (4.26) e (4.25) na equação (4.24) e resolvendo a equação de Riccati correspondente, obtemos:

$$w_3 = \left( \frac{-l-3}{r} + \frac{1}{2l+6} \right) \quad (4.28)$$

e

$$E_0^{(3)} = - \left( \frac{1}{4l^2 + 24l + 36} \right) = - \frac{1}{4(l+3)^2}. \quad (4.29)$$

Invertendo os operadores  $a_3^+$  e  $a_3^-$  obtemos  $H_4$ :

$$H_4 = a_3^- a_3^+ + E_0^{(3)} = - \frac{d^2}{dr^2} + w_3^2 + w_3' + E_0^{(3)}. \quad (4.30)$$

Porém, podemos escrever  $H_4$  em função de novos operadores  $a_4^+$  e  $a_4^-$ , definidos por:

$$a_4^+ = - \frac{d}{dr} + w_4 \quad (4.31)$$

$$a_4^- = \frac{d}{dr} + w_4, \quad (4.32)$$

então

$$H_4 = a_4^+ a_4^- + E_0^{(4)}, \quad (4.33)$$

onde  $E_0^{(4)}$  corresponde ao autovalor de energia do estado fundamental para o quarto hamiltoniano.

Substituindo as equações (4.33), (4.32) e (4.31) na equação (4.30) e resolvendo a equação de Riccati correspondente, obtemos:

$$w_4 = \left( \frac{-l-4}{r} + \frac{1}{2l+8} \right) \quad (4.34)$$

e

$$E_0^{(4)} = - \left( \frac{1}{4l^2 + 32l + 64} \right) = - \frac{1}{4(l+4)^2}. \quad (4.35)$$

Podemos repetir esse processo e assim construir toda a família de hamiltonianos. Chegamos a uma forma geral para o hamiltoniano:

$$H_{n+1} = a_{n+1}^+ a_{n+1}^- + E_0^{(n+1)}, \quad (4.36)$$

onde os operadores bosônicos podem ser escritos de maneira generalizada da seguinte forma:

$$a_{n+1}^+ = -\frac{d}{dr} + w_{n+1} = -\frac{d}{dr} - \frac{(l+n+1)}{r} + \frac{1}{2(l+n+1)} \quad (4.37)$$

$$a_{n+1}^- = \frac{d}{dr} + w_{n+1} = \frac{d}{dr} - \frac{(l+n+1)}{r} + \frac{1}{2(l+n+1)}. \quad (4.38)$$

Observamos que, diferentemente do oscilador harmônico, os superpotenciais diferem entre si.

Chegamos a uma expressão geral para o autovalor de energia:

$$E_0^{(n+1)} = -\frac{1}{4(l+n+1)^2}, \text{ para } n=0,1,2,3,\dots \quad (4.39)$$

Encontraremos agora as funções de onda para o átomo de hidrogênio. De acordo com o formalismo supersimétrico apresentado no capítulo II, temos que:

$$\psi_0^{(1)} = e^{-\int w_1 dr}, \quad (4.40)$$

substituindo o valor encontrado para  $w_1$  dado pela expressão (4.10), temos:

$$\psi_0^{(1)} = e^{-\left[(-l-1)\ln r + \frac{r}{2l+2}\right]}, \quad (4.41)$$

então

$$\psi_0^{(1)} = r^{(l+1)} \cdot e^{-\frac{r}{2l+2}}. \quad (4.42)$$

Sabemos que  $n$  é o número quântico radial,  $l$  é o número quântico de momento angular e  $N$  é o número quântico total e essas grandezas se relacionam por

$$N = n + l + 1. \quad (4.43)$$

Para compararmos os resultados obtidos com os encontrados na literatura a fim de verificar a eficácia do método, consideraremos para o estado fundamental

$$n = 0 \quad (4.44)$$

$$l = 0, \quad (4.45)$$

então

$$N = 1. \quad (4.46)$$

Desse modo temos que

$$\psi_0^{(1)} = r.e^{-\frac{r}{2}}. \quad (4.47)$$

Encontraremos agora a função de onda para o primeiro estado excitado ( $\psi_1^{(1)}$ ). Para isso, de acordo com o formalismo apresentado no capítulo II, calcularemos  $\psi_0^{(2)}$ :

$$\psi_0^{(2)} = e^{-\int w_2 dr}. \quad (4.48)$$

Substituindo o valor encontrado para  $w_2$  dado pela expressão (4.20), temos:

$$\psi_0^{(2)} = e^{-(-l-2)\ln r + \frac{r}{2l+4}}, \quad (4.49)$$

então

$$\psi_0^{(2)} = r^{(l+2)} . e^{-\frac{r}{2l+4}} . \quad (4.50)$$

Aplicando o operador  $a_1^+$  em  $\psi_0^{(2)}$  acharemos  $\psi_1^{(1)}$ :

$$\psi_1^{(1)} = a_1^+ \psi_0^{(2)} = r^{l+1} . e^{-\frac{r}{2l+4}} \left[ -2l - 3 + r \left( \frac{4l + 6}{4l^2 + 12l + 8} \right) \right] . \quad (4.51)$$

Adotando para o primeiro nível de energia

$$n = 1 \quad (4.52)$$

$$l = 0, \quad (4.53)$$

então

$$N = 2 . \quad (4.54)$$

temos

$$\psi_1^{(1)} = r . e^{-\frac{r}{4}} \left( -3 + \frac{3r}{4} \right) . \quad (4.55)$$

Calcularemos agora a função de onda para o segundo estado excitado ( $\psi_2^{(1)}$ ). Para isso calcularemos primeiramente a função de onda do estado fundamental para o terceiro hamiltoniano ( $\psi_0^{(3)}$ ) e depois a função de onda do primeiro estado excitado para o segundo hamiltoniano ( $\psi_1^{(2)}$ ) de acordo com o formalismo explicitado no capítulo II:

$$\psi_0^{(3)} = e^{-\int w_3 dr} . \quad (4.56)$$

Substituindo o valor encontrado para  $w_3$  dado pela expressão (4.28)

temos:

$$\psi_0^{(3)} = r^{(l+3)} . e^{-\frac{r}{2l+6}} \quad (4.57)$$



$$\psi_1^{(2)} = a_2^+ \psi_0^{(3)} = r^{l+2} \cdot e^{-\frac{r}{2l+6}} \left[ -2l - 5 + r \left( \frac{4l+10}{4l^2 + 20l + 24} \right) \right], \quad (4.58)$$

onde  $a_2^+$  é dado pela expressão (4.14).

Adotando para o segundo nível de energia

$$n = 2 \quad (4.59)$$

$$l = 0, \quad (4.60)$$

então

$$N = 3, \quad (4.61)$$

obtemos:

$$\psi_2^{(1)} = a_1^+ \psi_1^{(2)} = 5r \cdot e^{-\frac{r}{6}} \left[ 3 - r + \frac{r^2}{18} \right], \quad (4.62)$$

onde  $a_1^+$  é dado pela expressão (4.4).

Podemos dessa maneira encontrar as autofunções para todos os níveis de energia (estados excitados), aplicando os operadores nas autofunções antecedentes como mostrado no capítulo II.

Notamos que a forma geral para os autovalores de energia é dada por

$$E_{N,l} = -\frac{1}{4N^2}. \quad (4.63)$$

Com os resultados obtidos podemos concluir que estão de acordo com os encontrados na literatura, por exemplo, ver referências [4], [5] e [6].

## V MÉTODO VARIACIONAL

O método variacional é um método numérico que fornece os valores aproximados dos níveis de energia de um sistema quântico. Aqui ele será usado aliado ao formalismo supersimétrico para resolver a equação de Schrödinger para o potencial de Lennard-Jones (12,6).

O método consiste em expandir a função  $\psi$  em autoestado de H, denominados  $\psi_n$ :

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n, \quad (5.2)$$

onde

$$H\psi_n = E_n\psi_n. \quad (5.3)$$

Então, teremos:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_n \sum_m C_n^* \langle \psi_n | H | \psi_m \rangle C_m = \sum_n \sum_m C_n^* C_m E_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle, \quad (5.4)$$

usando as funções  $\psi_n$  ortonormais, temos que:

- para  $n \neq m$ , então  $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0$ , (5.5)

- para  $n = m$ , então  $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 1$ . (5.6)

Desta forma, a expressão (5.4) pode ser rearranjada e podemos escrever que:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |C_n|^2. \quad (5.7)$$

Da condição de ortonormalidade, sabemos que:

$$\sum_n |C_n|^2 = 1. \quad (5.8)$$

Finalmente, substituindo a equação (5.8) na equação (5.7), podemos escrever a seguinte desigualdade:

$$E_0 \leq \langle \psi | H | \psi \rangle, \quad (5.9)$$

ou seja, para determinar o valor de  $E_0$ , teremos que minimizar  $\langle \psi | H | \psi \rangle$ .

Este método é usado para calcular um limite superior para o autovalor de energia do estado fundamental. Neste contexto a função  $\psi$  é construída como sendo dependente de um certo número de parâmetros, a minimização da integral em (5.9) em relação a esses parâmetros fornece uma estimativa para  $E$ . Assim, quanto mais próxima a função estiver do que seria a função de onda real melhor será o resultado obtido.

O mesmo princípio pode ser usado para calcular valores de energia para estados excitados. Entretanto, o Método Variacional geralmente é usado apenas para o estado fundamental. Uma razão para essa limitação é a dificuldade em se encontrar as funções de onda apropriadas para os outros autoestados. O formalismo supersimétrico pode ser de grande utilidade para determinar essas outras autofunções. A hierarquia de hamiltonianos pode ser usada para esse fim.

## VI POTENCIAL DE LENNARD-JONES (12,6)

Um tipo de potencial muito utilizado na interação entre átomos, por exemplo, em Física Molecular e em problemas de biofísica molecular (ver ref. [7]), é o potencial de Lennard-Jones que é composto por um termo atrativo e um termo repulsivo. O potencial de Lennard-Jones é apresentado abaixo:

$$U(R) = \frac{B}{R^{12}} - \frac{A}{R^6},$$

onde o termo  $\frac{B}{R^{12}}$  representa uma interação repulsiva e o termo  $\frac{A}{R^6}$  uma interação atrativa. Nosso objetivo neste capítulo é resolver a equação de Schrödinger correspondente a esse potencial. Podemos escrever a equação da seguinte forma geral:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + D_e \left[ \left( \frac{r_e}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_e}{r} \right)^6 \right] \right\} \psi = E \psi, \quad (6.1)$$

onde  $D_e$  é a energia de dissociação e  $r_e$  é a distância internuclear de equilíbrio.

Faremos as seguintes mudanças de variáveis para simplificar a notação:

$$x = \frac{r}{r_e}, \quad (6.2)$$

$$\lambda = \frac{2mr_e^2 D_e}{\hbar^2}, \quad (6.3)$$

$$\varepsilon = \frac{2mr_e^2 E}{\hbar^2}. \quad (6.4)$$

Assim, a expressão (6.1), torna-se:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + \lambda \left[ \frac{1}{x^{12}} - 2\frac{1}{x^6} \right] \right\} \psi = \varepsilon \psi. \quad (6.5)$$

Pode-se notar que existe apenas a constante  $\lambda$  livre no problema.

**VI.1 RESOLVENDO A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER  
PARA O POTENCIAL DE LENNARD-JONES (12,6) TOMANDO  
 $l = 0$  PARA O ESTADO FUNDAMENTAL:**

Resolveremos inicialmente o potencial de Lennard-Jones (12,6) com  $l = 0$ , ou seja, fazendo  $l = 0$  na expressão (6.5) teremos:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \lambda \left[ \frac{1}{x^{12}} - \frac{2}{x^6} \right] \right\} \psi = \varepsilon \psi, \quad (6.1.1)$$

onde

$$V(x) = \frac{\lambda}{x^{12}} - \frac{2\lambda}{x^6} \quad (6.1.2)$$

é o potencial de Lennard-Jones (12,6) e

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\lambda}{x^{12}} - \frac{2\lambda}{x^6} \quad (6.1.3)$$

é o hamiltoniano.

Aplicando o formalismo supersimétrico, encontramos a seguinte equação para o superpotencial

$$w_1^2 - w_1' = \frac{\lambda}{x^{12}} - \frac{2\lambda}{x^6} + E_0^{(1)}. \quad (6.1.4)$$

Para essa equação não é conhecida uma solução analítica. Vamos resolvê-la aproximadamente usando o método variacional.

Vamos assumir uma função do tipo

$$w(x) = -\frac{B}{x^6} + A - \frac{H}{x}, \quad (6.1.5)$$

onde A e B são parâmetros obtidos da comparação do potencial efetivo com o potencial original e H será nosso parâmetro variacional. O potencial efetivo ( $V_{ef}$ ) será expresso então por:

$$V_{ef}(x) = w^2(x) - w'(x) = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2B}{x^7}(H-3) - \frac{2AB}{x^6} + \frac{H}{x^2}(H-1) - \frac{2AH}{x} + A^2. \quad (6.1.6)$$

Este é o potencial efetivo e H é o valor que minimiza a expressão (6.1.10).

A função de onda é dada por:

$$\psi(x) = e^{-\int w(x)dx}. \quad (6.1.7)$$

Calculando a integral  $\int w(x)dx$ , temos:

$$\int w(x)dx = \int \left[ -\frac{B}{x^6} + A - \frac{H}{x} \right] dx = \frac{B}{5x^5} + Ax - H \ln x. \quad (6.1.8)$$

Substituindo a equação (6.1.8) na equação (6.1.7), temos:

$$\psi(x) = e^{-\frac{B}{5x^5} - Ax} \cdot x^H. \quad (6.1.9)$$

Foi feito um gráfico, onde foi visto que esta função é aceitável, ou seja, é normalizável, vimos por exemplo que para  $x \rightarrow 0 \Rightarrow \psi(x) \rightarrow 0$  e para  $x \rightarrow \infty \Rightarrow \psi(x) \rightarrow 0$ .

De acordo com o método variacional, já explicitado na seção acima, a energia será encontrada pela minimização de:

$$\varepsilon = \frac{\int_0^{\infty} \psi(x) \cdot \left[ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\lambda}{x^{12}} - \frac{2\lambda}{x^6} \right] \cdot \psi(x) dx}{\int_0^{\infty} \psi^2(x) dx}, \quad (6.1.10)$$

onde  $\psi(x)$  é dada em (6.1.9).

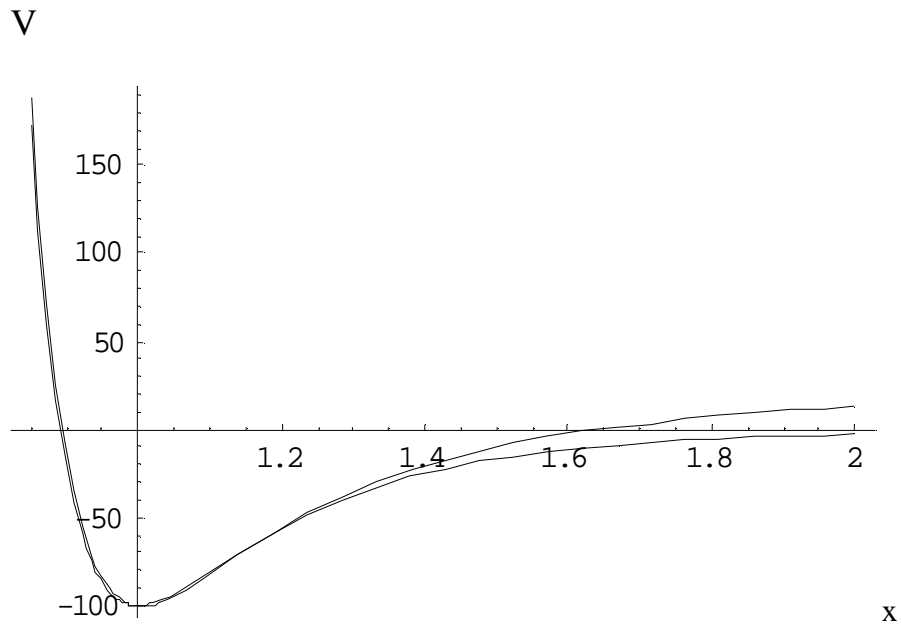
A minimização foi feita no software Mathematica e o resultado é mostrado nas tabelas 1 e 2.

As constantes A e B foram fixadas da comparação do potencial efetivo dado pela expressão (6.1.6) com o potencial original dado pela expressão (6.1.2). Igualando os termos de mesmo potencial temos:

$$\frac{B^2}{x^{12}} = \frac{\lambda}{x^{12}} \text{ e } \frac{2AB}{x^6} = \frac{2\lambda}{x^6}. \text{ Daí temos que } A = B = \sqrt{\lambda}.$$

A figura 2 mostra a comparação entre o potencial original e o potencial efetivo, usando o parâmetro H obtido da minimização de (6.1.10).





**Figura 2:** Comparação entre o potencial efetivo ( $V_{ef}$ ) dado em (6.1.6) e o potencial original dado em (6.1.2). Os valores tomados foram:  $x$  variando de 0.85 à 2,  $\lambda = 100$ ,  $A = 10$ ,  $B = 10$  e  $H = 3.61$ .

**VI.2 RESOLVENDO A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER  
PARA O POTENCIAL DE LENNARD-JONES (12,6) TOMANDO  
 $l \neq 0$  PARA O ESTADO FUNDAMENTAL**

Resolveremos agora a equação de Schrödinger para o potencial de Lennard-Jones (12,6) levando em consideração o termo de barreira centrífuga.

A equação é dada por:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + \lambda \left[ \frac{1}{x^{12}} - \frac{2}{x^6} \right] \right\} \psi = \varepsilon \psi, \quad (6.1.11)$$

onde o hamiltoniano é expresso por:

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{\lambda}{x^{12}} - \frac{2\lambda}{x^6}. \quad (6.1.12)$$

O superpotencial sugerido é o mesmo dado pela expressão (6.1.5), portanto a função de onda será a mesma dada pela expressão (6.1.9). Porém a expressão a ser minimizada para se encontrar a energia levará em consideração o termo de barreira centrífuga e será dada por:

$$\varepsilon = \frac{\int_0^{\infty} \psi(x) \cdot \left[ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{\lambda}{x^{12}} - \frac{2\lambda}{x^6} \right] \psi(x) dx}{\int_0^{\infty} \psi^2(x) dx}. \quad (6.1.13)$$

Os valores usados para os parâmetros  $\lambda$ , A e B são iguais aos usados para o caso anterior considerando  $l = 0$  e o procedimento para os cálculos de minimização é análogo.

Essa minimização é feita de maneira análoga à anterior com exceção do termo de barreira centrífuga. Esta minimização foi feita no software Mathematica.

### VI.3 RESULTADOS OBTIDOS NA RESOLUÇÃO DO POTENCIAL DE LENNARD-JONES (12,6)

Os resultados obtidos estão mostrados nas tabelas 1 e 2, onde os parâmetros A e B foram obtidos da comparação do potencial efetivo dado em (6.1.6) com o potencial original dado em (6.1.2). Os valores obtidos são representados por  $E_v$ .

$\lambda$	$l$	<b>H</b>	<b>A=B</b>	$E_v$
100	0	3.61	10	-0.500554
100	5	4.40	10	-0.253117
100	10	8.55	10	-0.345022
900	0	3.52	30	-0.811508
900	5	3.70	30	-0.779916
900	10	4.25	30	-0.696033

**Tabela 1:** Resultados encontrados na minimização de energia  $E_v$  das expressões (6.1.10) e (6.1.13). Aqui foram tomados os seguintes valores para  $\lambda$ : 100 e 900.

$\lambda$	$l$	<b>H</b>	<b>A=B</b>	$E_v$
2500	0	3.51	50	-0.884164
2500	5	3.62	50	-0.872536
2500	10	3.91	50	-0.841564
10000	0	3.51	100	-0.941046
10000	5	3.56	100	-0.938091
10000	10	3.70	100	-0.930215
10000	15	3.92	100	-0.917425
10000	20	4.24	100	-0.899732
10000	25	4.64	100	-0.877151

**Tabela 2:** Resultados encontrados na minimização de energia  $E_v$  das expressões (6.1.10) e (6.1.13). Aqui foram tomados os seguintes valores para  $\lambda$ : 2500 e 10000.

Na tabela 3 abaixo, colocaremos alguns resultados obtidos através do método variacional aliado à supersimetria a fim de compararmos com os resultados encontrados na literatura.

$\lambda$	$l$	$E_v$	$E_L$	$E_L - E_v$
100	0	-0.500554	-0.500973	-0.000419
900	0	-0.811508	-0.811519	-0.000011
2500	0	-0.884164	-0.884168	-0.000004
10000	0	-0.941046	-0.941046	0.000000
10000	5	-0.938091	-0.938080	0.000011
10000	10	-0.930215	-0.930210	0.000005
10000	15	-0.917425	-0.917420	0.000005
10000	20	-0.899732	-0.899730	0.000002
10000	25	-0.877151	-0.877150	0.000001

**Tabela 3:** Comparação entre os resultados encontrados no método variacional aliado à supersimetria  $E_v$  com outros resultados encontrados na literatura  $E_L$ . Para  $l=0$  o método utilizado pela literatura para se chegar aos níveis de energia foi o WKBJ, ver referência [9] e para  $l \neq 0$  foi utilizado o método da expansão  $1/N$  modificada, ver referência [10].

Podemos verificar da tabela 3 que os resultados obtidos através do método variacional estão de acordo com os outros métodos encontrados na literatura. Obtivemos resultados com precisão até a 6ª casa decimal, pode-se notar que para  $l=0$  e  $\lambda=10000$  os resultados coincidem (melhor

resultado) e para  $l=0$  e  $\lambda=100$  os resultados coincidem até a 3ª casa decimal.

Como o método para encontrar os autovalores de energia consiste em uma minimização de energia, podemos afirmar que quando  $E_v < E_L$ , o resultado obtido pelo método variacional será melhor do que o resultado encontrado na literatura. Podemos observar das tabelas 1 e 2 então que quando  $E_L - E_v > 0$  teremos um resultado melhor que o encontrado na literatura.

## VI.4 RESOLVENDO A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA O POTENCIAL DE LENNARD-JONES (12,6) TOMANDO $l = 0$ PARA O PRIMEIRO ESTADO EXCITADO

De acordo com o formalismo supersimétrico, invertendo os operadores  $a_1^+$  e  $a_1^-$ , encontramos o companheiro supersimétrico do potencial dado pela expressão (6.1.6):

$$V_{ef}' = w_1'^2 + w_1' + E_0^{(1)} = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2B}{x^7}(H+3) - \frac{2AB}{x^6} + \frac{H}{x^2}(H+1) - \frac{2AH}{x} + A^2 + E_0^{(1)}, \quad (6.1.14)$$

onde o valor de  $H$  é dado nas tabelas 1 e 2.

De acordo com o método variacional a energia será encontrada pela minimização de:

$$E_i = \frac{\int_0^\infty \psi(x) \left[ -\frac{d^2}{dx^2} + V_{ef}' \right] \psi(x) dx}{\int_0^\infty \psi^2(x) dx}. \quad (6.1.15)$$

Estamos assumindo uma função do tipo

$$w_2(x) = -\frac{B}{x^6} + A - \frac{K}{x}, \quad (6.1.16)$$

que produzirá um potencial que será o companheiro do potencial dado pela expressão (6.1.14):



$$V_{ef_2} = w_2^2(x) - w_2'(x) + E_0^{(2)} = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2B}{x^7}(K-3) - \frac{2AB}{x^6} + \frac{K}{x^2}(K-1) - \frac{2AK}{x} + A^2 + E_0^{(2)}.$$

(6.1.17)

E a função de onda será dada por:

$$\psi(x) = e^{-\frac{B}{5x^5} - Ax} \cdot x^K.$$

(6.1.18)

A função de onda acima corresponderá à  $\psi_0^{(2)}$  (função de onda do estado fundamental para o segundo hamiltoniano).

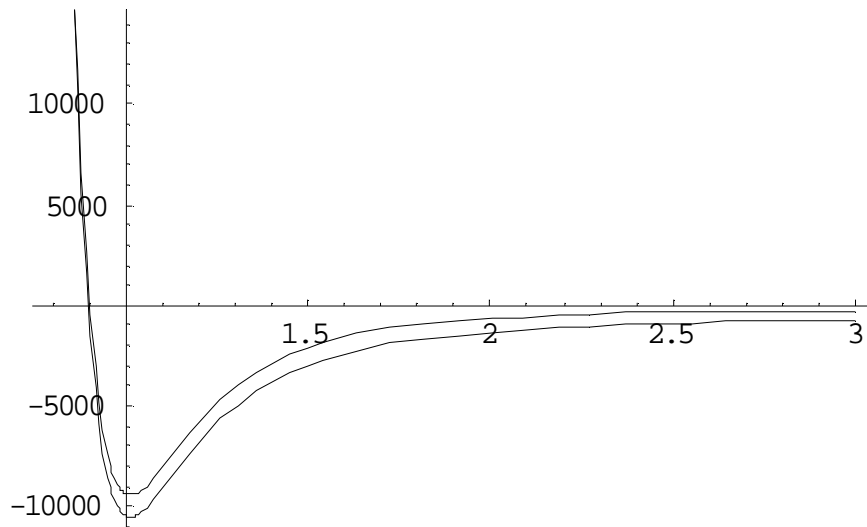
Para encontrarmos a função de onda para o primeiro estado excitado ( $\psi_1^{(1)}$ ), aplicamos o operador  $a_1^+$  dado em (2.2) em  $\psi_0^{(2)}$  (de acordo com o formalismo supersimétrico), onde o superpotencial  $w_1$  é dado pela expressão (6.1.5), com  $A = B = 100$ ,  $H = 3.51$  e  $K = 10.50$ :

$$\psi_1^{(1)} = \left( -\frac{d}{dx} + w_1(x) \right) \psi_0^{(2)}.$$

(6.1.19)

O gráfico da função  $\psi_1^{(1)}$  está no apêndice.

A figura 3 abaixo mostra a comparação entre o potencial dado pela expressão (6.1.14) e o potencial dado na expressão (6.1.17) usando o parâmetro  $K$  obtido da minimização de (6.1.15).



**Figura 3:** Comparação entre o potencial dado pela expressão (6.1.14) com  $H = 3.51$  (primeiro gráfico) e o potencial dado pela expressão (6.1.17) (segundo gráfico). Os valores foram tomados foram:  $x$  variando de 0.80 à 3,  $\lambda = 10000$ ,  $A = 100$ ,  $B = 100$  e  $K = 10.50$ .

Os resultados para os autovalores de energia para o primeiro estado excitado obtidos estão mostrados na tabela 4, onde  $A$  e  $B$  são parâmetros obtidos da comparação do potencial efetivo com o potencial original, ou seja,  $A = B = \sqrt{\lambda}$ , e  $H_1$  será nosso parâmetro variacional.

$\lambda$	$l$	K	A=B	$E_{v_1}$	$E_v$
100	0	10.09	10	-0.476314	-0.500554
900	0	10.46	30	-0.690408	-0.811508
2500	0	10.48	50	-0.79355	-0.884164
10000	0	10.50	100	-0.888577	-0.941046

**Tabela 4:** Resultados encontrados na minimização de energia da expressão (6.1.15).  $E_{v_1}$  indica a energia do primeiro estado excitado e  $E_v$  indica a energia do estado fundamental, ambas obtidas variacionalmente.

Os cálculos de minimização de energia da expressão (6.1.15) bem como os potenciais gerados por  $w_2$  foram realizados no software Mathematica e estão no Apêndice.

## **VII CONCLUSÕES**

Foi apresentado o formalismo supersimétrico e como este pode ser aplicado à Mecânica Quântica na resolução da equação de Schrödinger. Mostrou-se que podemos através do hamiltoniano original, criar uma família de hamiltonianos relacionados através da supersimetria e para isso é preciso encontrar um superpotencial através da fatorização do hamiltoniano. O superpotencial é encontrado através da solução da equação de Riccati. Com a solução desta equação encontramos o superpotencial e o autovalor de energia correspondente àquele nível de energia do hamiltoniano.

Para potenciais exatamente solúveis como o oscilador harmônico e o átomo de hidrogênio, conseguimos encontrar o superpotencial que satisfaz a equação de Riccati correspondente e assim encontrar as autofunções e os autovalores de energia para toda a hierarquia de Hamiltonianos. Em outras palavras, o problema é completamente resolvido.

Porém quando foi aplicado o método ao potencial de Lennard-Jones (12,6), não conseguimos encontrar um superpotencial que satisfizesse a equação de Riccati correspondente. Partimos então para um método numérico que nos desse os valores aproximados dos autovalores de energia e das autofunções de onda. O método utilizado foi o método variacional

que foi apresentado no capítulo V para determinação da energia do estado fundamental.

Porém o método variacional não foi utilizado sozinho, aliado a ele usamos a supersimetria para achar uma função de onda mais apropriada para a minimização da energia, que denominamos de função teste.

Mostramos através de uma comparação gráfica na figura 2 como o potencial efetivo que encontramos com o superpotencial usado se assemelhava bem ao potencial original para o problema do potencial de Lennard-Jones (12,6). E na tabela 3 foi mostrado a comparação dos resultados obtidos com o método variacional e com outros métodos encontrados na literatura, mostrando o bom resultado do método.

Foi obtido depois a autofunção e o nível de energia para o primeiro estado excitado, utilizando apenas um parâmetro variacional. De acordo com a comparação gráfica mostrada no apêndice, podemos comprovar que o potencial efetivo do segundo hamiltoniano se assemelha bem ao potencial efetivo do primeiro hamiltoniano. A tabela 4 mostrou a comparação entre o nível de energia do primeiro estado excitado e do estado fundamental.

O uso do formalismo da chamada MQS se mostra útil no estudo da equação de Schrödinger tanto nos casos em que a solução analítica é obtida, como em problemas em que métodos aproximativos (em especial, Método Variacional) necessitam ser usados.

## VIII REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] R. de Lima Rodrigues “The quantum mechanics susy algebra: An introduction review” e-print hep-th/0205017.
- [2] B. Mielmik and O. Rosas-Ortiz, J. Phys. A; Math. Gen 37, 10007 (2004).
- [3] O. L. de Lange and A. Welter Am. J. Phys. 60, 254 (1992).
- [4] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*. 3ed. N. Y. McGraw-Hill, 1968.
- [5] A. Beiser, *Concepts of Modern Physics*, McGraw-Hill Inc, New York (1963).
- [6] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, New York (1970).
- [7] Brooks III C. L., Karplus M., Pettitt B. M. Proteins: A Theoretical Perspective of Dynamics, Structure, and Thermodynamics. *Advances in Chemical Physics*. N. Y, v. LXXI, John Wiley & Sons, 1988.

- [8] E. Drigo Filho, Rev. Bras. Ens. Fis. 19, 152 (1997).
- [9] R. N. Kesarwani and Y. P. Varshni Can. J. Phys. 58, 363 (1980).
- [10] R. Dutt and Y. P. Varshni, J. Phys. B.: At. Mol. Phys. 20, 2434 (1987).
- [11] N. A. Alves, E. F. Drigo, The Factorisation Method and Supersymmetry. *Journal Physics A: Math. Gen.*, v. 21, p. 3215-3225, 1988.
- [12] F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, “Supersymmetry in Quantum Mechanics”, World Scientific, Singapore 2001.
- [13] G. Junker “Supersymmetric methods in quantum and statistical physics”, Springer, Berlin, 1996.
- [14] E. Drigo Filho and R. M. Ricotta Mod. Phys. Lett. A10, 1613 (1995).
- [15] E. Drigo Filho and R. M. Ricotta Phys. Lett. A269, 269 (2000).
- [16] G. R. P. Borges and E. Drigo Filho Int. J. Mod. Phys. A16, 4401, (2001).

[17] G. R. P. Borges e E. Drigo Filho, Rev. Bras. Ens. Fis. 21, 233 (1999).

[18] E. Drigo Filho and R. M. Ricotta Phys. Lett. A299, 137 (2002).

[19] E. Drigo Filho and R. M. Ricotta Phys Lett. A320, 95 (2003).

[20] G. Lévai, in: H. V. von Gevamb (Ed.), Lecture Notes in Phys., Vol. 427, p. 427, Springer, 1993.



**Parâmetros:**

**A:=50**

**B:=50**

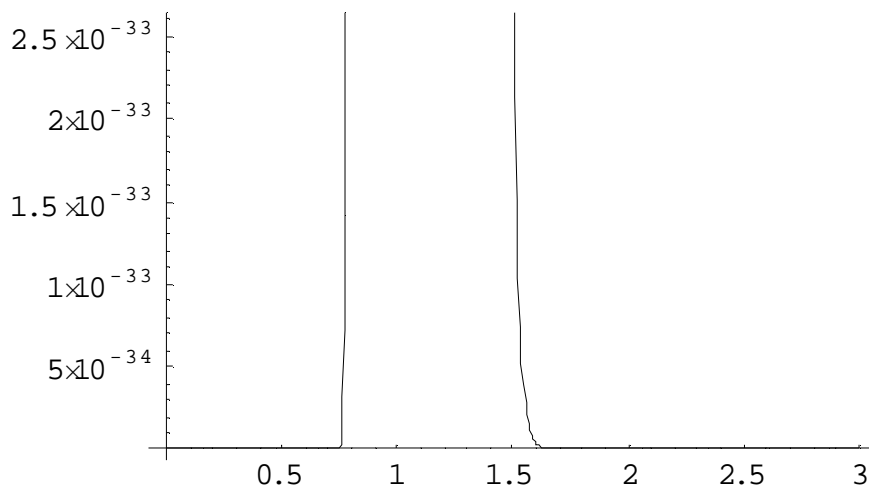
**Função de onda dada em (6.1.18):**

$$\text{psi}[x, K] = \text{Exp}\left[-\frac{B}{5x^5} - Ax\right] x^K$$

$$e^{-\frac{10}{x^5} - 50x} x^K$$

**Gráfico da função de onda dada acima:**

**Plot[psi[x, 3.51], {x, 0, 3}]**



Graphics

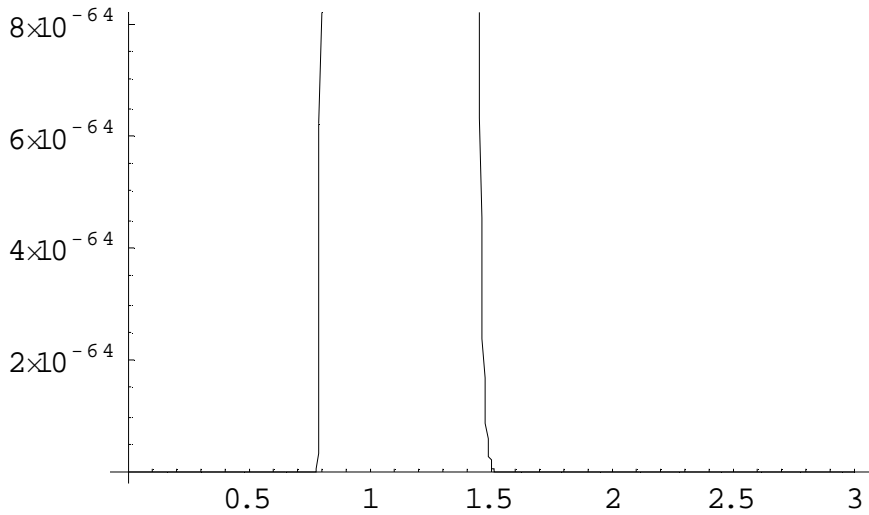
**Função de onda ao quadrado:**

$$\text{F0}[x, K] = \text{psi}[x, K]^2$$

$$e^{-\frac{20}{x^5} - 100x} x^{2K}$$

**Gráfico da função de onda ao quadrado:**

**Plot[F0[x, 3.51], {x, 0, 3}]**



Graphics

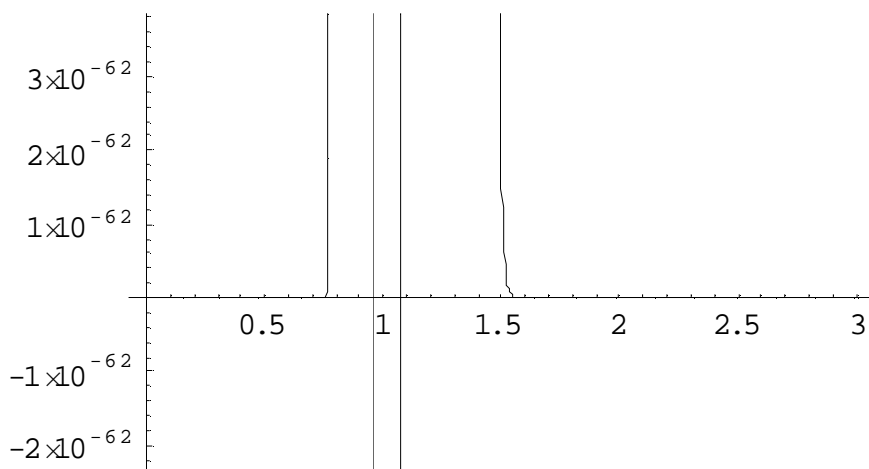
**Função de onda vezes a derivada segunda da própria função:**

**F1[x\_, K\_]=psi[x, K]D[psi[x, K], {x, 2}]**

$$e^{-\frac{10}{x^5}-50x} x^K \left( e^{-\frac{10}{x^5}-50x} (-1+K) K x^{-2+K} + 2 e^{-\frac{10}{x^5}-50x} K \left( -50 + \frac{50}{x^6} \right) x^{-1+K} + \left( e^{-\frac{10}{x^5}-50x} \left( -50 + \frac{50}{x^6} \right)^2 - \frac{300 e^{-\frac{10}{x^5}-50x}}{x^7} \right) x^K \right)$$

**Gráfico da função de onda vezes a derivada segunda da própria função:**

**Plot[F1[x, 3.51], {x, 0, 3}]**



Graphics

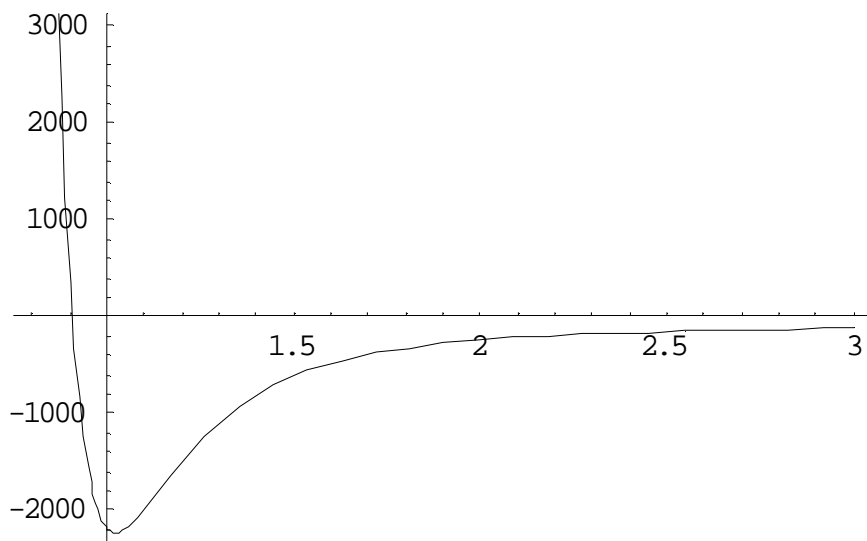
Potencial para o primeiro estado excitado dado em (6.1.14), (com H=3.51):

$$F2[x_] = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2B}{x^7} (3.51 + 3) - \frac{2AB}{x^6} + \frac{3.51}{x^2} (3.51 + 1) - \frac{2A \cdot 3.51}{x}$$

$$\frac{2500}{x^{12}} + \frac{651.}{x^7} - \frac{5000}{x^6} + \frac{15.8301}{x^2} - \frac{351.}{x}$$

Gráfico do potencial dado acima:

Plot[F2[x], {x, 0.8, 3}]



Graphics

Função de onda ao quadrado F0[x,K] vezes o potencial do primeiro estado excitado

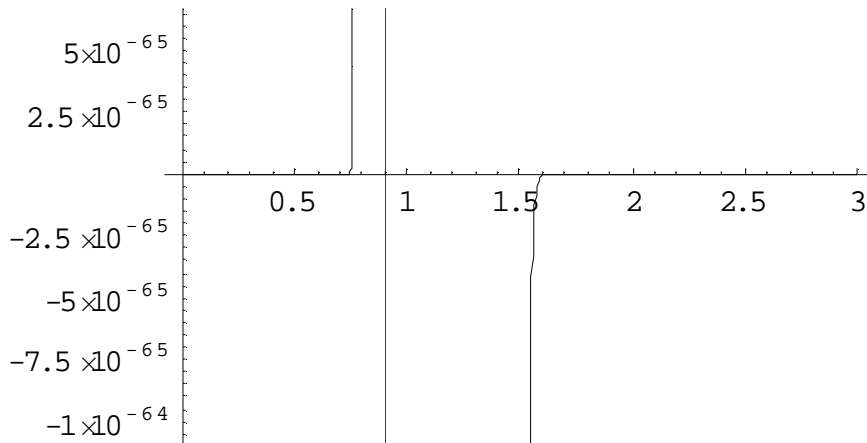
F2[x]:

F3[x\_, K\_]=F0[x, K] F2[x]

$$e^{-\frac{20}{x^5} - 100x} \left( \frac{2500}{x^{12}} + \frac{651.}{x^7} - \frac{5000}{x^6} + \frac{15.8301}{x^2} - \frac{351.}{x} \right) x^{2K}$$

Gráfico da função de onda ao quadrado F0[x,K] vezes o potencial do primeiro estado excitado F2[x]:

Plot[F3[x, 3.51], {x, 0, 3}]



Graphics

**Integração numérica da função de onda ao quadrado F0[x, K], para x variando de 0 a 10:**

**I0[K\_]=NIntegrate[F0[x, K], {x, 0, 10}]**

NIntegrate[F0[x,K],{x,0,10}]

**Integração numérica da função de onda vezes a derivada segunda da própria função**

**F1[x, K] para x variando de 0 a 10:**

**I1[K\_]=NIntegrate[F1[x, K], {x, 0, 10}]**

NIntegrate[F1[x,K],{x,0,10}]

**Integração numérica da função de onda ao quadrado vezes o potencial do primeiro estado excitado F3[x,K] para x variando de 0 a 10:**

**I2[K\_]=NIntegrate[F3[x, K], {x, 0, 10}]**

NIntegrate[F3[x,K],{x,0,10}]

**Equação a ser minimizada em relação ao parâmetro variacional**

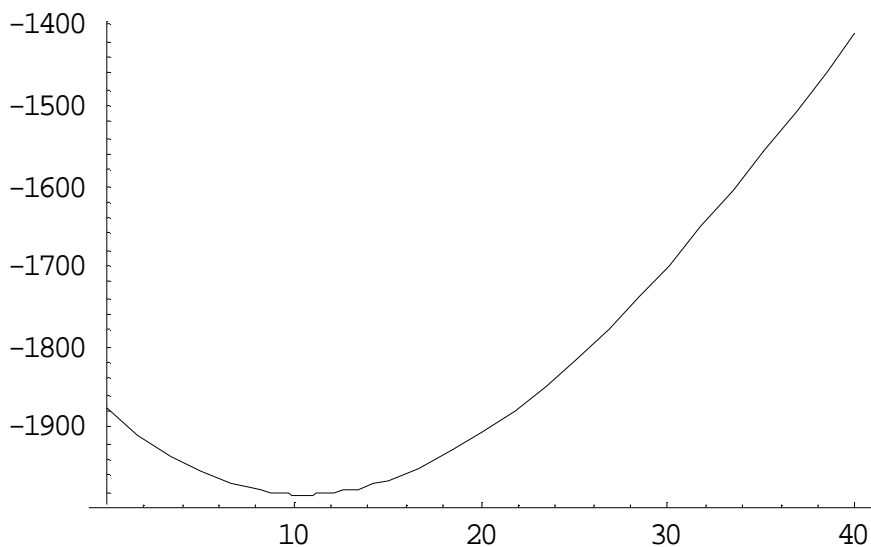
**K dada pela expressão (6.1.15):**

$$E_i[K_] = \frac{-I1[K] + I2[K]}{I0[K]}$$

$$\frac{-NIntegrate[F1[x, K], {x, 0, 10}] + NIntegrate[F3[x, K], {x, 0, 10}]}{NIntegrate[F0[x, K], {x, 0, 10}]}$$

**Gráfico para a minimização da equação dada acima E<sub>i</sub>[K] em relação ao parâmetro variacional K**

**Plot[Ei[K], {K, 0, 40}]**



Graphics

**Cálculo para encontrar o mínimo de energia da expressão dada acima:**

**FindMinimum[Ei[K], {K, 0, 40}]**

**{-1983.88, {K → 10.48}}**

**Cálculo do valor de energia:**

$$E_v = \frac{E_i[10.48]}{2500}$$

-0.79355

**Potencial companheiro do potencial dado pela expressão F2[x], com K=10.48:**

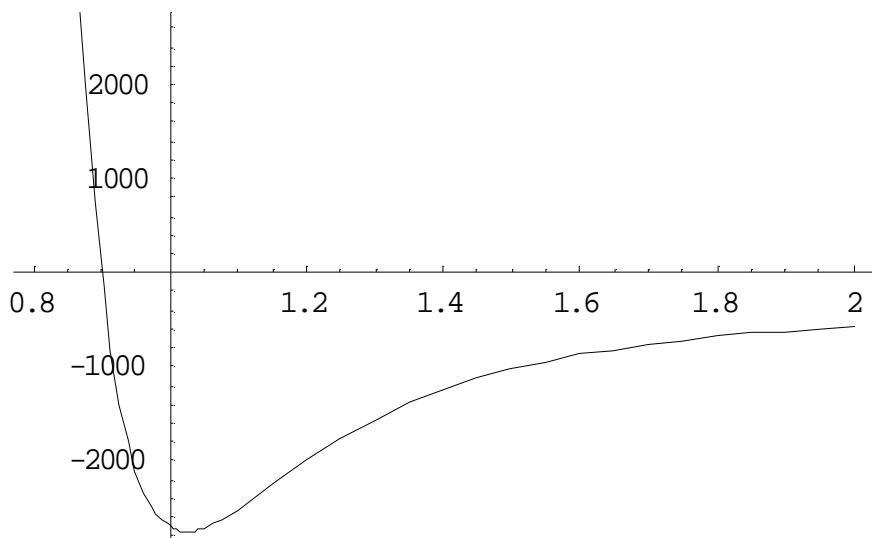
$$F4[x] = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2B}{x^7} (10.48 - 3) - \frac{2AB}{x^6} + \frac{10.48}{x^2} (10.48 - 1) - \frac{2A10.48}{x}$$

$$\frac{2500}{x^{12}} + \frac{748.}{x^7} - \frac{5000}{x^6} + \frac{99.3504}{x^2} - \frac{1048.}{x}$$

**Gráfico do potencial companheiro do potencial dado pela expressão F2[x,H], com**

**K=10.48:**

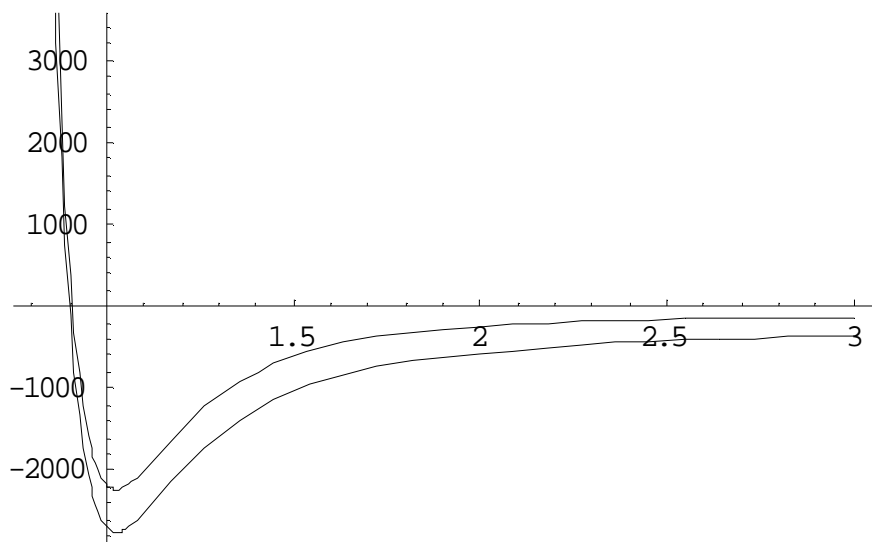
**Plot[F4[x], {x, 0.8, 2}]**



Graphics

**Comparação gráfica para os potenciais F2[x] e F4[x]:**

**Plot[{F2[x], F4[x]}, {x, 0.8, 3}]**



Graphics

**Parâmetros:**

**A:=100**

**B:=100**

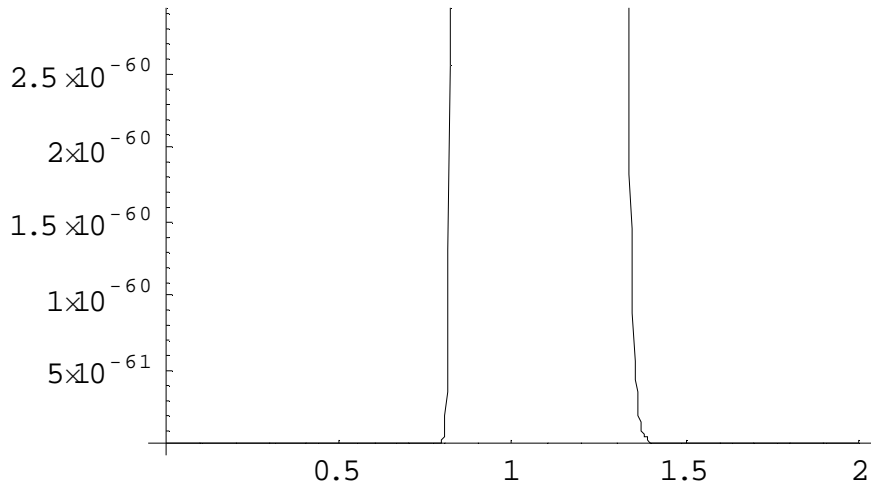
**Função de onda dada em (6.1.18):**

$$\text{psi}[x, K] = \text{Exp}\left[-\frac{B}{5x^5} - Ax\right] x^K$$

$$e^{-\frac{20}{x^5} - 100x} x^K$$

**Gráfico da função de onda dada acima:**

**Plot[psi[x, 3.51], {x, 0, 2}]**



Graphics

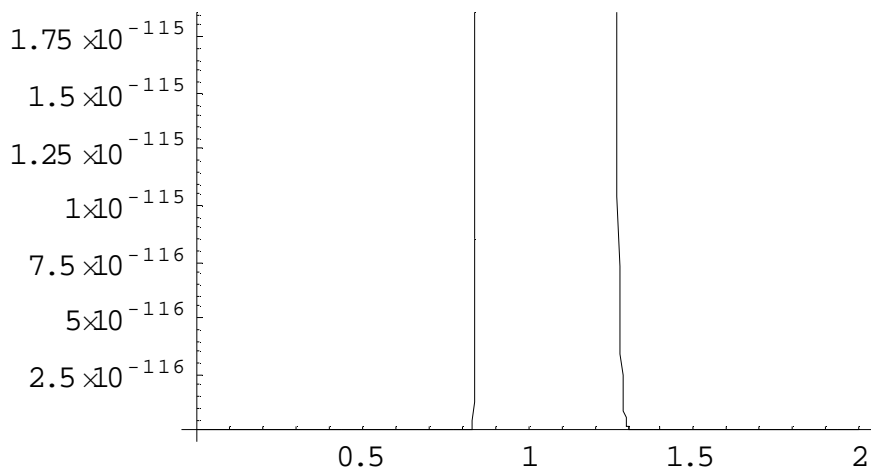
**Função de onda ao quadrado:**

$$\text{F0}[x, K] = \text{psi}[x, K]^2$$

$$e^{-\frac{40}{x^5} - 200x} x^{2K}$$

**Gráfico da função de onda ao quadrado:**

**Plot[F0[x, 3.51], {x, 0, 2}]**



Graphics

**Função de onda vezes a derivada segunda da própria função:**

**F1[x, K]=psi[x, K]D[psi[x, K], {x, 2}]**

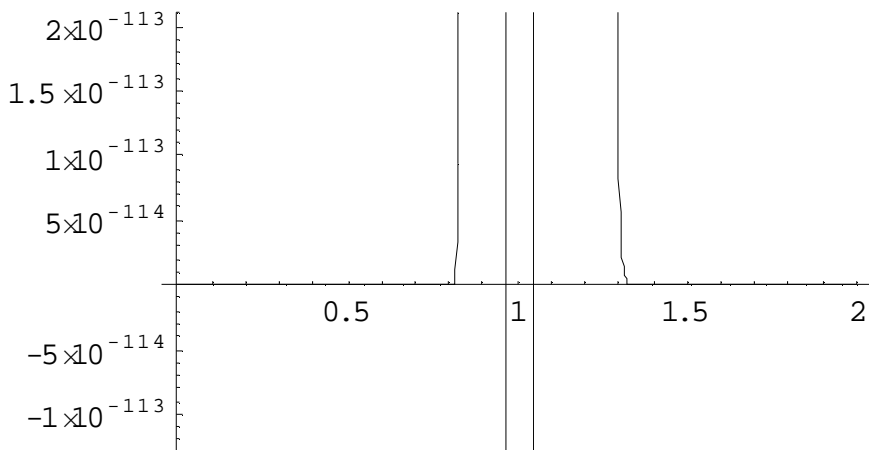
$$e^{-\frac{20}{x^5} - 100x} x^K$$

$$\left( e^{-\frac{20}{x^5} - 100x} (-1 + K) K x^{-2+K} + \right.$$

$$2 e^{-\frac{20}{x^5} - 100x} K \left( -100 + \frac{100}{x^6} \right) x^{-1+K} +$$

$$\left. \left( e^{-\frac{20}{x^5} - 100x} \left( -100 + \frac{100}{x^6} \right)^2 - \frac{600 e^{-\frac{20}{x^5} - 100x}}{x^7} \right) x^K \right)$$

**Gráfico da função de onda vezes a derivada segunda da própria função:  
Plot[F1[x, 3.51], {x, 0, 2}]**



Graphics

**Potencial para o primeiro estado excitado dado em (6.1.14), (com H=3.51):**

$$F2[x_] = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2 B (3.51 + 3)}{x^7} -$$

$$\frac{2 A B}{x^6} + \frac{3.51 (3.51 + 1)}{x^2} -$$

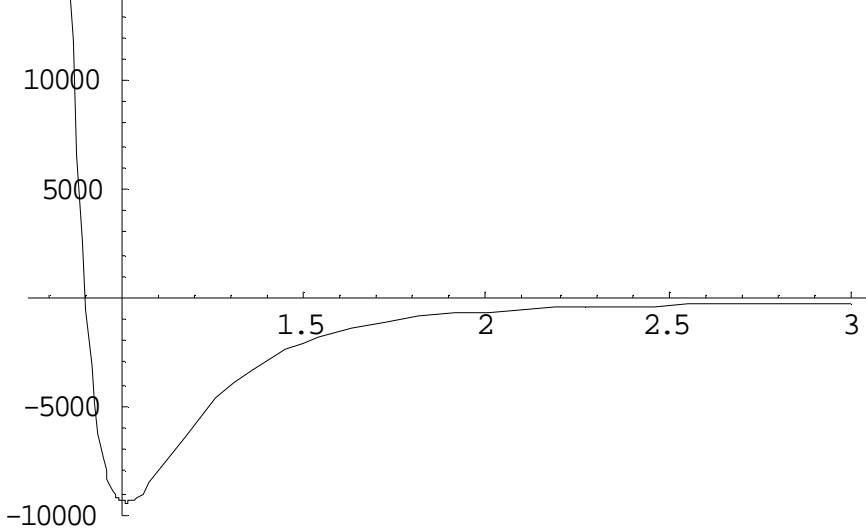
$$\frac{2 A 3.51}{x}$$



$$\frac{10000}{x^{12}} + \frac{1302.}{x^7} - \frac{20000}{x^6} + \frac{15.8301}{x^2} - \frac{702.}{x}$$

**Gráfico do potencial dado acima:**

**Plot[F2[x], {x, 0.8, 3}]**



Graphics

**Função de onda ao quadrado F0[x, K] vezes o potencial do primeiro estado excitado**

**F2[x]:**

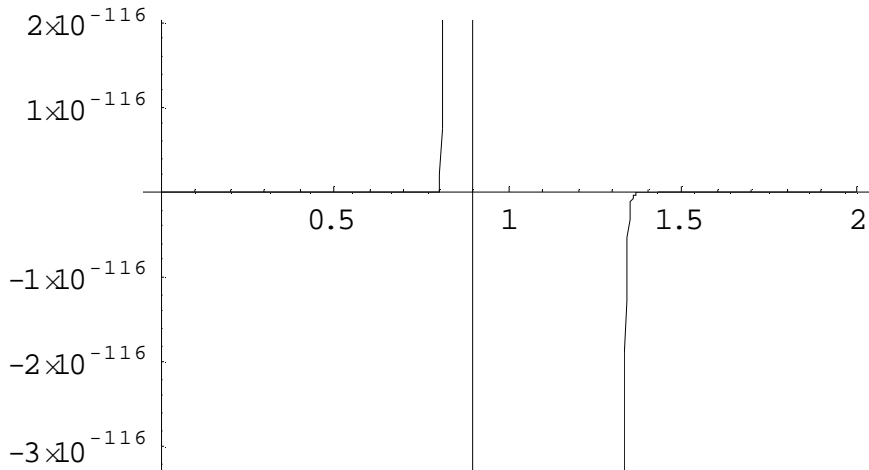
**F3[x\_, K\_]=F0[x, K]F2[x]**

$$e^{-\frac{40}{x^5} - 200x}$$

$$\left( \frac{10000}{x^{12}} + \frac{1302.}{x^7} - \frac{20000}{x^6} + \frac{15.8301}{x^2} - \frac{702.}{x} \right) x^{2K}$$

**Gráfico da função de onda ao quadrado F0[x, K] vezes o potencial do primeiro estado excitado F2[x]:**

**Plot[F3[x, 3.51], {x, 0, 2}]**



Graphics

**Integração numérica da função de onda ao quadrado F0[x, K], para x variando de 0 a 10:**

**I0[K\_]=NIntegrate[F0[x, K], {x, 0, 10}]**

NIntegrate[F0[x,K],{x,0,10}]

**Integração numérica da função de onda vezes a derivada segunda da própria função F1[x, K] para x variando de 0 a 10:**

**I1[K\_]=NIntegrate[F1[x, K], {x, 0, 10}]**

NIntegrate[F1[x,K],{x,0,10}]

**Integração numérica da função de onda ao quadrado vezes o potencial do primeiro estado excitado F3[x, K] para x variando de 0 a 10:**

**I2[K\_]=NIntegrate[F3[x, K], {x, 0, 10}]**

NIntegrate[F3[x,K],{x,0,10}]

**Equação a ser minimizada em relação ao parâmetro variacional K dada pela expressão (6.1.15):**

$$E_i [ K ] = \frac{- I1 [ K ] + I2 [ K ]}{I0 [ K ]}$$

(-NIntegrate[F1[x,K],{x,0,10}]+NIntegrate[F3[x,K],{x,0,10}])/NIntegrate[F0[x,K],{x,0,10}]

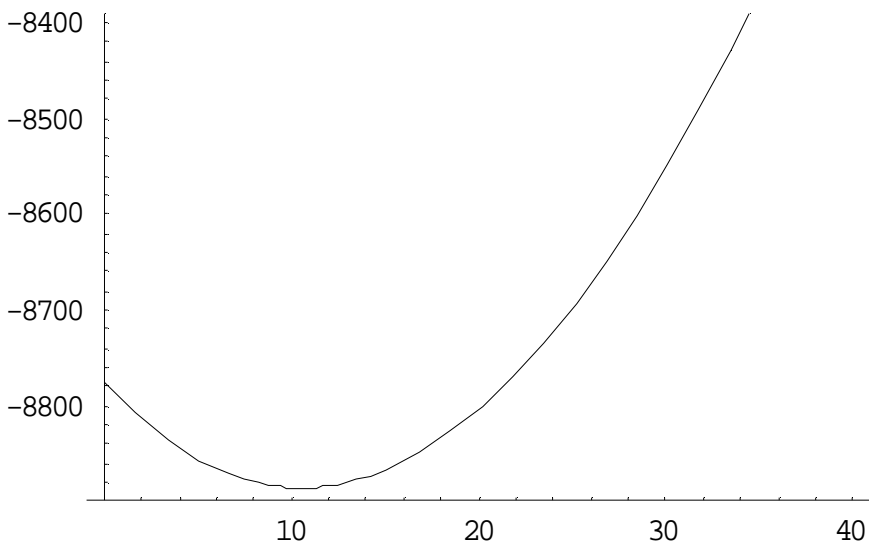
**Gráfico para a minimização da**

**equação dada acima  $E_i [ K ]$  em**

**relação ao parâmetro variacional**

**K :**

Plot[Ei[K], {K, 0,40}]



Graphics

**Cálculo para encontrar o mínimo de energia da expressão dada acima:**

**FindMinimum[Ei[K], {K, 1, 40}]**

**{-8885.77, {K → 10.4968}}**

**Cálculo do valor de energia:**

$$E_v = \frac{E_i[10.4968]}{10000}$$

-0.888577

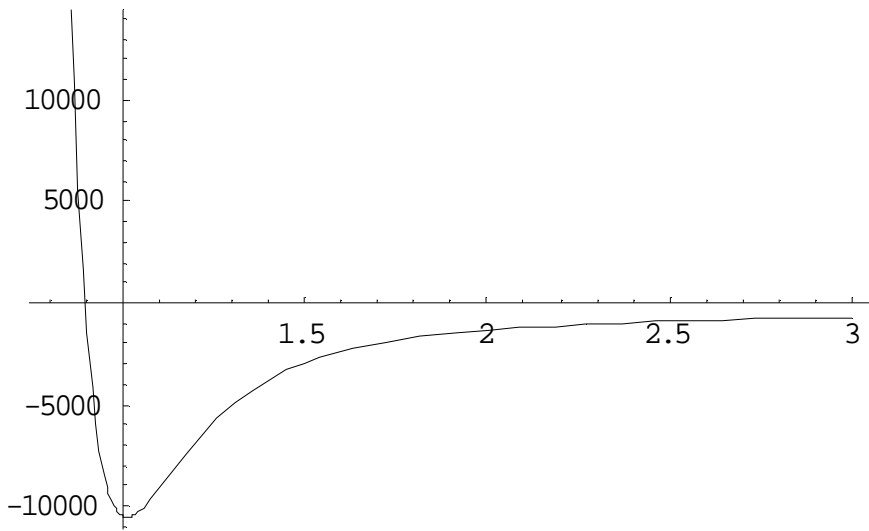
**Potencial companheiro do potencial dado pela expressão F2[x], com K=10.50:**

$$F4[x_] = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2B}{x^7} (10.50 - 3) - \frac{2AB}{x^6} + \frac{10.50}{x^2} (10.50 - 1) - \frac{2A10.51}{x}$$

$$\frac{10000}{x^{12}} + \frac{1500.}{x^7} - \frac{20000}{x^6} + \frac{99.75}{x^2} - \frac{2102.}{x}$$

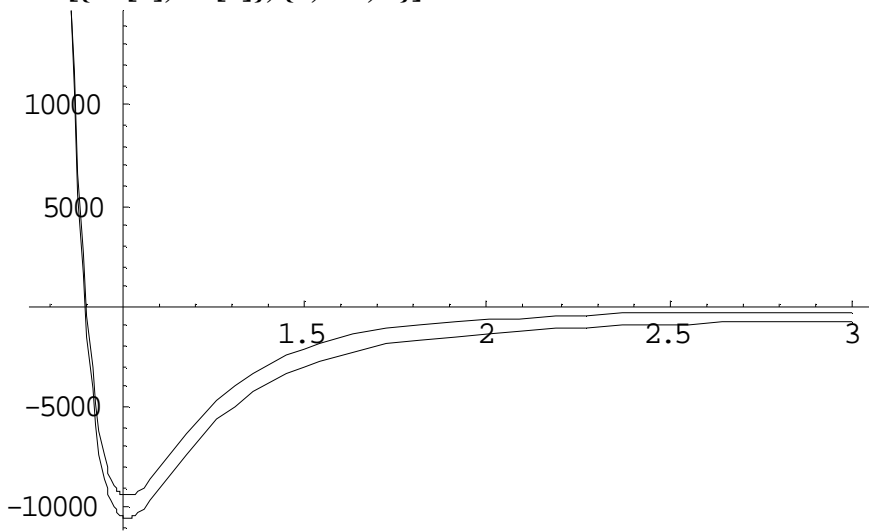
**Gráfico do potencial companheiro do potencial dado pela expressão F2[x], com K=10.50:**

**Plot[F4[x], {x, 0.8, 3}]**



Graphics

**Comparação gráfica para os potenciais  $F2[x]$  e  $F4[x]$ :**  
**`Plot[{F2[x], F4[x]}, {x, 0.8, 3}]`**



Graphics

**Parâmetros**

**A:=10**

**B:=10**

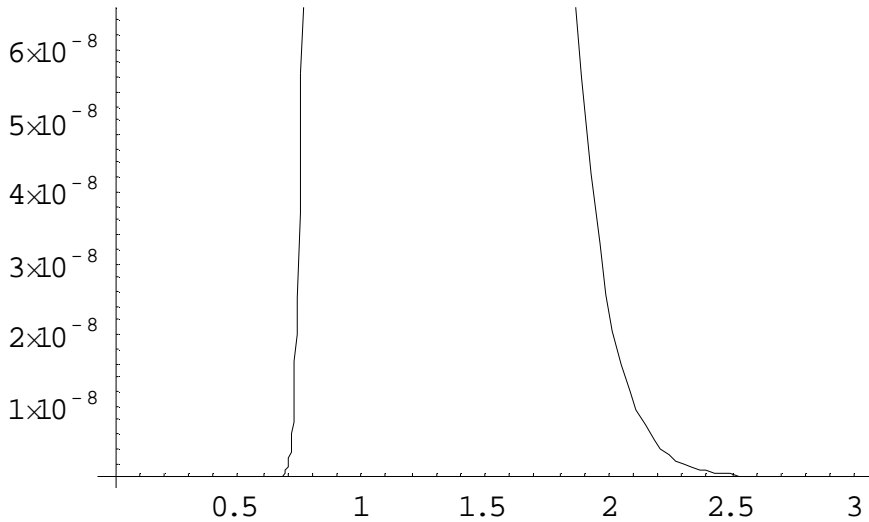
**Função de onda dada em (6.1.18):**

$$\text{psi}[x, K] = \text{Exp}\left[-\frac{B}{5x^5} - Ax\right] x^K$$

$$e^{-\frac{2}{x^5} - 10x} x^K$$

**Gráfico da função de onda dada acima:**

**Plot[psi[x, 3.61], {x, 0, 3}]**



Graphics

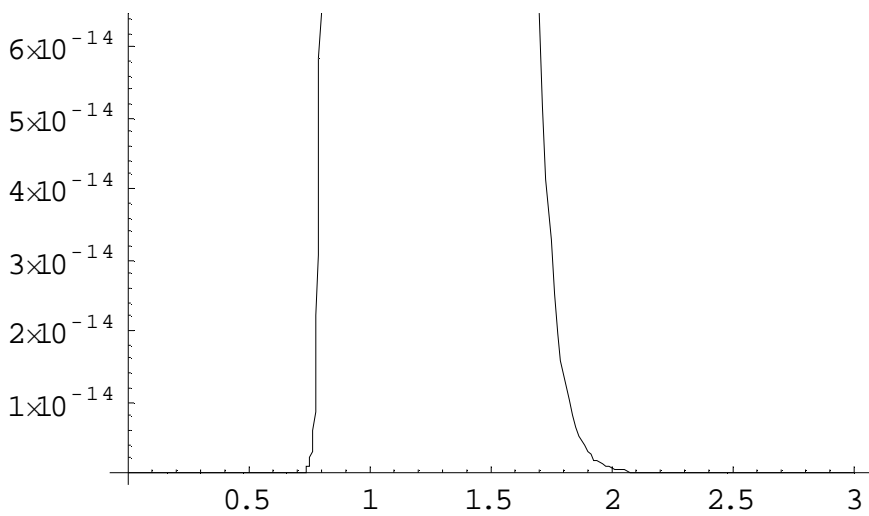
**Função de onda ao quadrado:**

$$\text{F0}[x, K] = \text{psi}[x, K]^2$$

$$e^{-\frac{4}{x^5} - 20x} x^{2K}$$

**Gráfico da função de onda ao quadrado:**

**Plot[F0[x, 3.61], {x, 0, 3}]**



Graphics

**Função de onda vezes a derivada segunda da própria função:**

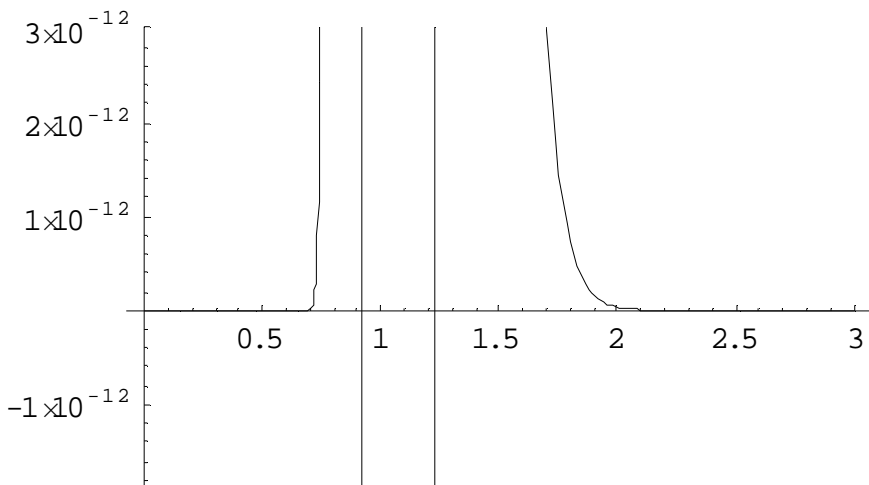
**F1[x, K]=psi[x, K]D[psi[x, K], {x, 2}]**

$$e^{-\frac{2}{x^5}-10x} x^K \left( e^{-\frac{2}{x^5}-10x} (-1+K) K x^{-2+K} + \right.$$

$$\left. 2 e^{-\frac{2}{x^5}-10x} K \left( -10 + \frac{10}{x^6} \right) x^{-1+K} + \left( e^{-\frac{2}{x^5}-10x} \left( -10 + \frac{10}{x^6} \right)^2 - \frac{60 e^{-\frac{2}{x^5}-10x}}{x^7} \right) x^K \right)$$

**Gráfico da função de onda vezes a derivada segunda da própria função:**

**Plot[F1[x, 3.61], {x, 0, 3}]**



Graphics

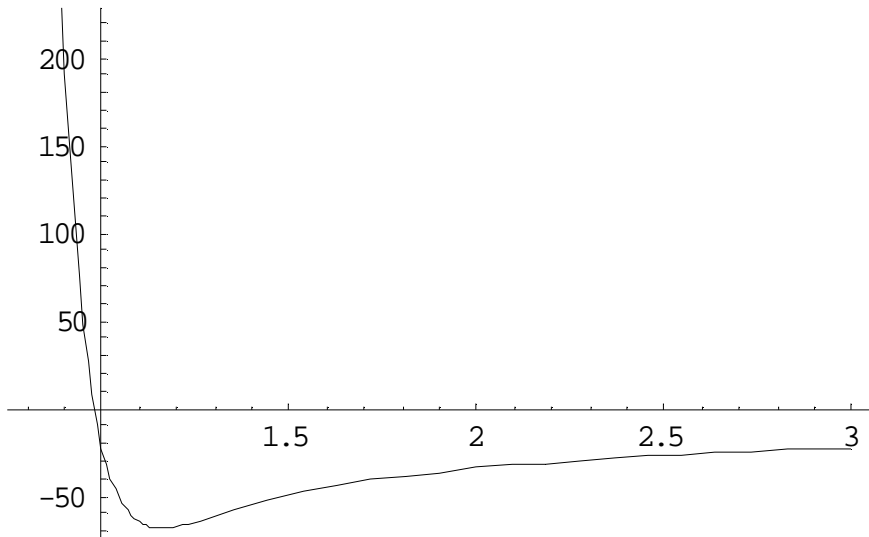
**Potencial para o primeiro estado excitado dado em (6.1.14), (com H=3.61):**

$$F2[x] = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2B}{x^7} (3.61 + 3) - \frac{2AB}{x^6} + \frac{3.61}{x^2} (3.61 + 1) - \frac{2A \cdot 3.61}{x}$$

$$\frac{100}{x^{12}} + \frac{132.2}{x^7} - \frac{200}{x^6} + \frac{16.6421}{x^2} - \frac{72.2}{x}$$

**Gráfico do potencial dado acima:**

**Plot[F2[x], {x, 0.8, 3}]**



Graphics

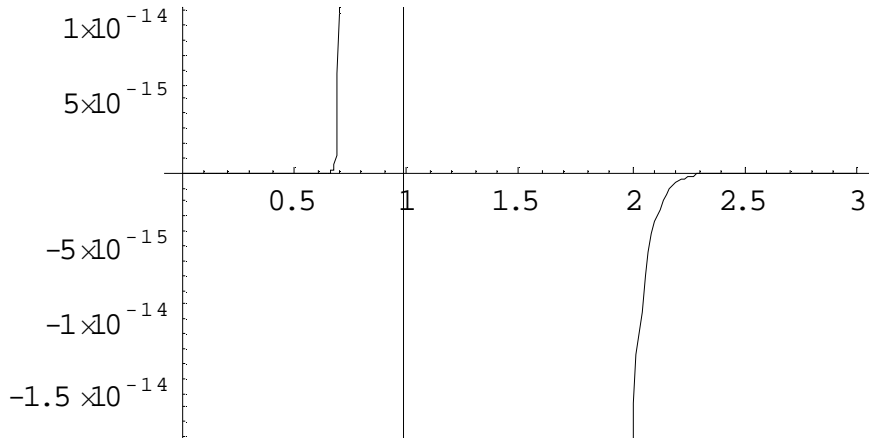
**Função de onda ao quadrado F0[x, K] vezes o potencial do primeiro estado excitado F2[x]:**

**F3[x\_, K\_]=F0[x, K] F2[x]**

$$e^{-\frac{4}{x^5}-20x} \left( \frac{100}{x^{12}} + \frac{132.2}{x^7} - \frac{200}{x^6} + \frac{16.6421}{x^2} - \frac{72.2}{x} \right) x^{2K}$$

**Gráfico da função de onda ao quadrado F0[x, K] vezes o potencial do primeiro estado excitado F2[x]:**

**Plot[F3[x, 3.61], {x, 0, 3}]**



Graphics

**Integração numérica da função de onda ao quadrado F0[x, K], para x variando de 0 a 10:**

**I0[K\_]=NIntegrate[F0[x, K], {x, 0, 10}]**

NIntegrate[F0[x,K],{x,0,10}]

**Integração numérica da função de onda vezes a derivada segunda da própria função F1[x, K] para x variando de 0 a 10:**

**I1[K\_]=NIntegrate[F1[x, K], {x, 0, 10}]**

NIntegrate[F1[x,K],{x,0,10}]

**Integração numérica da função de onda ao quadrado vezes o potencial do primeiro estado excitado F3[x, K] para x variando de 0 a 10:**

$I2[K_] = \text{NIntegrate}[F3[x, K], \{x, 0, 10\}]$

$\text{NIntegrate}[F3[x, K], \{x, 0, 10\}]$

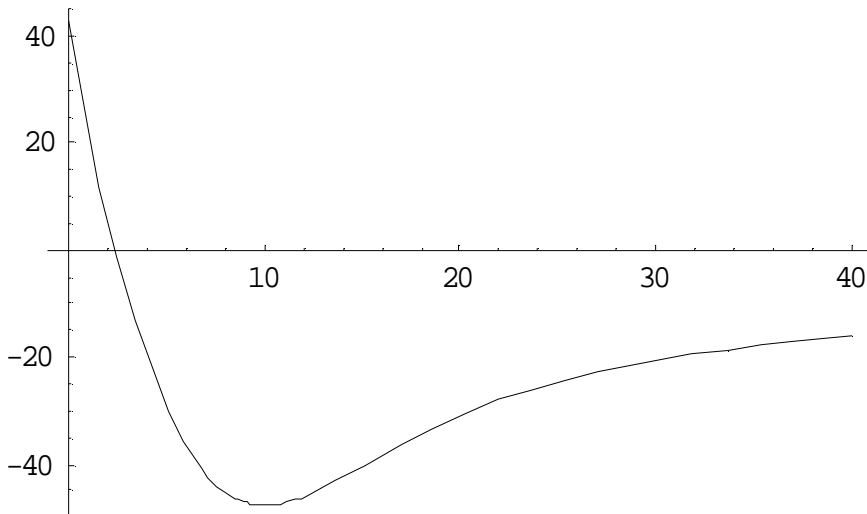
Equação a ser minimizada em relação ao parâmetro variacional K dada pela expressão (6.1.15):

$$E_i[K] = \frac{-I1[K] + I2[K]}{I0[K]}$$

$(-\text{NIntegrate}[F1[x, K], \{x, 0, 10\}] + \text{NIntegrate}[F3[x, K], \{x, 0, 10\}]) / \text{NIntegrate}[F0[x, K], \{x, 0, 10\}]$

Gráfico para a minimização da equação dada acima  $E_i[K]$  em relação ao parâmetro variacional K:

$\text{Plot}[E_i[K], \{K, 0, 40\}]$



Graphics

Cálculo para encontrar o mínimo de energia da expressão dada acima:

$\text{FindMinimum}[E_i[K], \{K, 0, 40\}]$

$\{-47.6314, \{K \rightarrow 10.0936\}\}$

Cálculo do valor de energia:

$$E_v = \frac{E_i[10.09]}{100}$$

-0.476314

Potencial companheiro do potencial dado pela expressão  $F2[x]$ , com  $K=10.09$ :

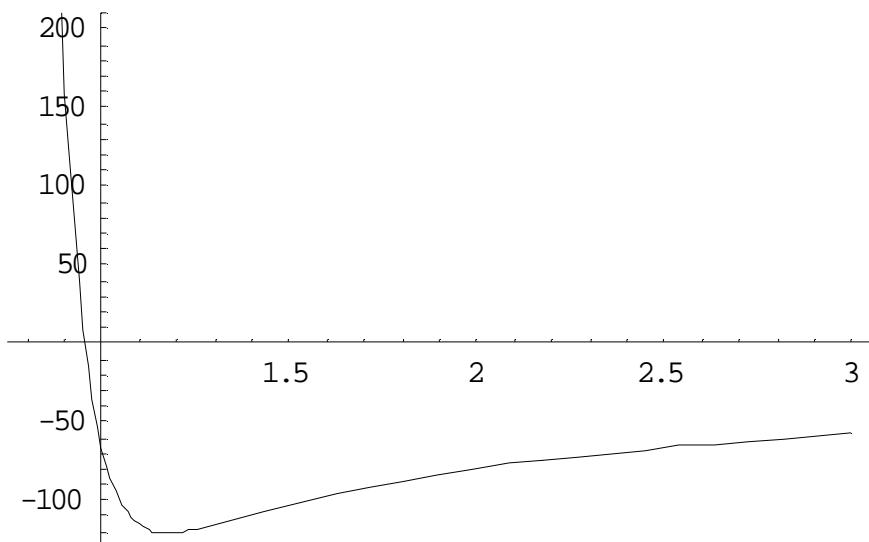
$$F4[x] = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2B}{x^7} (10.09 - 3) - \frac{2AB}{x^6} + \frac{10.09}{x^2} (10.09 - 1) - \frac{2A \cdot 10.09}{x}$$

$$\frac{100}{x^{12}} + \frac{141.8}{x^7} - \frac{200}{x^6} + \frac{91.7181}{x^2} - \frac{201.8}{x}$$

Gráfico do potencial companheiro do potencial dado pela expressão  $F2[x]$ , com  $K=10.09$ :

$\text{Plot}[F4[x], \{x, 0.8, 3\}]$

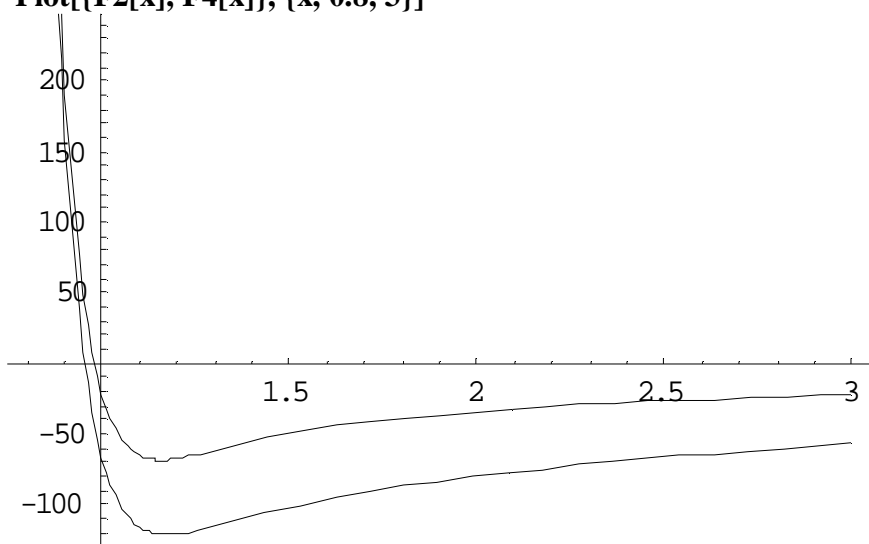




Graphics

**Comparação gráfica para os potenciais  $F2[x]$  e  $F4[x]$ :**

**Plot[{ $F2[x]$ ,  $F4[x]$ }, { $x$ , 0.8, 3}]**



Graphics

**Parâmetros:**

**A:=30**

**B:=30**

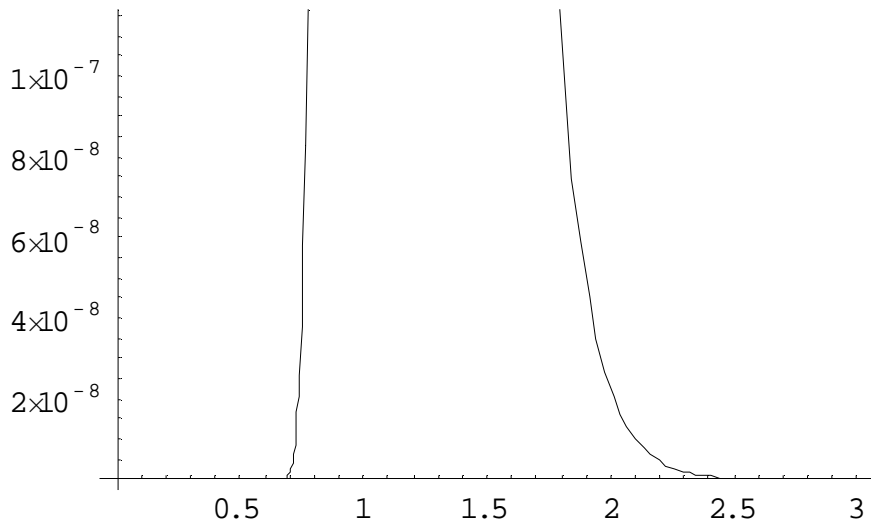
**Função de onda dada em (6.1.18):**

$$\text{psi}[x, K] = \text{Exp}\left[-\frac{B}{5x^5} - Ax\right] x^K$$

$$e^{-\frac{2}{x^5} - 10x} x^K$$

**Gráfico da função de onda dada acima:**

**Plot[psi[x, 3.52], {x, 0, 3}]**



Graphics

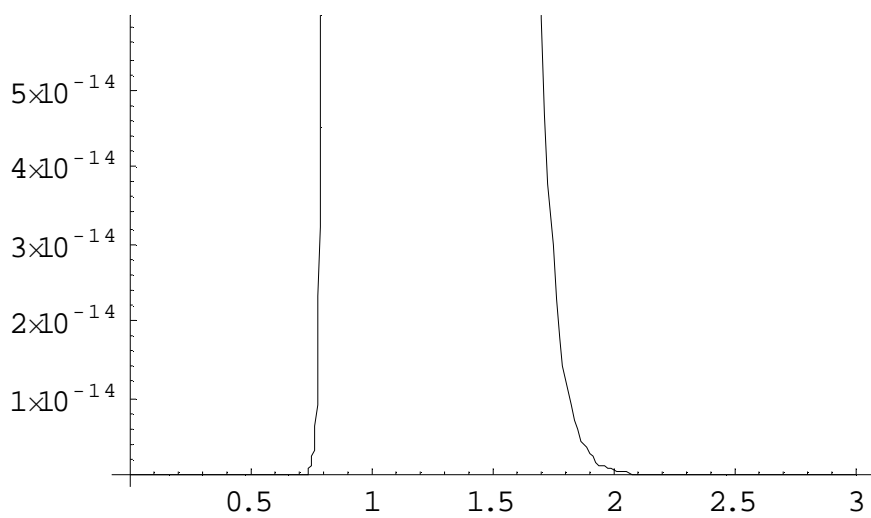
**Função de onda ao quadrado:**

$$\text{F0}[x, K] = \text{psi}[x, K]^2$$

$$e^{-\frac{4}{x^5} - 20x} x^{2K}$$

**Gráfico da função de onda ao quadrado:**

**Plot[F0[x, 3.52], {x, 0, 3}]**



Graphics

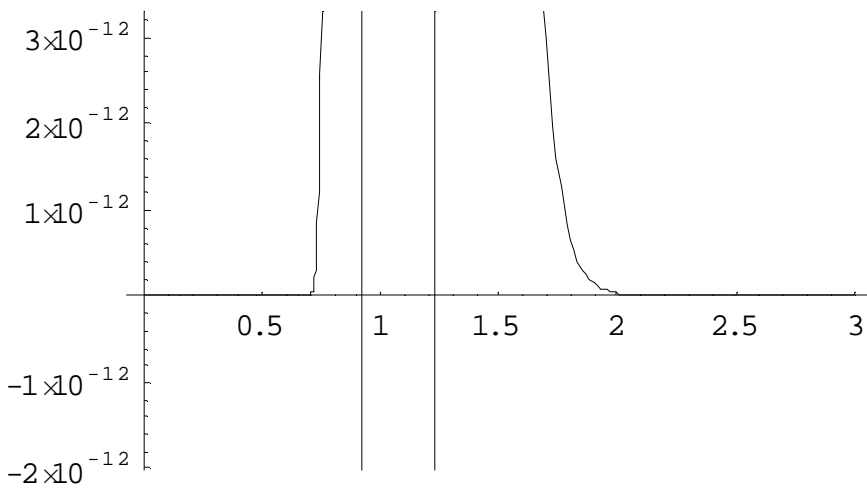
**Função de onda vezes a derivada segunda da própria função:**

**F1[x, K]=psi[x, K]D[psi[x, K], {x, 2}]**

$$e^{-\frac{2}{x^5}-10x} x^K \left( e^{-\frac{2}{x^5}-10x} (-1+K) K x^{-2+K} + \right. \\ \left. 2 e^{-\frac{2}{x^5}-10x} K \left( -10 + \frac{10}{x^6} \right) x^{-1+K} + \left( e^{-\frac{2}{x^5}-10x} \left( -10 + \frac{10}{x^6} \right)^2 - \frac{60 e^{-\frac{2}{x^5}-10x}}{x^7} \right) x^K \right)$$

**Gráfico da função de onda vezes a derivada segunda da própria função:**

**Plot[F1[x, 3.52], {x, 0, 3}]**



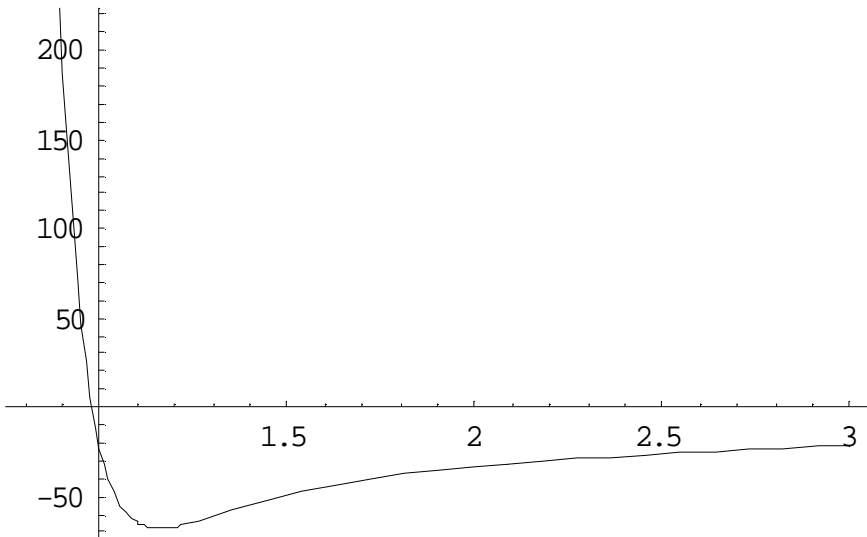
Graphics

**Potencial para o primeiro estado excitado dado em (6.1.14), (com H=3.52):**

$$F2[x] = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2B}{x^7} (3.52 + 3) - \frac{2AB}{x^6} + \frac{3.52}{x^2} (3.52 + 1) - \frac{2A \cdot 3.52}{x} \\ \frac{100}{x^{12}} + \frac{130.4}{x^7} - \frac{200}{x^6} + \frac{15.9104}{x^2} - \frac{70.4}{x}$$

**Gráfico do potencial dado acima:**

**Plot[F2[x], {x, 0.8, 3}]**



Graphics

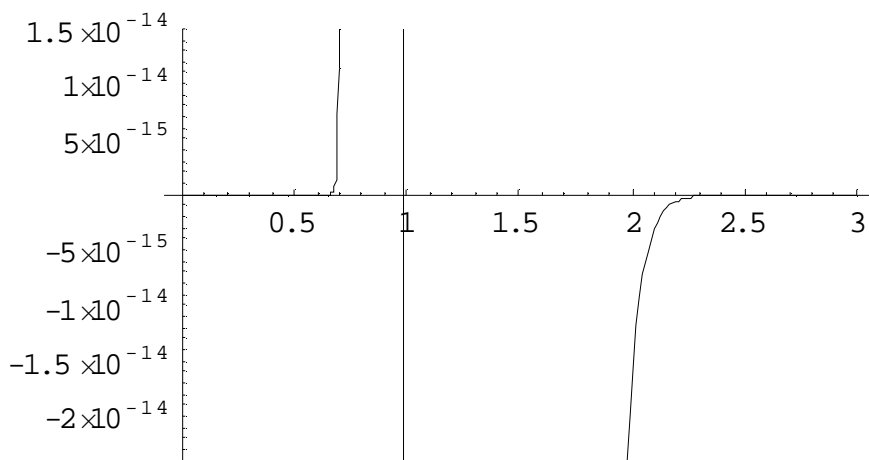
**Função de onda ao quadrado F0[x, K] vezes o potencial do primeiro estado excitado F2[x]:**

**F3[x\_, K\_]=F0[x, K] F2[x]**

$$e^{-\frac{4}{x^5}-20x} \left( \frac{100}{x^{12}} + \frac{130.4}{x^7} - \frac{200}{x^6} + \frac{15.9104}{x^2} - \frac{70.4}{x} \right) x^{2K}$$

**Gráfico da função de onda ao quadrado F0[x, K] vezes o potencial do primeiro estado excitado F2[x]:**

**Plot[F3[x, 3.52], {x, 0, 3}]**



Graphics

**Integração numérica da função de onda ao quadrado F0[x, K], para x variando de 0 a 10:**

**I0[K\_]=NIntegrate[F0[x, K], {x, 0, 10}]**

NIntegrate[F0[x,K],{x,0,10}]

**Integração numérica da função de onda vezes a derivada segunda da própria função F1[x, K] para x variando de 0 a 10:**

**I1[K\_]=NIntegrate[F1[x, K], {x, 0, 10}]**

NIntegrate[F1[x,K],{x,0,10}]

**Integração numérica da função de onda ao quadrado vezes o potencial do primeiro estado excitado F3[x, K] para x variando de 0 a 10:**

`I2[K_]=NIntegrate[F3[x, K], {x, 0, 10}]`

`NIntegrate[F3[x,K],{x,0,10}]`

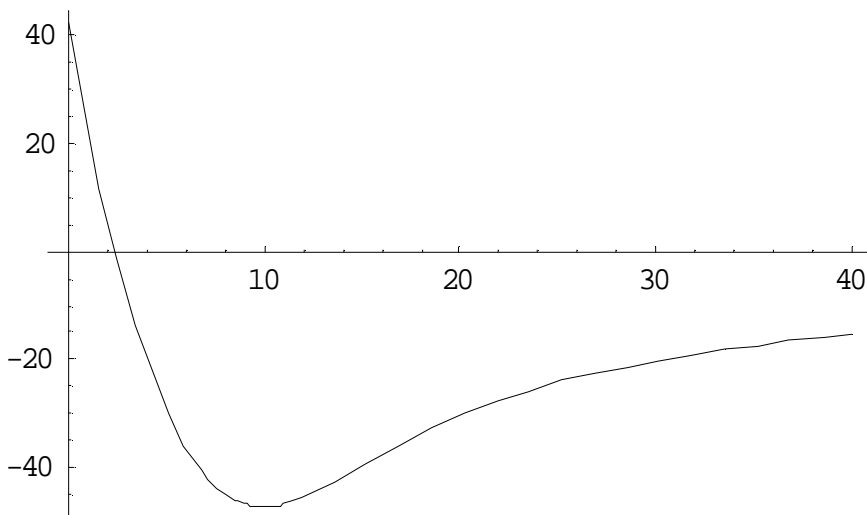
Equação a ser minimizada em relação ao parâmetro variacional K dada pela expressão (6.1.15):

$$E_i[K] = \frac{-I_1[K] + I_2[K]}{I_0[K]}$$

$$\frac{-NIntegrate[F1[x, K], {x, 0, 10}] + NIntegrate[F3[x, K], {x, 0, 10}]}{NIntegrate[F0[x, K], {x, 0, 10}]}$$

Gráfico para a minimização da equação dada acima  $E_i[K]$  em relação ao parâmetro variacional K :

`Plot[Ei[K], {K, 0, 40}]`



Graphics

Cálculo para encontrar o mínimo de energia da expressão dada acima:

`FindMinimum[Ei[K], {K, 0, 40}]`

`{-47.0567, {K -> 10.0281}}`

Cálculo do valor de energia:

$$E_v = \frac{E_i[10.46]}{900}$$

-0.0521882

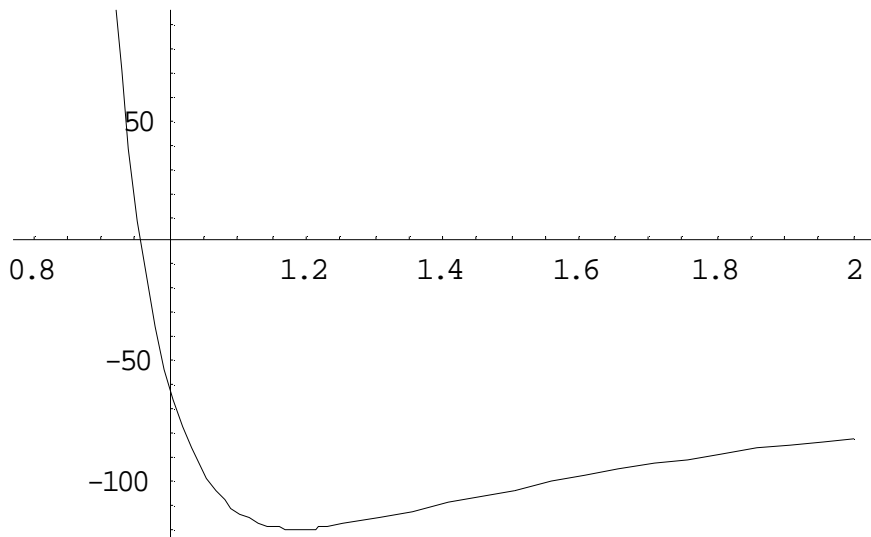
Potencial companheiro do potencial dado pela expressão  $F_2[x]$ , com  $K=10.46$ :

$$F_4[x] = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2B}{x^7} (10.46 - 3) - \frac{2AB}{x^6} + \frac{10.46}{x^2} (10.46 - 1) - \frac{2A \cdot 10.46}{x}$$

$$\frac{100}{x^{12}} + \frac{149.2}{x^7} - \frac{200}{x^6} + \frac{98.9516}{x^2} - \frac{209.2}{x}$$

Gráfico do potencial companheiro do potencial dado pela expressão  $F_2[x]$ , com  $K=10.46$ :

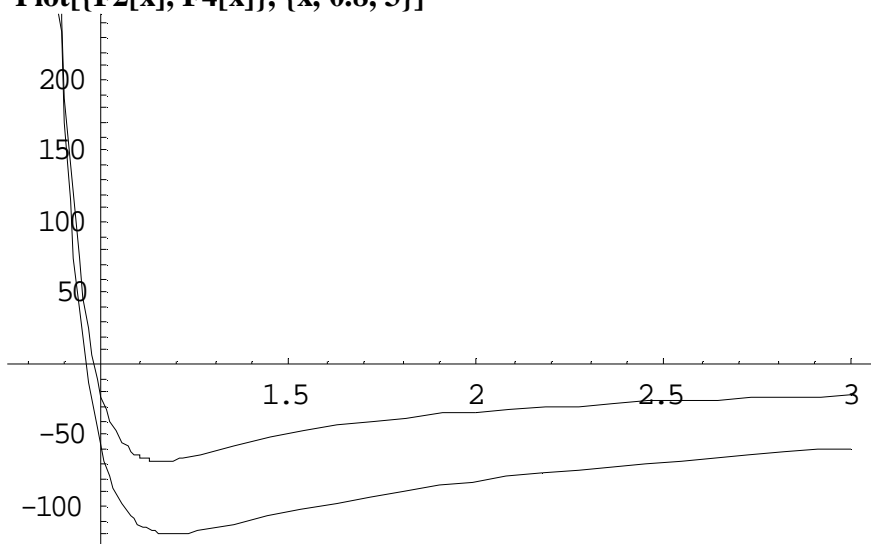
`Plot[F4[x], {x, 0.8, 2}]`



Graphics

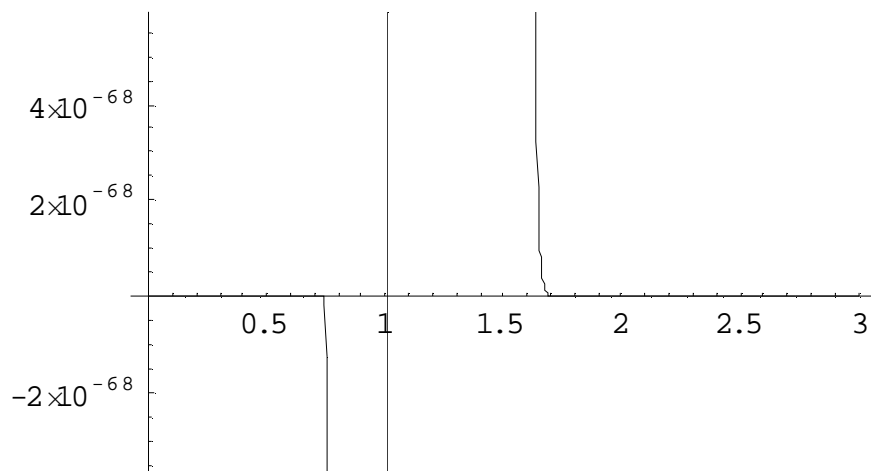
**Comparação gráfica para os potenciais F2[x] e F4[x]:**

**Plot[{F2[x], F4[x]}, {x, 0.8, 3}]**



Graphics

**Gráfico da função de onda para o primeiro estado excitado dado em (6.1.19):**



Graphics