



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.006/13

Mecânica Quântica Supersimétrica: Aplicações

Jonathan Bolaños Coral

Orientador

Prof. Dr. Bruto M. Pimentel Escobar

Março de 2013

*“A mi Zarca, mi Flaca,
mi Canela y mi Gatuna”*

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço ao Prof. Dr. Bruto M. Pimentel, não apenas pela orientação no desenvolvimento desta Dissertação, mas também agradecer a ele pela sua amizade e, em especial pelas discussões que contribuíram para minha formação como pesquisador em Física e por me ensinar que o primeiro dos objetivos tem que ser a procura pelo conhecimento. Infelizmente, o Prof. Dr. Pimentel não foi meu orientador desde o início de meu Mestrado, o que sem dúvida me fez perder. Contudo, espero que no futuro eu tenha a oportunidade de continuar trabalhando com ele.

A todos os meus companheiros Brasileiros com os quais desfrutei de uma amizade durante estes dois anos; pela paciência com meu “portunhol” e principalmente por me aceitarem como um companheiro, apesar de não ser Brasileiro; espero que essas amizades continuem e cresçam cada dia.

À Nathaly, Paulo, Pablo, Patrice e o Guilherme pela ajuda na revisão do português nesta dissertação.

Ao Danilo Ruy, Pablo, Carlisson, Mario e ao mesmo Prof. Dr. Pimentel por terem me ajudado com os inúmeros problemas que tive para me manter no Brasil e para poder viajar para meu país nas férias de fim de ano.

Às funcionárias Luzinete, Rosane e a Neila, por sua disposição permanente.

Finalmente, agradeço à CAPES pela bolsa de estudos, sem a qual não seria possível realizar meu Mestrado no Brasil.

Resumo

Aqui se introduz os conceitos básicos de Mecânica Quântica Supersimétrica (SUSYQM), bem como sua aplicação nos regimes relativístico e não relativístico. Discutindo inicialmente o conceito de simetria e cargas conservadas, a álgebra da SUSYQM é introduzida. Sua aplicação é mostrada utilizando-a para calcular as autoenergias e autofunções do Átomo de Hidrogenio e o Oscilador Harmonico Tridimensional em ambos os regimes mencionados.

Palavras Chaves: Mecânica Quântica Supersimétrica; Átomo de Hidrogênio não-relativístico; Oscilador Harmônico Tridimensional; Átomo de Hidrogênio relativístico; Oscilador de Dirac.

Áreas do conhecimento: Mecânica Quântica Supersimétrica.

Abstract

From the concepts of supersymmetric quantum mechanics (SUSYQM) we studied the hydrogen atom and the three-dimensional harmonic oscillator in non-relativistic and relativistic levels .

The calculation of eigenenergies and eigenfunctions of such systems were also performed by the conventional method in order to establish a comparison with the results obtained from SUSYQM.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Caso não-relativístico	8
2.1	Introdução	8
2.2	Átomo de hidrogênio: $V(r) \sim r^{-1}$	11
2.2.1	Introdução	11
2.2.2	Solução explícita da equação diferencial radial	12
2.2.3	Solução via SUSYQM	15
2.3	Oscilador Harmônico 3D: $V(r) \sim r^2$	23
2.3.1	Introdução	23
2.3.2	Solução explícita da equação diferencial radial	23
2.3.3	Solução via SUSYQM	26
3	Caso relativístico	34
3.1	Introdução	34
3.2	Átomo de Hidrogênio: $V(r) \sim r^{-1}$	35
3.2.1	Introdução	35
3.2.2	Solução explícita da equação diferencial radial	37
3.2.3	Solução via SUSYQM	43
3.3	Oscilador de Dirac: $V(\mathbf{r}) \sim \mathbf{r}\hat{\alpha} \cdot \hat{\beta}$	50
3.3.1	Introdução	50
3.3.2	Solução via SUSYQM	56
4	Conclusão	62
5	Apêndice	i
.1	Equação Diferencial Hypergeométrica	i

Capítulo 1

Introdução

Simetrias e cargas conservadas: O conceito de simetria é um dos conceitos mais importantes em Física. A maioria das pessoas tem uma ideia sobre o que é uma simetria, no entanto, a maneira de cada uma pensar faz com que a definição de simetria não seja universal. Além disso, para que a simetria seja incorporada na Física, precisamos que a mesma seja descrita por uma linguagem matemática, com a qual podemos trabalhar. Dessa forma, o conceito de simetria em Física deve ser entendido no sentido das teorias de grupos e representação, e da álgebra e geometria diferencial [1].

O tema das simetrias em Física foi historicamente desenvolvido em virtude de um grande entendimento da teoria de grupos. As simetrias em Física têm relações diretas com a física experimental por meio das leis de conservação. Conservação de energia, de momento linear e de momento angular são quantidades medidas experimentalmente e vinculadas à invariância de um sistema físico sob diferentes classes de transformações, no caso, transformações espaciais e por rotações, respectivamente. A relação entre as diferentes transformações de simetria e suas correspondentes leis de transformação é estabelecida pelo teorema de Noether [2].

Basicamente, as simetrias são classificadas em dois grandes grupos: simetrias do espaço-tempo e simetrias em um espaço interno [1]; e a ideia de grupo é fundamental no desenvolvimento do primeiro grupo citado. Historicamente, a eletrostática e a magnetostática foram teorias descobertas independentemente e sabemos que ambas são invariantes sob o grupo de rotações. Atualmente sabemos que, diferentemente do que se acreditava no passado, essas duas teorias não são totalmente independentes, elas fazem parte de uma mesma teoria que é invariante sob o grupo de Lorentz: o eletromagnetismo de Maxwell. Matematicamente, o grupo de Lorentz é considerado como uma generalização do grupo de rotação, e assim, neste caso, a unificação das duas

teorias físicas aparentemente independentes surge como resultado de uma ampliação dos grupos sobre os quais as teorias são construídas. Alguns físicos acreditam que estas ampliações ajudarão na formulação de uma teoria que inclua como casos particulares todas as teorias físicas conhecidas [3].

Supersimetria: Um dos postulados da relatividade restrita é o princípio de constância da velocidade da luz no vácuo. Este princípio é equivalente a estabelecer a invariância do intervalo $s^2 = \eta_{\mu\nu}x^\mu x^\nu$ em diferentes referenciais inerciais, na expressão do intervalo $(x^\mu) = (x^0, x^1, x^2, x^3)$ é um ponto da variedade espaço-tempo. O conjunto de transformações lineares $x^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$ que preservam o intervalo s^2 constituem o chamado grupo de Lorentz. Geralmente a definição do grupo de Lorentz se faz mediante a transformação da métrica

$$L := O(1, 3) = \{ \Lambda \in GL(4, R) | \Lambda^T \eta \Lambda = \eta \}, \quad (1.1)$$

onde $GL(4, R)$ é o conjunto de todas matrizes 4×4 invertíveis e de componentes reais [3]. Qualquer transformação de Lorentz (TL) pode ser decomposta como o produto de rotações, boosts, inversões temporais e inversões completas. Sendo assim, é suficiente estudar rotações e boosts. Sabemos que existem três rotações e três boosts, então as TL são descritas em função de seis parâmetros [4]. Outro postulado da relatividade restrita estabelece que todos os fenômenos físicos são invariantes perante translações espaço-temporais. Fisicamente, este postulado representa a isotropia do espaço e do tempo. As translações espaço-temporais podem ser expressas da forma $x^\mu \rightarrow x'^\mu = x^\mu + a^\mu$, onde a^μ é um quadri vetor constante arbitrário. Este tipo de transformação também deixa invariante o intervalo. O grupo de Poincaré é o grupo de todas as transformações reais no espaço de Minkowski da forma

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu + a^\mu, \quad a^\mu = \text{constante} \quad (1.2)$$

que deixa invariante o intervalo. Por sua definição, o grupo de Poincaré tem 10 geradores e denotaremos como M^μ os geradores das TL e como P^μ os geradores das translações. Podemos mostrar que

$$[P_\mu, P_\nu] = 0, \quad (1.3a)$$

$$[M_{\mu\nu}, P_\rho] = i(\eta_{\nu\rho}P_\mu - \eta_{\mu\rho}P_\nu), \quad (1.3b)$$

$$[M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] = -i(\eta_{\mu\rho}M_{\nu\sigma} - \eta_{\mu\sigma}M_{\nu\rho} - \eta_{\nu\rho}M_{\mu\sigma} + \eta_{\nu\sigma}M_{\mu\rho}). \quad (1.3c)$$

Existe um importante teorema que vincula os geradores do grupo de Poincaré e a matriz S. O teorema se conhece como o teorema de Coleman e Mandula [5], e estabelece que a álgebra de Lie de simetrias da matriz S mais geral é

$$[P_\mu, B_l] = 0, \quad (1.4a)$$

$$[M_{\mu\nu}, B_l] = 0, \quad (1.4b)$$

onde $\{B_l\}$ é um conjunto finito formado por operadores escalares de Lorentz que satisfazem a álgebra $[B_l, B_m] = iC_{lm}^k B_k$ e C_{lm}^k são as constantes de estrutura desta álgebra de Lie [3].

Uma álgebra de Lie graduada Z_2 é um espaço vetorial L que pode ser considerado como a soma direta de dois subespaços, L_o e L_1 , no qual atua um produto $\circ : L \times L \rightarrow L$, tal que se $L_1^{(o)}, L_2^{(o)} \in L_o$ e $L_1^{(1)}, L_2^{(1)} \in L_1$. Assim, temos

1. $L_1^{(o)} \circ L_2^{(o)} \in L_o$,
2. $L_1^{(o)} \circ L_1^{(1)} \in L_1$,
3. $L_1^{(1)} \circ L_2^{(1)} \in L_o$.

Álgebra de Lie graduada Z_2 : Uma álgebra linear $L = L_o \oplus L_1$ pode ser considerada um grading de Z_2 se o produto $\circ : L \times L \rightarrow L$ atua como

$$L_o \circ L_o \subset L_o, \quad (1.5a)$$

$$L_o \circ L_1 \subset L_1, \quad (1.5b)$$

$$L_1 \circ L_1 \subset L_o, \quad (1.5c)$$

e L_o é uma álgebra de Lie. Para tudo $x_\mu \in L$ existe um $g \in \{0, 1\}$ o qual é determinado com as regras

$$g(x_\mu) = 0 \Leftrightarrow x_\mu \in L_o, \quad (1.6a)$$

$$g(x_\mu) = 1 \Leftrightarrow x_\mu \in L_1. \quad (1.6b)$$

Se $g(x_\mu) = 0$, se diz que x é par, no caso contrário x é ímpar. Definimos o produto como

$$x_\mu \circ x_\nu = x_\mu x_\nu - (-1)^{g(x_\mu)g(x_\nu)} x_\mu x_\nu, \quad (1.7)$$

assim, se $L_o = \text{espan}\{B_i\}$, $i = 1, 2, \dots, \dim L_o$, $L_1 = \text{espan}\{Q_a\}$, $a = 1, 2, \dots, \dim L_1$ e $L = \text{espan}\{x_\mu\}$, onde $\text{espan}\{y\}$ representa o espaço expandido pelos elementos do conjunto $\{y\}$, temos

$$B_i \circ B_j = [B_i, B_j], \quad (1.8a)$$

$$B_i \circ Q_a = [B_i, Q_a], \quad (1.8b)$$

$$Q_a \circ Q_b = \{Q_a, Q_b\}. \quad (1.8c)$$

Essas definições são suficientes para fazer uma extensão da álgebra de Poincaré.

Extensão da álgebra de Poincaré: Uma possibilidade para extensão da álgebra de Poincaré é utilizar uma álgebra de Lie graduada Z_2 na qual

1. L_o : Álgebra de Poincaré,
2. $L_1 = \text{espan}\{Q_a\}$, $a = 1, 2, 3, 4$,

e neste caso, exigindo que as relações (1.5) sejam satisfeitas, temos que (1.9) fica

$$P_\mu \circ Q_a = [P_\mu, Q_a] = 0, \quad (1.9a)$$

$$M_{\mu\nu} \circ Q_a = [M_{\mu\nu}, Q_a] = -(\sigma_{\mu\nu})_{ab} Q_b, \quad (1.9b)$$

$$Q_a \circ Q_b = \{Q_a, Q_b\} = a(\gamma^\mu C)_{ab} P^\mu, \quad (1.9c)$$

onde a é uma constante arbitrária. De (1.9c) e assumindo que os Q são espinores de Majorana temos que $Q_a \circ \bar{Q}_b = \{Q_a, \bar{Q}_b\} = -a(\gamma^\mu)_{ab} P_\mu$. No caso de P^0 definido positivo geralmente se adota a convenção $a = -2$, assim, no referencial em repouso $\{Q_a, \bar{Q}_b\} = 2\gamma_{ab}^0 P_0$. Logo, $8P_0 = \{Q_a, \bar{Q}_b\} \gamma_{ba}^0$, do qual

$$\begin{aligned} P_0 &= \frac{1}{8} (Q_a \gamma_{ab}^0 T \bar{Q}_b + \bar{Q}_b \gamma_{ba}^0 Q_a), \\ &= \frac{1}{8} (Q_a \gamma_{ab}^0 T Q_c^\dagger \gamma_{cb}^0 + Q_c^\dagger \gamma_{cb}^0 \gamma_{ba}^0 Q_a), \\ &= \frac{1}{8} (Q_a Q_a^\dagger + Q_a^\dagger Q_a). \end{aligned} \quad (1.10)$$

Como os espinores de Majorana são reais, então

$$H \equiv P_0 = \frac{1}{4} \sum_a Q_a^2. \quad (1.11)$$

Por definição, um estado $|\Omega\rangle$ é supersimétrico se $Q_a|\Omega\rangle = 0$. Escrevendo a expressão $\{Q_a, \bar{Q}_b\} = 2(\gamma^\mu)_{ab} P_\mu$ em função de espinores de Weyl obtemos

$$\{Q_A, Q^B\} = 0, \quad (1.12a)$$

$$\{Q_A, \bar{Q}_{\dot{B}}\} = 2\sigma_{A\dot{B}}^\mu P_\mu, \quad (1.12b)$$

$$\{\bar{Q}^{\dot{A}}, \bar{Q}_{\dot{B}}\} = 0, \quad (1.12c)$$

$$\{\bar{Q}^{\dot{A}}, Q^B\} = 2\sigma^{\mu\dot{A}B} P_\mu. \quad (1.12d)$$

Uma completa dedução dessas expressões pode ser encontrada em [3]. A álgebra dada por (1.9) é conhecida como álgebra supersimétrica e seu estudo deu origem a supersimetria [6].

Atualmente a supersimetria é uma importante linha de pesquisa, muitos pesquisadores acreditam que se é possível desenvolver uma teoria que inclua todas as teorias atuais, então essa teoria deve ser supersimétrica.

Mecânica quântica supersimétrica: De (1.11) vemos que todo estado possível $|\psi\rangle$ cumpre

$$\langle\psi|H|\psi\rangle \geq 0. \quad (1.13)$$

Diz-se que supersimetria não é quebrada se

$$\langle\Omega|H|\Omega\rangle = 0, \quad (1.14)$$

é o mínimo valor possível de $\langle\psi|H|\psi\rangle$. No caso contrário, se diz que supersimetria é quebrada. Se um estado supersimétrico existe, ele tem que ser necessariamente o estado fundamental, e assim a supersimetria não é espontaneamente quebrada. Na procura de um mecanismo de quebra dinâmica de supersimetria por efeitos não perturbativos, foi formulada a mecânica quântica supersimétrica (SUSYQM), atualmente a SUSYQM é uma teoria grandemente desenvolvida e aplicada [7]. Por definição, um sistema da mecânica quântica supersimétrica é um sistema no qual os operadores de carga Q_j comutam com o superhamiltoniano, isto é,

$$[H, Q_j] = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (1.15)$$

e seguem a álgebra

$$\{Q_j, Q_k\} = \delta_{jk}H, \quad (1.16)$$

onde δ_{jk} é a delta de Kronecker [8]. Essa álgebra é caso não-relativístico da álgebra supersimétrica.

Uma Simples Realização: o caso mais simples da álgebra da SUSYQM é com $N = 2$. Neste caso [9], a construção dos operadores de carga pode ser feita assumindo a existência de operadores bosônicos

$$A = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x), \quad A^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x), \quad (1.17)$$

que cumprem

$$[A, A^\dagger] = \sqrt{\frac{2}{m}} \frac{dW}{dx} \hbar \quad (1.18)$$

e de operadores fermiônicos

$$f = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad f^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

que satisfazem

$$\{f, f^\dagger\} = 1. \quad (1.20)$$

Com esses operadores é possível construir os operadores de carga

$$Q \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^\dagger \equiv \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.21)$$

Usando esses dois operadores, se constrói o superhamiltoniano fica definido como

$$H \equiv \begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & AA^\dagger \end{pmatrix}. \quad (1.22)$$

Pode-se mostrar que esses operadores de carga e o hamiltoniano seguem a álgebra da SUSYQM. Na construção anterior, vimos que os operadores fermiônicos são completamente definidos, porém os operadores bosônicos dependem da determinação do superpotencial $W(x)$. Diferentes superpotenciais implicam na determinação de diferentes operadores bosônicos, e consequentemente, diferentes superhamiltonianos. Uma importante característica da SUSYQM é que a mesma é uma teoria formulada em uma dimensão [8].

Um breve comentário sobre método de fatoração: Os métodos de fatoração de operadores diferenciais são partes de uma área de pesquisa puramente matemática, não dependendo do fato de que o operador diferencial possa ser utilizado na construção de uma equação da física, em particular em mecânica quântica [10]. Os métodos de fatoração de equações diferenciais são muito utilizados no caso das equações de valores próprios [11]. Estes métodos apresentam uma importante característica: são aplicáveis unicamente nos casos de espectros de energia discretos e as equações diferenciais não precisam ser resolvidas mediante a substituição de séries de potências.

Os espectros dos sistemas estudados nesta dissertação são discretos, então podem ser estudados com os métodos de fatoração e isto é justamente o que fazemos nesta dissertação, aqui fatoramos os hamiltonianos de quatro sistemas quânticos e mostramos que os operadores resultantes seguem a álgebra de SUSYQM, assim, utilizando as propriedades desses operadores, encontramos as autofunções e as autoenergias de cada um dos sistemas.

Os elementos da diagonal do superhamiltoniano (1.22) definem dois hamiltonianos $H_1 = A^\dagger A$ e $H_2 = AA^\dagger$ os quais estão evidentemente relacionados, pois são resultados de uma fatoração em função de dois operadores. A técnica básica utilizada na determinação do superhamiltoniano é uma classe particular dos métodos de fatoração de equações diferenciais, contudo, nesta dissertação desenvolvemos os cálculos com a linguagem e dentro do contexto da SUSYQM.

A ordem desta Dissertação: Esta Dissertação tem como objetivo principal apresentar as noções básicas da SUSYQM fazendo a sua aplicação no estudo de dois sistemas físicos realmente importantes: o Átomo de Hidrogênio (AH)

e o Oscilador Harmônico Tridimensional (OAT). O estudo desses dois sistemas se desdobra em dois casos, o não-relativístico e o relativístico. No caso não-relativístico os sistemas são modelados com a equação de Schrödinger (ES) e no caso relativístico a equação utilizada é a equação de Dirac (ED). Mostraremos que SUSYQM, que é uma teoria desenvolvida para sistemas em uma dimensão, pode ser utilizada para estudar a parte radial destes sistemas. Enquanto à ordem desta dissertação, além deste capítulo introdutório, apresentamos mais três capítulos. No capítulo 2, desenvolvemos o aspecto não-relativístico do AH e o OAT. O capítulo 3, inclui a parte relativística. No capítulo 4, apresentaremos as conclusões e as perspectivas.

Capítulo 2

Caso não-relativístico

2.1 Introdução

A equação com a qual se estuda a dinâmica dos sistemas da mecânica quântica não relativística é a ES. Existe uma grande quantidade de sistemas quânticos no nível não-relativístico que podem ser estudados com SUSYQM, isso significa que, a SUSYQM pode ser aplicada no caso de algumas equações de Schrödinger, dependendo da forma do potencial. No caso de potenciais que dependem das coordenadas e do tempo a ES não pode ser resolvida pelo método de separação de variáveis. Contudo caso de potenciais que dependem só das coordenadas a ES é separável. Na representação de coordenadas a ES é

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi = 0 \quad (2.1)$$

onde V é o potencial. Se o potencial é radial, ou seja, se o potencial é da forma $V = V(r)$, é natural tentar solucionar a equação utilizando coordenadas esféricas. Em coordenadas esféricas o laplaciano é

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \quad (2.2)$$

Com este laplaciano e procurando soluções independentes do tempo da forma $\Psi(r, \theta, \phi) = \mathcal{R}(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$, a ES (2.1) é

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{\Theta(\theta)\Phi(\phi)}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}(r)}{dr} \right) + \frac{\mathcal{R}(r)\Phi(\phi)}{r^2 \sin(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{\mathcal{R}(r)\Theta(\theta)}{r^2 \sin^2(\theta)} \left(\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} \right) \right] + [V(r) - E] \mathcal{R}(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) = 0, \quad (2.3)$$

logo, multiplicando essa equação por $-2m_0r^2/\hbar^2\mathcal{R}(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ obtemos

$$\frac{1}{\mathcal{R}(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}(r)}{dr} \right) - \frac{2m_0r^2}{\hbar^2} [V(r) - E] + \frac{1}{\sin(\theta)\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)\Phi(\phi)} \left(\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} \right) = 0. \quad (2.4)$$

Nessa equação, os dois primeiros termos dependem unicamente da coordenada r , os outros dois termos dependem só de θ e ϕ , assim

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) - \frac{2m_0r^2}{\hbar^2} [V(r) - E] = l(l+1)\mathcal{R} = 0, \quad (2.5a)$$

$$\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} = -l(l+1)\sin^2(\theta), \quad (2.5b)$$

onde $l(l+1)$ é uma constante se separação, aplicando um procedimento similar na segunda dessas equações, obtemos finalmente que a ES (2.1) é equivalente ao sistema

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}(r)}{dr} \right) - \frac{2m_0r^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \mathcal{R}(r) = l(l+1)\mathcal{R}(r), \quad (2.6a)$$

$$\sin(\theta) \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + l(l+1)\sin^2(\theta)\Theta(\theta) = m^2\Theta(\theta), \quad (2.6b)$$

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} = -m^2\Phi(\phi), \quad (2.6c)$$

onde m é outra constante de separação. A equação 2.6a é a equação radial e suas soluções são as autofunções radiais (FR). Utilizando a propriedade $\Phi(\theta + 2\pi) = \Phi(\theta)$ na equação (2.6c), obtemos a condição $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. A solução fisicamente aceitável de (2.6b) é $\Theta(\theta) = AP_l^m(\cos(\theta))$ onde A é uma constante e

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} \left[\frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2-1)^l \right] \quad (2.7)$$

são os polinômios de Legendre associados [12]. Essa expressão só tem sentido se l é inteiro não negativo e, se $|m| > l$ temos $P_l^m(x) = 0$, logo, as condições em l e m são

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad (2.8a)$$

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-2, l-1, l, \quad (2.8b)$$

assim, para todo l existem $2l+1$ valores possíveis de m . A função de onda angular $\mathcal{Y}(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$, é normalizada sob a condição $\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\mathcal{Y}(\theta, \phi)|^2 \sin(\theta) d\theta d\phi = 1$, assim

$$\mathcal{Y}(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \exp(im\phi) P_l^m(\cos(\theta)), \quad (2.9)$$

na qual $\epsilon = (-1)^m$, para $m \geq 0$ e $\epsilon = 1$ para $m \leq 0$ [13]. Comumente a equação (2.6a) é escrita utilizando a função de onda radial reduzida (FRR) $\mathcal{U}(r) = r\mathcal{R}(r)$, assim a parte radial da ES (2.1) é

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right] \mathcal{U}(r) = 0, \quad (2.10)$$

onde a condição de normalização desta nova variável é $\int_0^\infty |\mathcal{U}(r)|^2 dr = 1$. Do sistema (2.8) e da equação (2.10), vemos que as autoenergias desta classe de sistemas dependem unicamente da coordenada radial e podem ser calculadas utilizando a equação (2.10). Uma característica especial do operador desta equação é o fato que pode ser fatorado como o produto de dois operadores que seguem a álgebra da SUSYQM, logo, todo sistema quântico não-relativístico que apresente um potencial radial em principio pode ser estudado com o formalismo da SUSYQM.

Neste capítulo vamos mostrar que SUSYQM pode ser aplicada no caso de dois importantes sistemas quânticos não-relativísticos para os quais o potencial é radial; o AHNr e o OAT. Com o objetivo de conseguir uma melhor completude conceitual da aplicação do formalismo da SUSYQM nessa classe de sistemas, primeiramente se resolverá tais problemas utilizando o método convencional, a solução explícita das equações diferenciais e, finalmente apresentaremos as respectivas comparações dos métodos.

2.2 Átomo de hidrogênio: $V(r) \sim r^{-1}$

2.2.1 Introdução

No eletromagnetismo clássico, duas partículas carregadas estáticas interagem por meio do campo eletrostático que cada uma delas geram. A consideração que o campo elétrico é estático pode ser uma boa aproximação quando as acelerações das cargas são pequenas. O problema de dois corpos interagindo mediante o campo eletrostático é muito importante e é matematicamente análogo ao problema de dois corpos interagindo mediante o campo gravitacional newtoniano.

No estudo do problema de dois corpos é usual considerar que um deles tenha a massa muito maior que a massa do outro, logo, é possível assumir que o corpo de maior massa permanece na mesma posição. No caso que uma das cargas tenha uma magnitude pequena no sentido que o campo que gera não modifica substancialmente a magnitude do campo gerado pela outra carga e sua aceleração é baixa, é possível estudar o problema de uma carga no interior de um campo eletrostático Coulombiano. O principal modelo clássico do AH consiste em um elétron de carga $-e \approx -1.6 \times 10^{-19}$ e massa $m_e \approx 9.11 \times 10^{-31} kg$ ligado a um próton de carga e e massa m_p ($m_p \approx 1836m_e$), a força sobre o elétron é $\mathbf{F} = -k\mathbf{r}/r^3$, onde $k \equiv e^2/4\pi\epsilon_0 \approx 9 \times 10^9 \times e^2 N \cdot m^2 / C^2$ e \mathbf{r} é o vetor de posição do elétron com respeito ao próton e r sua magnitude. Da força que experimenta o elétron, temos que a sua energia potencial é central e tem a forma $V(r) = -k/r$. Em mecânica quântica o AHNR é o sistema descrito pela ES para o potencial central $V(r) = -k/r$ [13], esse potencial é radial e então as autofunções podem ser calculadas com a equação (2.10) para esse potencial

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{k}{r} - E \right] \mathcal{U}(r) = 0, \quad (2.11)$$

a fatoração desse tipo de equações tem uma relação com o fechamento das orbitas clássicas [14]. Para solucionar a equação (2.11) na procura de estados ligados devemos exigir que as energias sejam negativas, no caso de energias positivas a equação se associa ao espalhamento do elétron [15], métodos de fatoração podem ser utilizados para a solução [16]. Em referência à relação entre supersimetria e o AHNR, uma supersimetria exata no AHNR já foi encontrada [17], as autofunções desse sistema podem ser calculadas via supersimetria [18]. A solução do átomo de hidrogênio supersimétrico em diferentes dimensões foi tratada em [19].

2.2.2 Solução explícita da equação diferencial radial

Como se discutiu anteriormente, no caso de estados ligados as autoenergias têm de ser negativas, esse fato faz com que seja conveniente introduzir a constante $\kappa^2 = 2m|E|/\hbar^2$, logo a equação (2.11) pode ser escrita como

$$\left[-\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{\kappa^2 r^2} - \frac{2mk}{\hbar^2 \kappa^2 r} + 1 \right] \mathcal{U}(r) = 0, \quad (2.12)$$

e fazendo as substituições $\rho = \kappa r$ e $\rho_0 = 2mk/\hbar^2 \kappa$, obtemos

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right] \mathcal{U}(\rho) = 0. \quad (2.13)$$

Para encontrar a solução dessa equação de segunda ordem primeiramente vamos encontrar as soluções das equações diferenciais obtidas em casos limite. Com essas funções é possível propor a forma da função $\mathcal{U}(\rho)$.

O limite $\rho \rightarrow \infty$

Nesse limite os termos proporcionais a ρ^{-1} e ρ^{-2} em (2.13), decrescem rapidamente, assim

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - 1 \right] \mathcal{U}_{\rho \rightarrow \infty}(\rho) = 0, \quad (2.14)$$

essa equação diferencial é muito conhecida nos estudos de dinâmica de uma partícula, cuja solução geral é $\mathcal{U}_{\rho \rightarrow \infty}(\rho) = A \exp(-\rho) + B \exp(\rho)$, onde A e B são constantes. Entretanto, precisa-se que esta função seja normalizável, exigindo que a constante B seja nula, a solução fisicamente admissível é

$$\mathcal{U}_{\rho \rightarrow \infty}(\rho) = A \exp(-\rho). \quad (2.15)$$

Essa função limite depende do fato que o potencial decresce com a distância, sem isso o terceiro termo de (2.13) não poderia ser descartado.

O limite $\rho \rightarrow 0$

Nesse limite o termo proporcional a ρ^{-2} cresce rapidamente em comparação aos outros termos de (2.13), assim

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \mathcal{U}_{\rho \rightarrow 0}(\rho) = 0, \quad (2.16)$$

procurando uma solução da forma

$$\mathcal{U}_{\rho \rightarrow 0}(\rho) = \rho^\alpha \sum_{\mu=0}^{\infty} a_\mu \rho^\mu, \quad (2.17)$$

podemos obter

$$\frac{d^2}{d\rho^2} \mathcal{U}_{\rho \rightarrow 0}(\rho) = \rho^{\alpha-2} \left[\alpha(\alpha-1) \sum_{\mu=0}^{\infty} a_\mu \rho^\mu + 2\alpha \sum_{\mu=0}^{\infty} \mu a_\mu \rho^\mu + \sum_{\mu=0}^{\infty} \mu(\mu-1) a_\mu \rho^\mu \right]. \quad (2.18)$$

Substituindo (2.17) e (2.18) em (2.16), obtemos as duas condições

$$\alpha(\alpha-1) - l(l+1) = 0, \quad (2.19a)$$

$$\mu(2\alpha + \mu - 1) = 0, \quad (2.19b)$$

e assim $\mathcal{U}_{\rho \rightarrow 0}(r) = A\rho^{l+1} + B\rho^{-l}$, contudo o termo proporcional a ρ^{-l} cresce ilimitadamente quando ρ aproxima-se de zero, logo, a constante B tem de ser nula e

$$\mathcal{U}_{\rho \rightarrow 0}(\rho) = A\rho^{l+1}. \quad (2.20)$$

Esse resultado depende da forma do potencial e é válido para todo potencial proporcional a ρ^n com $n > -2$, caso contrário o termo angular de (2.13) não é o termo que cresce mais rapidamente nesse limite.

Autofunções radiais

Obtidas as funções limite (2.15) e (2.20), podemos propor que a forma geral da FRR é

$$\mathcal{U}(\rho) = \rho^{l+1} \exp(-\rho) f(\rho), \quad (2.21)$$

na qual $f(\rho)$ é uma função ainda não conhecida. A especificação dessa função vai determinar a FRR totalmente. Substituindo (2.21) em (2.13) vemos que a função $f(\rho)$ precisa satisfazer a equação

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{d}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)] \right] f(\rho) = 0, \quad (2.22)$$

substituindo nessa equação a solução em série de potências

$$f(\rho) = \sum_{\mu=0}^{\infty} a_\mu \rho^\mu, \quad (2.23)$$

encontramos que os coeficientes têm de cumprir a relação de recorrência

$$a_{\mu+1} = \frac{2[\mu + (l + 1)] - \rho_0}{(\mu + 1)[\mu + 2(l + 1)]} a_{\mu}. \quad (2.24)$$

Essa relação de recorrência é sempre válida, no entanto, a FRR (2.21) tem de ser normalizável, esse fato faz com que precisemos impor uma condição aos a_{μ} com o intuito que a função (2.23) não divirja. No caso de grandes valores de μ a relação de recorrência (2.24) pode se aproximar como

$$a_{\mu_g+1} \approx \frac{2}{\mu_g + 1} a_{\mu_g}, \quad (2.25)$$

na qual o subíndice g indica que o μ é suficientemente grande. Supondo que existe um a_{i+1} não nulo com $i + 1$ igual a um valor particular de μ_g que satisfaça

$$a_{\mu_g} \approx \frac{2}{\mu_g} \frac{2}{\mu_g - 1} \cdots \frac{2}{i + 2} a_{i+1} = \frac{2^{\mu_g - i - 1} (i + 1)!}{\mu_g!} a_{i+1}, \quad (2.26)$$

temos

$$f_g(\rho) \sim \frac{a_{i+1} (i + 1)!}{2^{i+1}} \sum_{\mu_g=0}^{\infty} \frac{(2\rho)^{\mu_g}}{\mu_g!} = \frac{a_{i+1} (i + 1)!}{2^{i+1}} \exp(2\rho), \quad (2.27)$$

substituindo essa função em (2.21), obtemos

$$\mathcal{U}_g(\rho) \sim \frac{a_{i+1} (i + 1)!}{2^{i+1}} \rho^{l+1} \exp(\rho). \quad (2.28)$$

A função $g(\rho) = \rho^{l+1} \exp(\rho)$ é sempre crescente com ρ , o que faz com que seja uma função não é normalizável, no entanto, $\mathcal{U}_g(\rho) \sim a_{i+1} (i + 1)! / 2^{i+1}$, logo, a não normalizabilidade de $g(\rho)$ implica a não normalizabilidade de $\mathcal{U}_g(\rho)$ unicamente se o coeficiente $a_{i+1} (i + 1)! / 2^{i+1}$ não é nulo, o qual só é possível se $a_{i+1} = 0$. De (2.23) vemos que a_{i+1} não pode ser o primeiro dos coeficientes, nesse caso a função $f(\rho)$ se anulava, pois todos os termos seriam nulos. Se o primeiro dos coeficientes nulos é o a_{i+1} , então o último dos coeficientes não nulo é o a_i , assim, a função $f(\rho)$ é um polinômio de grau i . De (2.24) vemos que a condição $a_{i+1} = 0$ implica $\rho_0 = 2(i + l + 1)$, os valores possíveis de i e l são inteiros, isso faz com que a quantidade $i + l + 1$ também seja inteira, além do que, diferentes valores de i e l podem gerar o mesmo valor de $i + l + 1$, sugerindo essas duas características a definição de número quântico principal

$$n = i + l + 1. \quad (2.29)$$

Em função dele podemos dizer que $f(\rho)$ é um polinômio de grau $n - l - 1$ em ρ , logo, a FRR (2.21) não normalizada é

$$\mathcal{U}_{nl}(\rho) \sim \rho^{l+1} \exp(-\rho) \sum_{\mu=0}^{n-l-1} a_{\mu} \rho^{\mu}. \quad (2.30)$$

Das definições de ρ e ρ_0 temos $\rho = 2mkr/\rho_0\hbar^2$, onde $\rho_0 = 2n$ foi a condição encontrada pela existência de um $a_{i+1} = 0$, logo $\rho = r/an$ onde $a = \hbar^2/mk$ é o raio de Bohr. Assim, a FR não normalizada $\mathcal{R}_{nl}(r) = \mathcal{U}_{nl}(r)/r$ é

$$\mathcal{R}_{nl}(r) \sim \frac{1}{r} \left(\frac{r}{an}\right)^{l+1} \exp\left(-\frac{r}{an}\right) \sum_{\mu=0}^{n-l-1} a_{\mu} \left(\frac{r}{an}\right)^{\mu}, \quad (2.31)$$

o subíndice nl mostra que a FR depende dos dois números quânticos.

Autoenergias

Na subseção anterior vimos que a existência de um $a_{i+1} = 0$ implica $\rho_0 = 2n$, onde n é o número quântico principal. Além disso, vimos que $\rho_0 = 2mk/\hbar^2\kappa$ onde $\kappa = 2m|E|/\hbar^2$, estas relações implicam

$$E_n = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.32)$$

isto é, o AHNR tem um espectro discreto de energia e os valores possíveis dependem apenas do número quântico principal.

2.2.3 Solução via SUSYQM

A equação para a FRR (2.11) resulta

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{k}{r} \right] \mathcal{U}(r) = E\mathcal{U}(r), \quad (2.33)$$

a qual pode se escrever como

$$\frac{\hbar^2}{m} \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{ar} \right] \mathcal{U}(r) = E\mathcal{U}(r), \quad (2.34)$$

onde $a = \hbar^2/mk$, aqui definimos o hamiltoniano

$$H_l \equiv \frac{\hbar^2}{m} \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{ar} \right]. \quad (2.35)$$

Veremos que esse hamiltoniano pode ser fatorado como o produto de dois operadores A e A^\dagger com os quais é possível fazer a construção de um superhamiltoniano de maneira que esses operadores satisfaçam a álgebra da SUSYQM.

Fatoração da equação radial

Para que seja possível aplicar as técnicas próprias da SUSYQM apresentadas no primeiro capítulo ao estudo do hamiltoniano (2.35), primeiramente esse hamiltoniano deve ser fatorado como um produto de dois operadores os quais têm de ser hermiticamente conjugados. Pela forma dos termos do hamiltoniano (2.35), procuramos uma fatoração da forma

$$H_l = \left(-\frac{\alpha d}{dr} + \frac{\beta(l+\delta)}{r} - \frac{\gamma k}{(l+\delta)a} \right) \left(\frac{\alpha d}{dr} + \frac{\beta(l+\delta)}{r} - \frac{\gamma k}{(l+\delta)a} \right), \quad (2.36)$$

onde α , β e γ são contantes ainda indeterminadas. Não é possível encontrar α , β e γ pelas quais a equação (2.36) seja satisfeita diretamente, no entanto, fazendo as escolhas $\alpha = \beta = \gamma \equiv \hbar/\sqrt{2m}$, obtemos os operadores

$$A_{l\delta} \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[-\frac{d}{dr} + \frac{(l+\delta)}{r} - \frac{1}{(l+\delta)a} \right], \quad (2.37a)$$

$$A_{l\delta}^\dagger \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\frac{d}{dr} + \frac{(l+\delta)}{r} - \frac{1}{(l+\delta)a} \right], \quad (2.37b)$$

os quais, além de ser hermitianos conjugados satisfazem

$$A_{l\delta} A_{l\delta}^\dagger = \frac{\hbar^2}{m} \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2} \frac{(l+\delta)(l+\delta+1)}{r^2} - \frac{1}{ra} + \frac{1}{2a^2(l+\delta)^2} \right]. \quad (2.38)$$

O produto resultado da troca dos operadores é

$$A_{l\delta}^\dagger A_{l\delta} = \frac{\hbar^2}{m} \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2} \frac{(l+\delta-1)(l+\delta)}{r^2} - \frac{1}{ra} + \frac{1}{2a^2(l+\delta)^2} \right], \quad (2.39)$$

solucionadas as equações $(l+\delta)(l+\delta+1) = l(l+1)$ e $(l+\delta-1)(l+\delta) = l(l+1)$ vemos que o produto de operadores da forma (2.38) pode ser escrito como a soma do hamiltoniano H_l e uma constante unicamente no caso $\delta = 0$. Similarmente, com um produto de operadores da forma (2.39) o mesmo resultado pode unicamente ser obtido com $\delta = 1$. Adicionando a quantidade $\hbar^2/2ma^2l^2$ nos dois lados da equação (2.34), obtemos

$$A_{l0} A_{l0}^\dagger \mathcal{U}(r) = \left[E + \frac{\hbar^2}{2ma^2l^2} \right] \mathcal{U}(r), \quad (2.40)$$

correspondentemente, adicionando o termo $\hbar^2/2ma^2(l+1)^2$ à mesma equação

$$A_{l1}^\dagger A_{l1} \mathcal{U}(r) = \left[E + \frac{\hbar^2}{2ma^2(l+1)^2} \right] \mathcal{U}(r). \quad (2.41)$$

Contudo, as duas equações não podem ser adequadas para o estudo da equação (2.34) com o formalismo da SUSYQM. O critério para a escolha de uma dessas duas equações será apresentado na seguinte subseção.

Definição dos operadores de escada

A forma da equação (2.40) sugere estudar a possibilidade de se encontrar uma função normalizável $\mathcal{U}_{l0}^+(r)$ que satisfaça a equação $A_{l0}^\dagger \mathcal{U}_{l0}^+(r) = 0$, similarmente, (2.41) sugere procurar uma função normalizável $\mathcal{U}_{l1}^-(r)$ que satisfaça $A_{l1} \mathcal{U}_{l1}^-(r) = 0$, o que explicitamente, essas equações diferenciais são

$$\left[\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{la} \right] \mathcal{U}_{l0}^+(r) = 0, \quad (2.42a)$$

$$\left[-\frac{d}{dr} + \frac{(l+1)}{r} - \frac{1}{(l+1)a} \right] \mathcal{U}_{l1}^-(r) = 0, \quad (2.42b)$$

com soluções gerais

$$\mathcal{U}_{l0}^+(r) = C_0 r^{-l} \exp \left[\frac{r}{la} \right], \quad (2.43a)$$

$$\mathcal{U}_{l1}^-(r) = C_1 r^{l+1} \exp \left[-\frac{r}{(l+1)a} \right], \quad (2.43b)$$

nas quais C_1 e C_2 são constantes ainda indeterminadas. As funções da forma (2.43a) são não normalizáveis, pelo qual não podem descrever uma partícula ligada, no entanto

$$\int_0^\infty [\mathcal{U}_{l1}^-(r)]^2 dr = C_1^2 \Gamma[2l+3] \left[\frac{(l+1)a}{2} \right]^{2l+3}, \quad (2.44)$$

desses resultados, podemos concluir que unicamente (2.41) inclui a equação (2.34), pois oferece a possibilidade de encontrar uma autofunção normalizável para o estado fundamental. Além do mais, o primer tipo de funções não é normalizável no caso $l = 0$.

Identificação de SUSYQM no sistema.

Vimos que os operadores adequados para a fatoração são

$$A_{l1} \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[-\frac{d}{dr} + \frac{(l+1)}{r} - \frac{1}{(l+1)a} \right], \quad (2.45a)$$

$$A_{l1}^\dagger \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\frac{d}{dr} + \frac{(l+1)}{r} - \frac{1}{(l+1)a} \right], \quad (2.45b)$$

a existência de um estado fundamental que se pode destruir com a aplicação do operador A_{l1} é uma importante característica para considerar os operadores anteriores como operadores escada. Com A_{l1} e A_{l1}^\dagger construímos os operadores de carga e o superhamiltoniano, os hamiltonianos componentes do superhamiltoniano são

$$A_{l1}^\dagger A_{l1} = \frac{\hbar^2}{m} \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{ra} + \frac{1}{2a^2(l+1)^2} \right], \quad (2.46a)$$

$$A_{l1} A_{l1}^\dagger = \frac{\hbar^2}{m} \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{(l+1)(l+2)}{2r^2} - \frac{1}{ra} + \frac{1}{2a^2(l+1)^2} \right] \quad (2.46b)$$

Então, o AHNR pode ser estudado totalmente com o formalismo da SUSYQM, pois o hamiltoniano $A_{l1}^\dagger A_{l1}$ que compõe o superhamiltoniano é o hamiltoniano que difere em uma só constante do hamiltoniano H_l .

Autofunção e autoenergia do estado fundamental

Por definição, o estado fundamental tem a propriedade de ser aniquilado pelo operador de destruição. A única possibilidade para a FRR do estado fundamental é $\mathcal{U}_{l1}^-(r)$ apresentada em (2.43b). No entanto, primeiramente esta função deve ser normalizada utilizando a equação (2.44), assim

$$\mathcal{U}^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{[2/(l+1)a]^{2l+3}}{\Gamma[2l+3]}} r^{l+1} \exp \left[-\frac{r}{(l+1)a} \right], \quad (2.47)$$

na qual o símbolo (0) indica que se trata do estado fundamental. Substituindo esta função em (2.41) encontramos a energia associada com esse estado

$$E_{\mathcal{U}^{(0)}} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2(l+1)^2}. \quad (2.48)$$

Invertendo o ordem dos operadores na equação (2.41) podemos obter a nova equação

$$A_{l1} A_{l1}^\dagger \mathcal{V}(r) = \left[E + \frac{\hbar^2}{2ma^2(l+1)^2} \right] \mathcal{V}(r), \quad (2.49)$$

onde $\mathcal{V}(r)$ é uma nova função. As equações (2.41) e (2.49) são vinculadas mediante a SUSYQM.

Autofunções e autoenergias dos estados excitados

Explicitamente as equações (2.41) e (2.49) podem ser escritas como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\hbar^2}{mar} - E \right] \mathcal{U}(r) = 0, \quad (2.50a)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(l+1)(l+2)}{r^2} - \frac{\hbar^2}{mar} - E \right] \mathcal{V}(r) = 0, \quad (2.50b)$$

das quais podemos ver que o operador da equação (2.50b) pode ser obtido do operador da equação (2.50a) fazendo a troca $l \rightarrow l+1$, assim, a função do estado fundamental do conjunto de autofunções $\{\mathcal{V}(r)\}$ pode ser obtida diretamente da função (2.47) utilizando a mesma troca, logo

$$\mathcal{V}^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{[2/(l+2)a]^{2l+5}}{\Gamma[2l+5]}} r^{l+2} \exp\left[-\frac{r}{(l+2)a}\right], \quad (2.51)$$

correspondentemente a energia desse estado pode ser obtida da energia (2.48) mediante o mesmo procedimento de substituição, assim

$$E_{\mathcal{V}^{(0)}} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2(l+2)^2}. \quad (2.52)$$

O conjunto de equações (2.41) e (2.49) inclui os dois hamiltonianos que formam o superhamiltoniano. Este fato faz com que exista uma relação entre os conjuntos de funções $\{\mathcal{U}(r)\}$ e $\{\mathcal{V}(r)\}$, como foi explicado no capítulo de introdução, em particular a autofunção não-normalizada do primeiro estado excitado é $\mathcal{U}^{(1)}(r) \sim A_{l1}^\dagger \mathcal{V}^{(0)}(r)$ e $E_{\mathcal{U}^{(1)}} = E_{\mathcal{V}^{(0)}}$, assim, a autofunção não-normalizada e a correspondente autoenergia são

$$\mathcal{U}^{(1)}(r) \sim A_{l1}^\dagger r^{l+2} \exp\left[-\frac{r}{(l+2)a}\right], \quad (2.53a)$$

$$E_{\mathcal{U}^{(1)}} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2(l+2)^2}. \quad (2.53b)$$

A equação (2.50b) foi obtida de um operador do tipo (2.38) no qual $\delta = 1$, no entanto, essa equação também pode ser obtida utilizando um operador do tipo (2.39) com $\delta = 2$. Em correspondência, deve existir outra equação similar à equação (2.50b) construída utilizando operadores do tipo (2.38) com $\delta = 2$, assim podemos construir as equações

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(l+1)(l+2)}{r^2} - \frac{\hbar^2}{mar} - E \right] \mathcal{V}(r) = 0, \quad (2.54a)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(l+2)(l+3)}{r^2} - \frac{\hbar^2}{mar} - E \right] \mathcal{W}(r) = 0, \quad (2.54b)$$

onde pode-se obter a equação (2.54b) de (2.54a) fazendo a troca $l \rightarrow l + 1$, assim, utilizando (2.51) teremos

$$\mathcal{W}^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{[2/(l+3)a]^{2l+7}}{\Gamma[2l+7]}} r^{l+3} \exp\left[-\frac{r}{(l+3)a}\right], \quad (2.55)$$

de maneira similar, a energia associada com esse estado pode ser obtida de (2.52)

$$E_{\mathcal{W}^{(0)}} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2(l+3)^2}. \quad (2.56)$$

O fato que as duas equações (2.50) sejam relacionadas por SUSYQM garante que a autofunção não-normalizada do segundo estado excitado seja $\mathcal{U}^{(2)}(r) \sim A_{l1}^\dagger \mathcal{V}^{(1)}(r)$, da mesma maneira, as equações (2.54) garantem que $\mathcal{V}^{(1)}(r) \sim A_{l2}^\dagger \mathcal{W}^{(0)}(r)$ e, as correspondentes relações entre as energias são $E_{\mathcal{U}^{(2)}} = E_{\mathcal{V}^{(1)}}$ e $E_{\mathcal{V}^{(1)}} = E_{\mathcal{W}^{(0)}}$, assim, a autofunção não-normalizada e a correspondente autoenergia são

$$\mathcal{U}^{(2)}(r) \sim A_{l1}^\dagger A_{l2}^\dagger r^{l+3} \exp\left[-\frac{r}{(l+3)a}\right], \quad (2.57a)$$

$$E_{\mathcal{U}^{(2)}} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2(l+3)^2}. \quad (2.57b)$$

A função do estado fundamental (2.47), a sua energia (2.48) e as correspondentes expressões para o primeiro e segundo estado excitado e as suas energias apresentadas em (2.53) e (2.57), são casos particulares das relações gerais

$$\mathcal{U}^{(N)}(r) \sim A_{l1}^\dagger A_{l2}^\dagger \dots A_{lN}^\dagger r^{l+N+1} \exp\left[-\frac{r}{(l+N+1)a}\right], \quad (2.58a)$$

$$E_{\mathcal{U}^{(N)}} = -\left[\frac{\hbar^2}{2ma^2(l+N+1)^2}\right], \quad (2.58b)$$

nessas expressões temos o termo $l + N + 1$. Para diferentes valores de l e N os valores de energia podem ser diferentes, porém, para todos os possíveis valores de l e N que gerem o mesmo número $l + N + 1$ os valores de energia são iguais, fato esse que sugere a definição do número quântico principal

$$n = l + N + 1. \quad (2.59)$$

Com a definição desse número quântico as expressões finais para as autofunções radiais não-normalizadas e as autoenergias são

$$\mathcal{R}_{nl}(r) \sim \frac{1}{r} \prod_{i=1}^N A_{li}^\dagger r^n \exp\left[-\frac{r}{na}\right], \quad (2.60a)$$

$$E_n = -\left[\frac{\hbar^2}{2ma^2}\right] \frac{1}{n^2}, \quad (2.60b)$$

onde $\prod_{i=1}^N A_{li}^\dagger = A_{l1}^\dagger A_{l2}^\dagger \cdots A_{lN}^\dagger$ sendo a ordem dos operadores relevantes.

Exemplos

Vamos apresentar alguns exemplos do cálculo de diferentes autofunções radiais

$$\mathcal{R}_{nl}(r) \sim \frac{1}{r} \prod_{i=1}^N A_{li}^\dagger r^n \exp\left[-\frac{r}{na}\right], \quad (2.61)$$

onde os operadores A_{li}^\dagger são

$$A_{li}^\dagger \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\frac{d}{dr} + \frac{(l+i)}{r} - \frac{1}{(l+i)a} \right]. \quad (2.62)$$

Como sugere a notação das autofunções (2.61) a escolha da autofunção se faz mediante a determinação dos dois números quânticos n e l , o número N fica implícito com a relação $N = n - l - 1$. A especificação desse número é muito importante, pois determina o número de operadores que atuam na função geratriz $r^n \exp[-r/na]$.

As autofunções que têm o número quântico principal menor ou igual a três se mostram na seguinte tabela:

n	l	$\mathcal{R}_{nl}(r)$	$N = n - l - 1$
1	0	$\mathcal{R}_{10}(r)$	0
2	0	$\mathcal{R}_{20}(r)$	1
2	1	$\mathcal{R}_{21}(r)$	0
3	0	$\mathcal{R}_{30}(r)$	2
3	1	$\mathcal{R}_{31}(r)$	1
3	2	$\mathcal{R}_{32}(r)$	0

Caso $n = 1$:

Como vemos na tabela a única possibilidade para $n = 1$ é

$$\mathcal{R}_{10}(r) \sim \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \quad (2.63)$$

Caso $n = 2$:

Neste caso existem dois possíveis valores do número quântico angular, $l = 0, 1$, assim, existem duas autofunções

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{20}(r) &\sim \frac{1}{r} A_{l1}^\dagger r^2 \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \\
&= \frac{1}{r} \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right] r^2 \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \\
&= \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \left[1 - \frac{r}{2a} \right] \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)
\end{aligned} \tag{2.64}$$

e

$$\mathcal{R}_{21}(r) \sim r \exp\left(-\frac{r}{2a}\right). \tag{2.65}$$

Caso $n = 3$:

Neste caso existem três possíveis valores do número quântico angular, $l = 0, 1, 2$, assim, existem três autofunções

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{30}(r) &\sim \frac{1}{r} A_{l1}^\dagger A_{l2}^\dagger r^3 \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \\
&= \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \right)^2 \frac{1}{r} \left[\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right] \left[\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} - \frac{1}{2a} \right] r^3 \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \\
&= 5 \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \right)^2 \frac{1}{r} \left[\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right] r^2 \left(1 - \frac{r}{6a} \right) \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \\
&= \frac{15\hbar^2}{2m} \left(1 - \frac{2r}{3a} + \frac{2r^2}{27a^2} \right) \exp\left(-\frac{r}{3a}\right),
\end{aligned} \tag{2.66}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{31}(r) &\sim \frac{1}{r} A_{l1}^\dagger r^3 \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \\
&= \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{1}{r} \left[\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} - \frac{2}{a} \right] r^3 \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \\
&= \frac{5\hbar}{\sqrt{2m}} r \left(1 - \frac{r}{6a} \right) \exp\left(-\frac{r}{3a}\right)
\end{aligned} \tag{2.67}$$

e

$$\mathcal{R}_{32}(r) \sim r^2 \exp\left(-\frac{r}{3a}\right). \tag{2.68}$$

Todas essas FRR são totalmente iguais às funções de FRR não-normalizadas que podem ser obtidas com a equação (2.31), método apresentado nos textos usuais [13].

2.3 Oscilador Harmônico 3D: $V(r) \sim r^2$

2.3.1 Introdução

Em mecânica clássica, é dito que uma partícula oscila quando se desloca periodicamente em relação a sua posição de equilíbrio. Entre os movimentos oscilatórios um dos mais importantes é o movimento harmônico simples (MHS). É dito que uma partícula descreve um MHS se sobre ela age uma força $\mathbf{F} = -k_e \mathbf{r}$, onde k_e é uma constante positiva de proporcionalidade e \mathbf{r} é o vetor de posição da partícula com respeito a sua posição de equilíbrio. Em geral esse vetor pode ter componentes nas três dimensões. A partícula que descreve um MHS é chamada oscilador harmônico simples (OHS), em ocasiões, o estudo do OHS pode ser feito em função de sua energia, a energia potencial de um OHS é $V(r) = m\omega^2 r^2/2$, na qual $\omega = \sqrt{k_e/m}$ é a frequência das oscilações e m é a massa da partícula. O OHS é um dos sistemas clássicos mais importantes pelo fato de que toda partícula oscilante, no limite de pequenas oscilações pode ser aproximada como um desses osciladores. Em mecânica quântica, o sistema descrito pela equação de Schrödinger para um potencial central $V(r) = m\omega^2 r^2/2$ é chamado oscilador harmônico tridimensional (OHT) [13]. A conexão entre o fechamento de orbitas clássicas e possíveis fatorações da parte radial da ES associada ao OHT é tratada em [14]. A dinâmica do OHT foi estudada por P. Kundrat [20] e algumas propriedades das autofunções deste sistema se estudam em [21]. O OHT é particularmente importante no estudo do modelo de camadas em Física Nuclear, pois nesse modelo os nucleões individuais se deslocam em um potencial médio o que é aproximado como um potencial de OHT [15]. Geralmente o OHT é estudado em mecânica quântica relativista utilizando métodos convencionais [22], não entanto também pode ser estudado com a utilização dos métodos da SUSYQM [23].

2.3.2 Solução explícita da equação diferencial radial

Como foi dito na introdução desta seção, em mecânica quântica o OHT é o sistema descrito por a ES para o potencial $V(r) = m\omega^2 r^2/2$. Nesse caso a equação (2.10) resulta em

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right] \mathcal{U}(r) = E\mathcal{U}(r), \quad (2.69)$$

de maneira semelhante à seção anterior, introduzindo a constante $\kappa^2 = -2m|E|/\hbar^2$, podemos reescrever a equação acima como

$$\left[-\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{\kappa^2 r^2} + \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2 \kappa^2} r^2 + 1 \right] \mathcal{U}(r) = 0, \quad (2.70)$$

a partir da qual fazendo as substituições $\rho = \kappa r$ e $\rho_0 = m\omega/\hbar\kappa^2$ obtemos

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \rho_0^2 \rho^2 - 1 \right] \mathcal{U}(\rho) = 0. \quad (2.71)$$

Para solucionar essa equação diferencial utilizaremos o mesmo método do capítulo anterior. Primeiramente estudaremos as soluções das equações diferenciais que são obtidos calculando certos limites de ρ .

O limite $\rho \rightarrow \infty$

Nesse limite o termo de momento angular na equação (2.71) é muito pequeno em comparação aos outros termos e $\rho_0^2 \rho^2 + 1 \approx \rho_0^2 \rho^2$, logo a equação resulta em

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho_0^2 \rho^2 \right] \mathcal{U}_{\rho \rightarrow \infty}(\rho) = 0, \quad (2.72)$$

cujas soluções

$$\mathcal{U}_{\rho \rightarrow \infty}(\rho) = A\sqrt{\rho}I_{1/4}\left(\frac{1}{2}\rho_0\rho^2\right) + B\sqrt{\rho}K_{1/4}\left(\frac{1}{2}\rho_0\rho^2\right), \quad (2.73)$$

onde $I_\alpha(x)$ e $K_\alpha(x)$ são as funções de Bessel modificadas de primeira e segunda espécie, respectivamente. No limite $\rho \rightarrow \infty$ o termo com a função de Bessel de primeira espécie introduz divergências, no caso da função de Bessel de segunda espécie no limite $\rho \rightarrow \infty$ utilizamos a propriedade $K_\alpha(x) = \sqrt{\pi/2x} \exp(-x)$ [12], logo

$$\mathcal{U}_{\rho \rightarrow \infty}(\rho) \sim \exp\left(-\frac{1}{2}\rho_0\rho^2\right). \quad (2.74)$$

O limite $\rho \rightarrow 0$

Contrariamente ao caso anterior, nesse limite o termo de momento angular é o termo relevante, nesse limite a equação (2.13) resulta em

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \mathcal{U}_{\rho \rightarrow 0}(\rho) = 0, \quad (2.75)$$

equação essa obtida no capítulo anterior, e cuja solução encontrada foi

$$\mathcal{U}_{\rho \rightarrow 0}(\rho) = B\rho^{l+1}. \quad (2.76)$$

Autofunções Radiais

Com as soluções das equações diferenciais obtidas nos casos limite da variável ρ (2.74) e (2.76), podemos continuar a construção da FRR geral, que precisa ter a forma

$$\mathcal{U}(\rho) = \rho^{l+1} \exp\left(-\frac{\rho_0 \rho^2}{2}\right) f(\rho), \quad (2.77)$$

na qual $f(\rho)$ é uma função ainda não conhecida. Substituindo essa função em (2.71), obtemos que a função $f(\rho)$ tem que satisfazer

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + 2 \left(\frac{l+1}{\rho} - \rho_0 \rho \right) \frac{d}{d\rho} - [\rho(2l+3) + 1] \right] f(\rho) = 0, \quad (2.78)$$

introduzindo a nova variável $t = \rho_0 \rho^2$, obtemos

$$\left[t \frac{d^2}{dt^2} + \left(l + \frac{3}{2} - t \right) \frac{d}{dt} - \left[\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} \right) - \frac{1}{4\rho_0} \right] \right] f(t) = 0, \quad (2.79)$$

que é uma equação diferencial de Kummer [ver apêndice], então a solução geral é

$$f(\rho) = A {}_1F_1 \left[\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{1}{2\rho_0} \right), l + \frac{3}{2}; \rho_0 \rho^2 \right] + B \rho^{-(2l+1)} {}_1F_1 \left[\frac{1}{2} \left(-l + \frac{1}{2} - \frac{1}{2\rho_0} \right), -l + \frac{1}{2}; \rho_0 \rho^2 \right], \quad (2.80)$$

no caso $l \neq 0$ o segundo termo fica proporcional a $\rho^{-(2l+1)}$ e não pode ser normalizado pelo seu comportamento perto do $\rho = 0$. No caso $l = 0$

$$\mathcal{R}(\rho, l = 0) = A \exp\left(-\frac{\rho_0 \rho^2}{2}\right) {}_1F_1 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2\rho_0} \right), \frac{3}{2}; \rho_0 \rho^2 \right] + B \rho^{-1} \exp\left(-\frac{\rho_0 \rho^2}{2}\right) {}_1F_1 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\rho_0} \right), \frac{1}{2}; \rho_0 \rho^2 \right], \quad (2.81)$$

a forma do segundo termo faz com que seja divergente na origem o que implica que este termo contribui infinitamente na energia cinética média, mantendo a energia potencial média. Esse fato não é aceitável e o termo precisa ser eliminado, logo, $B = 0$. Uma descrição detalhada dessa divergência pode ser encontrada em [13]. Das propriedades da função ${}_1F_1(a, c; x)$ [ver apêndice], sabemos que o primeiro termo de (2.80) é normalizável se

$$\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{1}{2\rho_0} \right) = -n, \quad \text{onde } n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.82)$$

logo, a FR não normalizada, em função da variável original $r = \rho/\kappa$, é

$$\mathcal{R}_{nl}(r) = r^l \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right) {}_1F_1\left[-n, l + \frac{3}{2}; \frac{m\omega}{\hbar}r^2\right], \quad (2.83)$$

na qual os subíndices nl indica que as FRs em geral dependem dos dois números quânticos n e l . Essas FRs não-normalizadas podem ser escritas em função dos polinômios de Laguerre associados [ver .1.6 do apêndice].

$$\mathcal{R}_{nl}(r) = r^l \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right) L_n^{l+1/2}\left(\frac{m\omega}{\hbar}r^2\right). \quad (2.84)$$

Autoenergias

Utilizando as relações $\rho_0 = m\omega/\hbar\kappa^2$ e $\kappa^2 = -2m|E|/\hbar^2$ vemos que (2.82) é equivalente a

$$E_{nl} = \hbar\omega\left(2n + l + \frac{3}{2}\right), \quad \text{onde } n, l = 0, 1, 2, \dots \quad (2.85)$$

Nesta expressão vemos que as autoenergias dependem dos dois números quânticos n e l , o que é uma importante diferença com o AHNR, para o qual as autoenergias dependem só do número quântico n .

2.3.3 Solução via SUSYQM

Como foi discutido anteriormente o potencial sob o elétron atômico está submetido é o potencial de Coulomb gerado pelo próton do núcleo, potencial esse é radial e, nesse caso a equação para a FRR (2.10) resulta em

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right] \mathcal{U}(r) = E\mathcal{U}(r). \quad (2.86)$$

Essa equação pode ser reescrita de um modo mais conveniente

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}r^2\right] \mathcal{U}(r) = E\mathcal{U}(r), \quad (2.87)$$

onde definimos o hamiltoniano

$$H_l \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}r^2\right]. \quad (2.88)$$

Para que SUSYQM seja aplicável ao OHT, é preciso que o hamiltoniano anterior possa ser fatorado como o produto de dois operadores A e A^\dagger , como foi discutido na introdução.

Fatoração da equação radial

Pela forma dos termos do hamiltoniano (2.88), procuramos uma fatoração

$$H_l = \left(-\frac{\alpha d}{dr} + \frac{\beta(l+\delta)}{r} - \gamma r \right) \left(\frac{\alpha d}{dr} + \frac{\beta(l+\delta)}{r} - \gamma r \right), \quad (2.89)$$

onde α , β e γ são constantes ainda indeterminadas. Não é possível encontrar α , β e γ de tal maneira que a equação (2.89) seja cumprida exatamente. Entretanto, escolhendo $\alpha = \beta = \hbar/\sqrt{2m}$ e $\gamma = \omega\sqrt{m/2}$ construímos os operadores

$$A_{l\delta} \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[-\frac{d}{dr} + \frac{(l+\delta)}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right], \quad (2.90a)$$

$$A_{l\delta}^\dagger \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\frac{d}{dr} + \frac{(l+\delta)}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right], \quad (2.90b)$$

que são tais que

$$A_{l\delta} A_{l\delta}^\dagger = \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{(l+\delta)(l+\delta+1)}{r^2} + \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 r^2 - \frac{m\omega}{\hbar} (2l+2\delta-1) \right]. \quad (2.91)$$

O resultado da troca dos operadores fornece

$$A_{l\delta}^\dagger A_{l\delta} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{(l+\delta-1)(l+\delta)}{r^2} + \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 r^2 - \frac{m\omega}{\hbar} (2l+2\delta+1) \right]. \quad (2.92)$$

Solucionando as equações $(l+\delta)(l+\delta+1) = l(l+1)$ e $(l+\delta-1)(l+\delta) = l(l+1)$ vemos que o produto de operadores da forma (2.91) pode ser escrito como a soma do hamiltoniano H_l e uma constante unicamente no caso $\delta = 0$. Similarmente, com um produto de operadores da forma (2.92) se obtém o mesmo hamiltoniano mais uma constante com $\delta = 1$. Adicionando a quantidade $-\hbar\omega(2l-1)/2$ nos dois lados da equação (2.87) obtemos

$$A_{l0} A_{l0}^\dagger \mathcal{U}(r) = \left[E - \frac{1}{2} \hbar\omega(2l-1) \right] \mathcal{U}(r). \quad (2.93)$$

Analogamente, adicionando $-\hbar\omega(2l+3)/2$ nos dois lados da mesma equação obtemos

$$A_{l1}^\dagger A_{l1} \mathcal{U}(r) = \left[E - \frac{1}{2} \hbar\omega(2l+3) \right] \mathcal{U}(r). \quad (2.94)$$

Definição dos operadores escada

Como no caso do AHNR, a forma da equação (2.93) sugere estudar a possibilidade de se encontrar uma função normalizável $\mathcal{U}_{l_0}^+(r)$ que cumpra com $A_{l_0}^\dagger \mathcal{U}_{l_0}^+(r) = 0$. Similarmente (2.94) sugere procurar outra função normalizável $\mathcal{U}_{l_1}^-(r)$ que satisfaça $A_{l_1} \mathcal{U}_{l_1}^-(r) = 0$. Explicitamente, essas equações diferenciais são

$$\left[\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right] \mathcal{U}_{l_0}^+(r) = 0, \quad (2.95a)$$

$$\left[-\frac{d}{dr} + \frac{(l+1)}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right] \mathcal{U}_{l_1}^-(r) = 0, \quad (2.95b)$$

e as soluções são

$$\mathcal{U}_{l_0}^+(r) = C_1 r^{-l} \exp \left[\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right], \quad (2.96a)$$

$$\mathcal{U}_{l_1}^-(r) = C_2 r^{l+1} \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right], \quad (2.96b)$$

nas quais C_1 e C_2 são constantes. As funções da forma (2.96a) são não normalizáveis, entretanto, no caso das funções do tipo (2.96b) temos

$$\int_0^\infty [\mathcal{U}_{l_1}^-(r)]^2 dr = C^2 \Gamma[l + 3/2] \left[\frac{\hbar}{m\omega} \right]^{l+3/2}. \quad (2.97)$$

Desses resultados é possível concluir que unicamente (2.94) pode ser utilizada para o estudo do OAT com formalismo da SUSYQM.

Identificação de SUSYQM no sistema

Na subseção anterior vimos que os operadores adequados para a fatoração são

$$A_{l_1} \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[-\frac{d}{dr} + \frac{(l+1)}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right], \quad (2.98a)$$

$$A_{l_1}^\dagger \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\frac{d}{dr} + \frac{(l+1)}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right]. \quad (2.98b)$$

De maneira análoga aos operadores (2.45), esses operadores também podem ser considerados como operadores escada, o operador A_{l_1} é um operador de destruição devido à existência de um estado fundamental, que pode ser destruído pela ação deste operador. Com esses operadores, A_{l_1} e $A_{l_1}^\dagger$, também

é possível introduzir os operadores de carga e o superhamiltoniano com hamiltonianos componentes

$$A_{l_1}^\dagger A_{l_1} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 r^2 - \frac{m\omega}{\hbar}(2l+3) \right], \quad (2.99)$$

e

$$A_{l_1} A_{l_1}^\dagger = \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{(l+1)(l+2)}{r^2} + \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 r^2 - \frac{m\omega}{\hbar}(2l+1) \right]. \quad (2.100)$$

Assim, o OAT pode ser estudado totalmente com o formalismo da SUSYQM, pois o hamiltoniano $A_{l_1}^\dagger A_{l_1}$ que compõe o superhamiltoniano difere somente de uma constante do hamiltoniano H_l do OHT.

Autofunção e autoenergia do estado fundamental

Vimos que unicamente a equação

$$A_{l_1}^\dagger A_{l_1} \mathcal{U}(r) = \left[E - \frac{1}{2} \hbar\omega(2l+3) \right] \mathcal{U}(r), \quad (2.101)$$

é adequada para o estudo do OHT com o formalismo da SUSYQM. A FRR de estado base pode ser construído utilizando as relações (2.95b) e (2.97), dita FRR é

$$\mathcal{U}^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{(m\omega/\hbar)^{l+3/2}}{\Gamma[l+3/2]}} r^{l+1} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right]. \quad (2.102)$$

Substituindo essa função em (2.101), encontramos a autoenergia associada com o estado fundamental

$$E_{\mathcal{U}^{(0)}} = \hbar\omega \left(l + \frac{3}{2} \right). \quad (2.103)$$

Invertendo o ordem dos operadores na equação (2.101) podemos obter uma nova equação

$$A_{l_1} A_{l_1}^\dagger \mathcal{V}(r) = \left[E - \frac{1}{2} \hbar\omega(2l+1) \right] \mathcal{V}(r). \quad (2.104)$$

As equações (2.101) e (2.104) são vinculadas por SUSYQM. Os lados direitos das relações (2.101) e (2.104) são diferentes, o termo $\hbar\omega(2l+3)$ pode ser obtido do termo $\hbar\omega(2l+1)$ fazendo a substituição $l \rightarrow l+1$, nos cálculos das

energias essa diferença precisa ser considerada. Explicitamente as equações (2.101) e (2.104) podem ser escritas como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - E \right] \mathcal{U}(r) = 0, \quad (2.105a)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(l+1)(l+2)}{r^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - E \right] \mathcal{V}(r) = 0 \quad (2.105b)$$

a equação (2.105b) pode ser obtida de (2.105a) com a troca $l \rightarrow l+1$, logo

$$\mathcal{V}^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{(m\omega/\hbar)^{l+5/2}}{\Gamma[l+5/2]}} r^{l+2} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right], \quad (2.106a)$$

$$E_{\mathcal{V}^{(0)}} = \hbar\omega \left(l + \frac{5}{2} \right). \quad (2.106b)$$

Autofunções e autoenergias dos estados excitados

Com as autofunções de estado fundamental calculadas podemos obter as autofunções dos estados excitados utilizando as relações apresentadas na Introdução, as quais neste caso são

$$\mathcal{U}^{(n+1)}(r) \sim A^\dagger \mathcal{V}^{(n)}(r), \quad (2.107a)$$

$$\mathcal{V}^{(n)}(r) \sim A \mathcal{U}^{(n+1)}(r), \quad (2.107b)$$

$$E_{\mathcal{U}} = E_{\mathcal{V}}(l \rightarrow l+1), \quad (2.107c)$$

em (2.107c) introduziu-se a correção de $l \rightarrow l+1$ da qual se falou anteriormente. Utilizando (2.106), (2.107a) e (2.107c) temos que a autofunção não-normalizada e autoenergia do primeiro estado excitado são

$$\mathcal{U}^{(1)}(r) \sim A^\dagger r^{l+2} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right], \quad (2.108a)$$

$$E_{\mathcal{U}^{(1)}} = \hbar\omega \left(l + \frac{7}{2} \right). \quad (2.108b)$$

Em analogia a (2.105) podemos construir o sistema de equações

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(l+1)(l+2)}{r^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - E \right] \mathcal{V}(r) = 0, \quad (2.109a)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(l+2)(l+3)}{r^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - E \right] \mathcal{W}(r) = 0, \quad (2.109b)$$

essas equações são construídas utilizando os operadores $A_{l_2}^\dagger A_{l_2}$ e $A_{l_2} A_{l_2}^\dagger$ respetivamente, assim em analogia à construção de (2.102) e (2.103) temos que

$$\mathcal{W}^{(0)}(r) = r^{l+3} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right], \quad (2.110a)$$

$$E_{\mathcal{W}^{(0)}} = \hbar\omega \left(l + \frac{7}{2}\right). \quad (2.110b)$$

das quais em analogia à construção de (2.108) temos

$$\mathcal{V}^{(1)}(r) \sim A_2^\dagger r^{l+3} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right], \quad (2.111a)$$

$$E_{\mathcal{V}^{(1)}} = \hbar\omega \left(l + \frac{9}{2}\right), \quad (2.111b)$$

com a qual podemos gerar a segunda autofunção de estado excitado do conjunto $\{\mathcal{U}(r)\}$, utilizando (2.107) obtemos

$$\mathcal{U}^{(2)}(r) \sim A_1^\dagger A_2^\dagger r^{l+3} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right], \quad (2.112a)$$

$$E_{\mathcal{U}^{(2)}} = \hbar\omega \left(l + \frac{11}{2}\right). \quad (2.112b)$$

na qual $A_1^\dagger \equiv A^\dagger$. É possível mostrar que as relações (2.102), (2.103), (2.108) e (2.112) são casos particulares das relações gerais

$$\mathcal{U}_{nl}(r) \sim A_{l_1}^\dagger A_{l_2}^\dagger \dots A_{l_n}^\dagger r^{l+n+1} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right], \quad (2.113a)$$

$$E_{nl} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2}\right). \quad (2.113b)$$

De (2.113a) temos que a expressão para as autofunções radiais não normalizadas é

$$\mathcal{R}_{nl}(r) \sim \frac{1}{r} \prod_{i=1}^n A_{l_i}^\dagger r^{l+n+1} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right]. \quad (2.114)$$

onde $\prod_{i=1}^n A_{l_i}^\dagger = A_{l_1}^\dagger A_{l_2}^\dagger \dots A_{l_n}^\dagger$ sendo o ordem dos operadores relevante.

Exemplos

Apresentaremos alguns exemplos do cálculo de diferentes autofunções radiais não normalizadas

$$\mathcal{R}_{nl}(r) \sim \frac{1}{r} \prod_{i=1}^n A_{l_i}^\dagger r^{l+n+1} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right], \quad (2.115)$$

onde os operadores A_{li}^\dagger são escritas como

$$A_{li}^\dagger \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\frac{d}{dr} + \frac{(l+i)}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right]. \quad (2.116)$$

Escolhendo alguns valores de n e l para os quais o estado tem a mesma energia, podemos escrever a seguinte tabela

n	l	$\mathcal{R}_{nl}(r)$	E_{nl}
0	0	$\mathcal{R}_{00}(r)$	$3\hbar\omega/2$
0	1	$\mathcal{R}_{01}(r)$	$5\hbar\omega/2$
1	0	$\mathcal{R}_{10}(r)$	$7\hbar\omega/2$
0	2	$\mathcal{R}_{02}(r)$	$7\hbar\omega/2$
1	1	$\mathcal{R}_{11}(r)$	$9\hbar\omega/2$
0	3	$\mathcal{R}_{03}(r)$	$9\hbar\omega/2$
2	0	$\mathcal{R}_{20}(r)$	$11\hbar\omega/2$
1	2	$\mathcal{R}_{12}(r)$	$11\hbar\omega/2$
0	4	$\mathcal{R}_{04}(r)$	$11\hbar\omega/2$

Calculando algumas destas autofunções temos

Caso $n = 0$:

De (2.115), vemos que neste caso o produto dos operadores é igual á identidade, logo

$$\mathcal{R}_{0l}(r) \sim r^l \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right], \quad (2.117)$$

assim, alguns casos particulares são

$$\mathcal{R}_{00}(r) \sim \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right], \quad (2.118a)$$

$$\mathcal{R}_{01}(r) \sim r \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right], \quad (2.118b)$$

$$\mathcal{R}_{02}(r) \sim r^2 \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right], \quad (2.118c)$$

$$\mathcal{R}_{03}(r) \sim r^3 \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right]. \quad (2.118d)$$

Caso $n = 1$:

Neste caso precisa-se aplicar unicamente um dos operadores

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{1l}(r) &\sim \frac{1}{r} A_{l1}^\dagger r^{l+2} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right), \\ &= \frac{1}{r} \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r} - \frac{m\omega}{\hbar} r \right] r^{l+2} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right), \\ &= \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\left(l + \frac{3}{2} \right) - \frac{m\omega}{\hbar} r^2 \right] r^l \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right). \end{aligned} \quad (2.119)$$

assim, alguns casos particulares são

$$\mathcal{R}_{10}(r) \sim \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\left(\frac{3}{2} \right) - \frac{m\omega}{\hbar} r^2 \right] r \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right), \quad (2.120a)$$

$$\mathcal{R}_{11}(r) \sim \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\left(\frac{5}{2} \right) - \frac{m\omega}{\hbar} r^2 \right] r^1 \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right), \quad (2.120b)$$

$$\mathcal{R}_{12}(r) \sim \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\left(\frac{7}{2} \right) - \frac{m\omega}{\hbar} r^2 \right] r^2 \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right), \quad (2.120c)$$

$$\mathcal{R}_{13}(r) \sim \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\left(\frac{9}{2} \right) - \frac{m\omega}{\hbar} r^2 \right] r^3 \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right). \quad (2.120d)$$

Todas essas funções são iguais às FR não-normalizadas que podem ser obtidas com a equação (2.84) o qual é o método apresentado nos textos usuais [15].

Capítulo 3

Caso relativístico

3.1 Introdução

Uma das equações com as quais se estudam muitos sistemas da Mecânica Quântica Relativística é a equação de Dirac (ED) [24]. A ES é uma equação não-relativística que, em representação de coordenadas, pode-se escrever como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial x^j{}^2} + V(\mathbf{r}, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi_s(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3.1)$$

a forma dessa equação mostra, evidentemente, a sua não covariância e, quando substituindo os operadores desta equação pelas variáveis dinâmicas correspondentes obtemos a equação clássica $E = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{r}, t)$. Em particular, esse resultado implica que as partículas com momento zero e que não estão no interior de um potencial, não têm energia, este fato mostrando que a ES não pode descrever partículas para as quais a sua energia em repouso m_0c^2 é relevante. Uma generalização relativística e covariante da ES tem que apresentar a mesma ordem nas derivadas para as diferentes coordenadas e, no caso de momento \mathbf{p} e potencial zero, as partículas devem ter uma energia de repouso m_0c^2 . Dessa ultima consideração, vemos que a nova equação precisa de um novo termo que dependa da energia em repouso. A apropriada extensão relativística da ES é a ED

$$\left[-i\hbar c \hat{\alpha} \cdot \nabla + m_0c^2 \hat{\beta} + V(\mathbf{r}, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi_d(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3.2)$$

onde

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

e $\Psi_d(\mathbf{r}, t)$ é o espinor de Dirac [24]. Dois sistemas relativísticos que podem ser estudados com a ED são o Átomo de Hidrogênio Relativístico (AHR) e o Oscilador de Dirac (OA).

3.2 Átomo de Hidrogênio: $V(r) \sim r^{-1}$

3.2.1 Introdução

O estudo do AHR foi apresentado no segundo capítulo. Importantes efeitos do AH só podem ser discutidos em análises relativísticas desse sistema, que podem ser feitas utilizando a ED para o elétron no interior do mesmo potencial de Coulomb gerado pelo núcleo utilizado no segundo capítulo $V(r) = -k/r$ [25], neste caso a ED (3.2) resulta em

$$\left[-i\hbar c \hat{\alpha} \cdot \nabla + m_0 c^2 \hat{\beta} - \frac{k}{r} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3.4)$$

possíveis simetrias do AHR foram fortemente discutidas [26]. A equação (3.4) pode ser resolvida perturbativamente [27] e diretamente utilizando coordenadas esféricas [15], neste ultimo caso definimos o operador

$$\hbar \hat{k} = \hat{\beta} \left[\hat{\sigma}' \cdot \hat{L} + \hbar \right], \quad (3.5)$$

no qual, substituindo o momento angular $\hat{L} = -i\hbar \hat{r} \times \nabla$, obtemos

$$\begin{aligned} \hbar \hat{k} &= \hat{\beta} [-i\hbar \hat{\sigma}' \cdot (\hat{r} \times \nabla) + \hbar], \\ &= -i\hbar \hat{\beta} \hat{\sigma}' \cdot (\hat{r} \times \nabla) + \hbar \hat{\beta}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

utilizando a propriedade

$$i\hat{\sigma}' \cdot (\hat{A} \times \hat{B}) = (\hat{\alpha} \cdot \hat{A}) (\hat{\alpha} \cdot \hat{B}) - \hat{A} \cdot \hat{B}, \quad (3.7)$$

podemos escrever

$$\begin{aligned} \hbar \hat{k} &= -\hbar \hat{\beta} [(\hat{\alpha} \cdot \hat{r}) (\hat{\alpha} \cdot \nabla) - \hat{r} \cdot \nabla] + \hbar \hat{\beta}, \\ &= -\hbar \hat{\beta} (\hat{\alpha} \cdot \hat{r}) (\hat{\alpha} \cdot \nabla) + \hbar \hat{\beta} \hat{r} \cdot \nabla + \hbar \hat{\beta}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

multiplicando por $r^{-1} \hat{\beta}$ os dois lados da equação e utilizando a propriedade $\hat{\beta}^2 = \hat{I}$, obtemos

$$\hbar r^{-1} \hat{\beta} \hat{k} = -\hbar (\hat{\alpha} \cdot r^{-1} \hat{r}) (\hat{\alpha} \cdot \nabla) + r^{-1} (\hbar \hat{r} \cdot \nabla + \hbar \hat{I}), \quad (3.9)$$

na qual o operador $r^{-1}\hat{r} = \hat{e}_r$ é o operador vetor unitário na direção da coordenada \mathbf{r} . Decompondo o operador vetor $\hat{\alpha}$ em coordenadas esféricas e fazendo a multiplicação dos dois lados da equação pela matriz $\hat{\alpha}_r$, temos

$$\hbar \frac{\hat{\alpha}_r}{r} \hat{\beta} \hat{k} = -\hbar \hat{\alpha}_r^2 (\hat{\alpha} \cdot \nabla) + \frac{\hat{\alpha}_r}{r} (\hbar \hat{r} \cdot \nabla + \hbar), \quad (3.10)$$

assumindo que $\hat{\alpha}_r^2 = \hat{I}$, multiplicando toda a equação por i e olhando a única componente não trivial ao fazer atuar o operador ∇ , é a componente radial, obtemos por fim

$$\begin{aligned} -i\hbar \hat{\alpha} \cdot \nabla &= i\hbar \frac{\hat{\alpha}_r}{r} \hat{\beta} \hat{k} - i \frac{\hat{\alpha}_r}{r} \left(\hbar \hat{r} \cdot \hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \hbar \right), \\ &= i\hbar \frac{\hat{\alpha}_r}{r} \hat{\beta} \hat{k} - i\hbar \hat{\alpha}_r \frac{\partial}{\partial r} - i\hbar \frac{\hat{\alpha}_r}{r}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

substituindo esse resultado na ED para o AHR (3.4), resulta

$$\left[i\hbar c \frac{\hat{\alpha}_r}{r} \hat{\beta} \hat{k} - i\hbar c \hat{\alpha}_r \frac{\partial}{\partial r} - i\hbar c \frac{\hat{\alpha}_r}{r} + m_0 c^2 \hat{\beta} - \frac{k}{r} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3.12)$$

procurando uma solução da forma $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(r)\phi(t)$, observa-se que nossa ED é equivalente às duas equações

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E\phi(t), \text{ com solução } \phi(t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (3.13)$$

e

$$\left[i\hbar c \frac{\hat{\alpha}_r}{r} \hat{\beta} \hat{k} - i\hbar c \hat{\alpha}_r \frac{d}{dr} + m_0 c^2 \hat{\beta} - \frac{k}{r} - i\hbar c \frac{\hat{\alpha}_r}{r} - E \right] \psi(r) = 0 \quad (3.14)$$

nas quais E é uma constante de separação. Explicitamente a equação (3.14) resulta em

$$\begin{aligned} i\hbar c \frac{\hat{k}}{r} \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F(r) \\ G(r) \end{pmatrix} + \hbar c \frac{d}{dr} \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F(r) \\ G(r) \end{pmatrix} \\ + m_0 c^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F(r) \\ G(r) \end{pmatrix} + \hbar \frac{c}{r} \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F(r) \\ G(r) \end{pmatrix} \\ = \left[E + \frac{k}{r} \right] \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F(r) \\ G(r) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

a qual é equivalente as duas equações

$$\hbar c \frac{dG}{dr} + \hbar c \frac{\kappa}{r} G - \left[E + m_0 c^2 + \frac{k}{r} \right] F = 0, \quad (3.16a)$$

$$\hbar c \frac{dF}{dr} - \hbar c \frac{\kappa}{r} F + \left[E - m_0 c^2 + \frac{k}{r} \right] G = 0, \quad (3.16b)$$

lembrando que $k = e^2/4\pi\epsilon_0$ podemos escrever as equações anteriores como

$$\frac{dG}{dr} + \frac{\kappa}{r}G - \left[\frac{E + m_0c^2}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right] F = 0, \quad (3.17a)$$

$$\frac{dF}{dr} - \frac{\kappa}{r}F + \left[\frac{E - m_0c^2}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right] G = 0, \quad (3.17b)$$

onde $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$ é a constante de estrutura fina. Vimos que encontrar a solução de (3.4) é equivalente a encontrar a solução do sistema (3.17), esse sistema pode ser resolvido perturbativamente [27], resolvendo as equações diferenciais utilizando series de potencias [15] ou utilizando o formalismo da SUSYQM [28], a relação deste ultimo método e as autofunções do estado fundamental é brevemente discutida em [29], propriedades gerais das autofunções foram estudadas em [30].

3.2.2 Solução explícita da equação diferencial radial

Como foi feito no capítulo anterior, aqui solucionamos o sistema de equações radiais (3.17), estudando inicialmente os casos limites das equações para poder determinar a forma das soluções gerais do sistema

O limite $r \rightarrow 0$

Neste caso os termos proporcionais a r^{-1} em (3.17) crescem rapidamente e, as equações podem se aproximar por

$$\frac{dG_{r \rightarrow 0}}{dr} + \frac{\kappa}{r}G_{r \rightarrow 0} - \frac{\alpha}{r}F_{r \rightarrow 0} = 0, \quad (3.18a)$$

$$\frac{dF_{r \rightarrow 0}}{dr} - \frac{\kappa}{r}F_{r \rightarrow 0} + \frac{\alpha}{r}G_{r \rightarrow 0} = 0. \quad (3.18b)$$

Este tipo de sistema de equações pode ser resolvido assumindo uma solução da forma $G_{r \rightarrow 0}(r) = ar^\delta$ e $F_{r \rightarrow 0}(r) = br^\delta$, onde a, b, δ, γ são constantes, substituindo em (3.18), obtemos

$$\delta ar^{\delta-1} + \kappa ar^{\delta-1} - \alpha br^{\delta-1} = 0, \quad (3.19a)$$

$$\delta br^{\delta-1} - \kappa br^{\delta-1} + \alpha ar^{\delta-1} = 0, \quad (3.19b)$$

onde as igualdades só serão satisfeitas se

$$a(\delta + \kappa) - b\alpha = 0, \quad (3.20a)$$

$$b(\delta - \kappa) + a\alpha = 0, \quad (3.20b)$$

esse sistema tem solução se

$$\text{Det} \begin{pmatrix} \delta + \kappa & -\alpha \\ \alpha & \delta - \kappa \end{pmatrix} = 0, \quad \text{é dizer} \quad \delta = \pm \sqrt{\kappa^2 - \alpha^2}. \quad (3.21)$$

A condição de normalização da função de onda exige que a integral

$$\int_c^\infty (F_{r \rightarrow 0}^2 + G_{r \rightarrow 0}^2) dr \sim \int_c^\infty r^{2\delta} dr, \quad (3.22)$$

seja finita. Para isso precisa-se que $\delta < -1/2$, assim, de (3.21) temos a condição

$$\delta = -\sqrt{\kappa^2 - \alpha^2} < -\frac{1}{2}. \quad (3.23)$$

O limite $r \rightarrow \infty$

Nesse caso os termos proporcionais ao r^{-1} em (3.17), podem ser desprezados, assim temos

$$\frac{dG_{r \rightarrow \infty}}{dr} - \frac{E + m_0 c^2}{\hbar c} F_{r \rightarrow \infty} = 0, \quad (3.24a)$$

$$\frac{dF_{r \rightarrow \infty}}{dr} + \frac{E - m_0 c^2}{\hbar c} G_{r \rightarrow \infty} = 0, \quad (3.24b)$$

fazendo as trocas

$$\rho = 2\xi r, \quad \xi = \frac{\sqrt{m_0^2 c^4 - E^2}}{\hbar c}, \quad (3.25)$$

nas equações (3.24), estas ficam da forma

$$\frac{dG_{\rho \rightarrow \infty}}{d\rho} - \frac{E + m_0 c^2}{2\hbar c \xi} F_{\rho \rightarrow \infty} = 0, \quad (3.26a)$$

$$\frac{dF_{\rho \rightarrow \infty}}{d\rho} + \frac{E - m_0 c^2}{2\hbar c \xi} G_{\rho \rightarrow \infty} = 0, \quad (3.26b)$$

essas equações podem ser desacopladas diretamente, obtendo

$$\frac{d^2 G_{\rho \rightarrow \infty}}{d\rho^2} + \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{(2\hbar c \xi)^2} G_{\rho \rightarrow \infty} = 0, \quad (3.27a)$$

$$\frac{d^2 F_{\rho \rightarrow \infty}}{d\rho^2} + \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{(2\hbar c \xi)^2} F_{\rho \rightarrow \infty} = 0, \quad (3.27b)$$

nas quais substituindo o ξ de (3.25) resultam

$$\frac{d^2 G_{\rho \rightarrow \infty}}{d\rho^2} - \frac{1}{4} G_{\rho \rightarrow \infty} = 0, \quad (3.28a)$$

$$\frac{d^2 F_{\rho \rightarrow \infty}}{d\rho^2} - \frac{1}{4} F_{\rho \rightarrow \infty} = 0, \quad (3.28b)$$

essas equações têm as soluções gerais

$$G_{\rho \rightarrow \infty} = ae^{\rho/2} + be^{-\rho/2}, \quad (3.29a)$$

$$F_{\rho \rightarrow \infty} = ce^{\rho/2} + de^{-\rho/2}, \quad (3.29b)$$

nas quais a , b , c e d são constantes, no entanto os termos exponenciais positivos não são normalizáveis, portanto não devem ser considerados. Assim

$$G_{\rho \rightarrow \infty} = be^{-\rho/2}, \quad (3.30a)$$

$$F_{\rho \rightarrow \infty} = de^{-\rho/2}. \quad (3.30b)$$

o que diz que para grandes distâncias as funções G e E decrescem exponencialmente.

Autofunções radiais

Substituindo em (3.17) as trocas (3.25) obtemos

$$\frac{dG}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho}G - \left[\frac{E + m_0c^2}{2\hbar c\xi} + \frac{\alpha}{\rho} \right] F = 0, \quad (3.31a)$$

$$\frac{dF}{d\rho} - \frac{\kappa}{\rho}F + \left[\frac{E - m_0c^2}{2\hbar c\xi} + \frac{\alpha}{\rho} \right] G = 0. \quad (3.31b)$$

Para procurar a solução geral deste sistema de equações, suponhamos que as funções G e F podem ser escritas como a soma e a subtração de duas outras funções ainda desconhecidas, ou seja $G = \varphi_1 + \varphi_2$ e $F = \varphi_1 - \varphi_2$. No entanto, nas subseções anteriores estudou-se o comportamento dessas funções para pequenas e grandes distâncias, primeiramente vamos incluir o comportamento para grandes distâncias fazendo que a $\varphi_1 = e^{-\rho/2}\eta_1$ e $\varphi_2 = e^{-\rho/2}\eta_2$, assim $G = e^{-\rho/2}(\eta_1 + \eta_2)$ e $F = e^{-\rho/2}(\eta_1 - \eta_2)$. As relações

$$\left(\frac{m_0c^2 + E}{\hbar c\xi} \right)^2 = \frac{m_0c^2 + E}{m_0c^2 - E}, \quad \left(\frac{m_0c^2 - E}{\hbar c\xi} \right)^2 = \frac{m_0c^2 - E}{m_0c^2 + E} \quad (3.32)$$

fazem que seja conveniente escrever as funções G e F como

$$G = \sqrt{m_0c^2 + E}e^{-\rho/2}(\phi_1 + \phi_2), \quad (3.33a)$$

$$F = \sqrt{m_0c^2 - E}e^{-\rho/2}(\phi_1 - \phi_2). \quad (3.33b)$$

Substituindo (3.33) em (3.31), obtemos o sistema

$$\left[\frac{\kappa}{\rho} - \frac{1}{2} \right] (\phi_1 + \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\rho} + \frac{d\phi_2}{d\rho} - \left[\frac{E + m_0c^2}{2\hbar c\xi} + \frac{\alpha}{\rho} \right] \sqrt{\frac{m_0c^2 - E}{m_0c^2 + E}} (\phi_1 - \phi_2) = 0 \quad (3.34)$$

e

$$\left[\frac{\kappa}{\rho} + \frac{1}{2} \right] (\phi_1 - \phi_2) - \frac{d\phi_1}{d\rho} + \frac{d\phi_2}{d\rho} - \left[\frac{E - m_0c^2}{2\hbar c\xi} + \frac{\alpha}{\rho} \right] \sqrt{\frac{m_0c^2 + E}{m_0c^2 - E}} (\phi_1 + \phi_2) = 0 \quad (3.35)$$

subtraindo e adicionando as equações anteriores, obtemos

$$\frac{2\kappa}{\rho} \phi_2 - \phi_1 + 2 \frac{d\phi_1}{d\rho} - \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{m_0c^2 - E}{\hbar c\xi} \right) (\phi_1 - \phi_2) + \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{m_0c^2 + E}{\hbar c\xi} \right) (\phi_1 + \phi_2) = 0 \quad (3.36)$$

e

$$\frac{2\kappa}{\rho} \phi_1 - \phi_2 + 2 \frac{d\phi_2}{d\rho} - \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{m_0c^2 - E}{\hbar c\xi} \right) (\phi_1 - \phi_2) - \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{m_0c^2 + E}{\hbar c\xi} \right) (\phi_1 + \phi_2) = 0 \quad (3.37)$$

é dizer

$$\frac{d\phi_1}{d\rho} - \left(1 - \frac{\alpha E}{\hbar c\xi \rho} \right) \phi_1 + \left(\frac{\kappa}{\rho} + \frac{\alpha m_0c^2}{\hbar c\xi \rho} \right) \phi_2 = 0, \quad (3.38a)$$

$$\frac{d\phi_2}{d\rho} - \frac{\alpha E}{\hbar c\xi \rho} \phi_2 + \left(\frac{\kappa}{\rho} - \frac{\alpha m_0c^2}{\hbar c\xi \rho} \right) \phi_2 = 0, \quad (3.38b)$$

Na obtenção das equações (3.33) apenas foram utilizadas as funções $G_{\rho \rightarrow \infty}$ e $F_{\rho \rightarrow \infty}$ que dão o comportamento das G e F para grandes distâncias, porém as funções $G_{\rho \rightarrow 0}$ e $F_{\rho \rightarrow 0}$ que dão o comportamento das mesmas funções para pequenas distâncias, ainda não foram utilizadas. Incluindo essas últimas funções, vamos assumir que em (3.38)

$$\phi_1 = \rho^\delta \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k, \quad \phi_2 = \rho^\delta \sum_{k=0}^{\infty} b_k \rho^k, \quad (3.39)$$

assim temos

$$a_k (k + \delta) - a_{k-1} + \frac{\alpha E}{\hbar c\xi} a_k + \left(\kappa + \frac{\alpha m_0c^2}{\hbar c\xi} \right) b_k = 0, \quad (3.40a)$$

$$b_k (k + \delta) - \frac{\alpha E}{\hbar c\xi} b_k + \left(\kappa - \frac{\alpha m_0c^2}{\hbar c\xi} \right) b_k = 0, \quad (3.40b)$$

de (3.40b)

$$b_k = \frac{\alpha m_0c^2 / \hbar c\xi - \kappa}{k + \delta - \alpha E / \hbar c\xi} a_k, \quad (3.41)$$

substituindo em (3.40a)

$$a_{k-1} = a_k \left[k + \delta + \frac{\alpha E}{\hbar c\xi} + \left(\kappa + \frac{\alpha m_0c^2}{\hbar c\xi} \right) \frac{\alpha m_0c^2 / \hbar c\xi - \kappa}{k + \delta - \alpha E / \hbar c\xi} \right], \quad (3.42)$$

multiplicando essa expressão por $k + \delta - \alpha E/\hbar c\xi$

$$\begin{aligned} a_{k-1} \left(k + \delta - \frac{\alpha E}{\hbar c\xi} \right) &= a_k \left[(k + \delta)^2 - \left(\frac{\alpha E}{\hbar c\xi} \right)^2 + \left(\frac{\alpha m_0 c^2}{\hbar c\xi} \right)^2 - \kappa^2 \right] \\ &= a_k \left[k(k + 2\delta) - (\alpha)^2 - \left(\frac{\alpha E}{\hbar c\xi} \right)^2 + \left(\frac{\alpha m_0 c^2}{\hbar c\xi} \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (3.43)$$

desprezando os termos de ordem superior ao primeiro em α , temos

$$a_k = \frac{k + \delta - \alpha E/\hbar c\xi}{k(k + 2\delta)} a_{k-1}, \quad (3.44)$$

dessa e (3.41)

$$b_k = \frac{k - 1 + \delta - \alpha E/\hbar c\xi}{k(k + 2\delta)} b_{k-1}, \quad (3.45)$$

substituindo em (3.39)

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \rho^\delta \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k + \delta - \alpha E/\hbar c\xi}{k(k + 2\delta)} a_{k-1} \rho^k \\ &= \rho^\delta a_0 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(1 + \delta - \alpha E/\hbar c\xi)(2 + \delta - \alpha E/\hbar c\xi) \dots (k + \delta - \alpha E/\hbar c\xi)}{k!(1 + 2\delta)(2 + 2\delta) \dots (k + 2\delta)} \rho^k \\ &= a_0 \rho^\delta {}_1F_1(1 + \delta - \alpha E/\hbar c\xi, 1 + 2\delta; \rho) \end{aligned} \quad (3.46)$$

e

$$\begin{aligned} \phi_2 &= \rho^\delta \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k - 1 + \delta - \alpha E/\hbar c\xi}{k(k + 2\delta)} b_{k-1} \rho^k \\ &= \rho^\delta b_0 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\delta - \alpha E/\hbar c\xi)(1 + \delta - \alpha E/\hbar c\xi) \dots (k - 1 + \delta - \alpha E/\hbar c\xi)}{k!(1 + 2\delta)(2 + 2\delta) \dots (k + 2\delta)} \rho^k \\ &= b_0 \rho^\delta {}_1F_1(\delta - \alpha E/\hbar c\xi, 1 + 2\delta; \rho), \end{aligned} \quad (3.47)$$

essa última pode-se escrever em função do a_0 com a ajuda da relação (3.41)

$$\phi_2 = a_0 \rho^\delta (\alpha m_0 c^2/\hbar c\xi - \kappa)/(\delta - \alpha E/\hbar c\xi) {}_1F_1(\delta - \alpha E/\hbar c\xi, 1 + 2\delta; \rho). \quad (3.48)$$

Para que as funções ${}_1F_1$ de (3.46), (3.47) e (3.48) sejam normalizáveis tem que se cumprir [ver apêndice]

$$\eta' = \alpha E/\hbar c\xi - \delta, \quad \eta' = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.49)$$

assim, substituindo (3.46) e (3.47) em (3.33) temos que as FRR são

$$G = C\rho^\delta e^{-\rho/2} \times [{}_1F_1(1 + \eta, 1 + 2\delta; \rho) + (\alpha m_0 c^2 / \hbar c \xi - \kappa) / \eta {}_1F_1(\eta, 1 + 2\delta; \rho)] \quad (3.50)$$

e

$$F = C\rho^\delta e^{-\rho/2} \times [{}_1F_1(1 + \eta, 1 + 2\delta; \rho) - (\alpha m_0 c^2 / \hbar c \xi - \kappa) / \eta {}_1F_1(\eta, 1 + 2\delta; \rho)] \quad (3.51)$$

onde $C = a_0 \sqrt{m_0 c^2 + E}$.

Autoenergias

Com a expressão (3.49) podemos definir o número quântico principal

$$n = \alpha E / \hbar c \xi - \delta + |\kappa| = Z\alpha E / \hbar c \xi - \delta + j + 1/2, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.52)$$

ou seja

$$n = \frac{Z\alpha E}{\sqrt{m_0^2 c^4 - E^2}} - \delta + j + 1/2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.53)$$

logo, os valores próprios de energia E_n são

$$E_n = m_0 c^2 \left\{ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left[n - j - \frac{1}{2} + \left[\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - (Z\alpha)^2 \right]^{1/2} \right]^2} \right\}^{-1/2}, \quad (3.54)$$

$n = 0, 1, 2, \dots; \quad j = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$

Na teoria de Dirac o elétron do AHR tem um espectro de energias diferente do encontrado no caso do AHNR [15].

3.2.3 Solução via SUSYQM

Na introdução dessa seção apresentou-se a solução da ED para o AHR. O estudo foi focado na solução das equações radiais, feito na subseção 3.2.2 resolvendo diretamente as equações diferenciais pelo método de substituição em série de potências. Em particular mostrou-se que as autoenergias dependem apenas da coordenada radial. Nesta subseção equações diferenciais radiais (3.17)

$$\frac{dG_\kappa}{dr} + \frac{\kappa}{r}G_\kappa - \left[\frac{E + m_0c^2}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right] F_\kappa = 0, \quad (3.55a)$$

$$\frac{dF_\kappa}{dr} - \frac{\kappa}{r}F_\kappa + \left[\frac{E - m_0c^2}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right] G_\kappa = 0, \quad (3.55b)$$

serão resolvidas utilizando as técnicas próprias da SUSYQM [28]. Nas equações anteriores é possível fazer um reagrupamento de termos

$$\frac{dG_\kappa}{dr} + \frac{1}{r} [\kappa G_\kappa - \alpha F_\kappa] - \left[\frac{E + m_0c^2}{\hbar c} \right] F_\kappa = 0, \quad (3.56a)$$

$$\frac{dF_\kappa}{dr} - \frac{1}{r} [\kappa F_\kappa - \alpha G_\kappa] + \left[\frac{E - m_0c^2}{\hbar c} \right] G_\kappa = 0. \quad (3.56b)$$

Em principio esse reagrupamento só é possível pelo fato de que o potencial é o potencial de Coulomb.

Equação diferencial matricial

A importância do reagrupamento anterior radica no fato que assim é possível escrever as equações como uma só equação diferencial matricial

$$\begin{pmatrix} G'_\kappa \\ F'_\kappa \end{pmatrix} + \left[\frac{1}{r} \begin{pmatrix} \kappa & -\alpha \\ \alpha & -\kappa \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & [m_0c^2 + E]/\hbar c \\ [m_0c^2 - E]/\hbar c & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} G_\kappa \\ F_\kappa \end{pmatrix} = 0, \quad (3.57)$$

na qual o símbolo ' significa derivação da função com respeito à coordenada radial. Nem todas as matrizes da equação (3.57) são diagonais. Esse fato indica que as equações (3.56) não podem se desacoplar diretamente. Com o fim de gerar um sistema desacoplado de combinações lineares das funções G_κ e F_κ , pode-se calcular a matriz diagonalizante D da matriz não-diagonal. Em verdade, para nosso caso, o importante é a matriz D^{-1} . Essa matriz é

$$D^{-1} = \begin{pmatrix} s + \kappa & -\alpha \\ -\alpha & s + \kappa \end{pmatrix}, \quad (3.58)$$

onde $s = \sqrt{\kappa^2 - \gamma^2}$. Multiplicando a equação (3.57) pela esquerda com essa matriz, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \begin{pmatrix} (s + \kappa) G_\kappa - \alpha F_\kappa \\ (s + \kappa) F_\kappa - \alpha G_\kappa \end{pmatrix} + \frac{s}{r} \begin{pmatrix} (s + \kappa) G_\kappa - \alpha F_\kappa \\ \alpha G_\kappa - (s + \kappa) F_\kappa \end{pmatrix} \\ = \frac{1}{\hbar c} \begin{pmatrix} m_0 c^2 [(s + \kappa) F_\kappa - \alpha G_\kappa] + E [(s + \kappa) F_\kappa + \alpha G_\kappa] \\ m_0 c^2 [(s + \kappa) G_\kappa - \alpha F_\kappa] - E [(s + \kappa) G_\kappa + \alpha F_\kappa] \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.59)$$

que sugere escolher $\mathcal{G}_\kappa(\rho) = (s + \kappa) G_\kappa - \alpha F_\kappa$ e $\mathcal{F}_\kappa(\rho) = (s + \kappa) F_\kappa - \alpha G_\kappa$ como possíveis funções para separar o sistema. Embora, a última matriz não apresenta unicamente estas duas funções, o sistema $A\mathcal{G}_\kappa(\rho) + B\mathcal{F}_\kappa(\rho) = (s + \kappa) F_\kappa + \alpha G_\kappa$ e $C\mathcal{G}_\kappa(\rho) + D\mathcal{F}_\kappa(\rho) = (s + \kappa) G_\kappa + \alpha F_\kappa$, tem solução para $A = D = \alpha/s$ e $B = C = \kappa/s$, logo (3.59) pode-se escrever como

$$\frac{d}{dr} \begin{pmatrix} \mathcal{G}_\kappa \\ \mathcal{F}_\kappa \end{pmatrix} + \frac{s}{r} \begin{pmatrix} \mathcal{G}_\kappa \\ -\mathcal{F}_\kappa \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar c} \begin{pmatrix} m_0 c^2 \mathcal{F}_\kappa + E [(\alpha/s)\mathcal{G}_\kappa + (\kappa/s)\mathcal{F}_\kappa] \\ m_0 c^2 \mathcal{G}_\kappa - E [(\kappa/s)\mathcal{G}_\kappa + (\alpha/s)\mathcal{F}_\kappa] \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

da qual fazendo a troca $\rho = Er$ pode-se escrever como as duas equações

$$\left(\frac{d}{d\rho} + \frac{s}{\rho} - \frac{\alpha}{\hbar c s} \right) \mathcal{G}_\kappa(\rho) = \frac{1}{\hbar c} \left(\frac{m_0 c^2}{E} + \frac{\kappa}{s} \right) \mathcal{F}_\kappa(\rho), \quad (3.61a)$$

$$\left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{s}{\rho} - \frac{\alpha}{\hbar c s} \right) \mathcal{F}_\kappa(\rho) = -\frac{1}{\hbar c} \left(\frac{m_0 c^2}{E} - \frac{\kappa}{s} \right) \mathcal{G}_\kappa(\rho), \quad (3.61b)$$

que embora ainda acopladas, se podem desacoplar, utilizando os métodos da SUSYQM.

Definição dos operadores de escada

Os operadores diferenciais que fazem parte das equações de autovalores (3.61) são adjuntos

$$\left(\frac{d}{d\rho} + \frac{s}{\rho} - \frac{\gamma}{\hbar c s} \right)^\dagger = \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{s}{\rho} - \frac{\gamma}{\hbar c s} \right), \quad (3.62)$$

para esses operadores podemos procurar funções $R^+(\rho)$ e $R^-(\rho)$ que cumpram

$$\left(\frac{d}{d\rho} + \frac{s}{\rho} - \frac{\gamma}{\hbar c s} \right) R^+ = 0, \quad (3.63a)$$

$$\left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{s}{\rho} - \frac{\gamma}{\hbar c s} \right) R^- = 0. \quad (3.63b)$$

As soluções gerais dessas equações são

$$R^+(\rho) = C_1 \rho^{-s} \exp\left(\frac{\gamma}{\hbar c s} \rho\right), \quad (3.64a)$$

$$R^-(\rho) = C_2 \rho^s \exp\left(-\frac{\gamma}{\hbar c s} \rho\right), \quad (3.64b)$$

onde C_1 e C_2 são constantes arbitrárias. As funções da forma (3.64a) não podem se normalizar e, no caso das funções da forma (3.64b) temos

$$\int_0^\infty [R^-(\rho)]^2 d\rho = C_2^2 \left(\frac{\hbar c s}{2\gamma}\right)^{2s+1} \Gamma(2s+1). \quad (3.65)$$

Desses resultados podemos concluir que unicamente (3.63b) oferece a possibilidade de encontrar uma autofunção normalizável que possa ser destruída pela aplicação de um operador. Definimos os operadores

$$A^\dagger \equiv \frac{d}{d\rho} + \frac{s}{\rho} - \frac{\gamma}{\hbar c s}, \quad (3.66a)$$

$$A \equiv -\frac{d}{d\rho} + \frac{s}{\rho} - \frac{\gamma}{\hbar c s}. \quad (3.66b)$$

Veremos que esses operadores são importantes para mostrar que o sistema segue a álgebra da SUSYQM.

Desacople das equações

Com a definição dos operadores de escada, pode-se escrever as equações (3.61) como

$$A^\dagger \mathcal{G}_\kappa(\rho) = \frac{1}{\hbar c} \left(\frac{m_0 c^2}{E} + \frac{\kappa}{s} \right) \mathcal{F}_\kappa(\rho), \quad (3.67a)$$

$$A \mathcal{F}_\kappa(\rho) = -\frac{1}{\hbar c} \left(\frac{m_0 c^2}{E} - \frac{\kappa}{s} \right) \mathcal{G}_\kappa(\rho). \quad (3.67b)$$

multiplicando a primeira dessas equações por A e a segunda por A^\dagger temos

$$AA^\dagger \mathcal{G}_\kappa(\rho) = \frac{1}{\hbar c} \left(\frac{m_0 c^2}{E} + \frac{k}{s} \right) A \mathcal{F}_\kappa(\rho), \quad (3.68a)$$

$$A^\dagger A \mathcal{F}_\kappa(\rho) = -\frac{1}{\hbar c} \left(\frac{m_0 c^2}{E} - \frac{k}{s} \right) A^\dagger \mathcal{G}_\kappa(\rho). \quad (3.68b)$$

de (3.67) e (3.68) obtemos as duas equações desacopladas

$$A^\dagger A \mathcal{F}_\kappa(\rho) = \frac{1}{(\hbar c)^2} \left[\left(\frac{\kappa}{s} \right)^2 - \left(\frac{m_0 c^2}{E} \right)^2 \right] \mathcal{F}_\kappa(\rho), \quad (3.69a)$$

$$A A^\dagger \mathcal{G}_\kappa(\rho) = \frac{1}{(\hbar c)^2} \left[\left(\frac{\kappa}{s} \right)^2 - \left(\frac{m_0 c^2}{E} \right)^2 \right] \mathcal{G}_\kappa(\rho), \quad (3.69b)$$

que são duas equações de valores próprios.

Identificação de SUSYQM no sistema

Com os operadores

$$A^\dagger \equiv \frac{d}{d\rho} + \frac{s}{\rho} - \frac{\gamma}{\hbar c s}, \quad (3.70a)$$

$$A \equiv -\frac{d}{d\rho} + \frac{s}{\rho} - \frac{\gamma}{\hbar c s}. \quad (3.70b)$$

podemos construir os operadores de carga e o superhamiltoniano

$$\mathbf{H} \equiv \begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & A A^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.71)$$

do qual os os hamiltonianos componentes são

$$A^\dagger A = -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{2\alpha}{\hbar c \rho} + \frac{s(s-1)}{\rho^2} + \left(\frac{\alpha}{\hbar c s} \right)^2, \quad (3.72a)$$

$$A A^\dagger = -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{2\alpha}{\rho} + \frac{s(s+1)}{\rho^2} + \left(\frac{\alpha}{\hbar c s} \right)^2. \quad (3.72b)$$

logo o sistema de equações radiais pode ser estudado com o formalismo da SUSYQM.

Autofunção e autoenergia do estado fundamental

A função de onda do estado fundamental $\mathcal{F}_\kappa^{(0)}(\rho)$ tem de satisfazer $A \mathcal{F}_\kappa^{(0)}(\rho) = 0$, que é justamente a propriedade satisfeita pelas funções do tipo (3.64b), logo, de (3.65) temos

$$\mathcal{F}_\kappa^{(0)}(\rho) = \rho^s \exp \left[-\frac{\alpha}{\hbar c s} \rho \right], \quad (3.73)$$

substituindo essa função em (3.69a) obtemos que o valor da energia neste estado $E_{\mathcal{F}_\kappa}^{(0)}$ é

$$E_{\mathcal{F}_\kappa}^{(0)2} = \frac{m_0^2 c^4 s^2}{\alpha^2 + s^2}. \quad (3.74)$$

Utilizando a propriedade $\kappa^2 = s^2 + \alpha^2$ podemos escrever (3.69) como

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{2\alpha}{\hbar c \rho} + \frac{s(s-1)}{\rho^2} + \left(\frac{m_0 c}{\hbar E} \right)^2 - 1 \right] \mathcal{F}_\kappa(\rho) = 0, \quad (3.75a)$$

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{2\alpha}{\hbar c \rho} + \frac{s(s+1)}{\rho^2} + \left(\frac{m_0 c}{\hbar E} \right)^2 - 1 \right] \mathcal{G}_\kappa(\rho) = 0, \quad (3.75b)$$

em que a única diferença entre os operadores diferenciais nessas duas equações é o terceiro termo. A segunda equação pode ser obtida a partir da substituição $s \rightarrow s + 1$. Similarmente ao segundo capítulo, tem de existir um hamiltoniano $H_1 = A_1^\dagger A_1$, que de uma forma completamente análoga à (3.69a) satisfaça a equação $H_1 \mathcal{G}_\kappa = E \mathcal{G}_\kappa$, assim, analogamente a (3.73) e (3.74), temos que a função do estado fundamental e a sua correspondente autoenergia no caso de \mathcal{G}_κ são

$$\mathcal{G}_\kappa^{(0)}(\rho) = \rho^{s+1} \exp \left[-\frac{\alpha}{\hbar c (s+1)} \rho \right], \quad (3.76a)$$

$$E_{\mathcal{G}_\kappa}^{(0)} = \frac{m_0 c^2 (s+1)}{[\alpha^2 + (s+1)^2]^{1/2}}. \quad (3.76b)$$

Com as autofunções e as autoenergias desses estados fundamentais, é possível obter as autofunções e as autoenergias dos estados excitados.

Autofunções e autoenergias dos estados excitados

As fórmulas gerais das autofunções (não normalizadas) e as autoenergias dos estados excitados apresentados na Introdução nesse caso são

$$\mathcal{F}_\kappa^{(n+1)}(\rho) \sim A^\dagger \mathcal{G}_\kappa^{(n)}(\rho), \quad (3.77a)$$

$$\mathcal{G}_\kappa^{(n)}(\rho) \sim A \mathcal{F}_\kappa^{(n+1)}(\rho), \quad (3.77b)$$

$$E_{\mathcal{F}_\kappa}^{(n+1)} = E_{\mathcal{G}_\kappa}^{(n)}. \quad (3.77c)$$

De (3.76)e (3.77) temos

$$\mathcal{F}_\kappa^{(1)}(\rho) = A^\dagger \rho^{s+1} \exp \left[-\frac{\alpha}{\hbar c (s+1)} \rho \right], \quad (3.78a)$$

$$E_{\mathcal{F}_\kappa}^{(1)} = \frac{m_0 c^2 (s+1)}{[\alpha^2 + (s+1)^2]^{1/2}}, \quad (3.78b)$$

De (3.75) e da discussão anterior temos que com os operadores A_1, A_1^\dagger podemos construir as duas equações

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{2\gamma}{\hbar c\rho} + \frac{s(s+1)}{\rho^2} + \left(\frac{m_0c}{\hbar E}\right)^2 - 1 \right] \mathcal{G}_\kappa(\rho) = 0, \quad (3.79a)$$

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{2\gamma}{\hbar c\rho} + \frac{s(s+2)}{\rho^2} + \left(\frac{m_0c}{\hbar E}\right)^2 - 1 \right] \mathcal{T}_\kappa(\rho) = 0, \quad (3.79b)$$

em analogia às equações (3.76)

$$\mathcal{T}_\kappa^{(0)}(\rho) = \rho^{s+2} \exp \left[-\frac{\alpha}{\hbar c(s+2)}\rho \right], \quad (3.80a)$$

$$E_{\mathcal{T}_\kappa}^{(0)} = \frac{m_0c^2(s+2)}{[\alpha^2 + (s+2)^2]^{1/2}}, \quad (3.80b)$$

e, em analogia a (3.78)

$$\mathcal{G}_\kappa^{(1)}(\rho) = A_1^\dagger \rho^{s+2} \exp \left[-\frac{\alpha}{\hbar c(s+2)}\rho \right], \quad (3.81a)$$

$$E_{\mathcal{G}_\kappa}^{(1)} = \frac{m_0c^2(s+2)}{[\alpha^2 + (s+2)^2]^{1/2}}, \quad (3.81b)$$

dessas relações e das (3.77), podemos escrever

$$\mathcal{F}_\kappa^{(2)}(\rho) = A_0^\dagger A_1^\dagger \rho^{s+2} \exp \left[-\frac{\alpha}{\hbar c(s+2)}\rho \right], \quad (3.82a)$$

$$E_{\mathcal{F}_\kappa}^{(2)} = \frac{m_0c^2(s+2)}{[\alpha^2 + (s+2)^2]^{1/2}}, \quad (3.82b)$$

nas quais $A_0^\dagger \equiv A^\dagger$. Pode-se mostrar que (3.78) e (3.82) são casos particulares das expressões gerais

$$\mathcal{F}_\kappa^{(n)}(\rho) = \prod_{j=0}^{n-1} A_j^\dagger \rho^{s+n} \exp \left[-\frac{\alpha}{\hbar c(s+n)}\rho \right], \quad (3.83a)$$

$$E_{\mathcal{F}_\kappa}^{(n)} = \frac{m_0c^2(s+n)}{[\alpha^2 + (s+n)^2]^{1/2}}. \quad (3.83b)$$

Com as funções $\mathcal{F}_\kappa^{(n)}$ podemos obter as funções radiais originais [28], utilizando as definições de \mathcal{F}_κ e \mathcal{G}_κ

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} G_\kappa^{(n)} \\ F_\kappa^{(n)} \end{bmatrix} &= \frac{1}{2s(s+\kappa)} \begin{bmatrix} (s+\kappa)\mathcal{G}_\kappa^{(n)} + \alpha\mathcal{F}_\kappa^{(n)} \\ (s+\kappa)\mathcal{F}_\kappa^{(n)} + \alpha\mathcal{G}_\kappa^{(n)} \end{bmatrix}, \\
&= \frac{1}{2s(s+\kappa)\hbar c} \begin{bmatrix} (s+\kappa)(\kappa/s - m_0c^2/E)^{-1}A_0\mathcal{F}_\kappa^{(n)} + \alpha\mathcal{F}_\kappa^{(n)} \\ (s+\kappa)\mathcal{F}_\kappa^{(n)} + \alpha(\kappa/s - m_0c^2/E)^{-1}A_0\mathcal{F}_\kappa^{(n)} \end{bmatrix}, \\
&= \frac{1}{2s(s+\kappa)\hbar c} \begin{bmatrix} s+\kappa & \alpha \\ \alpha & s+\kappa \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\kappa/s - m_0c^2/E)^{-1}A_0\mathcal{F}_\kappa^{(n)} \\ \mathcal{F}_\kappa^{(n)} \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{3.84}$$

e as autoenergias são

$$E_\kappa^{(n)} = \frac{m_0c^2[n + (\kappa^2 - \alpha^2)^{1/2}]}{[\alpha^2 + [n + (\kappa^2 - \alpha^2)^{1/2}]^2]^{1/2}}, \tag{3.85}$$

similarmente ao primeiro capítulo, o símbolo (n) indica o estado.

3.3 Oscilador de Dirac: $V(\mathbf{r}) \sim \mathbf{r}\hat{\alpha} \cdot \hat{\beta}$

3.3.1 Introdução

A equação de Dirac livre pode ser escrita como $[-i\hbar c\hat{\alpha} \cdot \nabla + m_0 c^2 \hat{\beta} - i\hbar(\partial/\partial t)]\Psi = 0$, o momento é apresentado linearmente. Entre a grande possibilidade de possíveis potenciais externos podemos incluir um potencial que depende linearmente da coordenada radial, no entanto, existe uma quantidade infinita de possíveis potenciais com essa característica. Em particular, pode-se considerar o potencial $V(\mathbf{r}) = -icm_0\omega\mathbf{r}\hat{\alpha} \cdot \hat{\beta}$, como o resultado da substituição não minimal $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - im_0\omega\mathbf{r}\hat{\beta}$, onde ω é uma constante. Veremos que essa constante é uma frequência de oscilação. Com a introdução desse potencial, a equação de Dirac correspondente é

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[-ic\hat{\alpha} \cdot \left(\hbar\nabla + m_0\omega\mathbf{r}\hat{\beta}\right) + m_0c^2\hat{\beta}\right]\Psi(\mathbf{r},t). \quad (3.86)$$

Esta equação foi primeiramente apresentada por Itô *et. al.* desenvolvendo estudos de cromodinamica quântica do estudo de modelos de confinamento quark em mesons e baryons [33], revisado por Cook [34] e anos mais tarde redescoberto independentemente por M. Moshinsky *et al.* [35]. O sistema descrito pela equação (3.86) é conhecido como *oscilador de Dirac* (OD). As autofunções do OD em três dimensões formam um conjunto completo [36], autofunções e autoenergias do OD podem ser calculadas solucionando diretamente sua equação diferencial [35] e também utilizando os métodos da SUSYQM [37]. Propriedades algebraicas do OD são demonstradas em [38]. A relação do OD com alguns problemas de quebra de supersymetria podem ser encontrados em [39]. O OD foi utilizado em diferentes estudos e aplicações, em particular, se estudou o comportamento do OD no interior de um campo magnético [40] e algumas propriedades estadísticas, fazendo a comparação com o oscilador harmônico [41], recentemente foi aplicado em óptica quântica [42] e no modelamento de propriedades dos mésons utilizando sistemas partícula-antipartícula [43], uma realiação fotonica do OD foi proposta em [44].

Assumindo que a função de onda mencionada é da forma $\Psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})\phi(t)$, podemos escrever a equação (3.86) como

$$i\hbar\psi(\mathbf{r})\frac{d\phi(t)}{dt} = -i\hbar c\phi(t)\hat{\alpha} \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}) - im\omega c\psi(\mathbf{r})\phi(t)\hat{\alpha} \cdot \mathbf{r}\hat{\beta} + mc^2\psi(\mathbf{r})\phi(t)\hat{\beta}, \quad (3.87)$$

a qual vemos que é equivalente às duas equações

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E\phi(t), \quad \text{com solução} \quad \phi(t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (3.88a)$$

$$-i\hbar c\hat{\alpha} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}) - im\omega c \psi(\mathbf{r}) \hat{\alpha} \cdot \mathbf{r} \hat{\beta} + mc^2 \psi(\mathbf{r}) \hat{\beta} = E\psi(\mathbf{r}), \quad (3.88b)$$

onde E é uma constante numérica com dimensões de energia. A equação (3.88b) pode ser escrita, explicitamente como

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar c\hat{\sigma} \cdot \nabla \\ -i\hbar c\hat{\sigma} \cdot \nabla & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \\ & - \begin{pmatrix} 0 & im\omega c\hat{\sigma} \cdot \mathbf{r} \\ im\omega c\hat{\sigma} \cdot \mathbf{r} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \\ & + mc^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (3.89) \end{aligned}$$

fazendo algumas simplificações, temos

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar c\hat{\sigma} \cdot \nabla + im\omega c\hat{\sigma} \cdot \mathbf{r} \\ -i\hbar c\hat{\sigma} \cdot \nabla - im\omega c\hat{\sigma} \cdot \mathbf{r} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \\ & = \begin{pmatrix} E - mc^2 & 0 \\ 0 & E + mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (3.90) \end{aligned}$$

essa equação é equivalente as duas equações acopladas

$$c\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla + im\omega\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) = (E - mc^2) \psi_1(\mathbf{r}), \quad (3.91a)$$

$$c\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla - im\omega\mathbf{r}) \psi_1(\mathbf{r}) = (E + mc^2) \psi_2(\mathbf{r}), \quad (3.91b)$$

que podem ser desacopladas diretamente. Multiplicando a primeira por $(E + mc^2)$, obtemos

$$c\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla + im\omega\mathbf{r}) (E + mc^2) \psi_2(\mathbf{r}) = (E^2 - m^2c^4) \psi_1(\mathbf{r}). \quad (3.92)$$

Em função da equação (3.91b), podemos substituir o termo $(E + mc^2) \psi_2(\mathbf{r})$ pelo termo $-c\hat{\sigma} \cdot (i\hbar\nabla + im\omega^2\mathbf{r}) \psi_1(\mathbf{r})$, assim obtemos uma equação desacoplada para $\psi_1(\mathbf{r})$

$$c^2\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla + im\omega\mathbf{r}) \hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla - im\omega\mathbf{r}) \psi_1(\mathbf{r}) = (E^2 - m^2c^4) \psi_1(\mathbf{r}). \quad (3.93)$$

De uma maneira totalmente similar, podemos obter a equação correspondente à componente $\psi_2(\mathbf{r})$. Multiplicando (3.91b) por $(E - mc^2)$, obtemos

$$c\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla - im\omega\mathbf{r}) (E - mc^2) \psi_1(\mathbf{r}) = (E^2 - m^2c^4) \psi_2(\mathbf{r}), \quad (3.94)$$

em função da equação (3.91a), podemos substituir o termo $(E - mc^2)\psi_1(\mathbf{r})$ pelo termo $c\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla + im\omega^2\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})$, assim obtemos uma equação desacoplada para $\psi_2(\mathbf{r})$

$$c^2\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla - im\omega\mathbf{r})\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla + im\omega\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r}) = (E^2 - m^2c^4)\psi_2(\mathbf{r}). \quad (3.95)$$

Com a função (3.88a) e as funções solução das equações (3.93) e (3.95), podemos obter a função de onda total do OD.

É usual fatorar as componentes espaciais do espinor [15] como

$$\begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ig(r)\Omega_{jlm}(\mathbf{r}/r) \\ -f(r)\Omega_{j'l'm}(\mathbf{r}/r) \end{pmatrix}, \quad (3.96)$$

logo, temos

$$\begin{aligned} & -i\hbar\hat{\sigma} \cdot \nabla \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \hbar\hat{\sigma} \cdot [\nabla g(r)]\Omega_{jlm}(\mathbf{r}/r) + \hbar g(r)\hat{\sigma} \cdot \nabla\Omega_{jlm}(\mathbf{r}/r) \\ -i\hbar\hat{\sigma} \cdot [\nabla f(r)]\Omega_{j'l'm}(\mathbf{r}/r) - i\hbar f(r)\hat{\sigma} \cdot \nabla\Omega_{j'l'm}(\mathbf{r}/r) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.97)$$

é dizer

$$\begin{aligned} & -i\hbar\hat{\sigma} \cdot \nabla \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \hbar\frac{dg(r)}{dr}\left(\hat{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r}\right)\Omega_{jlm}(\mathbf{r}/r) - g(r)\left(\frac{2\hbar}{r} + \frac{1}{r}\mathbf{L} \cdot \hat{\sigma}\right)\Omega_{j'l'm}(\mathbf{r}/r) \\ -i\hbar\frac{df(r)}{dr}\left(\hat{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r}\right)\Omega_{j'l'm}(\mathbf{r}/r) - if(r)\left(\frac{2\hbar}{r} + \frac{1}{r}\mathbf{L} \cdot \hat{\sigma}\right)\Omega_{jlm}(\mathbf{r}/r) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.98)$$

na qual \mathbf{L} é o operador de momento angular, assim

$$-i\hbar\hat{\sigma} \cdot \nabla \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -c\hbar\frac{dg(r)}{dr}\Omega_{j'l'm}(\mathbf{r}/r) - c\hbar g(r)\frac{\kappa+1}{r}\Omega_{j'l'm}(\mathbf{r}/r) \\ -i\hbar\frac{df(r)}{dr}\Omega_{jlm}(\mathbf{r}/r) + ic\hbar f(r)\frac{\kappa-1}{r}\Omega_{jlm}(\mathbf{r}/r) \end{pmatrix}, \quad (3.99)$$

além disso, utilizando a relação (3.96), temos

$$imc\omega\hat{\sigma} \cdot \mathbf{r} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc\omega r g(r)\Omega_{j'l'm}(\mathbf{r}/r) \\ imc\omega r f(r)\Omega_{jlm}(\mathbf{r}/r) \end{pmatrix} \quad (3.100)$$

substituindo (3.99) e (3.100) em (3.93) e (3.95), obtemos

$$\begin{aligned} \left(-c\hbar \frac{d}{dr} - c\hbar \frac{\kappa + 1}{r} - m_0 c \omega r \right) g_\kappa(r) &= - [E + m_0 c^2] f_\kappa(r), \\ \left(-ic\hbar \frac{d}{dr} + ic\hbar \frac{\kappa - 1}{r} + im_0 c \omega r \right) f_\kappa(r) &= [E - m_0 c^2] ig_\kappa(r). \end{aligned} \quad (3.101)$$

Essas equações mostram que as energias próprias do OD dependem apenas da coordenada radial. Fazendo as trocas $G_\kappa = r g_\kappa$ e $F_\kappa = r f_\kappa$, temos

$$\begin{aligned} \left(c\hbar \frac{d}{dr} + c\hbar \frac{k}{r} + m_0 c \omega r \right) G_k(r) &= [E + m_0 c^2] F_k(r), \\ \left(-c\hbar \frac{d}{dr} + c\hbar \frac{k}{r} + m_0 c \omega r \right) F_k(r) &= [E - m_0 c^2] G_k(r), \end{aligned} \quad (3.102)$$

conjunto de equações que formam a parte radial do OD.

Desacople de equações

Nesta subseção estamos interessados na interpretação das equações (3.93) e (3.95), as quais são as equações diferenciais para cada uma das componentes do espinor da equação diferencial do OD. A equação (3.93) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} (E^2 - m^2 c^4) \psi_1(\mathbf{r}) &= c^2 \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \left[-\hbar^2 \nabla_i \nabla_j - \hbar m \omega (\nabla_i r_j) \right. \\ &\quad \left. - \hbar m \omega r_j \nabla_i + \hbar m \omega r_i \nabla_j + m^2 \omega^2 r_i r_j \right] \psi_1(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (3.103)$$

e aplicando a propriedade das matrizes de Pauli $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \hat{\delta}_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k$ obtemos

$$\begin{aligned} (E^2 - m^2 c^4) \psi_1(\mathbf{r}) &= c^2 \left[-\hbar^2 \nabla^2 + m^2 \omega^2 r^2 - 3\hbar m \omega \right. \\ &\quad \left. - i\hbar^2 \varepsilon_{ijk} \nabla_i \nabla_j \hat{\sigma}_k - i\hbar m \omega \varepsilon_{ijk} (\nabla_i r_j) \hat{\sigma}_k \right. \\ &\quad \left. + i\hbar m \omega \varepsilon_{ijk} (r_i \nabla_j - r_j \nabla_i) \hat{\sigma}_k + im^2 \omega^2 \varepsilon_{ijk} r_i r_j \hat{\sigma}_k \right] \psi_1(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (3.104)$$

em que dois termos foram cancelados por serem iguais e de sinais opostos. Utilizando as relações $\varepsilon_{ijk} \nabla_i \nabla_j = 0$, $\varepsilon_{ijk} \nabla_i r_j = 0$ e $\varepsilon_{ijk} r_i r_j = 0$, e observando que $i\hbar \varepsilon_{ijk} (r_i \nabla_j - r_j \nabla_i) = 2i\hbar \varepsilon_{ijk} r_i \nabla_j = -2\varepsilon_{ijk} r_i p_j = -2(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_k = -2\mathbf{L}_k$ onde \mathbf{L} é o momento angular da partícula, obtemos

$$c^2 \left[-\hbar^2 \nabla^2 + m^2 \omega^2 r^2 - 3\hbar m \omega - 2m\omega \mathbf{L} \cdot \hat{\sigma} \right] \psi_1(\mathbf{r}) = (E^2 - m^2 c^4) \psi_1(\mathbf{r}), \quad (3.105)$$

na qual pode-se escrever a função da matriz spin $\hat{S} = \hbar\hat{\sigma}/2$, assim, finalmente temos a seguinte equação para a primeira componente do espinor

$$c^2 \left[-\hbar^2 \nabla^2 + m^2 \omega^2 r^2 - 3\hbar m \omega - 4m(\omega/\hbar) \mathbf{L} \cdot \hat{S} \right] \psi_1(\mathbf{r}) = (E^2 - m^2 c^4) \psi_1(\mathbf{r}). \quad (3.106)$$

É importante destacar que essa equação é totalmente equivalente à equação (3.93). De uma maneira totalmente similar, o mesmo procedimento aplicado na equação (3.95) leva à seguinte equação para a segunda componente do espinor

$$c^2 \left[-\hbar^2 \nabla^2 + m^2 \omega^2 r^2 + 3\hbar m \omega + 4m(\omega/\hbar) \mathbf{L} \cdot \hat{S} \right] \psi_2(\mathbf{r}) = (E^2 - m^2 c^4) \psi_2(\mathbf{r}). \quad (3.107)$$

As equações (3.106) e (3.107) juntamente com (3.88a) são suficientes para a determinação do espinor da equação (3.86) para o OD.

O limite de baixa energia das equações das componentes da função de onda

A fim de estabelecer o sistema não-relativístico equivalente ao OD temos de calcular o limite de baixas energias das equações (3.106) e (3.107). Para toda partícula massiva, a magnitude do momento linear p satisfaz a condição $p < m_0 c$ e considerando, termos até segunda ordem em p/mc , temos que a energia $E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} = m_0 c^2 \sqrt{1 + (p/m_0 c)^2}$ da partícula, pode ser escrita como $E \approx m_0 c^2 [1 + (p/m_0 c)^2/2] = m_0 c^2 + p^2/2m_0 = m_0 c^2 + \varepsilon$, onde a energia cinética da partícula $\varepsilon \equiv p^2/2m_0$ tem um pequeno valor em comparação à energia própria. Substituindo essa aproximação em (3.106) e (3.107), desconsiderando o termo proporcional ao ε^2 e dividindo por $2mc^2$, obtemos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 - \frac{3}{2} \hbar \omega - \frac{2\omega}{\hbar} \mathbf{L} \cdot \hat{S} \right] \psi_1(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi_1(\mathbf{r}), \quad (3.108a)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 + \frac{3}{2} \hbar \omega + \frac{2\omega}{\hbar} \mathbf{L} \cdot \hat{S} \right] \psi_2(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi_2(\mathbf{r}). \quad (3.108b)$$

Essas equações incluem termos proporcionais a \hbar , termos esses de natureza quântica e cujo significado físico será discutido mais adiante. Por enquanto, se a magnitude de \mathbf{L} cumpre $L \gg \hbar$, os termos $\sim \hbar \omega$ podem ser descartados e os termos $\sim \mathbf{L}$ terão magnitudes muito grandes. Nesse caso as equações

ficam

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 - \frac{2\omega}{\hbar}\mathbf{L}\cdot\hat{S} \right] \psi_1(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi_1(\mathbf{r}), \quad (3.109a)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + \frac{2\omega}{\hbar}\mathbf{L}\cdot\hat{S} \right] \psi_2(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi_2(\mathbf{r}), \quad (3.109b)$$

e cada uma delas corresponde a um oscilador harmônico simples com um acoplamento spin-orbita, este resultado que no limite não-relativístico deu origem ao nome de oscilador de Dirac [35]. Em comparação, as duas equações descrevem osciladores harmônicos simples de mesma massa e frequência, os valores de spin se diferenciam apenas pelo sinal e, as autoenergias dos dois osciladores são as mesmas.

Condição de normalização

Obtivemos as equações acopladas

$$(E - m_0c^2) \psi_1(\mathbf{r}) = (-i\hbar\hat{\sigma}\cdot\nabla + im_0c\omega\hat{\sigma}\cdot\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}), \quad (3.110a)$$

$$(E + m_0c^2) \psi_2(\mathbf{r}) = (-i\hbar\hat{\sigma}\cdot\nabla - im_0c\omega\hat{\sigma}\cdot\mathbf{r}) \psi_1(\mathbf{r}), \quad (3.110b)$$

com as quais é possível calcular as duas componentes espaciais do espinor

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad (3.111)$$

que é a solução da equação do OD (3.86). Das equações (3.110), temos

$$(E - m_0c^2) \int |\psi_1(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \int \psi_1^*(\mathbf{r}) (-i\hbar\hat{\sigma}\cdot\nabla + im_0c\omega\hat{\sigma}\cdot\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3.112)$$

e

$$(E + m_0c^2) \int |\psi_2(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \int \psi_2^*(\mathbf{r}) (-i\hbar\hat{\sigma}\cdot\nabla - im_0c\omega\hat{\sigma}\cdot\mathbf{r}) \psi_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3.113)$$

em que os lados direitos são iguais, logo

$$(E - m_0c^2) \int |\psi_1(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = (E + m_0c^2) \int |\psi_2(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}, \quad (3.114)$$

além desta propriedade, a condição de normalização do espinor (3.111) exige que

$$\int |\psi_1(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} + \int |\psi_2(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1, \quad (3.115)$$

com essas duas propriedades, temos

$$\int |\psi_1(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{m_0 c^2}{E} \right), \quad (3.116a)$$

$$\int |\psi_2(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{m_0 c^2}{E} \right), \quad (3.116b)$$

condições essas de normalização para cada uma das componentes espaciais do espinor do OD.

3.3.2 Solução via SUSYQM

As equações radiais no caso do OD (3.102) podem ser resolvidas diretamente tomando os casos limites das mesmas e depois propor uma solução em séries de potência. Esse método de solução foi discutido nas últimas três seções, e no caso no OD apresentaremos diretamente a solução utilizando o formalismo da SUSYQM.

Determinação dos operadores de escada

Os operadores diferenciais nas equações diferenciais acopladas (3.102), satisfazem a relação

$$\left(c\hbar \frac{d}{dr} + c\hbar \frac{\kappa}{r} + m_0 c \omega r \right)^\dagger = \left(-c\hbar \frac{d}{dr} + c\hbar \frac{\kappa}{r} + m_0 c \omega r \right), \quad (3.117)$$

que é uma das características dos operadores de criação e aniquilação. Procurando a forma geral de funções $R^+(r)$ e $R^-(r)$ pela qual a ação desses operadores aniquila a função temos

$$\left(-c\hbar \frac{d}{dr} + c\hbar \frac{\kappa}{r} + m_0 c \omega r \right) R^+(r) = 0, \quad (3.118)$$

$$\left(c\hbar \frac{d}{dr} + c\hbar \frac{\kappa}{r} + m_0 c \omega r \right) R^-(r) = 0, \quad (3.119)$$

essas equações tenham as soluções

$$R_1(r) = C_1 r^\kappa \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right), \quad (3.120)$$

$$R_2(r) = C_2 r^{-\kappa} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right), \quad (3.121)$$

nas quais C_1 e C_2 são constantes. Dos dois possíveis tipos de soluções, a primeira tem de ser descartada, pelo fato que $R_1(r) = r^\kappa \exp(m\omega r^2/2\hbar)$ não

pode ser normalizada contudo, as funções do tipo $R_2(r) = r^{-k} \exp(-m\omega r^2/2\hbar)$ são normalizáveis. Em correspondência ao qual, temos que os operadores podem ser definidos como operadores de criação A^\dagger e de aniquilação A , logo

$$A^\dagger \equiv -c\hbar \frac{d}{dr} + c\hbar \frac{\kappa}{r} + m_0 c \omega r, \quad (3.122a)$$

$$A \equiv c\hbar \frac{d}{dr} + c\hbar \frac{\kappa}{r} + m_0 c \omega r, \quad (3.122b)$$

e a função de onda do estado base é do tipo $R_2(r)$.

Desacoplamento das equações

Com a definição dos operadores de escada, podemos escrever novamente as equações (3.102) como

$$A^\dagger F_\kappa(r) = [E - m_0 c^2] G_\kappa(r), \quad (3.123a)$$

$$A G_\kappa(r) = [E + m_0 c^2] F_\kappa(r), \quad (3.123b)$$

multiplicando a primeira dessas equações por A e a segunda por A^\dagger , temos

$$A A^\dagger F_\kappa(r) = [E - m_0 c^2] A G_\kappa(r), \quad (3.124a)$$

$$A^\dagger A G_\kappa(r) = [E + m_0 c^2] A^\dagger F_\kappa(r). \quad (3.124b)$$

A partir da equação (3.123b) podemos substituir o termo $A G_\kappa(r)$ por $[E + m_0 c^2] F_\kappa(r)$ na primeira equação de (3.124), similarmente, de (3.123a) podemos substituir o termo $A^\dagger F_\kappa(r)$ por $[E - m_0 c^2] G_\kappa(r)$ na segunda equação de (3.124), assim obtemos as equações desacopladas

$$A^\dagger A G_\kappa(r) = [E^2 - m_0^2 c^4] G_\kappa(r), \quad (3.125a)$$

$$A A^\dagger F_\kappa(r) = [E^2 - m_0^2 c^4] F_\kappa(r), \quad (3.125b)$$

que são duas equações de valores próprios.

Identificação de SUSYQM no sistema

Com os operadores (3.122) podemos fazer a construção dos operadores de carga e do superhamiltoniano no qual

$$A^\dagger A = c^2 \hbar^2 \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m\omega\kappa}{\hbar} + \left(\frac{m\omega r}{\hbar}\right)^2 + \frac{\kappa(\kappa+1)}{r^2} - \frac{m\omega}{\hbar} \right] \quad (3.126)$$

e

$$A A^\dagger = c^2 \hbar^2 \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m\omega\kappa}{\hbar} + \left(\frac{m\omega r}{\hbar}\right)^2 + \frac{\kappa(\kappa-1)}{r^2} + \frac{m\omega}{\hbar} \right], \quad (3.127)$$

assim, o superhamiltoniano (3.71) pode se escrever como [37]

$$\mathbf{H} = c^2 \hbar^2 \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{\kappa}{r} + \frac{m\omega r}{\hbar} \right)^2 + \left(\frac{\kappa}{r^2} - \frac{m\omega}{\hbar} \right) \sigma_3 \right]. \quad (3.128)$$

Autofunção e autoenergia do estado fundamental

A função de onda do estado fundamental $F_\kappa^{(0)}(r)$ tem que satisfazer a condição $AF_\kappa^{(0)}(r) = 0$, mostrou se que esta é uma das propriedades cumpridas pelas funções (3.121), logo, a função não normalizada é

$$F_\kappa^{(0)}(r) = r^{-\kappa} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right), \quad (3.129)$$

Com a substituição dessa função na equação (3.125a) temos que a energia do estado fundamental é

$$E_{F_\kappa}^{(0)} = m_0 c^2. \quad (3.130)$$

Utilizando os operadores (3.126) e (3.127) para escrever explicitamente as expressões (3.125), obtemos

$$c^2 \hbar^2 \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{m\omega r}{\hbar} \right)^2 + \frac{\kappa(\kappa+1)}{r^2} + \frac{m\omega}{\hbar} (2\kappa-1) - \frac{E^2}{c^2 \hbar^2} + \left(\frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 \right] F_\kappa(r), \quad (3.131)$$

e

$$c^2 \hbar^2 \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{m\omega r}{\hbar} \right)^2 + \frac{\kappa(\kappa-1)}{r^2} + \frac{m\omega}{\hbar} (2\kappa+1) - \frac{E^2}{c^2 \hbar^2} + \left(\frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 \right] G_\kappa(r), \quad (3.132)$$

$$A^\dagger A = -c^2 \hbar^2 \frac{d^2}{dr^2} + \left(c\hbar \frac{\kappa}{r} + mc\omega r \right)^2 + \left(c^2 \hbar^2 \frac{\kappa}{r^2} - c^2 \hbar m\omega \right) \quad (3.133)$$

Autofunções e autoenergias dos estados excitados

As equações (3.125), onde o hamiltoniano é (3.128), se podem escrever como

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{(\kappa + m_0 \omega r^2 / \hbar)^2}{r^2} + \frac{(\kappa - m_0 \omega r^2 / \hbar)}{r^2} \sigma_3 - \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{c^2 \hbar^2} \right] \begin{pmatrix} G_k(r) \\ F_k(r) \end{pmatrix} = 0. \quad (3.134)$$

o qual tem como solução geral as funções

$$G_\kappa = C_{1G_\kappa} r^{-1/2} M_W \left(\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{4m_0 c^2 \omega \hbar} - \frac{1}{2} \kappa + \frac{1}{4}; \frac{1}{2} \kappa + \frac{1}{4}; \frac{m_0 \omega}{\hbar} r^2 \right) \\ + C_{2G_\kappa} r^{-1/2} U_W \left(\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{4m_0 c^2 \omega \hbar} - \frac{1}{2} \kappa + \frac{1}{4}; \frac{1}{2} \kappa + \frac{1}{4}; \frac{m_0 \omega}{\hbar} r^2 \right), \quad (3.135)$$

e

$$F_{\kappa'} = C_{1F_{\kappa'}} r^{-1/2} M_W \left(\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{4m_0 c^2 \omega \hbar} - \frac{1}{2} \kappa' - \frac{1}{4}; \frac{1}{2} \kappa' - \frac{1}{4}; \frac{m_0 \omega}{\hbar} r^2 \right) + C_{2F_{\kappa'}} r^{-1/2} U_W \left(\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{4m_0 c^2 \omega \hbar} - \frac{1}{2} \kappa' - \frac{1}{4}; \frac{1}{2} \kappa' - \frac{1}{4}; \frac{m_0 \omega}{\hbar} r^2 \right), \quad (3.136)$$

nas quais C_{1G_κ} , C_{2G_κ} , $C_{1F_{\kappa'}}$ e $C_{2F_{\kappa'}}$ são constantes e $M_W(\alpha, \beta, \gamma)$ e $U_W(\alpha, \beta, \gamma)$ são as funções de Whittaker [12]. Precisa-se que as funções $G_\kappa(r)$ e $F_{\kappa'}(r)$ no caso de $r \rightarrow \infty$ permaneçam limitadas, porém os termos proporcionais a $U_W(\alpha, \beta, \gamma)$ não satisfazem tais condições, assim, as respectivas constantes devem ser anuladas, logo

$$G_\kappa(r) = C_{1G_\kappa} \left(\frac{m_0 \omega}{\hbar} \right)^{\kappa/2+3/4} r^{\kappa+1} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right) \times M_W \left(\frac{1}{2} + \kappa - \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{4m_0 c^2 \omega \hbar}; \kappa + \frac{3}{2}; \frac{m_0 \omega}{\hbar} r^2 \right) \quad (3.137)$$

e

$$F_{\kappa'}(r) = C_{1F_{\kappa'}} \left(\frac{m_0 \omega}{\hbar} \right)^{\kappa'/2+1/4} r^{\kappa'} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right) \times M_W \left(\frac{1}{2} + \kappa' - \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{4m_0 c^2 \omega \hbar}; \kappa' + \frac{1}{2}; \frac{m_0 \omega}{\hbar} r^2 \right). \quad (3.138)$$

Fazendo a definição do número radial principal n como

$$n = \frac{E_n^2 - m_0^2 c^4}{4m_0 c^2 \omega \hbar} - \kappa - \frac{1}{2}, \quad (3.139)$$

vemos que os possíveis valores de energia são

$$E_{n\kappa}^\pm = \pm m_0 c^2 \left[1 + \frac{4\omega \hbar}{m_0 c^2} \left(n + \kappa + \frac{1}{2} \right) \right]^{1/2}. \quad (3.140)$$

Nas funções de onda ainda não-normalizadas (3.137) e (3.138) podemos utilizar a relação [12]

$$M_W(-n; m+1; x) = \frac{n!m!}{(n+m)!} L_n^m(x), \quad (3.141)$$

logo

$$G_l = C_{1G_l} \frac{n!(l+1/2)!}{(n+l+1/2)!} \left(\frac{m_0 \omega}{\hbar} \right)^{1/4} \left[\left(\frac{m_0 \omega}{\hbar} \right)^{1/2} r \right]^{l+1} \exp \left(-\frac{m_0 \omega}{2\hbar} r^2 \right) \times L_n^{l+1/2} \left(\frac{m_0 \omega}{\hbar} r^2 \right) \quad (3.142)$$

e

$$F_{l'} = C_{1F_{l'}} \frac{n'!(l'+1/2)!}{(n'+l'+1/2)!} \left(\frac{m_0\omega}{\hbar}\right)^{1/4} \left[\left(\frac{m_0\omega}{\hbar}\right)^{1/2} r \right]^{l'+1} \exp\left(-\frac{m_0\omega}{2\hbar} r^2\right) \times L_{n'}^{l'+1/2} \left(\frac{m_0\omega}{\hbar} r^2\right). \quad (3.143)$$

Nestas expressões as constantes de normalização C_{1G_l} e $C_{1F_{l'}}$ ainda não são conhecidas. Calculando estas constantes, a parte espacial do espinor

$$\begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} iG_\kappa \Omega_{jlm}(\mathbf{r}/r) \\ -F_\kappa \Omega_{jl'm}(\mathbf{r}/r) \end{pmatrix}, \quad (3.144)$$

será determinada. Fazendo a troca $x = m_0\omega r^2/\hbar$ em (3.142) e (3.143), a condição de normalização (3.116) é

$$C_{1G_\kappa}^2 \left[\frac{n!(l+1/2)!}{(n+l+1/2)!} \right]^2 \left(\frac{\hbar}{m_0\omega}\right)^{1/2} \int_0^\infty dx x^{l+1/2} \exp(-x) [L_n^{l+1/2}(x)]^2 = \left(\frac{E_{n\kappa} + m_0c^2}{E_{n\kappa}}\right) \quad (3.145)$$

e

$$C_{1F_\kappa}^2 \left[\frac{n'!(l'+1/2)!}{(n'+l'+1/2)!} \right]^2 \left(\frac{\hbar}{m_0\omega}\right)^{1/2} \int_0^\infty dx x^{l'+1/2} \exp(-x) [L_{n'}^{l'+1/2}(x)]^2 = \left(\frac{E_{n\kappa} - m_0c^2}{E_{n\kappa}}\right) \quad (3.146)$$

nas quais [12]

$$\int_0^\infty dx x^{l+1/2} \exp(-x) [L_n^{l+1/2}(x)]^2 = \frac{(n+l+1/2)!}{n!}, \quad (3.147)$$

assim

$$C_{1G_\kappa} = \left(\frac{m_0\omega}{\hbar}\right)^{1/4} \left[\frac{(n+l+1/2)!}{n![(l+1/2)!]^2} \left(\frac{E_{n\kappa} + m_0c^2}{E_{n\kappa}}\right) \right]^{1/2}, \quad (3.148a)$$

$$C_{1F_\kappa} = \left(\frac{m_0\omega}{\hbar}\right)^{1/4} \left[\frac{(n'+l'+1/2)!}{n'![(l'+1/2)!]^2} \left(\frac{E_{n\kappa} - m_0c^2}{E_{n\kappa}}\right) \right]^{1/2}, \quad (3.148b)$$

substituindo essas constantes em (3.142) e (3.143), obtemos as funções $G_k(r)$ e $F_k(r)$

$$G_k(r) = \left[\frac{m_0\omega n! (E_{n\kappa} + m_0c^2)}{\hbar(n+l+1/2)! E_{n\kappa}} \right]^{1/2} \left[\left(\frac{m_0\omega}{\hbar}\right)^{1/2} r \right]^{l+1} \exp\left(-\frac{m_0\omega}{2\hbar} r^2\right) \times L_n^{l+1/2} \left(\frac{m_0\omega}{\hbar} r^2\right) \quad (3.149)$$

e

$$F_k(r) = \left[\frac{m_0 \omega n! (E_{n\kappa} - m_0 c^2)}{\hbar (n' + l' + 1/2)! E_{n\kappa}} \right]^{1/2} \left[\left(\frac{m_0 \omega}{\hbar} \right)^{1/2} r \right]^{l'+1} \exp \left(-\frac{m_0 \omega}{2\hbar} r^2 \right) \\ \times L_{n'}^{l'+1/2} \left(\frac{m_0 \omega}{\hbar} r^2 \right) \quad (3.150)$$

finalmente, temos que o espinor do OD é

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{r} \left(\begin{array}{c} \left[\frac{m_0 \omega n! (E_{n\kappa} + m_0 c^2)}{\hbar (n + l + 1/2)! E_{n\kappa}} \right]^{1/2} \left[\left(\frac{m_0 \omega}{\hbar} \right)^{1/2} r \right]^{l+1} L_n^{l+1/2} \left(\frac{m_0 \omega}{\hbar} r^2 \right) \\ \left[\frac{m_0 \omega n! (E_{n\kappa} - m_0 c^2)}{\hbar (n' + l' + 1/2)! E_{n\kappa}} \right]^{1/2} \left[\left(\frac{m_0 \omega}{\hbar} \right)^{1/2} r \right]^{l'+1} L_{n'}^{l'+1/2} \left(\frac{m_0 \omega}{\hbar} r^2 \right) \end{array} \right) \\ \times \exp \left(-\frac{m_0 \omega}{2\hbar} r^2 - \frac{iEt}{\hbar} \right). \quad (3.151)$$

Capítulo 4

Conclusão

Neste trabalho foi apresentado o estudo do Átomo de Hidrogênio e do Oscilador Harmônico Tridimensional nos níveis não-relativísticos e relativísticos, utilizando o formalismo da Mecânica Quântica Supersimétrica (SUSYQM).

Inicialmente, no capítulo 1, introduzimos os fundamentos da SUSYQM. No capítulo 2, realizamos o estudo não relativístico do Átomo de Hidrogênio e do Oscilador Harmônico Tridimensional, cujas expressões gerais para as autoenergias e as autofunções destes dois sistemas foram calculadas, sendo necessária a construção de operadores de escada com os quais o hamiltoniano de cada um destes sistemas pôde ser fatorado como o produto de dois operadores que seguem a álgebra da SUSYQM. Apresentamos diversos exemplos que ilustram a igualdade das autofunções encontradas pelo método convencional e utilizando o formalismo da SUSYQM. Finalmente, no capítulo 3, realizamos o estudo relativístico dos mesmos dois sistemas, a parte radial da ED para o Átomo de Hidrogênio Relativístico e do Oscilador de Dirac (a versão relativística correspondente do Oscilador Harmônico Tridimensional) foram fatoradas utilizando operadores que seguem a álgebra da SUSYQM, se obtiveram as respectivas expressões para as autoenergias e autofunções destes dois sistemas.

As expressões para as autoenergias e as autofunções dos quatro sistemas estudados, Átomo de Hidrogênio relativístico e não-relativístico, Oscilador Harmônico Tridimensional e Oscilador de Dirac que foram obtidas com a utilização do formalismo da SUSYQM, podem ser comparadas com os resultados correspondentes obtidos por métodos convencionais os quais também são desenvolvidos neste trabalho. Em particular, as expressões para as autoenergias obtidas pelos dois métodos são evidentemente iguais, no entanto, os resultados obtidos para as autofunções, embora iguais, oferecem dificuldade para efeito de comparação, pois a resposta geral para qualquer autofunção

obtida com o formalismo da SUSYQM resulta em função de operadores e não pode ser simplificada, contrário ao caso do método convencional.

Possíveis trabalhos futuros são:

- Encontrar as constantes de normalização das autofunções do AHNR e o OAT utilizando unicamente o formalismo da SUSYQM.
- Estender os resultados encontrados no caso do AHNR e o OAT, estabelecendo as condições sob as quais a ES para um potencial central pode ser resolvida utilizando o formalismo da SUSYQM.
- Estender os resultados encontrados no caso do AHR e o OD, estabelecendo as condições sob as quais o sistema formado pelas equações que conformam a parte radial da ED pode ser resolvido com o formalismo da SUSYQM.

Capítulo 5

Apêndice

.1 Equação Diferencial Hypergeométrica

Uma equação diferencial que pode-se reduzir à forma

$$z(1-z)\frac{d^2\phi}{dz^2} + [c - (a+b+1)z]\frac{d\phi}{dz} - ab\phi = 0, \quad (.1.1)$$

onde a , b e c são constantes arbitrárias, é chamada equação diferencial hypergeométrica. Fazendo primeiramente a troca $x = bz$ e posteriormente pegando o limite $b \rightarrow \infty$ obtemos a equação

$$x\frac{d^2\phi}{dx^2} + (c-x)\frac{d\phi}{dx} - a\phi = 0, \quad (.1.2)$$

que é conhecida como equação diferencial de Kummer. Utilizando os símbolos de Pochhammer

$$(a)_0 = 1, \quad (a)_\mu = a(a+1)\cdots(a+\mu-1) \quad (.1.3)$$

as soluções* das equações (.1.1) e (.1.2) respetivamente são

$$\begin{aligned} \phi(z) &= A {}_2F_1(a, b, c; z) + Bz^{1-c} {}_2F_1(a+1-c, b+1-c, 2-c; z); \\ \text{com } {}_2F_1(a, b, c; z) &= \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{(a)_\mu (b)_\mu z^\mu}{(c)_\mu \mu!} \end{aligned} \quad (.1.4)$$

*As soluções das equações (.1.1) e (.1.2) podem-se calcular propondo uma solução da forma

$$\phi(x) = x^\alpha \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i \phi(z) = x^\alpha \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i$$

e

$$\phi(x) = A {}_1F_1(a, c; x) + Bx^{1-c} {}_1F_1(a - c + 1, 2 - c; x);$$
$$\text{com } {}_1F_1(a, c; x) = \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{(a)_{\mu} x^{\mu}}{(c)_{\mu} \mu!}. \quad (.1.5)$$

Das definições das funções ${}_1F_1(a, c; x)$ e ${}_2F_1(a, b, c; x)$ vemos que a sua existência implica $c \neq -n$ com $n = 0, 1, \dots$, além disto, no caso $a = -n$ (ou $b = -n$) com $n = 0, 1, \dots$, as séries terminam, e as funções ${}_1F_1(a, c; x)$ ou ${}_2F_1(a, b, c; x)$ definem polinômios finitos, em particular

$${}_1F_1(-n, m + 1; x) = \frac{n!m!}{(n + m)!} L_n^{(m)}(x), \quad (.1.6)$$

define a relação entre as soluções da equação de Kummer e os polinômios de Laguerre [12].

Bibliografia

- [1] J. Wess, *From symmetry to supersymmetry*. [Eur. Phys. J. C. 59, (2009) 177-183].
- [2] E. Noether, *Invariant Variation Problems*. Tradução ao inglês dos teoremas de E. Noether (1918) [arXiv:physics/0503066v1 [physics.hist-ph]].
- [3] H. Kirsten, A. Wiedemann. *Supersymmetry: an introduction with conceptual and calculational details*. World Scientific. 1987.
- [4] P. Ramond, *Field theory: a modern primer*. Segunda edição. Westview Press. 2001.
- [5] S. Coleman, J. Mandula. *All Possible Symmetries of the S Matrix*. [Phys. Rev. 159, (1967) 1251–1256].
- [6] J. Wess, J. Bagger. *Supersymmetry and supergravity* 1992.
- [7] Fred Cooper, Avinash Khare, Uday Sukhatme. *Supersymmetry and quantum mechanics*. [Phys. Rept. 251 (1995) 267-385]; C. V. Sukumar. *Supersymmetric quantum mechanics and its applications*. [AIP Conf. Proc. 744, (2004) 166-235]; M. de Crombrugghe, V. Rittenberg. *Supersymmetric quantum mechanics*. [Annals of Physics 151, (1983) 99-126].
- [8] E. Witten, *Dynamical breaking of supersymmetry*. [Nucl. Phys. B185 (1981) 513-554].
- [9] M. Chaichian, et al. *Symmetries in quantum mechanics: from angular momentum to supersymmetry*. Institute of physics publishing, Bristol, Philadelphia. 1997.
- [10] Shi-Hai Dong, *Factorization Method in Quantum Mechanics*. Springer, 2007.

- [11] L. Infeld. *On a New Treatment of Some Eigenvalue Problems*. [Phys. Rev. 59 (1941) 737-747].
- [12] George B. Arfken, Hans J. Weber, Frank E. Harris. *Mathematical Methods for Physicists* 1992.
- [13] C. Cohen-Tannoudji, et al. *Quantum mechanics*; D. Griffiths. *Quantum Mechanics: an introduction*. Quarta edição. Springer. 2001; W. Greiner. *Quantum Mechanics: an introduction*. Quarta edição. Springer. 2001.
- [14] Y. F. Liu, et al. *Connection between the closeness of classical orbits and the factorization of the radial Schrödinger equation*. [Phys. Rev. A 58 (1998) 862-868].
- [15] W. Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics: wave equations*. Terceira edição. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York. 2000.
- [16] B. W. Xu, et al. *Factorization of the radial Schrödinger equation of the hydrogen atom*. [Phys. Lett. A 259 (1999) 212-214].
- [17] R. D. Tangerman, J. A. Tjon. *Exact supersymmetry in the nonrelativistic hydrogen atom*. [Phys. Rev. A 48, (1993) 1089-1092].
- [18] A. Valance, et al. *Eigensolutions of the Coulomb hamiltonian via supersymmetry*. [Am. J. Phys. 58 (1990) 487-491].
- [19] A. Wipf, et al. *Algebraic solution of the supersymmetric hydrogen atom*. [Quantum theory and symmetries IV e.d. V. K. Dobrev, Heron Press, Sofia, (2006) 1-11].
- [20] P. Kundrat, et al. *Three-dimensional harmonic oscillator and time evolution in quantum mechanics*. [Phys. Rev. A 67 (2003) 1-5].
- [21] J. D. Talman, *Some properties of three-dimensional harmonic oscillator wave functions*. [Nucl. Phys. A141 (1970) 273-288].
- [22] L. Homorodean, *Isotropic three-dimensional oscillator in relativistic classical mechanics*. [Europhys. Lett., 66 (2004) 8-13].
- [23] R. Mota, et al. *Creation and annihilation operators, symmetry and supersymmetry of the 3D isotropic harmonic oscillator*. [J. Phys. A: Math. Gen. 36 (2003) 4849-4856].
- [24] B. Thaller, *The Dirac equation*. Springer-Verlag, Berlin 2010.

- [25] M. E. Rose. *Relativistic Wave Functions in the Continuous Spectrum for the Coulomb Field*. [Phys. Rev. 51 (1937) 484-485]; P. C. Martin, et al. *Relativistic Theory of Radiative Orbital Electron Capture*. [Phys. Rev. 109 (1957) 1307-1325].
- [26] H. M. Kiefer, et al. *Noninvariance Group for the Dirac Coulomb Problem*. [Phys. Rev. 180 (1969) 1282-1288]; T. T. Khachidze et al. *The hidden symmetry of the Coulomb problem in relativistic quantum mechanics: From Pauli to Dirac*. [Am. J. Phys. 74 (2006) 628-632]; J. Chen, et al. *SO(4) symmetry in the relativistic hydrogen atom*. [Phys. Rev. A 77 (2008) 1-4]; A. A. Stahlhofen. *Comment on "SO(4) symmetry in the relativistic hydrogen atom"*. [Phys. Rev. A 78 (2008) 1].
- [27] G. Breit, et al. *Perturbation Methods for Dirac Radial Equations*. [Phys. Rev. 76 (1949) 1307-1309].
- [28] C. V. Sukumar, *Supersymmetry and the Dirac equation for a central Coulomb field*. [J. Phys. A: Math. Gen. 18, (1985) L697-L701].
- [29] H. Panahi, et al. *Dirac equation and ground state of solvable potentials: supersymmetry method*. [Int J Theor Phys (2011) 2811-2818].
- [30] M. E. Rose, *A Note on Dirac Central Field Wave Functions*. [Phys. Rev. 82 (1950) 389-391].
- [31] M. E. Rose, *Properties of Dirac Wave Functions in a Central Field*. [Phys. Rev. 82 (1950) 470-477].
- [32] L. C. Biedenharn. *Remarks on the Relativistic Kepler Problem*. [Phys. Rev. 126 (1961) 845-851].
- [33] D. Itô, et al. *An example of dynamical systems with linear trajectory*. [Il Nuo. Cim. A Vol. 51, No 4, (1967) 1119-1121].
- [34] A. P. Cook. *Relativistic harmonic oscillator with intrinsic spin structure*. [Lett. Nuo. Cim. Vol 1, No 10 (1971) 419-426].
- [35] M. Moshinsky, A. Szczepaniak. *The Dirac oscillator*. [J. Phys. A: Math. Gen. 22, (1989) L817-L819].
- [36] R. Szmytkowski, M. Gruchowski. *Completeness of the Dirac oscillator eigenfunctions*. [J. Phys. A: Math. Gen. 34, (2001) 4991-4997].

- [37] J. Benítez, R. P. Martínez y Romero, H. N. Núñez-Yépez, A. L. Salas-Brito. *Solution and hidden supersymmetry of a Dirac oscillator*. [Phys. Rev. Lett. 64, (1990) 1643-1645]; J. Benítez, R. P. Martínez y Romero, H. N. Núñez-Yépez, A. L. Salas-Brito. *Errata: Solution and hidden supersymmetry of a Dirac oscillator*. [Phys. Rev. Lett. 65, (1990) 2085].
- [38] O. L. Lange. *Algebraic properties of the Dirac oscillator*. [J. Phys. A: Math. Gen. 24, (1991) 667-677].
- [39] O. Castaños, et al. *Soluble extensions of the Dirac oscillator with exact and broken supersymmetry*. [Phys. Rev. D 43 (1991) 544-547]; R. P. Martínez y Romero, et al. *Supersymmetric properties and stability of the Dirac sea*. [Phys. Rev. D 43 (1991) 2036-2040]; M. Moshinsky, C. Quesne, Y. Smirnov. *Supersymmetry and superalgebra for the two-body system with a Dirac oscillator interaction*. [J. Phys. A: Math. Gen. 28, (1995) 6447-6457].
- [40] B. P. Mandal. *Dirac oscillator in an external magnetic field*. [Phys. Lett. A 374 (2010) 1021-1023].
- [41] M. H. Pacheco, et al. *One-dimensional Dirac oscillator in a thermal bath*. [Phys. Lett. A 311 (2003) 93-96].
- [42] Y. X. Wang, *Zitterbewegung study in Dirac oscillator with laser pulse*. [Eur. Phys. J. B (2012) 85: 237].
- [43] A. Gonzáles, G. Loyola, M. Moshinsky, *Radial equation for the particle-antiparticle system with a Dirac oscillator interaction, and a qualitative application to mesons*. [Revista Mexicana de Física 40, No 1 (1994) 12-30].
- [44] S. Longui, *Photonic realization of the relativistic Dirac oscillator*. [Opt. Lett. Vol 35, No 8 (2010) 1302-1304].