

Universidade Federal de Juiz de Fora
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-Graduação em Matemática

Marcelo Silva Oliveira

Extensões Racionais do Oscilador Harmônico

Juiz de Fora

2020

Marcelo Silva Oliveira

Extensões Racionais do Oscilador Harmônico

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal de Juiz de Fora, na área de concentração em Matemática Aplicada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática.

Orientador: Andrey M. Pupasov-Maksimov

Juiz de Fora

2020

Ficha catalográfica elaborada através do Modelo Latex do CDC da UFJF
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Oliveira, Marcelo.

Extensões Racionais do Oscilador Harmônico / Marcelo Silva Oliveira.
– 2020.

92 f. : il.

Orientador: Andrey M. Pupasov-Maksimov

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto
de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Matemática, 2020.

1. Transformação de Darboux. 2. Mecânica Quântica. 3. Polinômios
Excepcionais de Hermite. 4. Teoria da Pertubação. 5. Método Variacional.
6. Propagador. I. Pupasov, Andrey, orient. II. Título.

Marcelo Silva Oliveira

Extensões Racionais do Oscilador Harmônico

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Matemática da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Matemática. Área de concentração: Matemática Aplicada

Aprovada em 05 de agosto de 2020

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Andrey Pupasov-Maksimov - Orientador

Universidade Federal de Juiz de Fora

O discente e os membros da banca deram a anuência para que o(a) Presidente da Banca assinasse por eles.



Prof. Dr. Alexei Anatolevich Deriglazov

Universidade Federal de Juiz de Fora



Prof. Dr. Walberto Guzmán Ramírez

Universidade Estadual do Rio de Janeiro

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por criar um universo cheio de belezas e mistérios que estimulam o melhor no ser humano, a busca pelo desconhecido. Agradeço também pelo dom da vida, por minha família e por me permitir realizar mais um sonho.

Agradeço a meus pais, Marisete e Alírio e a meus irmãos e irmãs. Obrigado mãe, por todo cuidado e carinho. Obrigado pai, por todos os conselhos. Obrigado irmãos e irmãs, por todos os momentos felizes. Família, vocês são demais! Peço todos os dias que Deus os proteja e continue alegrando os seus corações. Sem vocês eu não conheceria o amor e não saberia como é a paz. Vocês são tudo para mim.

Agradeço a meu orientador, sem o qual esse trabalho não seria possível, Dr. Andrey Pupasov pelo empenho, pelo amplo suporte, pelas incansáveis correções e pelas palavras de incentivo a continuar buscando resultados mesmo quando eu dizia "Eu não sou capaz, estou perdendo tempo". Obrigado por contribuir na minha trajetória de construção dos saberes matemáticos-físicos dos mais elementares aos mais complexos. Obrigado também pela oportunidade de tornar um sonho real, poder pesquisar na área da mecânica quântica. Muito orgulho desse trabalho.

Agradeço aos professores da Banca Examinadora Dr. Alexei Deriglazov e Dr. Walberto Ramírez por cada um doar parte do seu precioso tempo para ler, analisar e sugerir modificações, com o intuito de tornar esse trabalho mais polido e científico.

Agradeço ao coordenador do Mestrado Dr. Eduard Toon pela atenção, suporte e compreensão nos momentos difíceis. Agradeço também a secretária do curso Paula Reis pela atenção e palavras de encorajamento durante esse período (secretária-psicóloga, deve ganhar aumento). Enfim, a cada um dos meus professores do Departamento de Matemática por me ajudarem nessa jornada.

Agradeço ao coordenador do Departamento de Ciências e Tecnologias e aos meus professores do curso de Matemática da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia de Jequié pelo suporte e palavras de encorajamento.

Agradeço a cada um dos meus colegas do mestrado, não citarei nomes pois são muitos e não quero que falte ninguém. Agradeço por cada dica, prova, lista, ajuda de todos os tipos. Durante os dois anos em que convivemos eu tive a oportunidade de construir boas lembranças com cada um de vocês (e olha que faltei vários rolês). Quero que saibam que vocês são muito especiais para mim pois fizeram parte de quantidade considerável de páginas do livro da minha vida. Muito obrigado a todos.

Agradeço a cada amigo e amiga da Igreja Nova Esperança pela torcida e orações.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

“Be the change that you wish to see in the world.”

— Mahatma Gandhi

RESUMO

Trabalhamos com equação de Schrödinger unidimensional estacionária escalar. Usamos o método das transformações de Darboux para estudar Hamiltonianos isospectrais e design espectral. Aplicamos a teoria da perturbação e o método variacional para analisar e comparar o comportamento do espectro de energia de algumas extensões racionais do oscilador. Estudamos os polinômios geradores dos propagadores das extensões racionais do oscilador harmônico.

Palavras-chave: Transformação de Darboux. Mecânica Quântica. Polinômios Excepcionais de Hermite. Teoria da Perturbação. Método Variacional. Propagador.

ABSTRACT

We work with scalar stationary one-dimensional Schrödinger equation. We used the Darboux transformation method to study isospectral Hamiltonians and spectral design. We applied the perturbation theory and the variational method to analyze and compare the behavior of the energy spectrum of some rational extensions of the oscillator. We studied the polynomials that generate the propagators of the rational extensions of the harmonic oscillator.

Key-words: Darboux Transformation. Quantum Mechanics. Exceptional Hermite Polynomials. Perturbation Theory. Variational Methods, Propagator.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Funções de onda do oscilador quântico (a) e suas probabilidades (b).	34
Figura 2 – Relação entre os espectros dos hamiltonianos parceiros H_1 e H_2	42
Figura 3 – Probabilidade de transição definida por $ K^{\{1,2\}}(X, Y; T) ^2$	62
Figura 4 – Probabilidade de transição definida por $ K^{\{2,3\}}(X, Y; T) ^2$	63
Figura 5 – Probabilidade de transição definida por $ K^{\{3,4\}}(X, Y; T) ^2$	64
Figura 6 – Correções de primeira (a) e segunda (b) ordem para $\sigma_1 = \{1, 2\}$	70
Figura 7 – Correções de primeira (a) e segunda (b) ordem para $\sigma_2 = \{2, 3\}$	70
Figura 8 – Correções de primeira (a) e segunda (b) ordem para $\sigma_3 = \{3, 4\}$	71
Figura 9 – Polos e raízes dos potenciais $V^\sigma(X)$, para σ_1 , σ_2 e σ_3 , respectivamente.	72
Figura 10 – Gráficos de $ V^{\sigma_1} $, $ V^{\sigma_2} $ e $ V^{\sigma_3} $, respectivamente.	72
Figura 11 – Gráficos de $E(l)$ para $\sigma = \{1, 2\}$	79
Figura 12 – Potencial, funções teste e auto-estado fundamental para $\sigma = \{1, 2\}$	80
Figura 13 – Gráficos de $E(l, x_0)$ para $\sigma = \{2, 3\}$	80
Figura 14 – Potencial, funções teste e auto-estado fundamental para $\sigma = \{2, 3\}$	81
Figura 15 – Gráficos de $E(l, x_0, a_c)$ para $\sigma = \{3, 4\}$	82
Figura 16 – Potencial, funções teste e auto-estado fundamental para $\sigma = \{3, 4\}$	82

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	PRELIMINARES	14
2.1	OPERADORES DIFERENCIAIS	14
2.2	PROBLEMA DE STURM-LIOUVILLE	16
2.3	EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER	18
2.4	POLINÔMIOS DE HERMITE	21
3	OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO	27
3.1	MÉTODO DOS OPERADORES ESCADA	28
3.2	MÉTODO DOS POLINÔMIOS DE HERMITE	30
4	TRANSFORMAÇÃO DE DARBOUX	35
4.1	TRANSFORMAÇÃO DE DARBOUX DE PRIMEIRA ORDEM	36
4.2	TRANSFORMAÇÃO DE DARBOUX DE SEGUNDA ORDEM	43
4.3	TRANSFORMAÇÃO DE DARBOUX DE N-ÉSIMA ORDEM	44
5	PROPAGADORES	48
5.1	DEFINIÇÃO E PROPRIEDADES	48
5.2	PROPAGADOR DO OSCILADOR HARMÔNICO	53
5.3	EXTENSÕES RACIONAIS DO OSCILADOR HARMÔNICO	54
5.3.1	Propagador para extensão racional do oscilador harmônico de um poço	61
5.3.2	Propagador para extensão racional do oscilador harmônico de dois poços	62
5.3.3	Propagador para extensão racional do oscilador harmônico de três poços	63
6	ESTUDO DE MÉTODOS APROXIMADOS NO CASO DE EXTENSÕES RACIONAIS DO OSCILADOR	65
6.1	TEORIA DA PERTURBAÇÃO ESTACIONÁRIA	65
6.2	MÉTODO VARIACIONAL	73
7	POLINÔMIOS DE CONEXÃO	84
8	CONCLUSÃO	86

REFERÊNCIAS	87
-----------------------	----

1 INTRODUÇÃO

O estudo da mecânica quântica remonta o descobrimento dos raios catódicos por Michael Faraday em 1838, passando pelas contribuições dos físicos Gustav Kirchhoff, Ludwig Boltzmann e, finalmente, chegando em Max Planck. Este último, introduziu a ideia de que a energia era quantizada. A chamada hipótese quântica de Planck, concebida no fim do século XIX, foi de extrema importância para a compreensão dos fenômenos observados na emissão de energia por corpos negros. Outros físicos como Albert Einstein, bem como Gilbert Lewis e Louis de Broglie foram os responsáveis em dar continuidade ao desenvolvimento desse novo e revolucionário ramo da física. Por exemplo, o postulado de Einstein sobre a luz, ou mais especificamente sobre toda a radiação eletromagnética. Em palavras, esse postulado declara que toda radiação eletromagnética pode ser dividida num número finito de "quanta de energia", os quais são localizados como pontos do espaço.

Em 1925, os sólidos pilares da mecânica quântica foram estabelecidos pelos físicos Werner Heisenberg, Max Born e Erwin Schrödinger. Os alemães Heisenberg e Born desenvolveram a mecânica matricial, enquanto o austríaco Schrödinger formulou a mecânica de ondas e a equação de Schrödinger não relativista (sua principal criação). As formulações desses cientistas foram baseadas nas aproximações da teoria de de Broglie. Assim nascia a mecânica quântica moderna. Uma interpretação mais recente do mundo quântico foi apresentada por Richard Feynman com suas integrais de caminho em 1948. Nos anos subsequentes (até a atualidade), o mundo quântico foi (e continua sendo) rigorosamente estudado e expandido com as importantes contribuições feitas pelos mais diversos grupos de pesquisas em torno do mundo. Atualmente, a física quântica é um campo sólido e suas principais divisões consistem na mecânica quântica, física de matéria condensada e teoria quântica de campos.

Neste trabalho consideramos o problema espectral para a equação de Schrödinger estacionária unidimensional. As auto-funções desse problema são chamadas de funções de onda estacionárias. Evolução temporânea de um estado quântico, definido por meio da equação de Schrödinger dependente de tempo, pode ser calculada usando a série de Fourier generalizada sobre funções de onda estacionárias (seguindo uma linha padrão do método de separação das variáveis, equivalente ao da equação do calor, por exemplo). Outra forma equivalente de resolução desse problema de valor inicial (Cauchy) para equação de Schrödinger dependente de tempo envolve uma solução fundamental que chama-se propagador. Por outro lado, um propagador, definido através de integral funcional de Feynman [27, 28, 58] sobre trajetórias, pode ser considerado como um objeto principal da mecânica quântica. O propagador determine uma amplitude de transição entre estados quânticos e equação de Schrödinger para função de onda poder ser deduzido começando com integral funcional de Feynman.

Especificamente, trabalhamos com as extensões racionais do oscilador harmônico quântico. O oscilador quântico constitui-se em um dos sistemas modelo mais relevante do "mundo das probabilidades". A característica marcante do oscilador é a simplicidade do seu potencial (uma parábola). Dado um potencial arbitrário $V(x)$, no espaço de D -dimensional, o primeiro termo da expansão de Taylor $V(x) - V(0) = \langle x, \partial_{ij}V(0)x \rangle + (ox^2)$ desse potencial, num ponto crítico estável $x = 0$, representa D osciladores Harmônicos sem acoplamento. Sempre é possível diagonalizar a matriz simétrica e constante $\partial_{ij}V(0)$. Na ausência de acoplamento podemos considerar $D = 1$, sem perda de generalidade. Levando em consideração que o oscilador harmônico é um dos modelos da mecânica quântica que admite soluções analíticas exatas podemos usar esse modelo como um ponto inicial para teoria de perturbação. É comum considerar os próximos termos de expansão de Taylor como uma interação (perturbação). Porém, frequentemente o método de aproximações de Padé, ou seja, uma substituição de somas parciais de serie de Taylor pelas funções racionais, permite uma representação de potencial mais eficiente. A classe de potencias correspondentes $V(x) = x^2 + Q_n(x)/P_m(x)$ chama-se as *extensões racionais*. Existe um subconjunto específico em relação as propriedades analíticas no plano complexo $x \rightarrow z \in \mathbb{C}$ entre todas as extensões racionais. Um Hamiltoniano (operador diferencial linear) $-\partial_x^2 + V(x)$ chama-se livre de monodromia se a continuação analítica $\psi(z, E)$ de um solução $\psi(x, E)$ é função univalente no plano complexo, ou seja soluções não tem pontos de ramificação para $z \in \mathbb{C}$. Oblomkov [64], trabalhando com operadores unidimensionais livre de monodromia (com potenciais racionais crescendo quadraticamente), prova que tais operadores podem ser obtidos a partir de $-\partial_x^2 + x^2$, por meio de um numero finito de transformações de Darboux. Nessa dissertação vamos estudar extensões racionais de oscilador harmônico livre de monodromia.

As transformações de Darboux são úteis no estudo de supersimetrias entre dois, ou mais sistemas quânticos. Em [5], Bagrov e Samsonov apresentam a transformação de Darboux como um caso particular das transformações de ordem N . Eles também mostram que os operadores dessa transformação sempre podem ser decompostos em um produto de N operadores de Darboux de primeira ordem. Em [68], Oeftiger, lidando com a mecânica quântica supersimétrica (MQ SUSY) não-relativística unidimensional, discute sobre o formalismo da transformação de Darboux e traz algumas aplicações (oscilador harmônico, potencial do poço quadrado infinito e do poço delta). A SUSY surgiu dentro da teoria de campos quânticos com o objetivo de relacionar férmions e bósons [32, 61, 62, 68, 77, 87, 88, 89].

Na ausência de monodromia, o problema de autovalor das extensões racionais de um oscilador admite soluções polinomiais onde surge uma nova classe de polinômios ortogonais. Os polinômios excepcionais de Hermite ou polinômios X-Hermite constituem um conjunto ortogonal completo. Por não conter os polinômios de todos os graus, os elementos desse conjunto são ditos excepcionais. O estudo dos polinômios X-Hermite é um

assunto recente mas já existe uma vasta literatura sobre o tema [20, 22, 31, 34, 35, 36, 39, 44, 53, 67, 76, 70, 73]. Analogamente a relação dos polinômios de Hermite com o oscilador quântico, tem-se a relação dos polinômios excepcionais de Hermite com extensões racionais desse oscilador. Para calcular os polinômios X-Hermite usamos o conceito de wronskiano aplicado a uma sequência de polinômios da classe Hermite. As sequências que trabalhamos são estritamente crescente de inteiros não-negativos de comprimento $2M$, chamadas de sequências de Krein–Adler. Cada sequência de Krein–Adler determina uma partição dupla. Por sua vez, as partições estão associadas a seus respectivos diagramas de Young. Nessa teoria, os diagramas de Young são usados para analisar, além de outras características, o determinante wronskiano dos polinômios de Hermite e suas raízes [11, 25, 34, 53]. Relações de recorrência para polinômios excepcionais de Hermite são apresentadas nos artigos [11, 12, 25, 34, 35, 53].

Modelos exatamente solúveis por polinômios são de extrema importância no estudo da mecânica quântica. Um sistema quântico é dito exatamente solúvel por polinômios quando existem duas funções e um polinômio de grau k , o polinômio depende de uma das funções, tal que o k -ésimo auto-estado desse sistema é o produto de um das funções (a qual o polinômio não depende) pelo polinômio. Em [35], os autores mostram que cada extensão racional do oscilador harmônico quântico exatamente solúvel por polinômios é livre de monodromias. No artigo [33] é considerado o problema do oscilador quântico com frequência quadrada (regular+aleatória) sujeita a forças externas em uma estrutura de representação de funções de onda por processos aleatórios com valores complexos. Em [56] é proposto uma nova abordagem para problemas de solubilidade quase-exatas da mecânica quântica. Os autores também mostram que a equação de Schrödinger, quase-exatamente solúvel, pode ser obtida completamente da equação integral de Gaudin no sentido de separação parcial das variáveis.

Machnikowski em [55] apresenta vários métodos para resolver problemas exatamente solúveis da mecânica quântica. Essa tese possui duas partes, a primeira apresenta os métodos usados desde o surgimento desse campo na mecânica quântica, o segundo dedica-se a apresentar os novos métodos, os quais lidam com modelos quase-exatamente solúveis. Fernández em [26] considera modelos da mecânica quântica exatamente solúveis como funções de energia potencial que exibem dependência exponencial das coordenadas. Em [8], os autores examinam o hamiltoniano não-hermitiano $H = p^2 + x^2(ix)^\epsilon$ para o limite $\epsilon \rightarrow \infty$ e mostram que, nesse limite, a teoria torna-se exatamente solúvel. Além disso, provam que a generalização desse hamiltoniano, dada por $H = p^2 + x^{2M}(ix)^\epsilon$, também torna-se exatamente solúvel para ϵ grande. Finalmente, Sasaki em [80], faz uma revisão ampla sobre a mecânica quântica exatamente solúvel. Seu foco está nas recentes descobertas dos polinômios ortogonais multi-indexados.

O presente trabalho está dividido em sete capítulos, sendo o primeiro a introdução.

O segundo capítulo é dedicado a alguns conteúdos básicos, mas fundamentais para o desenvolvimento do trabalho. Especificamente, expomos o conceito de operadores diferenciais, o problema de Sturm-Liouville, a equação de Schrödinger e os polinômios de Hermite. No terceiro capítulo, aplicamos dois métodos distintos para resolver o problema do oscilador quântico. Primeiro, usamos o método algébrico (por operadores escadas), em seguida, aplicamos o método analítico (com polinômios de Hermite). As transformações de Darboux de primeira, segunda e N -ésima ordens são apresentadas no quarto capítulo. Para a transformação de Darboux de 1ª ordem, nós mostramos seu efeito (deformação) sobre o espectro do oscilador. O conceito de propagador é apresentado no quinto capítulo, onde são obtidas as extensões racionais do oscilado com parâmetros físicos. Nossas principais contribuições são dadas nos dois últimos capítulos. No sexto capítulo, aplicamos a teoria da perturbação e o método variacional para analisar e comparar o comportamento do espectro de energia de algumas extensões racionais do oscilador. Finalmente, no sétimo capítulo apresentamos um lema sobre os graus dos polinômios de conexão não-linear.

2 PRELIMINARES

2.1 OPERADORES DIFERENCIAIS

A interpretação dos fenômenos da mecânica quântica está intimamente relacionado com a compreensão do conceito de operador diferencial, uma vez que eles são os entes matemáticos que representam tais fenômenos. Sendo assim, faz-se necessário uma breve apresentação dos mesmos.

Na matemática, um operador diferencial é definido como uma função do operador de diferenciação ∂ e da variável em relação a qual realiza-se tal diferenciação. Aqui, vamos representar o operador diferencial de ordem n , na variável x , da seguinte forma

$$\hat{P}(x, \partial) = a_0(x) + a_1(x)\partial_x + a_2(x)\partial_x^2 + \dots + a_n(x)\partial_x^n, \quad (2.1)$$

onde ∂_x^n denota a n -ésima derivada em relação a x e os coeficientes $a_i(x)$ são funções suaves em x .

O operador diferencial $\hat{P}(x, \partial)$ age do espaço das funções \mathcal{F} para o espaço das funções $\tilde{\mathcal{F}}$ da seguinte forma

$$\begin{aligned} \hat{P}(x, \partial) : \mathcal{F} &\longrightarrow \tilde{\mathcal{F}} \\ \hat{P}(x, \partial)[f] &= a_0f + a_1\partial_x f + a_2\partial_x^2 f + \dots + a_n\partial_x^n f = \tilde{f} \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde $f \in \mathcal{F}$ e $\tilde{f} \in \tilde{\mathcal{F}}$. Os espaços das funções são também conhecidos como espaços dos funcionais lineares. Nesse trabalho, vamos usar o espaço das funções quadrado integráveis e duas vezes diferenciáveis, ou simplesmente, o espaço de Hilbert, denotado por \mathcal{H} .

Note que, $\hat{P}(x, \partial)$ é uma transformação linear, isto é, ele cumpre as seguintes relações de soma e produto por "escalar"

$$\begin{aligned} \hat{P}[f + g] &= \hat{P}[f] + \hat{P}[g], \\ \hat{P}[\alpha f] &= \alpha \hat{P}[f], \end{aligned}$$

onde $f, g \in \mathcal{H}$ e α é uma função escalar.

Sejam $\hat{P}(x, \partial)$ e $\hat{Q}(x, \partial)$ operadores diferenciais de ordem n e m , respectivamente. O produto $\hat{P}\hat{Q}$ é definido como o operador que gera o mesmo resultado obtido ao aplicar o operador \hat{Q} seguido pelo operador \hat{P} . Sendo assim, a aplicação $\hat{P}\hat{Q}$ consiste na composição de transformações lineares, isto é, $\hat{P}\hat{Q}[f] = \hat{P}(\hat{Q}[f])$. O produto de dois operadores diferenciais sempre existe e é um operador diferencial. Se os coeficientes de $\hat{P}(x, \partial)$ e $\hat{Q}(x, \partial)$ são constantes então $\hat{P}(\partial)\hat{Q}(\partial) = \hat{Q}(\partial)\hat{P}(\partial)$. Mas, se tais coeficientes dependem da variável x então $\hat{P}(x, \partial)\hat{Q}(x, \partial) \neq \hat{Q}(x, \partial)\hat{P}(x, \partial)$. Esse fato é verdadeiro porque x e ∂ não comutam, uma vez que $x\partial \neq 1 + x\partial = \partial x$. Isso nos garante varias possibilidades de escrever o produto de operadores por meio de x e ∂ . Como ilustração podemos considerar

$\hat{P}(x, \partial) = a_0(x) + a_1(x)\partial_x$ e $\hat{Q}(x, \partial) = b_0(x) + b_1(x)\partial_x$, assim

$$\begin{aligned}\hat{P}\hat{Q} &= (a_0 + a_1\partial_x)(b_0 + b_1\partial_x) \\ &= a_0b_0 + a_0b_1\partial_x + a_1b_0\partial_x + a_1b_1\partial_x^2 + a_1b_1'\partial_x \\ &= a_0b_0 + a_1b_1' + (a_0b_1 + a_1b_0 + a_1b_1')\partial_x + a_1b_1\partial_x^2.\end{aligned}$$

Note que, $\partial_x b_i = b_i' + b_i \partial_x$, onde o prima denota a derivada total em relação a x .

Ao trabalhar com operadores faz-se necessário estabelecer o conceito de operador adjunto. Assim, sejam \mathbf{V} e \mathbf{W} espaços vetoriais munidos de produto interno. Dados os operadores T e S , agindo como segue

$$T : \mathbf{V} \longrightarrow \mathbf{W} \quad \text{e} \quad S : \mathbf{W} \longrightarrow \mathbf{V},$$

dizemos que S é o operador adjunto de T , se ele cumpre a condição

$$\langle T v, w \rangle = \langle v, S w \rangle, \quad \forall v \in \mathbf{V} \text{ e } \forall w \in \mathbf{W}.$$

Denotamos $S = T^+$. Quando $S = T$ dizemos que T é auto-adjunto. Portanto, o operador adjunto de \hat{P} , denotado por \hat{P}^+ , deve cumprir a condição

$$\langle \hat{P}f, \tilde{f} \rangle = \langle f, \hat{P}^+ \tilde{f} \rangle,$$

onde o produto interno utilizado é definido no espaço das funções quadrado integráveis em um domínio aberto D , $L^2(D)$, definido por

$$\langle f, g \rangle := \int_D f^* g \, dx, \tag{2.3}$$

com as funções f e g pertencendo a $L^2(D)$ e f^* denotando o complexo conjugado de f .

A seguir apresentamos três dos mais comuns e importantes operadores diferenciais na matemática e física.

Exemplo 1: Operador Del (ou Nabla)

$$\nabla = \sum_{i=1}^n \vec{e}_i \partial_{x_i}$$

onde $\vec{e}_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ é o n -ésimo vetor da base canônica do espaço euclidiano.

Exemplo 2: Operador de Laplace (ou Laplaciano)

$$\Delta = \sum_{i=1}^n \partial_{x_i}^2$$

onde $\Delta = \nabla^2$.

Exemplo 3: Operador de Homogeneidade (ou Teta)

$$\Theta = \sum_{i=1}^n x_i \partial_{x_i}$$

o auto-espaço desse operador é o espaço dos polinômios homogêneos.

Um pouco de Álgebra Avançada. Na matemática, a álgebra de Weyl é um anel de operadores diferenciais com coeficientes polinomiais. Hermann Weyl introduziu essa álgebra para o estudo da incerteza de Heisenberg na mecânica quântica. Explicitamente, seja \mathcal{P} a abreviação para o anel $(\mathcal{P}, \oplus, \otimes)$. Denotamos o anel de operadores diferenciais polinomiais sobre \mathcal{P} nas variáveis x e ∂_x por $(\mathcal{P}[x, \partial_x], \oplus, \otimes)$ ou apenas $\mathcal{P}[x, \partial_x]$. Os elementos de $\mathcal{P}[x, \partial_x]$ são dados pela equação (2.1). Dessa forma, x e ∂_x geram a chamada primeira álgebra de Weyl. Existe uma família infinita de álgebras de Weyl e a n -ésima, $\mathcal{P}[x_1, \dots, x_n, \partial_{x_1}, \dots, \partial_{x_n}]$, é gerada por $x_1, \dots, x_n, \partial_{x_1}, \dots, \partial_{x_n}$. Considerando o ideal I , gerado pelo elemento $\partial_x x - x \partial_x - 1$, podemos definir o anel quociente da primeira álgebra de Weyl

$$\frac{\mathcal{P}[x, \partial_x]}{I},$$

chamado anel dos operadores diferenciais polinomiais não-comutativo. Cada um de seus elementos podem ser escrito de forma única como uma combinação \mathcal{P} -linear dos monômios $x^k \partial_x^l \mod I$. Analogamente, considerando o ideal I , gerado pelos elementos $\partial_{x_i} x_j - x_j \partial_{x_i} - \delta_{ij}, \partial_{x_i} \partial_{x_j} - \partial_{x_j} \partial_{x_i}, x_i x_j - x_j x_i, \forall 0 \leq i, j \leq n$, podemos definir o anel quociente da n -ésima álgebra de Weyl

$$\frac{\mathcal{P}[x_1, \dots, x_n, \partial_{x_1}, \dots, \partial_{x_n}]}{I},$$

chamado anel dos operadores diferenciais polinomiais multivariantes não-comutativo. Cada um de seus elementos podem ser escrito de forma única como uma combinação \mathcal{P} -linear dos monômios $x_1^{k_1} \dots x_n^{k_n} \partial_{x_1}^{l_1} \dots \partial_{x_n}^{l_n} \mod I$.

2.2 PROBLEMA DE STURM-LIOUVILLE

Um operador diferencial muito especial é o operador de Sturm-Liouville que trataremos agora.

No estudo das equações diferenciais é bem conhecida a equação diferencial linear de segunda ordem (ver [2], [82], [84], [90])

$$- [p(x)y'(x)]' + q(x)y(x) = \lambda\omega(x)y(x), \quad x \in [a, b], \quad (2.4)$$

onde as funções q e $\omega > 0$ são contínuas em $[a, b]$ e $p \in \mathcal{C}^1[a, b]$, ou seja, p é diferenciável com derivada contínua no intervalo $[a, b]$. Aqui a função ω é chamada de função peso e o prima denota a derivada com relação a x . O problema espectral (2.4) juntamente com condições de fronteiras (com derivada e ponto) é chamado de *Problema de Sturm-Liouville* (S-L).

Na literatura, chamamos de *Problema de S-L Regular* o problema formado pela equação (2.4) juntamente com as condições de contorno

$$\begin{aligned}\alpha_1 y(a) + \alpha_2 y'(a) &= 0, & \alpha_1^2 + \alpha_2^2 &\neq 0, & \alpha_1, \alpha_2 &\in \mathbb{R} \\ \beta_1 y(b) + \beta_2 y'(b) &= 0, & \beta_1^2 + \beta_2^2 &\neq 0, & \beta_1, \beta_2 &\in \mathbb{R}.\end{aligned}\tag{2.5}$$

Essa nomenclatura é uma homenagem aos franceses contemporâneos do século XIX, Jacques Charles François Sturm e Joseph Liouville.

Podemos obter o problema de autovalor de S-L a partir da equação (2.4), para isso, definimos o operador de Sturm-Liouville

$$\mathcal{L} := -\frac{1}{\omega} \left(\frac{d}{dx} \left[p \frac{d}{dx} \right] + q \right).\tag{2.6}$$

Dessa forma, reescrevemos a equação (2.4) na forma mais curta, ou seja, na seguinte equação de autovalor

$$\mathcal{L} y = \lambda y.\tag{2.7}$$

Da Álgebra Linear, é bem conhecido que λ é um autovalor do operador \mathcal{L} se o problema de S-L admitir solução não-trivial, $y \neq 0$, duas vezes diferenciáveis em $[a, b]$. Nessas condições, diremos que y é uma autofunção de \mathcal{L} associada a λ . Note que, $y \neq 0$ sempre que $\det(\mathcal{L} - \lambda I) = 0$.

O problema de autovalor de S-L é especialmente útil no estudo das soluções de equações diferenciais parciais tais como equação do calor, equação de onda, equação de Laplace, etc, uma vez que essas EDP's podem ser reduzidas a equação de S-L por meio do método da separação de variáveis. Nesse caso, o parâmetro espectral λ é a constante de separação do método.

O espaço das autofunções do problema de S-L é o espaço das funções quadrado integráveis duas vezes diferenciáveis no intervalo (a, b) , representamos por $(\mathbb{L}^2, (a, b)) \cup C^2(a, b)$, o seu produto interno leva em conta a função peso e é definido da seguinte forma

$$\langle y_1, y_2 \rangle = \int_a^b y_1^* y_2 \omega dx,\tag{2.8}$$

onde as funções y_1 e y_2 são soluções do problema de S-L, ω é a função peso da Eq.(2.4) e y^* denota o complexo conjugado de y .

Abaixo, resumimos em um único teorema, algumas das principais propriedades do operador \mathcal{L} , dos seus autovalores e das suas autofunções.

Teorema 2.2.1 *O problema de S-L, tal qual apresentado acima, tem as seguintes propriedades:*

1. \mathcal{L} é auto-adjunto;

2. todos os autovalores λ são reais de multiplicidade um;
3. autofunções associadas a autovalores distintos são ortonormais em relação a ω ;
4. As autofunções normalizadas formam uma base ortonormal do espaço de Hilbert;

A prova da maioria dessas propriedades podem ser encontradas em [2, 82, 84, 90]. Por autofunções normalizadas queremos dizer

$$\|y\|_{L_2} = \int_a^b y^* y \omega dx = \int_a^b |y|^2 \omega dx = 1, \quad (2.9)$$

onde $\|\cdot\|_{L_2}$ denota a norma do espaço de Hilbert.

O estudo do problema de S-L foi muito importante para o desenvolvimento da matemática, em especial, para a Análise Funcional. Ressaltamos que existem vários outros resultados muito importantes da Teoria de S-L mas a discussão dos mesmos, foge ao objetivo do presente trabalho. Para ver tais resultados, basta consultar as referências mencionadas no texto acima.

2.3 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

No estudo da mecânica quântica há um operador diferencial análogo ao operador de Sturm-Liouville, obtido da equação de Schrödinger. Tal operador e equação são os objetos de estudo da presente seção.

Os estados físicos dos sistemas quânticos são descritos pelas funções de onda ou funções de estado $\Psi(t, x) : (a, b) \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$. A descrição quântica é probabilística, ou seja, o quadrado do módulo da função de onda $|\Psi(t, x)|^2 = \rho(x, t)$ determina a densidade de probabilidade de observar a "partícula" na posição x no instante t .

A equação fundamental da mecânica quântica não-relativística que descreve a função de onda foi descoberta pelo físico austríaco Erwin Schrödinger e ela declara que

$$i\hbar\partial_t\Psi(x, t) = \hat{H}\Psi(x, t) \quad (2.10)$$

onde i é a unidade imaginária, \hbar é a constante de Planck reduzida, t é o tempo, x é a coordenada do espaço e \hat{H} é o operador Hamiltoniano. Chamamos essa equação de equação de Schrödinger dependente do tempo. A partir dela, podemos obter o seguinte operador diferencial

$$\mathbb{L} = \hat{H} - i\hbar\partial_t \quad (2.11)$$

chamado operador de Schrödinger dependente do tempo. O Hamiltoniano quântico \hat{H} é definido da seguinte maneira

$$\hat{H}(\hat{x}, t) := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\hat{x}, t), \quad (2.12)$$

no qual, Δ é o operador de Laplaciano (**Exemplo 2**) e $V(\hat{x}, t)$ é o potencial do sistema quântico. Alternativamente, podemos escrever o operador diferencial \hat{H} em função do operador momento \hat{p} , na forma

$$\hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}, t). \quad (2.13)$$

Relembre que o operador momento é definido como $\hat{p} := -i\hbar\nabla$, onde ∇ é o operador Del (**Exemplo 1**). O Hamiltoniano cumpre as condições de linearidades, ou seja, ele é um operador linear. Na mecânica quântica é comum usar apenas o Hamiltoniano Hermitiano, isto é, o Hamiltoniano auto-adjunto ($\hat{H} = \hat{H}^+$). O presente trabalho segue essa mesma direção e, além disso, usa apenas potenciais independentes do tempo, ou seja, $V(\hat{x})$, chamados potenciais estacionários.

Vamos analisar a equação de Schrödinger dependente do tempo mais simples, caso unidimensional com potencial estacionário. Sobre essas condições a equação (2.10) tem a forma

$$i\hbar\partial_t\Psi(x, t) = H_0\Psi(x, t), \quad x \in (a, b) \in \mathbb{R}, \quad (2.14)$$

onde $H_0 = -(\hbar^2/2m)\partial_x^2 + V_0(x)$ é o Hamiltoniano inicial com potencial estacionário inicial. Dizemos que essa equação descreve uma partícula quântica que se move no intervalo (a, b) com energia potencial $V_0(x)$.

A equação (2.14) é uma equação diferencial parcial e, portanto, podemos tentar resolvê-la utilizando o método das variáveis separáveis. Para isso, vamos definir a função de estado $\Psi(x, t)$ da seguinte forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t). \quad (2.15)$$

Substituindo essa igualdade na Eq.(2.14), obtemos

$$i\hbar\partial_t [\psi(x)\varphi(t)] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_0(x) \right] [\psi(x)\varphi(t)].$$

Expandindo ambos os membros dessa equação e em seguida dividindo-os por $\psi(x)\varphi(t)$, encontramos

$$\frac{i\hbar}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0(x).$$

Observe que, essa igualdade só faz sentido se ambos os lados forem uma constante pois, claramente, o primeiro membro depende apenas de t e o segundo membro depende apenas de x . Sendo assim, vamos chamar tal constante de E . Dessa forma, o primeiro membro produz

$$\frac{i\hbar}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} = E,$$

ou melhor,

$$\frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}.$$

Essa é uma equação diferencial ordinária simples, para resolvê-la, sem o rigor matemático, basta multiplicá-la por dt e integrá-la em relação a variável t . Fazendo isso e simplificando, obtemos

$$\varphi(t) = \varphi_0 e^{-\frac{iE}{\hbar}t}, \quad (2.16)$$

na qual φ_0 é uma constante arbitrária ou dependente das condições iniciais do problema (condições de contorno). Já o segundo membro gera

$$-\frac{\hbar^2}{2m\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0(x) = E \implies -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0(x)\psi = E\psi(x),$$

ou simplesmente,

$$H_0\psi(x) = E\psi(x). \quad (2.17)$$

Esse é, portanto, uma problema de autovalor. Chamamos (2.17) de equação de Schrödinger independente do tempo (nesse trabalho, vamos chamá-la simplesmente de *equação de Schrödinger*). Da equação de Schrödinger faz sentido chamarmos a função de onda ψ de autofunção de H_0 associada ao autovalor E . A equação(2.17) admite um conjunto infinito de autofunções, $\psi_n(x)$, e cada uma delas esta associada a um autovalor correspondente E_n ($n = 0, 1, 2, \dots$). O conjunto dos autovalores forma o espectro do sistema físico. Na mecânica quântica o espectro pode ser contínuo ou discreto. Para simplificar nossa apresentação, vamos considerar apenas o caso do espectro discreto (uma vez que o espectro do oscilador harmônico quântico é discreto).

A possibilidade de obter energias discretas explica vários fenômenos experimentais. Alguns exemplos são o conjunto de linhas espectrais característico de cada elemento químico (os átomos de cada elemento absorvem e emitem luz em comprimentos de onda específicos), cordas vibrantes, micro-ondas em uma cavidade de metal, ondas sonoras em uma estrela pulsante e ressonâncias na física de partículas de alta energia. Os operadores momento e posição, bem como a combinação deles (oscilador, por exemplo) também possuem espectro discreto. O átomo de hidrogênico é um caso especial porque seu espectro é dividido em duas parte, a discreta e a contínua, a parte contínua corresponda a sua energia de ionização.

Uma propriedade muito importante sobre as soluções da equação de Schrödinger é seguinte. As funções de estado formam um conjunto ortonormal, isto é, elas satisfazem a seguinte relação de ortonormalidade

$$\langle \psi_m(x), \psi_n(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn}, \quad (2.18)$$

onde δ_{mn} é o delta de Kroneker. Nas próximas seções discutiremos mais algumas das características dessas soluções e das constantes E_n (níveis de energia). Mas agora, dos resultados obtidos podemos reescrever a Eq.(2.15) como a seguinte combinação linear

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i\hbar^{-1}E_n t}. \quad (2.19)$$

Um problema de valor inicial interessante envolvendo a Eq.(2.10) é o problema de Cauchy. Esse problema consiste em encontrar a função de onda $\Psi(x, t)$ com a condição inicial $\Psi(x, 0) = \Psi_0(x)$, ou seja,

$$\Psi_0(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x). \quad (2.20)$$

Note que, a constante c_n pode ser encontrada fazendo

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) \Psi_0(x) dx = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) \psi_n(x) dx = c_n \delta_{mn}. \quad (2.21)$$

Logo, o pacote de onda dado pela Eq.(2.19) pode ser reescrito na forma

$$\Psi(x, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(y) \Psi_0(y) dy \right) \psi_m(x) e^{-\frac{iE_m t}{\hbar}},$$

ou ainda,

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{m=0}^{\infty} \psi_m(y) \psi_m(x) e^{-\frac{iE_m t}{\hbar}} \right) \Psi_0(y) dy. \quad (2.22)$$

O termo entre parenteses dessa equação é conhecido como o propagador $K(x, y; t)$ da equação de Schrödinger dependente do tempo, ele cumpre

$$(i\hbar\partial_t - H_0)K(x, y; t) = 0, \quad K(x, y; 0) = \delta(x - y), \quad (2.23)$$

onde $\delta(x - y)$ é a função delta de Dirac. O propagador $K(x, y; t)$, também chamado de função de Green, é uma função que fornece a amplitude de probabilidade de uma partícula deslocar-se de um ponto á outro do espaço em um dado intervalo de tempo.

Obter o propagador é o objeto principal dessa teoria. Ele pode ser calculado usando as integrais de caminho de Feynman. O método das integrais de caminho foi introduzido por Feynman em seu artigo de 1948 [27]. Seu livro [28] (edição recente), produzido juntamente com Hibbs, também apresenta essa nova abordagem da mecânica quânticas. Feynman postula a seguinte relação

$$K(x, y; t) = A(t) \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{k=N} S_k[x_k(t_k)] \right] dx_1 \cdots dx_N, \quad (2.24)$$

na qual $A(t)$ é a constante de normalização (dependente apenas do tempo) e $S_k[x_k(t_k)] = \int L(x_k, \dot{x}_k, t_k) dt_k$ é a ação clássica associada a k -ésima parte da trajetória $x(t)$. Assim, ele conclui que cada caminho possível contribui de maneira igual para a amplitude mas a fase esta relacionada à ação clássica de cada trajetória. Formas alternativas para chegar ao propagador são apresentadas em [7] (método de Schwinger, método algébrico e método das integrais de caminho). Propagador é o assunto do Capítulo 5.

2.4 POLINÔMIOS DE HERMITE

Na matemática, os polinômios de Hermite formam uma importante sequência de polinômios ortonormais. Os polinômios de Hermite surgem nas mais variadas áreas do

conhecimento humanos, tais como probabilidade, combinatória, análise numérica, teoria dos sistemas, teoria das matrizes aleatórias e na física. Embora essa classe de polinômios leva o nome do matemático francês Charles Hermite, originalmente, eles foram definidos por Pierre Simon Laplace em 1810 e, posteriormente, estudado com mais detalhe pelo matemático russo Pafnuty Chebyshev em 1859. As principais contribuições de Hermite foram dadas em suas publicações de 1865 quando ele definiu tais polinômios em múltiplas dimensões.

Os polinômios de Hermite podem ser padronizados de duas formas diferentes. Na forma probabilística e na forma física. No presente trabalho vamos usar a forma probabilística. Os polinômios de Hermite probabilísticos são definidos da seguinte forma

$$He_n(x) := (-1)^n e^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad (2.25)$$

já os polinômios de Hermite físicos são dados por

$$H_n(x) := (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}. \quad (2.26)$$

Essas definições não são idênticas mas uma é o reescalonamento da outra, ou seja, essas definições se relacionam pelas equações

$$He_n(x) = 2^{-\frac{n}{2}} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right) \quad \text{e} \quad H_n(x) = 2^{\frac{n}{2}} He_n(\sqrt{2}x). \quad (2.27)$$

O n -ésimo polinômio de Hermite tem grau n e o coeficiente do seu monômio dominante é igual a um para a forma probabilística e igual a dois elevado a n para a forma física. A Tabela 1 ilustra os oito primeiros polinômios de Hermite probabilístico (á esquerda) e físico (á direita). As funções de densidade para a distribuição de probabilidade normal padrão desses polinômios são, respectivamente

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \quad \text{e} \quad \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}, \quad (2.28)$$

ambos com valor esperado 0 e variância 1.

$He_0(x) = 1$	$H_0(x) = 1$
$He_1(x) = x$	$H_1(x) = 2x$
$He_2(x) = x^2 - 1$	$H_2(x) = 2^2 x^2 - 2$
$He_3(x) = x^3 - 3x$	$H_3(x) = 2^3 x^3 - 12x$
$He_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3$	$H_4(x) = 2^4 x^4 - 48x^2 + 12$
$He_5(x) = x^5 - 10x^3 + 15x$	$H_5(x) = 2^5 x^5 - 160x^3 + 120x$
$He_6(x) = x^6 - 15x^4 + 45x^2 - 15$	$H_6(x) = 2^6 x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$
$He_7(x) = x^7 - 21x^5 + 105x^3 - 105x$	$H_7(x) = 2^7 x^7 - 1344x^5 + 3360x^3 - 1680x$

Tabela 1 – Os oito primeiros polinômios de Hermite.

Ambas as padronizações dos polinômios de Hermite pertencem ao espaço das funções quadrado integráveis, logo, elas cumprem a relação

$$\langle H(x), H(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |H(x)|^2 \omega(x) dx < \infty, \quad (2.29)$$

onde o produto interno utilizado é o definido na equação (2.3), incluindo as respectivas funções pesos dos polinômios de Hermite probabilístico e físico, $\omega(x)$. Denotamos tal espaço por $L^2(\mathbb{R}, \omega(x) dx)$.

Os polinômios de Hermite formam uma base ortogonal completa do espaço de Hilbert. Uma base ortogonal no espaço de Hilbert é uma família de elementos em \mathcal{H} que satisfazem as condições de ortogonalidade e completude.

Os polinômios de Hermite são ortogonais com relação as suas respectivas funções peso, isto é, para a versão probabilística vale

$$\int_{-\infty}^{\infty} He_m(x) He_n(x) \omega_{e_n}(x) dx = \sqrt{2\pi} n! \delta_{mn} \quad (2.30)$$

onde $\omega_{e_n}(x) := e^{-\frac{x^2}{2}}$ é a função peso dos polinômios de Hermite probabilístico e δ_{mn} é o delta de Kroneker, enquanto que, para a versão física vale

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x) \omega_n(x) dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{mn} \quad (2.31)$$

com sua função peso dada por $\omega_n(x) := e^{-x^2}$.

Os polinômios de Hermite são completos, isto é, eles formam uma família densa em \mathcal{H} . Assim, dizemos que o fechamento do conjunto formado pelos polinômios de Hermite é o próprio espaço de Hilbert.

Uma base ortogonal completa em \mathcal{H} é um sistema ortogonal completo, isso significa que a função nula é a única função em \mathcal{H} ortogonal a todas as demais função do sistema. Matematicamente, dada a função $f(x) \in \mathcal{H}$ tal que

$$\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f g^* dx = 0 \quad \forall g(x) \in \mathcal{H}, \quad \text{então} \quad f(x) = 0. \quad (2.32)$$

Uma demonstração desse fato pode ser dada utilizando a função inteira. Não faremos essa demonstração aqui.

A equação diferencial de Hermite é uma edo de segunda ordem que define um problema de autovalores. Tal problema é expresso por

$$(\omega(x) \phi'(x))' = -\lambda \omega(x) \phi(x), \quad (2.33)$$

onde λ é uma constante e o prima denota derivada em relação a x . Essa equação possui uma singularidade irregular no infinito, equivalentemente, a função ϕ deve satisfazer condições de contorno em que ela seja um polinômio limitado no infinito. Sob essas condições de

fronteira a equação diferencial de Hermite tem solução apenas quando a constante λ é inteira com $\lambda \geq 0$. Nesse caso, dependendo da função peso $\omega(x)$, a solução dessa equação é dada por $\phi(x) = He_\lambda(x)$ ou $\phi(x) = H_\lambda(x)$. Agora, reescrevendo a equação (2.33) de forma simplificada, encontramos

$$-\phi'' - \frac{\omega'}{\omega} \phi' = \lambda \phi,$$

logo, vemos facilmente que, tal equação nos fornece um operador diferencial de segunda ordem chamado operador diferencial de Hermite que definimos por

$$L = -\partial_x^2 - \frac{\omega'}{\omega} \partial_x. \quad (2.34)$$

As autofunções desse operador, associadas aos seus respectivos autovalores inteiros não-negativos λ , são as soluções da equação de Hermite, ou seja, são os polinômios de Hermite.

Os polinômios de Hermite satisfazem importantes relações de recorrência. Nesse trabalho, destacamos as que acreditamos ser as mais importantes.

Os polinômios de Hermite forma uma sequência de Appell, isto é, eles constituem uma sequência que compre com as identidades

$$He'_n(x) = nHe_{n-1}(x), \quad H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x). \quad (2.35)$$

Além disso, os polinômios probabilístico e físico de Hermite satisfazem, respectivamente, as seguintes relações de recorrência

$$He_{n+1}(x) = xHe_n(x) - nHe_{n-1}(x), \quad H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x). \quad (2.36)$$

Esse é um dos métodos mais eficientes e simples para obter uma sequência de polinômios de Hermite. Note que, das duas igualdades em (2.35) podemos reescrever as duas equações em (2.36) como segue

$$He_{n+1}(x) = xHe_n(x) - He'_n(x), \quad H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - H'_n(x), \quad (2.37)$$

Assim, temos duas formas alternativas para calcular sequências de polinômios de Hermite. Essa classe de polinômios também pode ser dada pelas séries

$$He_n(x) = \sum_{k=0}^n he_{n,k} x^k \quad \text{e} \quad H_n(x) = \sum_{k=0}^n h_{n,k} x^k, \quad (2.38)$$

cujos coeficientes $he_{n,k}$ e $h_{n,k}$ obedecem as relações de recorrências

$$he_{n+1,k} = \begin{cases} -nhe_{n-1,k} & k = 0 \\ he_{n,k-1} - nhe_{n-1,k} & k > 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad h_{n+1,k} = \begin{cases} -h_{n,k+1} & k = 0 \\ 2h_{n,k-1} - (k+1)h_{n,k+1} & k > 0, \end{cases}$$

com $he_{0,0} = 1$, $he_{1,0} = 0$, $he_{1,1} = 1$, $h_{0,0} = 1$, $h_{1,0} = 0$ e $h_{1,1} = 2$. Podemos escrever também

$$He_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k n! x^{n-2k}}{2^k k! (n-2k)!} \quad \text{e} \quad H_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k n! (2x)^{n-2k}}{k! (n-2k)!}, \quad (2.39)$$

onde $\lfloor n/2 \rfloor$ é o maior inteiro menor do que ou igual a $n/2$. Essas últimas séries são soluções da equação de Hermite para $\lambda = 2n$.

As funções geratrizes exponenciais dos polinômios de Hermite são definidas pelas seguintes somas infinitas

$$R_p[t, x] = e^{xt-t^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} He_n(x) \frac{t^n}{n!}, \quad R_f[t, x] = e^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}, \quad (2.40)$$

onde R_p e R_f denotam as funções geradoras dos polinômios de Hermite probabilístico e físico, respectivamente. Vamos fazer a demonstração dessas igualdades para o caso probabilístico. O caso físico pode ser encontrado em livros texto sobre o assunto. Sendo assim, temos que

$$\begin{aligned} e^{xt-t^2/2} &= e^{xt} e^{-t^2/2} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(tx)^m}{m!} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-t^2/2)^k}{k!} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^m x^m}{m!} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k t^{2k}}{2^k k!} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^m t^{m+2k}}{2^k k! m!} \end{aligned}$$

agora, tomando $n = m + 2k$, obtemos

$$\begin{aligned} e^{xt-t^2/2} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k x^{n-2k} t^n}{2^k k! (n-2k)! n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k n! x^{n-2k} t^n}{2^k k! (n-2k)! n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} He_n(x) \frac{t^n}{n!}, \end{aligned}$$

a última igualdade foi obtida usando a primeira das equações em (2.39). A demonstração dessa relação, no sentido oposto, também pode ser facilmente realizada.

Para finalizar sobre polinômios de Hermite, falaremos sobre sua forma generalizada. Vimos que os polinômios de Hermite probabilísticos são ortogonais com respeito a distribuição normal, cuja função de densidade tem variância 1. Agora, iremos generalizar a definição desses polinômios para o caso em que a variância é um número positivo qualquer, α . Sendo assim, os polinômios de Hermite generalizados (probabilísticos) são definidos da seguinte maneira

$$He_n^{[\alpha]}(x) = \left(\frac{\alpha}{2}\right)^{\frac{n}{2}} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2\alpha}}\right). \quad (2.41)$$

Tais polinômios são ortogonais com respeito a distribuição de probabilidade normal padrão cuja função de densidade é dada por

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}, \quad (2.42)$$

onde o número positivo α é a sua variância. Analogamente a primeira equação em (2.38), temos a seguinte representação em série para os polinômios de Hermite generalizados

$$He_n^{[\alpha]}(x) = \sum_{k=0}^n he_{n,k}^{[\alpha]} x^k, \quad (2.43)$$

onde $he_{n,k}^{[\alpha]} := \alpha^{\frac{n-k}{2}} he_{n,k}$, para verificar isso, podemos usar a equação (2.41) e, em seguida, a primeira equação em (2.38) da seguinte forma

$$\begin{aligned} He_n^{[\alpha]}(x) &= \alpha^{\frac{n}{2}} He_n \left(\frac{x}{\sqrt{\alpha}} \right) \\ &= \alpha^{\frac{n}{2}} \sum_{k=0}^n he_{n,k} \left(\frac{x}{\sqrt{\alpha}} \right)^k \\ &= \alpha^{\frac{n}{2}} \sum_{k=0}^n \frac{he_{n,k} x^k}{\alpha^{k/2}} \\ &= \sum_{k=0}^n \alpha^{\frac{n-k}{2}} he_{n,k} x^k, \end{aligned}$$

como queríamos. A função geradora para o polinômio de Hermite generalizado é dada por

$$R \left[\sqrt{\alpha} t, \frac{x}{\sqrt{\alpha}} \right] = e^{xt - \frac{\alpha t^2}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} He_n^{[\alpha]}(x) \frac{t^n}{n!}, \quad (2.44)$$

com os polinômios $He_n^{[\alpha]}(x)$ formando uma sequência de Appel. Agora, vamos definir a composição dos polinômios de Hermite generalizados, chamada composição umbral (ver [73]). Sejam $A_n(x)$ e $B_n(x)$ duas sequências de Appel de polinômios geradas pelas funções $S[x, g]$ e $R[x, g]$ da seguinte forma

$$S[x, g] = s(g) e^{xg} = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(x) \frac{g^n}{n!}, \quad R[x, g] = r(g) e^{xg} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(x) \frac{g^n}{n!}, \quad (2.45)$$

com $A_n = \sum_{k=0}^n a_{n,k} x^k$ e $B_n = \sum_{k=0}^n b_{n,k} x^k$. Os coeficientes $a_{n,k}$ e $b_{n,k}$ dependem da sequência de Appel tomada. A composição umbral é definida como segue

$$(A_n \circ B)(x) = \sum_{k=0}^n a_{n,k} B_k(x) = \sum_{k=0}^n \sum_{j=0}^k a_{n,k} b_{k,j} x^k. \quad (2.46)$$

Dessa forma, a sequência $C_n(x) = (A_n \circ B)(x)$ é uma sequência de Appel. Sua função geradora, denotada por $Q[x, g] = S[x, g] \circ R[x, g]$, tem a seguinte forma

$$Q[x, g] = s(g)r(g)e^{xg} = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(x) \frac{g^n}{n!}. \quad (2.47)$$

Note que, $(A_n \circ B)(x) = (B_n \circ A)(x)$. Agora, podemos aplicar esses fatos para a sequência de polinômios de Hermite generalizados $He_n^{[\alpha]}(x)$

$$\exp \left(xz - \frac{\alpha z^2}{2} \right) \circ \exp \left(xz - \frac{\beta z^2}{2} \right) = \exp \left(xz - \frac{(\alpha + \beta) z^2}{2} \right). \quad (2.48)$$

Como um resultado obtemos a seguinte composição umbral

$$\left(He_n^{[\alpha]} \circ He^{[\beta]} \right) (x) = \sum_{k=0}^n he_{n,k}^{[\alpha]} He_k^{[\beta]}(x) = He_n^{[\alpha+\beta]}(x). \quad (2.49)$$

3 OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO

Na mecânica clássica, o oscilador harmônico é um sistema, mola/massa, que ao ser deslocado da sua posição de equilíbrio, $x^0 = (x_1^0, \dots, x_n^0)$, experimenta uma força de restauração $F = (F_1, \dots, F_n)$ proporcional ao deslocamento $x = (x_1, \dots, x_n)$. Esse processo é descrito pela fórmula da Lei de Hooke

$$F = -kx \quad (3.1)$$

onde k é uma constante positiva, chamada de constante elástica da mola do sistema. Note que, ao usar a segunda Lei de Newton, $F = m d^2x/dt^2$, podemos reescrever a Eq.(3.1) da seguinte forma

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}x \quad \implies \quad \frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2x, \quad (3.2)$$

na qual $\omega = \sqrt{k/m}$ é a frequência angular do oscilador. Resolvendo essa equação encontramos a solução

$$x(t) = a \operatorname{sen}(\omega t) + b \operatorname{cos}(\omega t), \quad (3.3)$$

em que a e b são constantes. Sabemos que a energia potencial do oscilador harmônico é elástica, logo, seu valor na posição x é dado por

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2. \quad (3.4)$$

Um fato importante é que usando expansão de Taylor na vizinhança de um ponto de equilíbrio estável, geralmente, pode-se aproximar um potencial qualquer do potencial harmônico dado pela Eq.(3.4).

Sabemos que no formalismo de Hamilton toda informação sobre o sistema da mecânica clássica está contida na função $H(x, p)$ de coordenada x e momento p , chamada função Hamiltoniana. Tal função representa a energia total do sistema, a qual é a soma das energias cinética e potencial. No caso do oscilador Harmônico clássico, o Hamiltoniano é dado por

$$H_{osc}(x, p) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2. \quad (3.5)$$

Nessa função, a primeira parcela corresponde a energia cinética do sistema físico enquanto que a segunda parcela corresponde à sua energia potencial. São bem conhecidas as fórmulas para obter as equações do movimento de Hamilton e, no caso do oscilador Harmônico, elas fornecem

$$\dot{p} = -\frac{\partial H(x, p)}{\partial x} = -m\omega^2x, \quad \dot{x} = \frac{\partial H(x, p)}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad (3.6)$$

nessa notação, o ponto acentuado representa a derivada em relação ao tempo.

A passagem para mecânica quântica é feito através da introdução do Hamiltoniano do oscilador harmônico quântico

$$H_{osc}(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \quad (3.7)$$

onde \hat{x} e \hat{p} são os operadores posição e momento, respectivamente. O Hamiltoniano H_{osc} possui algumas propriedades muito importantes, são elas:

- a) Ele é Hermitiano;
- b) Todos os seus autovalores são não-negativos, isto é, $E_n \geq 0, \forall n$;
- c) Ele possui um espectro discreto.

O oscilador quântico é o oscilador da mecânica quântica correspondente ao oscilador da mecânica clássica. Para resolver o problema do oscilador quântico nós devemos resolver a equação de Schrödinger independente do tempo

$$H_{osc}\Psi(x) = E\Psi(x) \quad x \in (a, b). \quad (3.8)$$

Podemos resolver essa equação utilizando dois métodos, um método utiliza os operadores escada o outro utiliza polinômios de Hermite. Para realizar essas construções, utilizamos o livro texto de David J. Griffiths [40] como uma das nossas principais fontes.

3.1 MÉTODO DOS OPERADORES ESCADA

Vamos resolver o problema dos autovalores e das autofunções da equação (3.8) usando os operadores escadas a e a^+ . Como vimos no Capítulo 1, o símbolo $^+$ denota o operador adjunto. Definimos a e a^+ da seguinte forma

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} p \right), \quad a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} p \right), \quad (3.9)$$

segue que, a é o operador adjunto de a^+ e vice-versa. Por comodidade e sem risco de confusão nós suprimimos o acento $\hat{}$ e consideramos o momento definido como $p = -i\hbar\partial_x$.

Agora, estamos interessados em encontrar alguma relação entre H_{osc} e os operadores a e a^+ , sendo assim, vamos multiplicar a por a^+ na seguinte ordem

$$aa^+ = \frac{m\omega}{2\hbar} \left[\left(x^2 + \frac{1}{(m\omega)^2} p^2 \right) + \frac{i}{m\omega} (px - xp) \right]$$

o termo $(px - xp)$ é o comutador dos operadores p e x . Lembre-se, o comutador de dois operadores T e S quaisquer é $[T, S] = TS - ST$. Uma verificação rápida nos mostra que $[p, x] = -i\hbar$. Assim,

$$aa^+ = \frac{m\omega}{2\hbar} \left[\left(x^2 + \frac{1}{(m\omega)^2} p^2 \right) + \frac{\hbar}{m\omega} \right]$$

isso nos dá

$$aa^+ = \frac{1}{\hbar\omega} \left[\left(\frac{m\omega^2 x^2}{2} + \frac{p^2}{2m} \right) + \frac{1}{2} \right],$$

ou ainda,

$$aa^+ = \frac{1}{\hbar\omega} \left(H + \frac{1}{2} \right),$$

e, portanto

$$H = \hbar\omega \left(aa^+ - \frac{1}{2} \right). \quad (3.10)$$

Analogamente, podemos ver que

$$H = \hbar\omega \left(a^+a + \frac{1}{2} \right). \quad (3.11)$$

O operador a é conhecido como operador de abaixamento ou anulação e o operador a^+ é conhecido como operador de levantamento ou criação. Essas nomenclaturas são justificadas pelos seguintes fatos

$$H(a\Psi) = (E - \hbar\omega)(a\Psi) \quad \text{e} \quad H(a^+\Psi) = (E + \hbar\omega)(a^+\Psi), \quad (3.12)$$

sempre que Ψ é uma solução da equação de Schrödinger, $H\Psi = E\Psi$. Em palavras, se E é um autovalor do operador Hamiltoniano H associado a autofunção Ψ então $(E - \hbar\omega)$ e $(E + \hbar\omega)$ são autovalores associados, respectivamente, as autofunções $(a\Psi)$ e $(a^+\Psi)$. Uma breve verificação na literatura nos mostra que aplicando potências de a e a^+ nas soluções Ψ , obteremos as seguintes sequências

$$1^a) \quad H(a\Psi) = (E - \hbar\omega)\Psi, \quad H(a^2\Psi) = (E - 2\hbar\omega)\Psi, \quad \dots$$

$$2^a) \quad H(a^+\Psi) = (E + \hbar\omega)\Psi, \quad H((a^+)^2\Psi) = (E + 2\hbar\omega)\Psi, \quad \dots$$

Na verdade, a primeira sequência não continua indefinidamente como os três pontos finais sugerem, o que ocorre é que, em um dado momento, ela atinge um estado Ψ_0 , com energia mínima E_0 , chamado de estado fundamental. Nesse estado, teremos o produto $a\Psi_0 = 0$.

Aqui, faz-se necessário encontramos uma expressão explícita para o auto-estado fundamental Ψ_0 . Para isso, basta desenvolver a igualdade $a\Psi_0 = 0$, da seguinte forma

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega}p \right) \Psi_0 = 0,$$

lembrando que $p = -i\hbar\partial_x$, temos

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\partial_x \right) \Psi_0 = 0,$$

separando x e Ψ pelo sinal de igualdade, obtemos

$$\frac{\partial_x \Psi_0}{\Psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}x$$

integrando ambos os membros dessa igualdade com respeito a x e aplicando a exponencial e , concluímos que

$$\Psi_0(x) = Ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},$$

com $C = e^c$, onde c é a constante de integração. Para determinar a constante C , devemos recordar que Ψ_0 é uma solução da equação de Schrödinger e, portanto, tem norma 1. Ou seja, $\int |\Psi_0|^2 = 1$. Desenvolvendo os cálculos, encontramos

$$C = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}.$$

Logo, a solução fundamental fica

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \quad (3.13)$$

Agora, para determinar o nível de energia fundamental E_0 basta aplicar Ψ_0 na equação de Schrödinger com H dado pela Eq.(3.11), fazendo isso, encontramos

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (3.14)$$

Dessa forma, aplicando sucessivamente o operador de criação a^+ na solução fundamental, poderemos determinar qualquer auto-estado desejado com seu respectivo nível de energia, ou seja,

$$\Psi_n(x) = C_n (a^+)^n \Psi_0(x), \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad (3.15)$$

os níveis de energia E_n são dados fazendo $(E_0 + n\hbar\omega) = (\frac{\hbar\omega}{2} + n\hbar\omega)$ na segunda sequência exibida acima. Devido ao fato da diferença entre um nível de energia e o próximo ser constante e igual $\hbar\omega$, dizemos que o espectro do oscilador quântico é *equidistante*.

3.2 MÉTODO DOS POLINÔMIOS DE HERMITE

Para resolver a equação de Schrödinger independente do tempo por polinômio de Hermite precisamos das variáveis adimensionais

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad K \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (3.16)$$

Assim, a equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi = E\psi$$

pode ser reescrita na forma

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi, \quad (3.17)$$

para isso, usamos

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\psi}{d\xi^2}.$$

Pela definição das variáveis adimensionais, quando x tende ao infinito ξ tende ao infinito, enquanto que K permanece constante. Logo, para ξ tendendo ao infinito a Eq.(3.17) fica, aproximadamente

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2 \psi \quad (3.18)$$

essa é uma EDO linear de 2 ordem. Assim, resolvendo (3.18) encontramos a solução aproximada de (3.17)

$$\psi(\xi) \approx \alpha e^{-\frac{\xi^2}{2}} + \beta e^{\frac{\xi^2}{2}}. \quad (3.19)$$

Note que, quando ξ tende ao infinito a solução $\psi(\xi)$ também tende ao infinito devido a segunda parcela com expoente positivo. Dizemos que essa não é uma solução normalizável. Logo, nesse caso, a solução não é uma solução física aceitável. Para que a solução seja normalizável e, portanto, fisicamente aceitável devemos tomar $\beta = 0$. Assim, as soluções físicas devem têm a forma assintótica

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad (3.20)$$

onde $h(\xi)$ são polinômios a determinar. Substituindo essa solução na Eq.(3.17) e desenvolvendo os cálculos necessários, obtemos

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh}{d\xi} + (K - 1)h = 0, \quad (3.21)$$

essa é a equação de Schrödinger escrita de uma outra forma. Podemos resolver essa EDO linear de segunda ordem usando série de potências. Para isso, definimos

$$h(\xi) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \xi^i. \quad (3.22)$$

Agora, calculando as derivadas termo a termo, de primeira e segunda ordem dessa série, obtemos, respectivamente

$$\frac{dh}{d\xi} = \sum_{i=0}^{\infty} i a_i \xi^{i-1}, \quad \frac{d^2h}{d\xi^2} = \sum_{i=0}^{\infty} (i+1)(i+2) a_{i+2} \xi^i.$$

Substituindo esses três últimos resultados na equação (3.21), encontramos

$$\sum_{i=0}^{\infty} [(i+1)(i+2)a_{i+2} - 2ia_i + (K-1)a_i] \xi^i = 0,$$

pela unicidade da expansão em série de potências, vemos que

$$(i+1)(i+2)a_{i+2} - 2ia_i + (K-1)a_i = 0, \quad \forall i$$

ou melhor,

$$a_{i+2} = \frac{(2i+1-K)}{(i+1)(i+2)} a_i. \quad (3.23)$$

Pode-se verificar facilmente que essa relação de recorrência depende de duas variáveis, a_0 e a_1 , como era de se esperar da expansão de uma EDO de segunda ordem em série de potências. Assim, começando com a_0 obtemos os coeficientes de índices pares da série, enquanto que começando com a_1 encontramos os coeficientes de índices ímpares. Explicitamente, por um lado, a_0 determina a função par

$$h_P(\xi) = a_0 + a_2 \xi^2 + a_4 \xi^4 + \dots,$$

por outro, a_1 determina a função ímpar

$$h_I(\xi) = a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \dots$$

Somando ambas as funções formamos a solução completa

$$h(\xi) = h_P(\xi) + h_I(\xi), \quad (3.24)$$

veremos mais detalhes sobre essa expressão a frente.

Agora, note que a formula de recorrência (3.23) pode ser reescrita como

$$a_{i+2} = \frac{2}{i+1}a_i - \frac{3+K}{(i+1)(i+2)}a_i$$

logo, para valores grandes de i , essa formula aproxima-se de

$$a_{i+2} \approx \frac{2}{i}a_i$$

que tem solução [40]

$$a_i \approx \frac{\lambda}{(i/2)!}, \quad \lambda \in \mathbb{C}.$$

Desses resultados podemos reescrever a expansão em série de potências de $h(\xi)$, equação (3.22), da seguinte forma

$$h(\xi) \approx \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\lambda}{(i/2)!} \xi^i$$

mas para valores muito grandes de i podemos tomar índices na forma $2i$, assim

$$h(\xi) \approx \lambda \sum \frac{\xi^{2i}}{i!}.$$

Essa é, por sua vez, a expansão em série de potência da função exponencial λe^{ξ^2} , ou seja

$$h(\xi) \approx \lambda e^{\xi^2}.$$

Substituindo essa expressão na Eq. (3.20), temos

$$\psi(\xi) \approx \lambda e^{\frac{\xi^2}{2}}. \quad (3.25)$$

Note que, essa não é uma solução normalizável pois ela tende ao infinito quando a variável ξ tende ao infinito, ou seja, essa solução não é fisicamente aceitável. Para contornar esse problemas devemos assumir as seguintes hipóteses [40]:

- 1) A série (3.22) deve ser finita;
- 2) Deve ocorrer um i mais alto ($i \equiv n$) tal que a fórmula (3.23) seja zero, ou seja, $a_{n+2} = 0$. Além disso, deve-se assumir $a_1 = 0$ se n é par e $a_0 = 0$ se n é ímpar;
- 3) Os valores de K devem ser $K = 2n + 1$, $n = 0, 1, 2, \dots$.

Perceba que, primeiro, o item 2) trunca a série h_P ou a série h_I a depender dela começar ou com $a_0 \neq 0$ e $a_1 = 0$ ou começar com $a_1 \neq 0$ e $a_0 = 0$, respectivamente. Segundo, o item 3) representa a quantização de energia pois da definição de K na Eq.(3.16), temos

$$\frac{2E_n}{\hbar\omega} = 2n + 1,$$

ou melhor,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.26)$$

Por fim, para os valores permitidos de K dados no item 3), a fórmula de recorrência (3.23), fica

$$a_{i+2} = \frac{-2(n-i)}{(i+1)(i+2)} a_i. \quad (3.27)$$

A partir das três hipóteses acima e das suas observações, podemos ver sem muita dificuldade que o polinômio (3.24) é apenas a parcela par, quando n é par e apenas a parcela ímpar, quando n é ímpar. Para facilitar o reconhecimento, denotamos o polinômio $h(\xi)$ em (3.24) por $h_n(\xi)$. O polinômio $h_n(\xi)$ tem grau n . As parcelas pares e ímpares de $h_n(\xi)$, na forma em que foram definidas, combinadas com os coeficientes determinados pela equação (3.27), nos fornecem o n -ésimo polinômio de Hermite físico, $H_n(\xi)$. Esse polinômio de Hermite pode não está na sua forma padrão, para escrevê-lo na forma padrão devemos escolhendo os fatores a_0 e a_1 de modo que o coeficiente da maior potência de ξ seja 2^n . Dos resultados obtidos até agora, podemos rescrever a n -ésima função de onda do oscilador em termo do n -ésimo polinômio de Hermite físico

$$\psi_n(\xi) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2},$$

onde C_n é a constante de normalização. Vamos determiná-la. Para isso, fazemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(\xi)|^2 d\xi = C_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 1.$$

Usando a seguinte propriedade dos polinômios de Hermite físico para $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar} x$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} 2^n n! \delta_{nm},$$

na qual δ_{nm} é o delta de Kroneker, encontramos o valor da constante de normalização

$$C_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}.$$

Dessa forma, o n -ésimo auto-estado normalizado do oscilador harmônico quântico, associado a energia E_n , é dada por

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad \text{com} \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega. \quad (3.28)$$

Essas soluções também podem ser escritas em termo dos polinômios de Hermite pirobalís-

tico, usando a constante de reescalonamento apresentada no Capítulo 2.

A Figura 1 representa os oito primeiros estados do oscilador quântico. Na Figura 1(a), temos ilustrado o potencial (parábola) e os níveis de energia (retas horizontais paralelas) associados as respectivas funções de onda (curvas coloridas). A Figura 1(b) representa as formas das densidades de probabilidades das autofunções do oscilador $P_n(X) = |\Psi_n(X)|^2$ (regiões coloridas sob as curvas) juntamente com o potencial e os níveis de energia. Atente ao fato de que o espectro é equidistante, isto é, a diferença entre um nível de energia e o próximo é constante e igual a $\hbar\omega$. Veja também que o nível de energia do estado fundamental é $\hbar\omega/2$. Diferentemente da abordagem clássica, podemos observar que a probabilidade de encontrar a partícula fora da ação do campo potencial é diferente de zero. Fenômeno conhecido como tunelamento quântico. Esse é o principal modelo

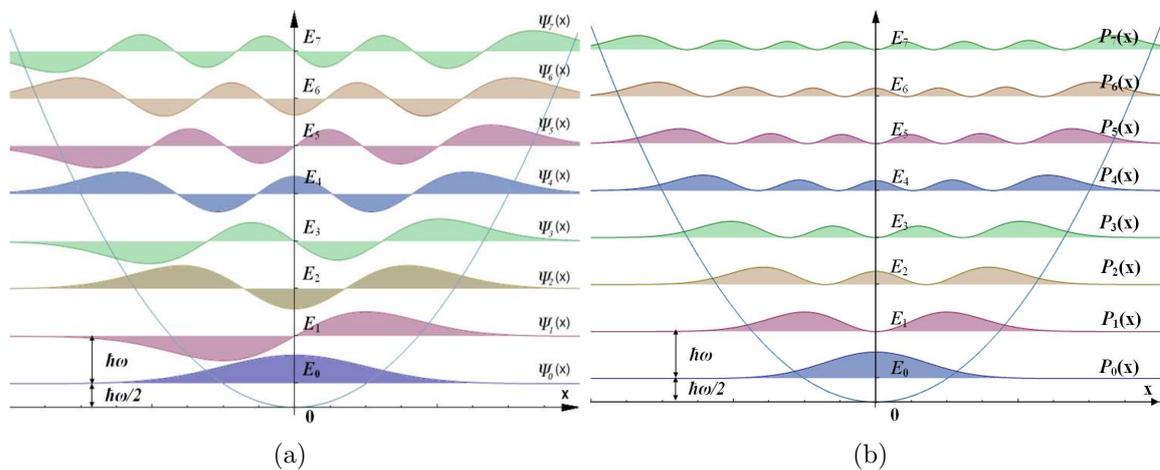


Figura 1 – Funções de onda do oscilador quântico (a) e suas probabilidades (b).
Fonte: [3] e [29].

presente na mecânica quântica e teoria quântica de campos, ou seja, qualquer campo quântico livre pode ser descrito como um conjunto infinito de osciladores. Nos próximos capítulos vamos aplicar deformações especiais desse modelo através de transformação da Darboux.

4 TRANSFORMAÇÃO DE DARBOUX

Transformações de Darboux também conhecidas como transformações de Supersimetria (SUSY) e fórmulas de Crum-Krein são usadas para obter potenciais exatamente solúveis da equação de Schrödinger unidimensional. Para essa discussão, usaremos principalmente os artigos [5, 14, 15, 35, 45, 61, 63, 64, 68, 71, 75, 79, 86], dentre os quais se destacam [5, 64] e a tese de bacharelado [68].

No artigo [5], Bagrov e Samsonov introduz o operador da transformação de Darboux de N -ésima ordem como um caso particular dos operadores de transformação geral. Eles mostram que esses operadores sempre podem ser representados como um produto de N operadores da transformação de Darboux de primeira ordem. Além de investigar o relacionamento entre essas transformações e o método de fatorização [48, 49]. Eles também introduzem os operadores de Supercharges e mostram que esses operadores e o super-hamiltoniano formam uma superalgebra de ordem N . Um potencial elementar N -paramétrico que tem exatamente N níveis do espectro discreto predeterminado também é construído.

Oblomkov [64] considera os operadores unidimensionais livre de monodromia com potenciais racionais que crescem quadraticamente. Ele mostra que todos esses operadores podem ser obtidos do operador $-\partial_x^2 + x^2$ por finitas transformações racionais de Darboux, além de encontrar uma expressão explícita para os correspondentes potenciais em termo dos polinômios de Hermite. Monodromia no caso das EDO's lineares. Quando procuramos as soluções das EDO's lineares, em séries de potências, faz sentido considerar a variável x como uma variável complexa e ver o que acontece quando x passa em torno das singularidades dos coeficientes da EDO, no plano complexo. Chamamos esse processo de monodromia quando a solução muda depois dele, devido a mudança de ramo da função multivalente. Se a solução é univalente, no plano complexo, dizemos que a monodromia é trivial ou a EDO é livre de monodromia.

Na tese de bacharel [68], Oeftiger lida com a mecânica quântica supersimétrica não-relativista em uma dimensão, onde ele discute sobre o formalismo da supersimetria juntamente com algumas aplicações tais como potencial de poço quadrado infinito e do poço delta, além do oscilador Harmônico.

Os artigos [32, 61, 62, 68, 77, 87, 88, 89] abordam um pouco sobre o surgimento da supersimetria na mecânica quântica. Segundo eles, a SUSY surgiu dentro da teoria de campos quânticos com o objetivo de relacionar os férmions e bósons. Nesse ambiente matemático, apesar de férmions e bósons serem aparentemente muito diferentes, eles constituem superparceiros e podem ser tratadas em pé de igualdade [61]. De acordo com Oeftiger [68], as transformações supersimétricas alteram os graus de liberdade bosônicos (spin inteiro) em fermiônicos (spin meio inteiro) e vice-versa. Além disso, as transformações

SUSY são realizadas por um operador supersimétrico \mathbb{Q} [68]

$$\mathbb{Q}|b\acute{o}son\rangle \propto |f\acute{e}rmi\acute{o}n\rangle \quad \text{e} \quad \mathbb{Q}|f\acute{e}rmi\acute{o}n\rangle \propto |b\acute{o}son\rangle .$$

Sendo assim, a supersimetria é uma importante ferramenta na descrição da natureza e compreensão dos sistemas físicos quânticos.

4.1 TRANSFORMAÇÃO DE DARBOUX DE PRIMEIRA ORDEM

A transformação de Darboux de primeira ordem teve origem na segunda metade do século XIX, quando o matemático francês Gaston Darboux estudava o problema de autovalores da equação de Schrödinger estacionária unidimensional [43]

$$H_0 \phi(x, E) = E \phi(x, E), \quad H_0 = -\partial_x^2 + V_0(x), \quad x \in [a, b], \quad (4.1)$$

onde $V_0(x)$ é uma função razoavelmente suave e o intervalo $[a, b]$ pode ser infinito. Seguindo [5, 17], introduzimos a seguinte definição geral

Definição 4.1.1 *Um operador diferencial linear L_N de N -ésima ordem agindo de \mathbf{T}_0 em \mathbf{T}_0 é chamado de operador da transformação de Darboux de ordem N se ele é invertível e cumpre as seguintes condições:*

- 1) L_N e L_N^{-1} são contínuos;
- 2) as seguintes igualdades são válidas:

$$L_N H_0 = H_N L_N \quad (4.2)$$

$$H_N = -\partial_x^2 + V_N(x), \quad V_N(x) \in \mathbf{T}. \quad (4.3)$$

Nessa definição, \mathbf{T}_0 e \mathbf{T} denotam espaços topológicos. Enquanto \mathbf{T}_0 é o espaço topológico formado pelo conjunto de soluções da equação (4.1) \mathbf{T} denota o espaço das funções razoavelmente suaves no intervalo $[a, b]$. Seja $\psi(x, E)$ a solução geral da equação (4.1) e seja $\varphi(x, E)$ a solução geral da nova equação de Schrödinger com o mesmo parâmetro espectral

$$H_N \varphi(x, E) = E \varphi(x, E), \quad x \in [a, b]. \quad (4.4)$$

Então, de acordo como a relação (4.2), essas duas soluções gerais se relacionam da seguinte maneira [5, 17]

$$\varphi(x, E) = L_N \psi(x, E). \quad (4.5)$$

As soluções fundamentais dessas equações serão representadas por $\psi_0(x, E)$ e $\varphi_0(x, E)$, respectivamente. Se denotarmos a diferença de potencial [5]

$$\Delta V^{(N)}(x) = H_N - H_0 = V_N(x) - V_0(x), \quad (4.6)$$

então a igualdade (4.2) toma a forma

$$[L_N, H_0] \equiv L_N H_0 - H_0 L_N = H_N L_N - H_0 L_N = \Delta V^{(N)}(x) L_N . \quad (4.7)$$

Assim, a partir dessa equação podemos obter o potencial $V_N(x)$ do novo sistema quântico descrito pelo hamiltoniano H_N .

Para entendermos o mecanismo por trás da transformação de Darboux, fórmulas de Crum-Krein ou SUSY de primeira ordem vamos considerar o sistema quântico descrito pelo hamiltoniano H_1 com um dado potencial independente do tempo $V_1(x)$

$$H_1 \psi(x) = E \psi(x) , \quad H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_1(x) . \quad (4.8)$$

Seja $\psi_0(x)$ a função de onda do estado fundamental desse sistema quântico. Seguindo [68], sem perda de generalidade, suponhamos que a ação do hamiltoniano na função de onda do estado fundamental seja $H_1 \psi_0(x) = 0$, assim

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_0''(x) + V_1(x) \psi_0(x) = 0 , \quad (4.9)$$

reorganizando, temos

$$V_1(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)} . \quad (4.10)$$

Sempre é possível impor a condição $H_1 \psi_0(x) = 0$ porque o potencial $V_1(x)$ pode ser deslocado por uma constante de maneira que o nível de energia do estado fundamental do hamiltoniano seja $E_0 = 0$. Essa condição não altera a função de onda nem as propriedades de dispersão de todos os potenciais pois ela só desloca o espectro de energia por uma constante [68]. Observe que a equação (4.10) esta bem definida, já que, a função de onda do estado fundamental não possui nós.

Agora, vamos definir os seguintes operadores diferenciais de primeira ordem com a ajuda do superpotencial $\mathbb{V}(x)$ (cuja dimensão é a raiz quadrada da energia)

$$L := \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \partial_x + \mathbb{V}(x) , \quad L^+ := -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \partial_x + \mathbb{V}(x) . \quad (4.11)$$

Os operadores diferenciais de primeira ordem L e L^+ fatoram o hamiltoniano do sistema quântico como

$$H_1 = L^+ L . \quad (4.12)$$

Dessa forma, podemos escrever o potencial $V_1(x)$ em função do superpotencial $\mathbb{V}(x)$

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_1(x) \\ &= L^+ L \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \mathbb{V}^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \mathbb{V}'(x) \end{aligned}$$

e, finalmente, obtemos $V_1(x)$ dado pela equação de Riccati

$$V_1(x) = \mathbb{V}^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \mathbb{V}'(x) . \quad (4.13)$$

Substituindo esse potencial $V_1(x)$ em função do superpotencial $\mathbb{V}(x)$ na equação (4.9), obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_0''(x) + \left(\mathbb{V}^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \mathbb{V}'(x) \right) \psi_0(x) = 0 ,$$

ou melhor,

$$\frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)} = \left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \mathbb{V}(x) \right)^2 - \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \mathbb{V}'(x) .$$

Usando a regra da cadeia: $u''/u = u''/u + (u'/u)^2 - (u'/u)^2 = (u'/u)^2 + (u'/u)'$ podemos reescrever essa última equação da seguinte forma

$$\left(\frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} \right)^2 + \left(\frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} \right)' = \left(-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \mathbb{V}(x) \right)^2 + \left(-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \mathbb{V}(x) \right)'$$

cuja solução é o superpotencial $\mathbb{V}(x)$ dado por

$$\mathbb{V}(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} (\ln \psi_0(x))' . \quad (4.14)$$

Note que, podemos facilmente obter a equação (4.10) substituindo essa última expressão do superpotencial na equação (4.13). Os operadores diferenciais de primeira ordem L e L^+ são conhecidos como operadores de entrelaçamento, operadores de Darboux e operadores SUSY de primeira ordem.

Agora, vamos considerar o sistema quântico descrito pelo hamiltoniano com um dado potencial independente do tempo $V_2(x)$

$$H_2 \varphi(x) = E \varphi(x) , \quad H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_2(x) . \quad (4.15)$$

De forma semelhante ao hamiltoniano H_1 , podemos fatorar o hamiltoniano H_2 usando os operadores de entrelaçamento L e L^+ da seguinte forma

$$H_2 = L L^+ . \quad (4.16)$$

Comparando as equações (4.12) e (4.16) vemos que apenas mudamos as ordens dos operadores de entrelaçamento. Analogamente ao potencial $V_1(x)$, também podemos escrever o potencial $V_2(x)$ em função do superpotencial $\mathbb{V}(x)$, definido na equação (4.14), da seguinte forma

$$\begin{aligned} H_2 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_2(x) \\ &= L L^+ \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \mathbb{V}^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \mathbb{V}'(x) \end{aligned}$$

e, finalmente, obtemos $V_2(x)$ dada pela equação de Riccati

$$V_2(x) = \mathbb{V}^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \mathbb{V}'(x) . \quad (4.17)$$

Dizemos assim que H_1 e H_2 são hamiltonianos parceiros supersimétricos e, semelhantemente, V_1 e V_2 são potencias parceiros supersimétricos.

Usando a definição 4.1.1 para o nosso caso, operador L de primeira ordem, a equação (4.2) fica da seguinte forma

$$L H_1 = H_2 L . \quad (4.18)$$

Essa equação nos diz que as soluções $\varphi(x)$ da equação (4.15) são relacionadas com as soluções $\psi(x)$ de (4.8) como segue

$$\varphi(x) = L \psi(x) . \quad (4.19)$$

Se denotarmos

$$\Delta V^{(2)}(x) = V_2(x) - V_1(x), \quad (4.20)$$

então a igualdade (4.18) toma a forma

$$[L, H_1] \equiv L H_1 - H_1 L = \Delta V^{(2)}(x) L . \quad (4.21)$$

Portanto, considerando a equação (4.21) como uma função de $\Delta V^{(2)}(x)$, ela pode ser tratada como uma segunda maneira de calcularmos o potencial $V_2(x)$ do novo sistema quântico descrito pelo hamiltoniano H_2 .

Os operadores L e L^+ realiza uma correspondência um-a-um entre os espaços bidimensionais das soluções para qualquer $E \neq 0$ [72]

$$\mathbb{H}_{1,E} \xrightarrow{L} \mathbb{H}_{2,E} .$$

No caso em que $E = 0$, uma solução particular da equação estacionária de Schrödinger (4.15), denotada por $\tilde{v}(x)$, é conectada com a solução $u(x) = \psi_0(x)$ pela relação [5, 24]

$$\tilde{v} = u^{-1}(x) .$$

Para obter essa correspondência, vamos seguir [72]. Assim, sejam $u(x), \tilde{u}(x)$ duas soluções linearmente independentes da equação inicial de Schrödinger (4.8). Agora consideramos um fato muito bem conhecido sobre as soluções da equação de Schrödinger que o wronskiano $Wr_1 = Wr[\psi, \tilde{\psi}]$ não depende de x . O wronskiano Wr_1 das soluções $\psi, \tilde{\psi}$ é definido da seguinte forma

$$Wr[\psi, \tilde{\psi}] := \begin{vmatrix} \psi(x) & \tilde{\psi}(x) \\ \psi'(x) & \tilde{\psi}'(x) \end{vmatrix} . \quad (4.22)$$

Sendo assim, sem perda de generalidade, vamos supor que o par u, \tilde{u} seja normalizado pela condição $Wr[u, \tilde{u}] = 1$, i.e

$$u \tilde{u}' - u' \tilde{u} = 1 .$$

Além disso, suponhamos que u seja conhecida, assim, a equação anterior será uma edo de primeira ordem em \tilde{u} e, dessa forma, reorganizando e integrando tal equação, obtemos

$$\tilde{u}(x) = u(x) \int_{x_0}^x \frac{dy}{u^2(y)}. \quad (4.23)$$

Finalmente, aplicando o operador da transformação L em \tilde{u} , obtemos \tilde{v}

$$\tilde{v}(x) = L \left(u(x) \int_{x_0}^x \frac{dy}{u^2(y)} \right) = u^{-1}(x). \quad (4.24)$$

Outra solução particular de (4.15), denotada por $v(x)$, pode ser obtida substituindo u por \tilde{v} e \tilde{u} por v na equação (4.23). Fazendo tais substituições, encontramos o seguinte resultado

$$v(x) = u^{-1}(x) \int_{x_0}^x u^2(y) dy. \quad (4.25)$$

Dessa maneira, nós restauramos o espaço das funções gerado pelas soluções linearmente independentes v e \tilde{v} , isto é, o espaço $\mathbb{H}_{2,0} = \text{span}\{v, \tilde{v}\}$.

A partir daqui, vamos considerar o caso em que $u(x)$ é uma solução da equação inicial de Schrödinger para um autovalor $\lambda \neq E$ de modo que o superpotencial seja determinado pela forma

$$\mathbb{V}(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} (\ln u(x))' \quad \text{com} \quad H_1 u(x) = \lambda u(x), \quad x \in [a, b]. \quad (4.26)$$

A seguir, apresentamos um lema muito importante encontrado em [72]. Ele relaciona o wronskiano das soluções $\psi, \tilde{\psi}$ com o wronskiano das soluções transformadas $\varphi, \tilde{\varphi}$.

Lema 4.1.1 [72]. *O wronskiano Wr_2 das soluções transformadas $\varphi = L\psi$ e $\tilde{\varphi} = L\tilde{\psi}$ é expresso pelo wronskiano Wr_1 das soluções $\psi, \tilde{\psi}$ da seguinte forma*

$$Wr_2 = (E - \lambda) Wr_1, \quad E \neq \lambda. \quad (4.27)$$

A solução $u(x)$ é chamada função da transformação de Darboux ou, simplesmente, função da transformação e a constante fixa λ é chamada de energia de fatoração. A menos que dito o contrário, suporemos que a solução $u(x)$ satisfaz a condição de regularidade $u(x) \neq 0, \forall x \in [a, b]$. Assim, evitamos que o potencial transformado $V_2(x)$ tenha mais singularidades do que o potencial original $V_1(x)$. Segundo [72], para garantirmos a construção das energias de fatoração pelo teorema da oscilação devemos supor tais energias menores do que ou iguais a energia do estado fundamental do primeiro sistema quântico, isto é, $\lambda \leq E_0^{(1)}$ (aqui e no que segue, denotaremos a energia do estado fundamental do primeiro sistema quântico por $E_0^{(1)}$). Quando a energia de fatoração λ é igual a energia do

estado fundamental $E_0^{(1)}$ temos que as soluções $u(x)$ e $\psi_0(x)$ coincidem. Assim, quando $\lambda = E_0^{(1)} = 0$ obtemos todas as análises feitas anteriormente.

Segue das relações na equação (4.26) que os operadores diferenciais de primeira ordem L e L^+ fatoram os hamiltonianos H_1 e H_2 pela seguinte regra

$$L^+ L = H_1 - \lambda \quad \text{e} \quad L L^+ = H_2 - \lambda. \quad (4.28)$$

Agora, temos o seguinte resultado

Teorema 4.1.1 [5]. *As formulas (4.28) são validas se, e somente se, L é o operador da transformação de Darboux de primeira ordem.*

Bagrov e Samsonov [5] usam essa propriedade para apresentar vários potenciais exatamente solúveis que podem ser obtidos da transformação singular de Darboux.

A seguir, vamos estudar um pouco sobre a relação entre os espectros de energia dos hamiltonianos parceiros H_1 e H_2 (usaremos, principalmente, [68, 72] para tal estudo). Seguindo [68], denotaremos os níveis de energia do primeiro sistema quântico por $E_n^{(1)}$ e os níveis de energia do segundo sistema quântico por $E_n^{(2)}$. Como veremos, a supersimetria pode conduzir a degeneração nos espectros de energia dos dois sistemas quânticos relacionados mas, ainda assim, eles são basicamente idênticos. Dessa forma, cada nível de energia do sistema supersimétrico, exceto o nível do estado fundamental de H_1 , é associado a duas autofunções, uma de cada hamiltoniano. Devido a esse fato, dizemos que os espectros de H_1 e H_2 é isoespectral.

Agora, façamos as seguintes análises. Dada a equação de Schrödinger para o primeiro sistema quântico [68]

$$H_1 \psi_n = L^+ L \psi_n = E_n^{(1)} \psi_n, \quad E_n^{(1)} \geq \lambda \quad (4.29)$$

nós obtemos facilmente o segundo sistema quântico

$$H_2 (L \psi_n) = L L^+ L \psi_n = L (H_1 \psi_n) = E_n^{(1)} (L \psi_n), \quad E_n^{(1)} \geq \lambda. \quad (4.30)$$

Assim, a função $L \psi_n$ é uma autofunção do hamiltoniano H_2 associado ao autovalor $E_n^{(1)}$. De forma análoga, dada a equação de Schrödinger do segundo sistema quântico [68]

$$H_2 \varphi_n = L L^+ \varphi_n = E_n^{(2)} \varphi_n, \quad E_n^{(2)} \geq \lambda \quad (4.31)$$

nós podemos encontrar o primeiro sistema quântico

$$H_1 (L^+ \varphi_n) = L^+ L L^+ \varphi_n = L^+ (H_2 \varphi_n) = E_n^{(2)} (L^+ \varphi_n), \quad E_n^{(2)} \geq \lambda. \quad (4.32)$$

Portanto, de forma análoga a mostrada anteriormente, vemos que a função $L^+ \varphi_n$ é uma autofunção do hamiltoniano H_1 associado ao autovalor $E_n^{(2)}$. Observando as equações

(4.29)-(4.32) vemos que as autofunções e níveis de energia dos dois hamiltonianos são relacionados da seguinte forma [68]

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= E_{n+1}^{(1)} & , & & E_0^{(1)} &= \lambda \\ \varphi_n &= \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(1)} - \lambda}} L \psi_{n+1} & , & & \psi_{n+1} &= \frac{1}{\sqrt{E_n^{(2)} - \lambda}} L^+ \varphi_n \end{aligned} \quad (4.33)$$

($n = 0, 1, 2, \dots$).

Seguindo [72], dependendo da forma concreta da função $u(x)$ e do operador L , podemos obter os três seguintes tipos de relação entre os espectros de energia de H_1 e H_2

- i) Para $\lambda = E_0^{(1)}$ e $u(x) = \psi_0(x)$ o nível do estado fundamental $E_0^{(1)}$ de H_1 é removido do espectro de H_2 , Figura 2a;
- ii) H_2 tem um novo nível de energia do estado fundamental mais profundo do que o de H_1 , isto é, $E_0^{(2)} = \lambda < E_0^{(1)}$, Figura 2b;
- iii) O espectro de H_1 e H_2 coincidem completamente, i.e, $\lambda < E_0^{(1)} = E_0^{(2)}$, Figura 2c.

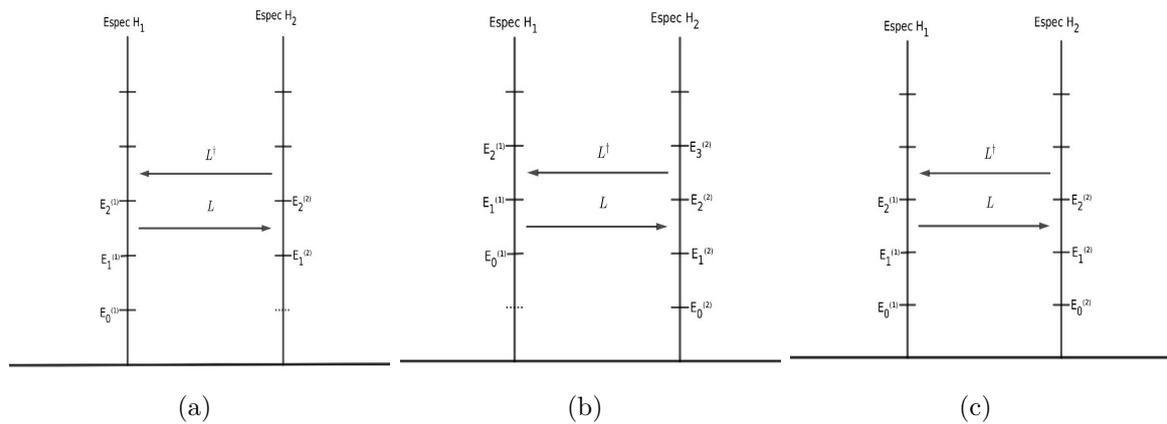


Figura 2 – Relação entre os espectros dos hamiltonianos parceiros H_1 e H_2 .

Fonte: Dados da pesquisa.

Na relação do tipo i), a função de onda do estado fundamental coincide com a função de transformação $u(x)$ e como ela satisfaz a condição de regularidade $u(x) \neq 0$, podemos criar o potencial inicial $V_1(x)$ livre de singularidades no intervalo $[a, b]$. Nas relações do tipo ii) e iii), segundo [72], a ausência de nós em $V_1(x)$ pode ser garantida por uma escolha apropriada de $u(x)$, uma tal escolha sempre é possível devido ao teorema da oscilação em [10], no caso iii) devemos ter $\lambda < E_0^{(1)}$. Para essas três relações podemos considerar a base ortonormal de autofunções de H_1 , denotada por $\{\psi_n, n = 0, 1, 2, \dots\}$. Assim, as autofunções do hamiltoniano H_2

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(1)} - \lambda}} L \psi_n \quad (4.34)$$

forma uma base ortonormal do mesmo espaço de Hilbert no caso iii). No caso i) a base não inclui φ_0 e no caso ii) é necessário incluir $\varphi_0 \propto u^{-1}$. Para uma análise mais ampla e completa sobre esse assunto veja [72].

4.2 TRANSFORMAÇÃO DE DARBOUX DE SEGUNDA ORDEM

Vamos considerar agora o sistema quântico representado pelo hamiltoniano H_3 com potencial $V_3(x)$

$$H_3 \varphi(x) = E \varphi(x), \quad H_3 = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_3(x). \quad (4.35)$$

Para determinarmos a transformação de Darboux, fórmula de Crum-Krein ou SUSY de segunda ordem vamos precisar de duas funções de transformação $u_1(x)$ e $u_2(x)$, logo, devemos ter

$$H_1 \psi = E \psi \quad \text{com} \quad H_1 u_1 = \lambda_1 u_1 \quad \text{e} \quad H_1 u_2 = \lambda_2 u_2, \quad (4.36)$$

onde as energias de fatoraçoão λ_1, λ_2 podem ser ou não iguais. Quando as energias de fatoraçoão são diferentes, $\lambda_1 \neq \lambda_2$, a solução $\varphi(x)$ da equação (4.35) é dada por [72]

$$\varphi := L \psi = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{Wr[u_1, u_2, \psi]}{Wr[u_1, u_2]} \quad (4.37)$$

enquanto que o potencial $V_3(x)$ é expresso como [72]

$$V_3(x) = V_1(x) - \frac{\hbar^2}{m} (\ln Wr[u_1, u_2])''. \quad (4.38)$$

Desenvolvendo a equação (4.37) encontramos o seguinte operador diferencial de segunda ordem L

$$L = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_x^2 + \frac{(u_1'' u_2 - u_1 u_2'')}{Wr[u_1, u_2]} \partial_x + \frac{(u_1' u_2'' - u_1'' u_2')}{Wr[u_1, u_2]} \right).$$

Se usarmos as relações $\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V_1 - E)\psi$ e $u_{1,2}'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V_1 - \lambda_{1,2})u_{1,2}$ na equação (4.37) o operador de segunda ordem L pode ser reescrito como um operador mais simples, isto é, como um operador diferencial de primeira ordem

$$L = (\lambda_1 - \lambda_2) \frac{u_1 u_2}{Wr[u_1, u_2]} \partial_x + \left(E + \frac{\lambda_2 u_1' u_2 - \lambda_1 u_1 u_2'}{Wr[u_1, u_2]} \right). \quad (4.39)$$

Note que, quando as energias de fatoraçoão são diferentes, $\lambda_1 \neq \lambda_2$, podemos ter ou $E = \lambda_1$ ou $E = \lambda_2$, nesses casos, o lado direito da equação (4.37) é zero (teremos duas colunas do Wronskiano iguais pois $E = \lambda_1 \implies u_1 = \psi$ ou $E = \lambda_2 \implies u_2 = \psi$). Sendo assim, se $v_1(x)$ e $v_2(x)$ são soluções da equação de Schrödinger (4.35), i.e, $H_3 v_{1,2} = \lambda_{1,2} v_{1,2}$ então

$$v_1(x) = \frac{u_2}{Wr[u_1, u_2]} \quad \text{e} \quad v_2(x) = \frac{u_1}{Wr[u_1, u_2]}. \quad (4.40)$$

Além disso, quando $E \neq \lambda_1$ e $E \neq \lambda_2$ a equação do Lema 4.1.1 para a transformação de Darboux de segunda ordem pode ser expandido da seguinte forma [72]

$$Wr_3(E) = (E - \lambda_1)(E - \lambda_2)Wr_0(E) . \quad (4.41)$$

No caso em que a transformação de Darboux de segunda ordem é degenerada, isto é, $\lambda := \lambda_1 = \lambda_2$, temos duas abordagens distintas. Uma delas é feita em [72], a outra é feita em [83]. A abordagem feita em [72] é baseada na representação iterativa de ordem superior e, em particular, na transformação de Darboux de segunda ordem, enquanto que, a abordagem feita em [83] utiliza-se de procedimentos envolvendo limites não triviais. Aqui vamos seguir [72]. Para isso, devemos considerar duas cadeias consecutivas de transformações de primeira ordem. Como as energias de fatoração são iguais $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ com $H_1 u = \lambda u$, de (4.24) e (4.25) temos que a solução da equação de Schrödinger com o hamiltoniano H_2 , associada ao parâmetro espectral λ , é

$$v(x) = u^{-1}(x) \left(\int_{x_0}^x u^2(y) dy + c \right) ,$$

onde x_0 e a constante c devem garantir $v(x) \neq 0$, $\forall x \in (a, b)$. Dessa forma, obtemos a solução transformada [5, 72]

$$\varphi := L\psi = \left(\lambda - E + \frac{u u'}{\int_{x_0}^x u^2(y) dy + c} \right) \psi - \frac{u^2}{\int_{x_0}^x u^2(y) dy + c} \psi' , \quad (4.42)$$

concomitantemente, o potencial $V_3(x)$ é dado da seguinte forma [5, 72]

$$V_3 = V_1 - 2 \left[\ln \left(\int_{x_0}^x u^2(y) dy + c \right) \right]'' \quad (4.43)$$

no intervalo (a, b) . Quando $E = \lambda$, isto é, $\psi(E, x) = u(\lambda, x)$ as raízes dessa expressão são nulas. Novamente usando soluções linearmente independentes de u nós obtemos o seguinte autoestado [5, 72]

$$\varphi(\lambda, x) = \frac{u(x)}{\int_{x_0}^x u^2(y) dy + c} . \quad (4.44)$$

Uma análise das possíveis modificações do espectros de energias dependendo da escolha das constantes de fatoração λ_1 , λ_2 e o comportamento assintótico das soluções de transformação u_1 , u_2 é dada em [72].

4.3 TRANSFORMAÇÃO DE DARBOUX DE N-ÉSIMA ORDEM

Agora, suponha que tenhamos realizado N transformações de Darboux de primeira ordem, assim, obtemos a cadeia de hamiltonianos $H_1 \xrightarrow{L_1^{(1)}} \dots \xrightarrow{L_1^{(N)}} H_N$. A transformação de Darboux de N -ésima ordem pode ser completamente determinada pelo conjunto das N funções de transformação linearmente independente $\{u_1, u_2, \dots, u_N\}$. Notadamente, essas funções são soluções da equação inicial de Schrödinger

$$H_1 \psi(x) = E \psi(x) \quad \text{com} \quad H_1 u_n(x) = \lambda_n u_n(x) , \quad \lambda_n \neq \lambda_{m \neq n} , \quad n, m = 1, \dots, N. \quad (4.45)$$

A N -ésima transformação SUSY relaciona o primeiro sistema quântico com o N -ésimo sistema quântico, o qual é descrito pelo hamiltoniano H_N com potencial independente do tempo $V_N(x)$

$$H_N \varphi(x) = E \varphi(x) , \quad H_N = \frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_N(x) . \quad (4.46)$$

Assim, nosso objeto é encontrar o operador diferencial de ordem N , L_N , que relacionam as soluções $\psi(x)$ e $\varphi(x)$ e os potenciais $V_1(x)$ e $V_N(x)$.

O teorema apresentado por Bagrov e Samsonov em [5] e introduzido a seguir é muito importante. Ele apresenta uma regra de fatoração do operador L_N .

Teorema 4.3.1 [5]. *O operador diferencial L_N sempre pode ser representado como o produto $L_N = L_1^{(1)} \cdot L_1^{(2)} \cdot \dots \cdot L_1^{(N)}$, onde $L_1^{(k)}$ ($k = 1, \dots, N$) é o operador de Darboux de primeira ordem. O operador $L_1^{(k)}$ é definido pela relação (4.11) onde o superpotencial $\mathbb{V}(x)$ é determinado pelas soluções da equação de Schrodinger obtidas da equação inicial pela transformação de Darboux de ordem $k - 1$.*

O operador L_N cumpre as condições da definição 4.1.1, isto é, ele satisfaz as relações de entrelaçamento

$$L_N H_1 = H_N L_N \quad \text{e} \quad H_1 L_N^+ = L_N^+ H_N . \quad (4.47)$$

Além disso, de acordo com o Teorema 4.3.1 e as relações de fatoração dos hamiltonianos H_1 e H_2 dadas na equação (4.28), o operador L_N obedece as seguintes regras de decomposição

$$L_N^+ L_N = (H_1 - \lambda_1)(H_1 - \lambda_2) \cdots (H_1 - \lambda_N) \quad (4.48)$$

$$L_N L_N^+ = (H_N - \lambda_1)(H_N - \lambda_2) \cdots (H_N - \lambda_N) . \quad (4.49)$$

Portanto, para o nosso caso, as energias de fatoração diferentes $\lambda_n \neq \lambda_m$, a ação do entrelaçador L_N em uma solução $\psi(x)$ é dada pela formula de Crum-Krein [15, 52, 72]

$$\varphi = L_N \psi = \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \right)^N \frac{Wr[u_1, u_2, \dots, u_N, \psi]}{Wr[u_1, u_2, \dots, u_N]} \quad (4.50)$$

onde $Wr[u_1, u_2, \dots, u_N]$ denota o wronskiano das soluções u_1, u_2, \dots, u_N , isto é

$$Wr[u_1, \dots, u_N] = \begin{vmatrix} u_1 & u_2 & \dots & u_N \\ u_1' & u_2' & \dots & u_N' \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1^{(N-1)} & u_2^{(N-1)} & \dots & u_N^{(N-1)} \end{vmatrix} . \quad (4.51)$$

Dessa forma, o operador diferencial L_N liga as funções de onda $\psi(x)$ e $\varphi(x)$ dos sistemas quânticos descritos por H_1 e H_N , respectivamente, pela relação $\varphi = L_N \psi$. Paralelamente a isso, o potencial $V_N(x)$ do hamiltoniano H_N é dado por [15, 52, 72]

$$V_N = V_1 - \frac{\hbar^2}{m} (\ln Wr[u_1, \dots, u_N])'' . \quad (4.52)$$

Segundo [72], nesse caso (também considerando o teorema 4.3.1), é possível mostrar que o potencial transformado $V_N(x)$ comporta-se assintoticamente como o potencial inicial $V_1(x)$ para o problema formulado sobre todo o eixo real \mathbb{R} . Para a equação (4.52), a diferença de potencial $\Delta V^{(N)}(x) = V_N(x) - V_1(x)$, apresentada na primeira seção desse capítulo, é dada por

$$\Delta V^{(N)}(x) = -\frac{\hbar^2}{m} (\ln Wr[u_1, \dots, u_N])'' . \quad (4.53)$$

Segundo Bagrov e Samsonov [5], se a diferença de potenciais $\Delta V^{(N)}(x)$ tem pontos singulares extra dentro do intervalo $[a, b]$ quando comparado com o potencial inicial $V_1(x)$, então a função de onda do estado discreto dos hamiltonianos H_1 e H_N não são relacionados pelo operador L_N e o espectro discreto desses hamiltonianos são diferentes. Entretanto seu espectro discreto pode ser facilmente encontrado, uma vez que, a transformação de Darboux nos permite obter a solução geral da equação inicial. Ainda segundo [5], se a diferença dos potenciais é regular dentro do intervalo $[a, b]$, o espectro discreto de H_1 e H_N coincidem quase em toda parte, exceto possivelmente em um número finito de níveis.

Um fato importante e de fácil verificação é que o núcleo do operador diferencial L_N é o espaço vetorial gerado pelo conjunto das soluções $\{u_1, u_2, \dots, u_N\}$. Seguindo [72], denotamos tal espaço da seguinte forma

$$\mathcal{N}(L_N) = G(u_1, u_2, \dots, u_N) \quad \text{e} \quad \dim[\mathcal{N}(L_N)] = N . \quad (4.54)$$

As soluções $v_n(x)$ da equação de Schrödinger transformada $H_N v_n = \lambda_n v_n$ são obtidas como segue [5, 72]

$$v_n = \frac{Wr[u_1, \dots, u_{n-1}, u_{n+1}, \dots, u_N]}{Wr[u_1, u_2, \dots, u_N]} , \quad n = 1, 2, \dots, N , \quad (4.55)$$

onde a função u_n é excluída do wronskiano do numerador. As soluções $v_n(x)$ geram o núcleo do operador adjunto L_N^+ , o qual tem a mesma dimensão de $\mathcal{N}(L_N)$, assim

$$\mathcal{N}(L_N^+) = G(v_1, v_2, \dots, v_N) \quad \text{e} \quad \dim[\mathcal{N}(L_N^+)] = N . \quad (4.56)$$

Note que, a equação (4.55) é uma generalização da equação (4.24).

Uma análise detalhada sobre a ação do operador L_N nas soluções u_n e v_n e suas relações com o espaço de Hilbert \mathcal{H} , bem como a relação dos espectros de H_1 e H_N é feita em [5, 72]. Além disso, nesses trabalhos é realizado um estudo completo sobre os operadores L_k e hamiltonianos H_k intermediários.

Agora chegamos em um ponto importante: As relações de entrelaçamento, equação (4.47), junto com as regras de fatoração, equação (4.48), formam uma super-álgebra polinomial (álgebra SUSY). Relembremos que uma álgebra é um espaço vetorial ou um grupo cuja base é formada por geradores. Tal álgebra tem um produto definido entre seus geradores de modo que o resultado desse produto ainda é um elemento da álgebra. A

super-álgebra polinomial pode ser identificada como uma super-álgebra de Lie. Na física, mais precisamente na mecânica quântica, a álgebra ou grupo de Lie é extensamente usada e ela aparece como simetrias entre grupos de sistemas físicos. O produto da álgebra de Lie assemelha-se com o comutador entre dois operadores. Assim, se \mathbb{A} e \mathbb{B} são elementos da álgebra de Lie, então

$$\mathbb{A} \circ \mathbb{B} := [\mathbb{A}, \mathbb{B}] \quad (4.57)$$

também pertence a tal álgebra. Os geradores da álgebra de Lie são transformações infinitesimais que compõem as transformações finitas. A super-álgebra de Lie é uma generalização da álgebra de Lie. Assim, além da noção de comutadores a álgebra SUSY utiliza-se da definição de anti-comutadores

$$\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\} := \mathbb{A} \mathbb{B} + \mathbb{B} \mathbb{A} . \quad (4.58)$$

Nomeadamente, temos os seguintes elementos (operadores) da super-álgebra de Lie:

i) Super-hamiltoniano diagonal

$$H = \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_N \end{pmatrix}, \quad H_{1,N} = \partial_x^2 + V_{1,N}(x). \quad (4.59)$$

ii) Operadores Super-Charge

$$Q_N = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ L_N & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad Q_N^+ = \begin{pmatrix} 0 & L_N^+ \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.60)$$

Segundo [72], apesar dos hamiltonianos componentes H_1 e H_N entrarem no super hamiltoniano H de forma algebricamente simétrica, nós devemos considerar H_1 como um dado hamiltoniano com propriedades espectrais conhecidas e H_N como um hamiltoniano derivado com propriedades espectrais ainda a ser descobertas. Agora, os operadores H, Q_N, Q_N^+ estão envolvido nas seguintes relações de comutação e anti-comutação

$$[H, Q_N] = [H, Q_N^+] = 0 \quad \text{e} \quad \{Q_N, Q_N^+\} = (H - I \cdot \lambda_1) \cdots (H - I \cdot \lambda_N), \quad (4.61)$$

onde I é a matriz identidade da mesma ordem que o super-hamiltoniano diagonal H . Assim, os operadores H, Q_N, Q_N^+ formam a super-álgebra de Lie, super-álgebra polinomial ou ainda álgebra SUSY de ordem N .

5 PROPAGADORES

A seguir apresentamos alguns dos principais resultados sobre propagadores. O texto é baseado principalmente nos artigos [64, 70, 73], na tese [72] e no livro [50]. Usaremos algumas de suas notações.

5.1 DEFINIÇÃO E PROPRIEDADES

Na mecânica quântica não relativística, o propagador é a função que fornece a amplitude de probabilidade de uma partícula viajar de um ponto a outro do espaço em um dado intervalo de tempo com momento e energia específicos. Assim, sejam x e y dois pontos do espaço e suponhamos que a partícula desloque-se do ponto x para o ponto y no intervalo de tempo t . Nesse caso, o propagador é denotado por $K(x, y; t)$ e ele é entendido como o núcleo do operador diferencial de Schrödinger dependente do tempo $(H - i\hbar\partial_t)$, o qual foi apresentado na equação (3.17). Sendo assim, deveremos ter as seguintes relações

$$(H - i\hbar\partial_t) K(x, y; t) = 0 \quad \text{com} \quad K(x, y; 0) = \delta(x - y), \quad (5.1)$$

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

As vezes, o propagador também é chamado de solução fundamental associada ao operador diferencial de Schrödinger. Nesse caso, o propagador é conhecido como função de Green, a qual denotamos por $G(x, y; t)$. Para a equação de Schrödinger, a função de Green é definida como o núcleo do operador diferencial $(H - E)^{-1}$, isto é,

$$(H - E)^{-1} G(x, y; t) = 0. \quad (5.2)$$

Abaixo, discutiremos primeiro sobre os propagadores em termo da função $K(x, y; t)$ e, em seguida, abordaremos os propagadores em termo das funções de Green.

De acordo com Dirac e Feynman [18, 19, 27, 28, 58], o propagador da mecânica quântica pode ser encontrado usando integrais de caminho como segue

$$K(x, y, t, t') = \int \exp \left[i\hbar^{-1} \int_t^{t'} L(\dot{q}, q, t) dt \right] D(q), \quad (5.3)$$

onde $L(\dot{q}, q, t)$ é o Lagrangiano do sistema e as condições de fronteiras da integral incluem $q(t) = x$ e $q(t') = y$. Nessa notação, t representa o instante em que a partícula sai do ponto x e t' representa o instante em que a partícula chega no ponto y . Os caminhos somados se movem apenas para frente no tempo e são integrados em relação ao diferencial $D[q(t)]$, o qual segue o caminho no tempo. Em sistemas não dissipativos o propagador também pode ser escrito como a amplitude de transição

$$K(x, y, t) = \langle x | \hat{U}(t) | y \rangle$$

onde $\hat{U}(t)$ é o operador unitário da evolução temporal. Nesse caso, a unitariedade implica na simetria $K^*(x, y, -t) = K(x, y, t)$ (ver, por exemplo, [72]).

Sabemos que o hamiltoniano H é um operador auto-adjunto ($H = H^\dagger$) e seu domínio, denotado por $\mathcal{D}(H)$, é dado por

$$\mathcal{D}(H) := \{\psi : \psi \in \mathcal{H} \cap C^2(a, b), \psi(a) = \psi(b) = 0\}, \quad (5.4)$$

onde C^2 representa o conjunto das funções duas vezes diferenciáveis, ou seja, suficientemente suaves. Além disso, o conjunto das autofunções $\psi_k(x)$ do operador H associadas ao quadrado do momento k

$$H \psi_k(x) = E \psi_k(x), \quad E = k^2, \quad (5.5)$$

forma uma base completa do espaço de Hilbert \mathcal{H} . Dessa forma, temos as seguintes relações

$$\sum_{n=0}^M \psi_n(x) \psi_n^*(y) + \int \psi_k(x) \psi_k^*(y) dk = \delta(x - y), \quad (5.6)$$

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm} \quad \text{e} \quad \langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \delta(k - k'). \quad (5.7)$$

Agora, podemos usar essa base para construir o propagador $K(x, y, t)$ como segue

$$K(x, y, t) = \sum_{n=0}^M \psi_n(x) \psi_n^*(y) e^{-i\hbar^{-1} E_n t} + \int \psi_k(x) \psi_k^*(y) e^{-ik^2 t}. \quad (5.8)$$

Nas equações acima, as funções de estado $\psi_k(x)$ são assumidas como tendo o comportamento assintótico oscilante no espaço infinito. Veja [72].

As funções de Green estão intimamente relacionadas com os operadores diferenciais e sabemos que na físicas, principalmente na mecânica quântica, as grandezas podem ser representadas por meio de tais operadores. Assim, o estudo das funções de Green revela-se extremamente importante. Precisamente, as funções de Green são entendidas como soluções fundamentais associadas aos operadores diferenciais. O problema de encontrar a função de Green de um operador diferencial linear não homogêneo exige que ela esteja bem definida em um domínio com as devidas condições de contorno. A classificação das funções de Green pode ser feita com base no número de tais funções presente no problema em estudo e com base nas condições de contorno de tal problema. As funções de Green não são funções propriamente ditas mas distribuições (funções generalizadas).

Para compreender a íntima relação da função de Green como os operadores diferenciais vamos considerar as análises abaixo. Seja L_x um operador diferencial linear qualquer (em função de x) agindo sobre as distribuições do conjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, no ponto $y \in \Omega$. A função de Green do operador L_x , $G(x, y; t)$, é a solução da equação

$$L_x G(x, y; t) = \delta(x - y). \quad (5.9)$$

Essa relação é muito importante pois permite resolver equações diferenciais do tipo

$$L_x u(x) = f(x). \quad (5.10)$$

Uma observação a ser feita é a seguinte, se existe $u(x) \neq 0$ tal que $L_x u(x) = 0$, então a função de Green não é única. Para contornar esse problema, devemos escolher entre outros critérios externos, adequadas condições de fronteiras.

Agora, vamos resolver a equação (5.10) fazendo o seguinte. Primeiro, multiplicamos a Eq. (5.9) por $f(y)$

$$L_x G(x, y; t) f(y) = \delta(x - y) f(y).$$

Segundo, integramos essa equação em relação y

$$\int L_x G(x, y; t) f(y) dy = \int \delta(x - y) f(y) dy .$$

Devido a propriedade de deslocamento da função delta de Dirac e ao fato do operador L_x ser linear e não depender de y , essa última equação pode ser simplificada como segue

$$L_x \int G(x, y; t) f(y) dy = f(x).$$

Por fim, comparando essa expressão com a Eq. (5.10) vemos facilmente que

$$u(x) = \int G(x, y; t) f(y) dy. \quad (5.11)$$

Dessa forma, uma vez que a função $f(y)$ é conhecida, para resolver a Eq. (5.10), basta encontrar a função de Green e, em seguida, calcular a integral (5.11). Essa integral é conhecida como a integral de Fredholm. Ressaltamos, entretanto, que a integral (5.11) nem sempre é fácil calcular e, além disso, nem todo operador L_x admite uma função de Green.

Supondo que exista um conjunto completo de autofunções $\phi_n(x)$ do operador L_x , ou seja, um conjunto de autofunções cumprindo a relação

$$\delta(x - y) = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n^*(x) \phi_n(y). \quad (5.12)$$

Então, podemos escrever a função de Green da seguinte forma

$$G(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi_n^*(x) \phi_n(y)}{\gamma_n}, \quad (5.13)$$

onde γ_n é o autovalor de L_x associado a autofunção $\phi_n(x)$, isto é, $L_x \phi_n(x) = \gamma_n \phi_n(x)$. Note que, aplicando o operador L_x em ambos os lados da equação (5.13) obtemos a relação de completude, Eq. (5.12)

No caso do operador do problema de Sturm-Liouville, o teorema apresentado a seguir estabelece a função de Green como sua solução fundamental.

Teorema 5.1.1 *O problema de S-L, dado pelas equações (2.4) e (2.5) e resumido na expressão*

$$\begin{aligned}\mathcal{L}u &= f \\ Du &= 0\end{aligned}\tag{5.14}$$

admite uma única solução e essa solução é dada pela Eq.(5.11). Além disso, a função $G(x, y)$ tem as seguintes propriedades:

1. $G(x, y)$ é contínua em x e y ;
2. $\mathcal{L}G(x, y) = 0$, se $x \neq y$;
3. $DG(x, y) = 0$, se $y \neq 0$;
4. $G(x, y) = G(y, x)$.

Não faremos as demonstrações desses resultados, uma vez que, elas podem ser encontradas em livros textos sobre problema de Sturm-Liouville e/ou funções de Green.

Sendo assim, para o nosso caso, a função de Green é a solução fundamental da seguinte equação de Schrödinger dependente do tempo

$$(H - i\hbar\partial_t)G(x, y; t, t') = \delta(x - y)\delta(t - t').\tag{5.15}$$

Uma das formas pela quais a função de Green se relaciona com o propagador $K(x, y, t)$ é a seguinte

$$G(x, y; t, t') = (i\hbar)^{-1}\Theta(t - t')K(x, y; t, t'),\tag{5.16}$$

onde $\Theta(t)$ é a função de passos de Heaviside ($\Theta(t) = 0$, se $t < 0$ e $\Theta(t) = 1$, se $t > 0$). Considerando a base completa do espaço de Hilbert formada pelas soluções da equação (5.5) temos que a função de Green também pode ser calculada da seguinte maneira

$$G(x, y, E) = \sum_{n=0}^M \frac{\psi_n(x)\psi_n^*(y)}{E_n - E} + \int \frac{\psi_k(x)\psi_k^*(y)}{k^2 - E} dk.\tag{5.17}$$

Dessa forma, dependendo do contexto o propagador pode ser identificado como $G(x, y, t)$ ou como $K(x, y, t)$. Veja [72].

A seguir, vamos aplicar os operadores de Darboux de primeira e segunda ordem nas funções de Green e nos propagadores $K(x, y, t)$. Para isso, devemos considerar dois sistemas quânticos entrelaçados por esses operadores. Suponhamos que tais operadores e sistemas quânticos entrelaçados sejam os mesmos definidos nas seções 4.1 e 4.2. Reveja os três casos *i*), *ii*), *iii*) da transformação de Darboux em 4.1. Sendo assim, temos

Teorema 5.1.2 [72]. *Seja $G_1(x, y, E)$ a função de Green do hamiltoniano H_1 . Então para todos os três casos da transformação de Darboux de primeira ordem, enumerados na*

seção 4.1, a função de Green de H_2 é dada por

$$G_2(x, y, E) = \frac{1}{E - \lambda} [L_x L_y G_1(x, y, E) - \delta(x - y)] \quad E \neq \lambda. \quad (5.18)$$

No caso ii) ela tem um polo simples em $E = \lambda$. Nos casos i) e ii) ela é regular em $E = \lambda$ e pode ser calculada como segue

$$G_2(x, y, \lambda) = [L_x L_y \partial_E G_1(x, y, E)]_{E=0}. \quad (5.19)$$

Aqui L_x é o operador dado em (4.11) e L_y é o mesmo operador com x substituído por y .

Teorema 5.1.3 [72]. *Seja $G_1(x, y, E)$ a função de Green do hamiltoniano H_1 . Então a função de Green de H_3 é dada por*

$$G_3(x, y, E) = \frac{1}{(E - \lambda_1)(E - \lambda_2)} L_x L_y G_1(x, y, E), \quad x < y, \quad E \neq \lambda_1, \lambda_2. \quad (5.20)$$

Teorema 5.1.4 [72]. *Os propagadores $K_1(x, y, t)$ e $K_2(x, y, t)$ das equações de Schrödinger com os hamiltonianos SUSY H_1 e H_2 são inter-relacionados um com o outro pelas funções de Green $G_1(x, y, E)$ e $\tilde{G}_1(x, y, E_0)$ das seguintes formas:*

Relação do tipo i)

$$K_2(x, y, t) = L_x L_y \int_a^b K_1(x, y, t) \tilde{G}_1(x, y, E_0) dz. \quad (5.21)$$

Relação do tipo ii)

$$K_2(x, y, t) = L_x L_y \int_a^b K_1(x, y, t) G_1(x, y, E_0) dz + \varphi_0(x) \varphi_0(y) e^{-i\lambda t}. \quad (5.22)$$

Relação do tipo iii)

$$K_2(x, y, t) = L_x L_y \int_a^b K_1(x, y, t) G_1(x, y, E_0) dz. \quad (5.23)$$

Nesse teorema, $\tilde{G}_1(x, y, E_0)$ é a versão da função de Green regularizada, ela é definida como segue [72]

$$\tilde{G}_1(x, y, E_0) := \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\psi_m(x) \psi_m(y)}{E_m - E_0} = \lim_{E \rightarrow E_0} \left[G_1(x, y, E) - \frac{\psi_0(x) \psi_0(y)}{E_0 - E} \right]. \quad (5.24)$$

Finalizamos a discussão sobre essas propriedades como o teorema a seguir, o qual refere-se aos propagadores relacionados com as transformações do tipo i) da seção 4.1.

Teorema 5.1.5 [72]. *Para as transformações com $u(x) = \psi_0(x)$ o propagador $K_1(x, y, t)$ do sistema resultante pode ser representado como*

$$K_2(x, y, t) = -\frac{1}{u(y)} L_x \int_a^y K_1(x, y, t) u(z) dz = \frac{1}{u(y)} L_x \int_y^b K_1(x, y, t) u(z) dz. \quad (5.25)$$

No Capítulo 2 da tese [72], Pupasov faz uma ampla discussão sobre essas propriedades e muitas outras que não foram apresentadas nessa breve revisão. Sendo assim, sua leitura é um exercício de complementariedade muito importante.

5.2 PROPAGADOR DO OSCILADOR HARMÔNICO

Dois exemplos de propagadores unidimensionais bem conhecidos na literatura são os da partícula livre e do oscilador harmônico, denotados por $K_{pl}(x, y; t)$ e $K_{osc}(x, y; t)$, respectivamente. A seguir vamos obter tais propagadores. Para isso, vamos considerar as equações (2.18)-(2.23) da seção 2.3, as quais fazem referência as soluções do problema de Cauchy. Resumidamente, dada a equação estacionária de Schrödinger $H \psi(x) = E \psi(x)$, consideramos o conjunto ortonormal $\{\psi_n ; n = 1, 2, \dots\}$ formado por suas soluções. Agora, construímos a solução geral da equação de Schrödinger dependente do tempo com a ajuda do propagador $K(x, y, t)$ da seguinte forma

$$\Psi(x, t) = \int K(x, y, t) \Psi(y, 0) dy . \quad (5.26)$$

Em termo do conjunto das autofunções $\psi_n(x)$ e de seus respectivos parâmetros espectrais de energias E_n , a solução geral fica

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \psi_n(x) e^{-i\hbar^{-1}E_n t} \quad \text{com} \quad C_n = \int \psi_n^*(y) \Psi(y, 0) dy .$$

Sendo assim,

$$\Psi(x, t) = \int \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*(y) \psi_n(x) e^{-i\hbar^{-1}E_n t} \Psi(y, 0) dy . \quad (5.27)$$

Fazendo a comparação das equações (5.26) e (5.27), temos que o propagador é dado por

$$K(x, y, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*(y) \psi_n(x) e^{-i\hbar^{-1}E_n t} \quad (5.28)$$

essa é uma forma alternativa a equação (5.8) para calcular o propagador. No caso do espectro contínuo, o propagador pode ser dada pela seguinte integral [72]

$$K(x, y, t) = \int \psi_E^*(x) \psi_E(y) e^{-i\hbar^{-1}Et} dE , \quad (5.29)$$

aqui comparamos a equação (5.26) com

$$\Psi(x, t) = \int C_E \psi_E(x) e^{-i\hbar^{-1}Et} dE \quad \text{onde} \quad C_E = \int \psi_E^*(y) \Psi(y, 0) dy .$$

Nas duas últimas equações acima, as funções $\psi_E(x)$ formam o conjunto ortonormal completo $\{\psi_E\}$ infinito tal que $H \psi_E(x) = E \psi_E(x)$.

Finalmente, vamos obter o propagador da partícula livre. Nesse caso, o potencial $V(x) \equiv 0$, isto é, o hamiltoniano é proporcional ao operador momento $p = -i\hbar\partial_x$. Assim, as autofunções do hamiltoniano são as mesmas do operador p , ou seja

$$p \psi(x) = E \psi(x) \quad \text{e} \quad H \psi(x) = \frac{p^2}{2m} \psi(x) .$$

Sendo assim, vemos que $E = p^2/(2m)$. A função de onda normalizada $\psi(x)$, para o caso do espectro contínuo, é definida pela expressão [69]

$$\psi(x) = \left(\frac{m}{2E}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\pm i\hbar^{-1}\sqrt{2mE}x} . \quad (5.30)$$

Logo, substituindo os auto-estados $\psi_E(x)$ da equação (5.29) pelos auto-estados do operador momento em (5.30), encontramos a seguinte relação para o propagador da partícula livre

$$K_{pl}(x, y; t) = \int \left(\frac{m}{2E} \right)^{1/2} \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\pm i\hbar^{-1}[\sqrt{2mE}(x-y) - Et]} dE .$$

Definindo $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, o que implica $dk = (m/2\hbar^2 E)^{1/2} dE$, encontramos

$$K_{pl}(x, y; t) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ik(x-y)} e^{-i\hbar k^2 t/2m} dk .$$

Finalmente, usando a definição da integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha k^2 + \beta k} dk = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\beta^2/4\alpha} ,$$

obtemos o propagador da partícula livre

$$K_{pl}(x, y; t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m(x-y)^2}{2i\hbar t}} . \quad (5.31)$$

Para mais detalhes veja [69], por exemplo.

Agora estamos prontos para obter o propagador do oscilador harmônico a partir do propagador da partícula livre. Para isso, basta considerarmos o hamiltoniano do oscilador $H_{osc}(x, p)$ e usarmos a seguinte identidade pertencente ao grupo de Lie

$$e^{itH_{osc}} = e^{-\frac{i}{2\hbar}[m\omega x^2 \operatorname{tg} \frac{\omega t}{2} + \frac{1}{m\omega} p^2 \sin \omega t + m\omega x^2 \operatorname{tg} \frac{\omega t}{2}]}$$

sempre que o comutador de x e p for dado por $[x, p] = i\hbar$. Sendo assim, temos

$$K_{osc}(x, y; t) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)} \right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega[(x^2+y^2)\cos(\omega t) - 2xy]}{2i\hbar \sin(\omega t)}} . \quad (5.32)$$

Esse mesmo resultado poderia ser obtido usando o núcleo da fórmula de Mehler. O núcleo de Mehler é uma função de valor complexo. Uma outra alternativa de encontrar o propagador do oscilador harmônico é dado por Kiyoto Hira [46], ele utiliza integrais de caminho e algumas relações de recorrência.

5.3 EXTENSÕES RACIONAIS DO OSCILADOR HARMÔNICO

Nessa seção vamos estudar as extensões racionais dos osciladores harmônicos e seus respectivos propagadores. A seguir, apresentaremos algumas definições e propriedades fundamentais para o desenvolvimento desse estudo. Nossas principais referências são [35, 57, 63, 64, 70, 71, 73, 74, 75, 79].

O problema de descrever os operadores de Schrödinger com potencial racional $V(x)$, definidos por

$$L = \partial_x^2 + V(x) \quad \text{com} \quad L\psi(x) = E\psi(x) \quad (5.33)$$

foi amplamente investigado nos artigos [9, 13, 21, 35, 38, 64]. O trabalho [21] foi um dos pioneiros a estudar esse problema com potenciais decrescentes, já [64] apresenta seus resultados para potenciais quadraticamente crescente. No artigo [13] os resultados são obtidos para o caso dos potenciais decrescentes mas em estrutura multidimensional, enquanto que, [38] estuda o caso matricial.

Tratando do caso dos potenciais racionais decrescentes, Duistermaat e Grünbaum declara o seguinte teorema

Teorema 5.3.1 [21]. *Cada operador de Schrödinger com potencial racional decrescendo infinitamente e com pontos singulares regulares em \mathbb{C} pode ser obtido do operador $-\partial_x^2$ por meio de finitas transformações de Darboux.*

No caso dos potenciais racionais quadraticamente crescente, artigo [64], Oblomkov mostra que todo operador de Schrödinger unidimensional livre de monodromia pode ser obtido do operador de segunda ordem $L_0 = -\partial_x^2 + x^2$ por finitas transformações racionais de Darboux. Ele também encontra uma fórmula explícita para os potenciais correspondentes a essas transformações em função dos polinômios de Hermite. Para fazer suas análises, Oblomkov define o potencial racional como $V(x) = x^2 + R(x)$, onde $R(x)$ tende a zero quando x cresce indefinidamente. Esses resultados são apresentados nas afirmações abaixo. Antes, introduzimos a seguinte definição

Definição 5.3.1 [64]. *Um operador de Schrödinger unidimensional com potencial racional $V(x)$ é dito ser livre de monodromia se qualquer solução da equação*

$$L\psi(x) = \lambda\psi(x) \tag{5.34}$$

é avaliada em $x \in \mathbb{C}$ para qualquer $\lambda \in \mathbb{C}$.

A demonstração do teorema a seguir é o principal resultado em [64]. Tal teorema foi inicialmente proposto como uma conjectura por Veselov. Ele declara o seguinte

Teorema 5.3.2 [64]. *Cada operador de Schrödinger L , livre de monodromia com potencial racional quadraticamente crescente, tem a forma*

$$L = L_0 - 2 \frac{d^2}{dx^2} \log \text{Wr}[H_{n_1}(x), H_{n_2}(x), \dots, H_{n_k}(x)] \tag{5.35}$$

onde n_1, \dots, n_k é uma sequência crescente de inteiros positivos, $H_i(x)$ é o i -ésimo polinômio físico de Hermite e $L_0 = -\partial_x^2 + x^2$. A diferentes operadores livre de monodromias correspondem diferentes sequências n_1, \dots, n_k .

Vemos assim que todo operador de Schrödinger livre de monodromia com potencial racional crescendo quadraticamente pode ser obtido do hamiltoniano do oscilador harmônico $L_0 = -\partial_x^2 + x^2$ ao submetê-lo a um número finito de transformações de Darboux.

No artigo [35], Ullate, Grandati e Milson caracterizam todas as extensões racionais do oscilador harmônico que são exatamente solúveis por polinômios provando que qualquer operador solúvel por polinômios necessariamente possui monodromia trivial. Além disso, eles mostram que toda extensão racional, solucionável por polinômios, corresponde a um sistema polinomial ortogonal do tipo Hermite. Seguindo [35], apresentamos as seguintes definições

Definição 5.3.2 *Uma extensão racional do oscilador harmônico é um potencial da forma*

$$V(x) = x^2 + \frac{a(x)}{b(x)} \quad (5.36)$$

onde $a(x), b(x)$ são polinômios reais tais que $\text{gr } a(x) < \text{gr } b(x)$. Se $b(x) \neq 0$ para todo real x nós vamos dizer que o potencial é regular.

Definição 5.3.3 *Um hamiltoniano quântico*

$$L = \partial_x^2 + V(x) \quad (5.37)$$

é dito ser exatamente solúvel por polinômios se existem funções $\mu(x), \zeta(x)$ tais que para todo $m \in \mathbb{N}$ finito, existe um polinômio $y_m(x)$ de grau m tal que

$$\psi_m(x) = \mu(x) y_m(\zeta(x)) \quad (5.38)$$

é uma autofunção, no sentido \mathcal{H} (espaço de Hilbert), de L .

As duas proposições enunciadas a seguir aprofundam o estudo sobre o potencial $V(x)$. Como ficará evidente, tal potencial está intimamente relacionado com o potencial $V_N(x)$, obtido pela transformação de Darboux de ordem N , ilustrado na equação (4.52). Os próximos resultados assumem o potencial inicial dado por $V_1(x) = x^2$. Sendo assim, temos

Teorema 5.3.3 [35]. *Se $V(x)$ é uma extensão racional do oscilador harmônico que é exatamente solúvel por polinômios, então $V(x)$ tem a forma*

$$V(x) = x^2 - \partial_{xx} \log Wr[H_{k_1}, H_{k_1+1}, H_{k_2}, H_{k_2+1}, \dots, H_{k_l}, H_{k_l+1}], \quad (5.39)$$

onde Wr é o operador wronskiano, H_n é o polinômio de Hermite de grau n e onde

$$k_i + 1 < k_{i+1}, \quad i = 1, 2, \dots, l - 1. \quad (5.40)$$

Inversamente, cada potencial da forma mostrada acima é não-singular e solúvel por polinômios.

Para fazer a demonstração desse teorema, os autores Ullate, Grandati e Milson usam o seguinte resultado

Teorema 5.3.4 [35]. *Cada extensão racional do oscilador que é solúvel por polinômios necessariamente tem monodromia trivial.*

Segundo esses autores, de certa forma este último teorema fornece a declaração inversa do resultado provado por Oblomkov [64], Teorema 5.3.2 acima, provando portanto que monodromia trivial de uma extensão racional e solubilidade exata são equivalentes.

A partir daqui, vamos introduzir a notação usada por Pupasov em [70, 73] e apresentar seus principais resultados. Ele denota as extensões racionais do operador de Schrödinger inicial $H = -\partial_x^2 + x^2/4$, da seguinte forma

$$H^\sigma = H + \Delta V^\sigma(x) \quad (5.41)$$

onde σ representa uma sequência do tipo Krein-Adler de níveis de energia excluídos do espectro de H e $\Delta V^\sigma(x)$ é a diferença dos potenciais inicial e final. Uma sequência do tipo Krein-Adler é uma sequência crescente de inteiro não-negativos da forma

$$\sigma = \{n_1, n_1 + 1, \dots, n_M, n_M + 1\}, \quad \text{com } n_i + 1 < n_{i+1}, \quad i = 1, 2, \dots, M - 1. \quad (5.42)$$

Dizemos que σ tem comprimento $2M$ e denotamos por $|\sigma| = 2M$. Quando conveniente poderemos usar também um das notações

$$\sigma = \{\sigma[[1]], \dots, \sigma[[2M - 1]], \sigma[[-1]]\} \quad \text{ou} \quad \sigma = \{k_1, \dots, k_{2M-1}, k_{2M}\} \quad (5.43)$$

para representar a mesma sequência. Na representação (5.41), o potencial da extensão racional do oscilador é definido como a soma do potencial inicial e a diferença de potencial

$$V^\sigma(x) = \frac{x^2}{4} + \Delta V^\sigma(x), \quad (5.44)$$

com $\Delta V^\sigma(x) = V^\sigma(x) - V_{osc}(x)$.

O operador inicial H é obtido do hamiltoniano do oscilador harmônico com parâmetros físicos

$$H_{osc} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_X^2 + \frac{m\omega^2}{2} X^2 \quad (5.45)$$

fixando os valores $\omega = 1$, $m = 1/2$, $\hbar = 1$ ou, equivalentemente, introduzindo as variáveis adimensionais

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} x \quad \text{e} \quad T = \frac{t}{\omega} \quad \text{com} \quad \partial_X = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \partial_x \quad \text{e} \quad \partial_T = \omega \partial_t. \quad (5.46)$$

Se considerarmos as autofunções de H definidas em termo dos polinômios de Hermite probabilísticos normalizados $he_n(x)$

$$\psi_n(x) = he_n(x)e^{-x^2/4}, \quad he_n(x) = p_n H e_n(x), \quad p_n = (n! \sqrt{2\pi})^{-1/2}, \quad (5.47)$$

podemos escrever a diferença de potenciais da seguinte forma (usando $" \equiv d^2/dx^2 \equiv \partial_{xx}$)

$$\Delta V^\sigma(x) = -2 \left(\log W r \left[\psi_{\sigma[[1]]}, \psi_{\sigma[[2]]}, \dots, \psi_{\sigma[[-1]]}, x \right] \right)'' . \quad (5.48)$$

Portanto, as extensões racionais do oscilador harmônico sem parâmetros físicos, H , são dadas por [70, 73]

$$H^\sigma = H - 2 \left(\log Wr [\psi_{\sigma[[1]]}, \psi_{\sigma[[2]]}, \dots, \psi_{\sigma[[-1]]}, x] \right)'' . \quad (5.49)$$

Encontrar os auto-estados desse operador é parte importante do estudo das extensões racionais. Isso é que fazemos abaixo.

As autofunções de H^σ são obtidas por meio dos polinômios excepcionais de Hermite, também chamados de polinômios X_σ -Hermite. Tais polinômios são definidos a partir da sequência σ , sendo assim, o m -ésimo polinômio excepcional de Hermite é definido como

$$H_m^\sigma(x) := Wr[H_\sigma(x) \cup \{H_m(x)\}, x], \quad m \in \mathbb{N} \setminus \sigma, \quad (5.50)$$

no qual, $H_\sigma(x) := \{H_{k_1}(x), H_{k_2}(x), \dots, H_{k_{2M}}(x)\}$ e $H_m(x)$ é o m -ésimo polinômio físico de Hermite. Precisamente, as autofunções das extensões racionais do oscilador, denotadas por $\psi_n^\sigma(x)$, são dadas por meio dos polinômios excepcionais de Hermite normalizado

$$he_n^\sigma(x) = N_n Wr[he_\sigma(x), he_n(x), x], \quad (5.51)$$

onde N_n é a constante de normalização

$$N_n = \begin{cases} \left(\prod_{j=1}^{2M} (n - \sigma[[j]]) \right)^{-\frac{1}{2}}, & n \notin \sigma \\ 0, & n \in \sigma. \end{cases} \quad (5.52)$$

Sendo assim, as autofunções de H^σ são escritas da seguinte maneira [70, 73]

$$\psi_n^\sigma(x) = \frac{he_n^\sigma(x)}{Wr[He_\sigma(x), x]} e^{-x^2/4}. \quad (5.53)$$

O estudo dos polinômios X-Hermite é recente mas já existe uma vasta literatura sobre o assunto [20, 22, 31, 34, 35, 36, 39, 44, 53, 67, 76, 70, 73]. Relações de recorrência para essa nova classe de polinômios excepcionais podem ser encontradas nos artigos [11, 12, 25, 34, 35, 53]. Análises do determinante wronskiano dos polinômios de Hermite e suas raízes podem ser obtidas em [11, 25, 34, 53].

Os auto-estados do oscilador harmônico inicial, $\psi_n(x)$, e os auto-estados do oscilador harmônico estendido racionalmente, $\psi_n^\sigma(x)$, são relacionadas por meio do operador da transformação de Darboux L_{2M} de ordem $2M$, ver equação (4.50)

$$\psi_n^\sigma(x) = N_n L_{2M} \psi_n(x) \quad \text{onde} \quad L_{2M} f(x) = \frac{Wr[\psi_\sigma(x), f(x), x]}{Wr[\psi_\sigma(x), x]}. \quad (5.54)$$

Do capítulo 4, sabemos que, além da relação de supersimetria

$$L_{2M} H_{osc} = H^\sigma L_{2M}, \quad (5.55)$$

o operador de entrelaçamento L_{2M} , também cumpre as relações de decomposição

$$L_{2M}^+ L_{2M} = \prod_{j=1}^{2M} (H_{osc} - \sigma[[j]]) \quad e \quad L_{2M} L_{2M}^+ = \prod_{j=1}^{2M} (H^\sigma - \sigma[[j]]). \quad (5.56)$$

A extensão racional do oscilador harmônico H^σ também pode ser reescrita em termo dos polinômios de Hermite. Para isso, usamos a seguinte identidade [73]

$$\hat{W}(x) = e^{-\frac{Mx^2}{2}} W(x) \prod_{n=1}^{2M} p_{\sigma[[n]]}, \quad (5.57)$$

na qual

$$W(x) = Wr[He_\sigma(x), x] \quad e \quad \hat{W}(x) = Wr[\psi_\sigma(x), x], \quad (5.58)$$

são notações simplificadas do wronskiano dos polinômios de Hermite $He_\sigma(x)$ e do wronskiano das funções de ondas do oscilador $\psi_\sigma(x)$, respectivamente. Sendo assim, oscilador harmônico estendido racionalmente H^σ é reescrito da seguinte forma

$$H^\sigma = H - 2(\log W(x))'' + 2M, \quad (5.59)$$

onde os dois termos a direita de H são obtidos depois de derivar (5.57) duas vezes em relação a x e multiplicar o resultado por -2 .

Agora, vamos discutir sobre a relação entre os propagadores dos operadores hamiltonianos com parâmetro físicos H_{osc} e sem parâmetros físicos H . Assim, seja $K_{osc}(X, Y, T)$ a função de Green do oscilador harmônico com parâmetros físicos, dada pela equação (5.32) e seja $K_{osc}(x, y, t)$ a função de Green do oscilador sem parâmetros. Dessa forma,

$$\begin{aligned} (i\hbar\partial_T - H_{osc})_X K_{osc}(X, Y, T) &= 0 & \text{com} & & K_{osc}(X, Y, 0) &= \delta(X - Y), \\ (i\hbar\partial_t - H)_x K_{osc}(x, y, t) &= 0 & \text{com} & & K_{osc}(x, y, 0) &= \delta(x - y). \end{aligned} \quad (5.60)$$

Levando em consideração a propriedade da função delta de Dirac

$$\delta(X, Y, 0) = \delta\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(x - y)\right) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\delta(x, y, 0),$$

podemos escrever a seguinte regra de transformação

$$K_{osc}(x, y, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} K_{osc}(X(x), Y(y), T(t)). \quad (5.61)$$

Logo, a função de Green do hamiltoniano sem parâmetros físicos é dada por

$$K_{osc}(x, y; t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi i \sin t}} e^{\frac{i[(x^2+y^2)\cos t - 2xy]}{4 \sin t}}, \quad (5.62)$$

geralmente dizemos que essa função de Green é a (5.32) reduzida a unidades.

O propagador $K^\sigma(x, y; t)$ correspondente a extensão racional do oscilador harmônico H^σ , obtido por Pupasov em [70, 73], é definido por

$$K^\sigma(x, y; t) = K_{osc}(x, y; t) \frac{\sum_{k=0}^{\sigma[[-1]]+1} Q_k^\sigma(x, y) e^{-ikt}}{\sum_{k=0}^{\sigma[[-1]]+1} Q_k^\sigma(x, y)}, \quad (5.63)$$

onde $Q_k^\sigma(x, y)$ é um polinômio simétrico, chamado de polinômio de conexão não-linear, definido por [70, 73]

$$Q_k^\sigma(x, y) = \frac{1}{h_0(x)h_0(y)} \left(h_k^\sigma(x)h_k^\sigma(y) - \sum_{j=1}^k Q_{k-j}^\sigma(x, y)h_j(x)h_j(y) \right), \quad (5.64)$$

com $0 \leq k \leq \sigma[[-1]] + 1$. Vamos aprofundar mais o estudo sobre esse polinômio no último capítulo. Veremos importantes resultados lá.

Para obter as extensões racionais do oscilador harmônico (5.45) (dependente dos parâmetros físicos \hbar, m, ω) e os seus propagadores correspondentes, nós usamos os polinômios X-Hermite generalizados normalizados

$$he_n^{[\alpha]\sigma}(X) = N_n^{[\alpha]} Wr[he_\sigma^{[\alpha]}(X), he_n^{[\alpha]}(X), X] \quad (5.65)$$

no qual, $N_n^{[\alpha]}$ é a constante de normalização definida por

$$N_n^{[\alpha]} = \begin{cases} \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \right)^{2M} \left(\prod_{i=1}^{|\sigma|} (\hbar\omega(n - \sigma[[i]])) \right)^{-1/2}, & n \notin \sigma \\ 0, & n \in \sigma. \end{cases} \quad (5.66)$$

e onde $he_n^{[\alpha]}(x)$ é o polinômio de Hermite generalizado (2.41) normalizado, definido da seguinte forma

$$he_n^{[\alpha]}(X) = \left(\alpha^n n! \sqrt{2\pi\alpha} \right)^{-1/2} He_n^{[\alpha]}(X). \quad (5.67)$$

A constante de normalização $N_n^{[\alpha]}$ é obtida da renormalização de N_n , para isso, notamos que os níveis de energia de H_{osc} diferem dos níveis de energia de H por um múltiplo de $\hbar\omega$ e que a relação entre as energias cinéticas desses hamiltonianos é $\partial_x \rightarrow \hbar/\sqrt{2m} \partial_X$.

Finalmente, levando em conta que $\alpha := \hbar/(2m\omega)$, nós obtemos as seguintes extensões racionais do oscilador com parâmetros físicos

$$H^{[\alpha]\sigma} = H_{osc} - \frac{\hbar^2}{m} (\log Wr[\psi_\sigma^{[\alpha]}(X), X])'', \quad (5.68)$$

em que $\psi_\sigma^{[\alpha]}(X)$ é o conjunto formado pelas autofunções do hamiltoniano H_{osc} , isto é, $\psi_\sigma^{[\alpha]}(X) = \{\psi_{k_1}^{[\alpha]}(X), \dots, \psi_{k_{2M}}^{[\alpha]}(X)\}$. Cada elemento do conjunto $\psi_\sigma^{[\alpha]}(X)$ é definido como

$$\psi_n^{[\alpha]}(X) := he_n^{[\alpha]}(X) e^{-X^2/4\alpha}. \quad (5.69)$$

Note que, o potencial da extensão como parâmetros físicos (5.68) é

$$V^{[\alpha]\sigma}(X) = \frac{m\omega^2}{2}X^2 - \frac{\hbar^2}{m}(\log Wr[\psi_\sigma^{[\alpha]}(X), X])'' \quad (5.70)$$

e, portanto, a diferença de potencial é encontrada fazendo $\Delta V^{[\alpha]\sigma}(X) = V^{[\alpha]\sigma}(X) - V_{osc}(X)$.

O propagador associado a extensão (5.68) é obtido usando o fato de que as fases são dadas por $e^{-iE_n T/\hbar}$. Sendo assim, chegamos a seguinte expressão

$$K^{[\alpha]\sigma}(X, Y; T) = K_{osc}(X, Y; T) \frac{\sum_{k=0}^{\sigma[[-1]]+1} Q_k^{[\alpha]\sigma}(X, Y) e^{-i\omega T k}}{\sum_{k=0}^{\sigma[[-1]]+1} Q_k^{[\alpha]\sigma}(X, Y)}, \quad (5.71)$$

onde o polinômio de conexão não-linear é definido por, $Q_k^{[\alpha]\sigma}(X, Y) := Q_k^{[\alpha]\sigma}$:

$$Q_k^{[\alpha]\sigma} = \frac{1}{he_0^{[\alpha]}(X)he_0^{[\alpha]}(Y)} \left(he_k^{[\alpha]\sigma}(X)he_k^{[\alpha]\sigma}(Y) - \sum_{j=1}^k Q_{k-j}^{[\alpha]\sigma} he_j^{[\alpha]}(X)he_j^{[\alpha]}(Y) \right). \quad (5.72)$$

Por fim, as autofunções normalizadas da extensão racional (5.68) são expressas por

$$\psi_n^{[\alpha]\sigma}(X) = \frac{he_n^{[\alpha]\sigma}(X)}{Wr[he_\sigma^{[\alpha]}(X), X]} e^{-X^2/4\alpha}. \quad (5.73)$$

Ressaltamos que, quando considerarmos $\alpha = 1$ nós omitiremos sua representação, assim, denotaremos a extensão por H^σ , o potencial por $V^\sigma(X)$, o propagador por $K^\sigma(X, Y; T)$, a diferença de potencial por $\Delta V^\sigma(X)$ e as auto-funções por $\psi_n^\sigma(X)$.

Abaixo, apresentamos alguns gráficos de $|K^\sigma(X, Y; T)|^2$ e algumas tabelas de $Q_k^{[\alpha]\sigma}(X, Y)$ para valores específicos de α e sequências σ 's. A observação das tabelas dos polinômio de conexão, juntamente com análise de outros resultados computacionais (para sequências σ 's mais complexas do que as apresentadas abaixo), nos conduziram a obter um lema sobre os graus de cada $Q_k^\sigma(X, Y)$. Esse lema é um dos nossos principais resultados. Ele é apresentado no Capítulo 7.

5.3.1 Propagador para extensão racional do oscilador harmônico de um poço

O potencial da extensão racional do oscilador com um poço, pode ser obtido usando a sequência $\sigma = \{1, 2\}$ na expressão (5.70). Fazendo isso, obtemos

$$V^{[\alpha]\{1,2\}}(X) = \frac{\omega(4m^3 X^6 \omega^3 + 20m^2 X^4 \omega^2 \hbar + 33m X^2 \omega \hbar^2 - 4\hbar^3)}{2(2m X^2 \omega + \hbar)^2}.$$

Expressões explícitas dos polinômios de conexão $Q_k^{[\alpha]\{1,2\}}(X, Y)$ são dados na Tabela 2. Eles nos permite construir o propagador $K^{[\alpha]\{1,2\}}(X, Y; T)$. Na Figura 3 obtemos a densidade de probabilidade desse propagador fazendo $\hbar = \omega = 1$ e $m = 1/2$ (constante $\alpha = \hbar/2m\omega = 1$). O espectro do hamiltoniano $H^{[\alpha]\{1,2\}}$ é quase-equidistante, $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, $n \in \mathbb{N} \setminus \{1, 2\}$. O estado fundamental é separado da parte equidistante do espectro por duas lacunas de energias. A relação entre número de poços de $V^{[\alpha]\sigma}(X)$ e σ é definida na página 71.

k	$Q_k^{[\alpha]\{1,2\}}(X, Y)$
0	$\frac{m\omega^2}{\pi}$
1	$-\frac{2m^2\omega^3XY}{\pi\hbar}$
2	$\frac{m\omega^2(4m^2\omega^2X^2Y^2+2m(X^2+Y^2)-\hbar^2)}{2\pi\hbar^2}$
3	$\frac{2m^2\omega^2XY}{\pi\hbar}$

Tabela 2 – Sequência de polinômios de conexão $Q_k^{[\alpha]\{1,2\}}(X, Y)$

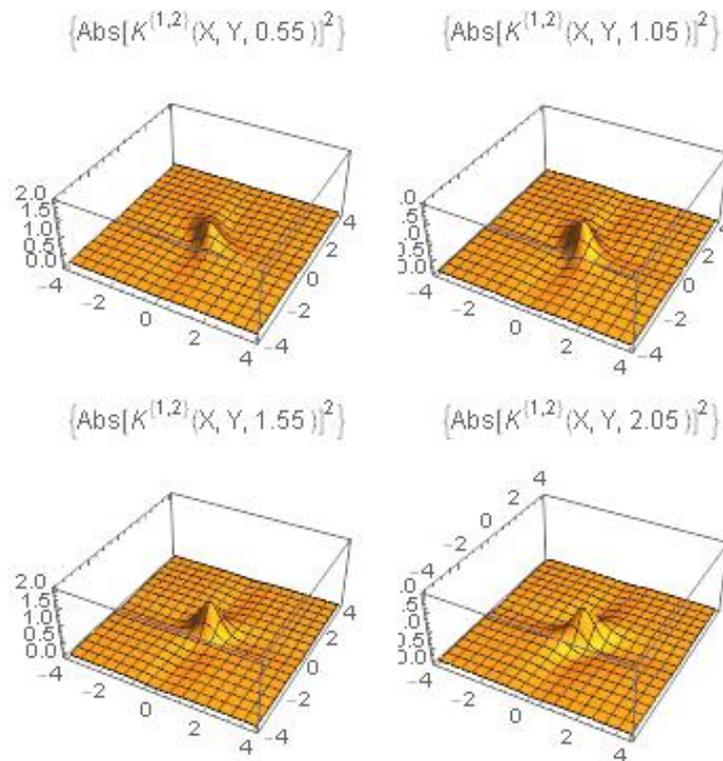


Figura 3 – Probabilidade de transição definida por $|K^{\{1,2\}}(X, Y; T)|^2$.

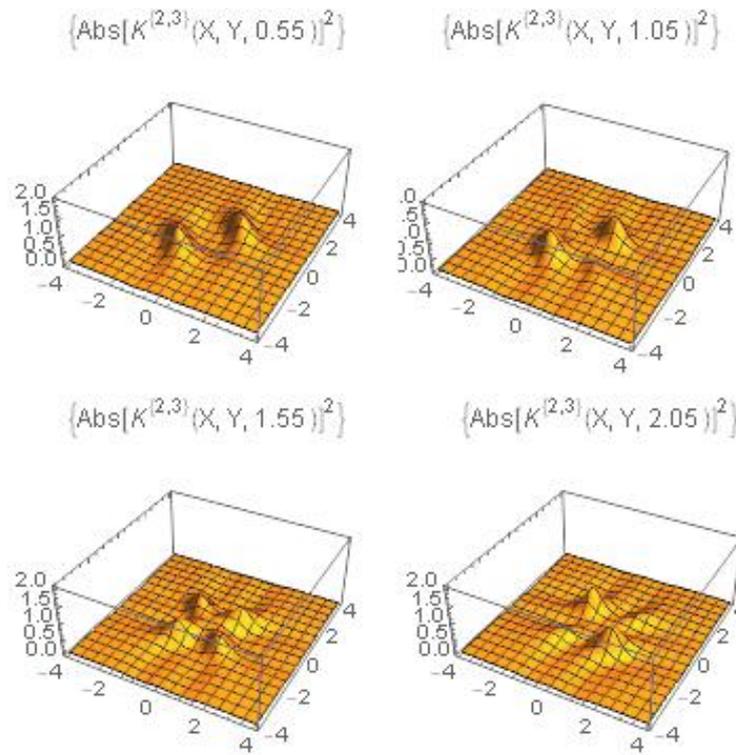
5.3.2 Propagador para extensão racional do oscilador harmônico de dois poços

Uma das sequências que nos fornece o potencial da extensão racional com dois poços é $\sigma = \{2, 3\}$. Sendo assim, aplicada essa sequência em (5.70), encontramos

$$V^{[\alpha]\{2,3\}}(X) = \frac{16m\omega^2\hbar^2(4m^2\omega^2X^6 - 9\hbar^2X^2)}{(4m^2\omega^2X^4 + 3\hbar^2)^2} + \frac{m\omega^2}{2}X^2 + 2\hbar\omega.$$

Os polinômios de conexão $Q_k^{[\alpha]\{2,3\}}(X, Y)$ são apresentados na Tabela 3. Tais polinômios de conexão nos permite calcular o propagador $K^{[\alpha]\{2,3\}}(X, Y; T)$. Na Figura 3 apresentamos sua densidade de probabilidade para a constante $\alpha = 1$. O espectro da extensão $H^{[\alpha]\{2,3\}}$ é quase-equidistante, $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, $n \in \mathbb{N} \setminus \{2, 3\}$. O estado fundamental e o primeiro estado excitado são separados da parte equidistante do espectro por duas lacunas de energias.

k	$Q_k^{[\alpha]\{2,3\}}(X, Y)$
0	$\frac{m\omega^2(2m\omega X^2 + \hbar)(2m\omega Y^2 + \hbar)}{2\pi\hbar^2}$
1	$\frac{-8m^4\omega^5 X^3 Y^3 + 6m^2\omega^3 \hbar^2 XY}{3\pi\hbar^3}$
2	$\frac{16m^5\omega^6 X^4 Y^4 + 12m^3\omega^4 \hbar^2 (X^4 - 4X^2 Y^2 + Y^2) - 3m\omega^2 \hbar^4}{12\pi\hbar^4}$
3	$\frac{8m^4\omega^5 X^3 Y^3 - 6m^2\omega^3 \hbar^2 XY}{3\pi\hbar^3}$
4	$\frac{m\omega^2(2m\omega X^2 - \hbar)(2m\omega Y^2 - \hbar)}{2\pi\hbar^2}$

Tabela 3 – Sequência de polinômios de conexão $Q_k^{[\alpha]\{2,3\}}(X, Y)$ Figura 4 – Probabilidade de transição definida por $|K^{\{2,3\}}(X, Y; T)|^2$.

5.3.3 Propagador para extensão racional do oscilador harmônico de três poços

Por fim, o potencial da extensão racional do oscilador harmônico com três poços pode ser obtido usando a sequência $\sigma = \{3, 4\}$. Sendo assim, a equação (5.70) nos dá

$$V^{\{3,4\}}(X) = \frac{X^2}{4} + \frac{12(X^4 - 15)}{X^6 - 3X^4 + 9X^2 + 9} - \frac{1296(X^4 - 2X^2 - 1)}{(X^6 - 3X^4 + 9X^2 + 9)^2} + 2.$$

Para reduzir a expressão desse potencial usamos $\alpha = 1$ ($\hbar = \omega = 1, m = 1/2$). Os polinômios de conexão $Q_k^{[\alpha]\{3,4\}}(X, Y)$ são enumerados na Tabela 3. Com esses polinômios encontramos o propagador $K^{\{3,4\}}(X, Y; T)$. A Figura 5 mostra a densidade de probabilidade desse propagador. O espectro do hamiltoniano $H^{[\alpha]\sigma}$ é quase-equidistante,

$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, $n \in \mathbb{N} \setminus \{3, 4\}$. O estado fundamental e os dois primeiros estados excitados são separado da parte equidistante do espectro por duas lacunas de energias.

Observando as tabelas 2, 3 e 4 vemos que os polinômios de conexão $Q_k^{[\alpha]\sigma}(X, Y)$ pares têm limites finitos quando $\hbar \rightarrow \infty$, enquanto os ímpares são zeros. Quando consideramos os polinômios de conexão como funções racionais de \hbar, m, ω podemos ver que $\hbar \rightarrow 0$ é ponto singular para todo $Q_k^{[\alpha]\sigma}(X, Y)$.

k	$Q_k^{[\alpha]\{3,4\}}(X, Y)$
0	$\frac{(4m^5\omega^5X^4+3m^3\omega^3\hbar^2)(4m^5\omega^5Y^4+3m^3\omega^3\hbar^2)}{12\pi m^5\omega^4\hbar^4}$
1	$-\frac{m^2\omega^3XY(16m^4\omega^4X^4Y^4-16m^3\omega^3\hbar X^2Y^2(X^2+Y^2)+4m^2\omega^2\hbar^2(3X^4-4X^2Y^2+3Y^4)-12m\omega\hbar^3(X^2+Y^2)+9\hbar^4)}{12\pi\hbar^5}$
2	$\frac{m\omega^2}{144\pi\hbar^6}(64m^6\omega^6X^6Y^6-96m^5\omega^5\hbar X^4Y^4(X^2+Y^2)+48m^4\omega^4\hbar^2 X^2Y^2(3X^4-7X^2Y^2+3Y^4)+72m^3\omega^3\hbar^3(X^2+Y^2)(X^4+Y^4)-36m^2\omega^2\hbar^4(5X^4-9X^2Y^2+5Y^4)-54m\omega\hbar^5+27\hbar^6)$
3	$\frac{m^2\omega^3XY(16m^4\omega^4X^4Y^4-16m^3\omega^3\hbar X^2Y^2(X^2+Y^2)+4m^2\omega^2\hbar^2(3X^4-8X^2Y^2+3Y^4)+12m\omega\hbar^3(X^2+Y^2)-27\hbar^4)}{12\pi\hbar^5}$
4	$\frac{m\omega^2(16m^4\omega^4X^4Y^4-16m^3\omega^3\hbar X^2Y^2(X^2+Y^2)-4m^2\omega^2\hbar^2(X^4+Y^4)+12m\omega\hbar^3(X^2+Y^2)-3\hbar^4)}{8\pi\hbar^4}$
5	$\frac{m^2\omega^3XY(2m\omega X^2-3\hbar)(2m\omega Y^2-3\hbar)}{2\pi\hbar^3}$

Tabela 4 – Sequência de polinômios de conexão $Q_k^{[\alpha]\{3,4\}}(X, Y)$

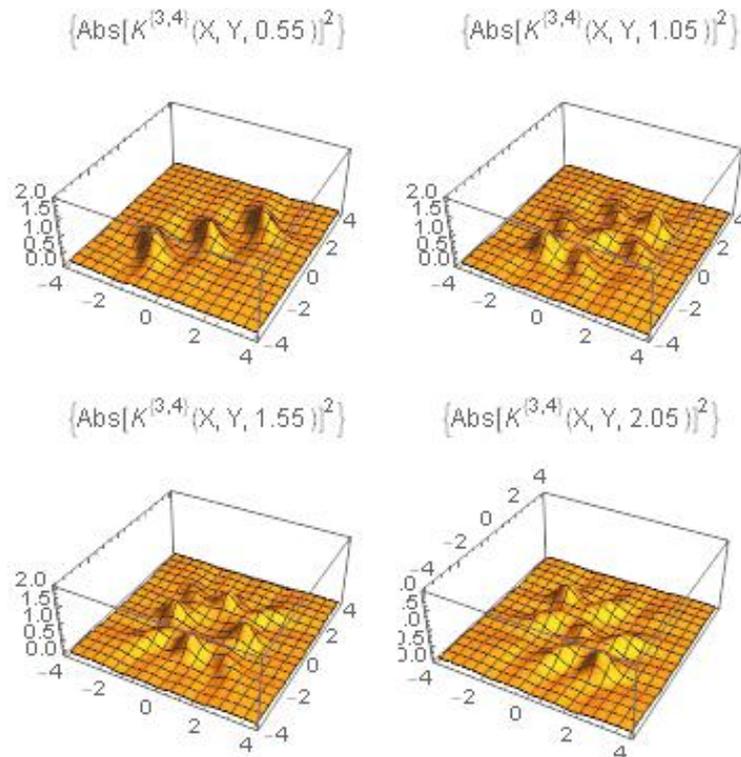


Figura 5 – Probabilidade de transição definida por $|K^{\{3,4\}}(X, Y; T)|^2$.

6 ESTUDO DE MÉTODOS APROXIMADOS NO CASO DE EXTENSÕES RACIONAIS DO OSCILADOR

Raramente é possível resolver as equações da mecânica quântica em forma analítica. No caso 1D, maioria dos problemas com soluções exatas tem potenciais com alta simetria e topologia bem simples. Teoria da perturbação, métodos variacionais lineares (e não linear) e método de Wentzel–Kramers–Brillouin (WKB) são os principais métodos para calcular soluções (níveis de energia e funções de onda) nos casos de potenciais arbitrárias.

Nesse capítulo vamos aplicar teoria da perturbação e métodos variacionais para extensões racionais de oscilador harmônico. Comparando os resultados aproximados e analíticos nos vamos analisar a influencia da estrutura do potencial na qualidade da aproximação.

6.1 TEORIA DA PERTURBAÇÃO ESTACIONÁRIA

A teoria da perturbação é dividida em dois casos, o primeiro é dependente do tempo e o segundo é independente do tempo (estacionário). Nesse trabalho estamos interessados no segundo caso, o qual chamaremos simplesmente de teoria da perturbação. Na física quântica, essa é uma ferramenta útil para fazer correções nas autoenergias e autoestados da equação de Schrödinger.

Para aplicarmos a teoria da perturbação necessitamos de um sistema quântico sujeito a uma pequena alteração. Sendo assim, vamos denotar o sistema perturbado da seguinte forma

$$H = H_0 + \lambda \hat{V} \quad (6.1)$$

onde H_0 é o sistema inicial (não perturbado) e λ é um parâmetro real pequeno. Nessa equação, $\lambda \hat{V}$ é chamado termo perturbativo. Agora, consideramos as equações de Schrödinger para o sistema não-perturbado e perturbado

$$H_0 \psi_n^{(0)}(x) = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}(x) \quad \text{e} \quad H \psi(x) = E \psi(x), \quad (6.2)$$

respectivamente. Aqui, estamos assumindo que o espectro de H_0 é não-degenerado. Note que, no limite $\lambda \rightarrow 0$, a equação (6.1) reduz-se ao sistema inicial. Dessa forma, faz sentido tomarmos as expansões de Maclaurin em λ das autoenergias e autoestados do sistema perturbado. Logo, devemos escrever

$$E = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad \text{e} \quad \psi = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots \quad (6.3)$$

Dizemos que $E_n^{(m)}$ fornece a m -ésima correção de autoenergia e $\psi_n^{(m)}$ a m -ésima correção de autoestado. Substituindo as duas expansões na segunda equação de (6.2), temos

$$(H_0 + \lambda \hat{V})(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots).$$

Igualando os termos correspondentes das potências em λ , ficamos com

$$\begin{aligned}
\lambda^0 : \quad & H_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \\
\lambda^1 : \quad & H_0 \psi_n^{(1)} + \hat{V} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} \\
\lambda^2 : \quad & H_0 \psi_n^{(2)} + \hat{V} \psi_n^{(1)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(2)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(0)} \\
& \dots \\
\lambda^m : \quad & H_0 \psi_n^{(m)} + \hat{V} \psi_n^{(m-1)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(m)} + \dots + E_n^{(m)} \psi_n^{(0)} \\
& \dots
\end{aligned}$$

Note que, os termos para λ^0 corresponde a equação inicial de Schrödinger. Os outros termos fornecem as demais correções. Na prática, para obtermos aproximações exatas, precisamos apenas das correções de primeira e segunda ordem. Assim, mostramos os passos dessas duas correções, em seguida, generalizamos sem o devido detalhamento. Por sua pequena relevância em nosso trabalho, os passos das correções de segunda ordem dos autoestados são omitidos.

1) Correções de autoenergias de primeira ordem

Para fazer as correções de autoenergias de primeira ordem, devemos resolver a equação para λ^1 , isto é, a equação

$$H_0 \psi_n^{(1)} + \hat{V} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)}. \quad (6.4)$$

Suponhamos que as funções $\psi_n^{(1)}(x)$ sejam dadas pela combinação linear das soluções ortonormais do sistema inicial em (6.2)

$$\psi_n^{(1)}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} C_m \psi_m^{(0)}. \quad (6.5)$$

Fazendo essa substituição em (6.4), multiplicando ambos os membros por $\psi_n^{(0)}$ e integrando em x , obtemos

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} H_0 \sum_{m=0}^{\infty} C_m \psi_m^{(0)} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx \\
= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} E_n^{(0)} \sum_{m=0}^{\infty} C_m \psi_m^{(0)} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} dx
\end{aligned}$$

Reorganizando essa equação e usando o fato do operador H_0 ser hermitiano, geramos

$$\begin{aligned}
\sum_{m=0}^{\infty} C_m \int_{-\infty}^{\infty} E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \psi_m^{(0)} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx \\
= E_n^{(0)} \sum_{m=0}^{\infty} C_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \psi_m^{(0)} dx + E_n^{(1)} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \psi_n^{(0)} dx.
\end{aligned}$$

Note que, podemos cancelar o primeiro termo do lado esquerdo como o primeiro termo do lado direito, além disso, usando a propriedade de ortonormalidade das soluções $\psi_n^{(0)}$, chegamos ao seguinte resultado

$$E_n^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx. \quad (6.6)$$

Finalmente, com essa expressão podemos realizar a correção de energia de primeira ordem como segue (rever primeira equação em (6.3))

$$E = E_n^{(0)} + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx + \mathcal{O}_2(\lambda). \quad (6.7)$$

2) Correções de autoestados de primeira ordem

Para determinarmos as correções de autoestados de primeira ordem nós devemos obter uma fórmula explícita para a constante C_m do somatório (6.5). Com esse objetivo, nós realizamos um processo análogo ao anterior, mas agora, multiplicando por $\psi_k^{(0)}$, $k \neq n$. Sendo assim, temos

$$\begin{aligned} E_k^{(0)} \sum_{m=0}^{\infty} C_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^{(0)} \psi_m^{(0)} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx \\ = E_n^{(0)} \sum_{m=0}^{\infty} C_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^{(0)} \psi_m^{(0)} dx + E_n^{(1)} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^{(0)} \psi_n^{(0)} dx. \end{aligned}$$

Usando as propriedades de ortonormalidade das soluções $\psi_k^{(0)}$, produzimos

$$E_k^{(0)} C_k + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx = E_n^{(0)} C_k.$$

Logo, chegamos a

$$C_k = \frac{\int \psi_k^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (6.8)$$

Portanto, as funções que fornecem as correções de autoestados de primeira ordem $\psi_n^{(1)}$, equação (6.5), são dadas pela expressão

$$\psi_n^{(1)}(x) = \sum_{k \neq n} \frac{\int \psi_k^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)}. \quad (6.9)$$

Sendo assim, as correções de primeira ordem dos autoestados são obtidas por (rever segunda equação em (6.3))

$$\psi = \psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{\int \psi_k^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)} + \mathcal{O}_2(\lambda). \quad (6.10)$$

3) Correções de autoenergias de segunda ordem

Fazemos as correções de autoenergias de segunda ordem usando a seguinte equação (equação obtida para λ^2 na sequência exposta acima)

$$H_0 \psi_n^{(2)} + \hat{V} \psi_n^{(1)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(2)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(0)}. \quad (6.11)$$

Agora, assumindo que $\psi_n^{(1)}$ é dada pela combinação linear ($m \neq n$)

$$\psi_n^{(1)}(x) = \sum_{m \neq n} C_m \psi_m^{(0)}, \quad (6.12)$$

multiplicando (6.11) por $\psi_n^{(0)}$ e integrando, temos

$$\begin{aligned} E_n^{(0)} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \psi_n^{(2)} dx + \sum_{m \neq n} C_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \hat{V} \psi_m^{(0)} dx \\ = E_n^{(0)} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \psi_n^{(2)} dx + E_n^{(1)} \sum_{m \neq n} C_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \psi_m^{(0)} dx + E_n^{(2)} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \psi_n^{(0)} dx. \end{aligned}$$

Fazendo as devidas simplificações, produzimos

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} C_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \hat{V} \psi_m^{(0)} dx.$$

Finalmente, usando a expressão (6.8) para C_m , obtemos o principal resultado da teoria de perturbação de segunda ordem

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\left| \int \psi_m^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx \right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (6.13)$$

Portanto, as correções de energia de segunda ordem são obtidas da seguinte forma

$$E = E_n^{(0)} + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{\left| \int \psi_m^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx \right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \mathcal{O}_3(\lambda). \quad (6.14)$$

Poderíamos continuar o processo e calcular as correções de autoestados de segunda ordem $\psi_n^{(1)}$, a correção de autoenergias de terceira ordem, e assim por diante, mas segundo [40], na prática, a equação (6.13) é o quão longe podemos ir normalmente no exercício desse método.

3) Correções de autoenergias e autoestados de p -ésima ordem

Para fazermos correções de p -ésima ordem nas autoenergias usamos a seguinte fórmula

$$E_n^{(p)} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{(0)} \hat{V} \psi_n^{(p-1)} \quad (6.15)$$

enquanto que, usamos

$$\psi_n^{(p)} = \sum_{k \neq n} \frac{(\psi_k^{(0)})^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \left(\hat{V} \psi_n^{(p-1)} - \sum_{k=1}^{p-1} E_n^{(k)} \psi_n^{(p-k)} \right) \quad (6.16)$$

para realizarmos as correções de p -ésima ordem nos autoestados.

Agora, vamos aplicar a teoria da perturbação para as extensões racionais do oscilador. Sendo assim, faremos as correções de energia de primeira e segunda ordem em tais extensões. Como vimos na seção anterior, nosso sistema perturbado é dado por

$$H^{[\alpha]\sigma} = H_{osc} - \frac{\hbar^2}{m} (\log W r[\psi_\sigma^{[\alpha]}(X), X])'', \quad (6.17)$$

onde H_{osc} é o sistema inicial não perturbado e o termo perturbativo é a parcela com wronskiano

$$\Delta V^{[\alpha]\sigma} = -\frac{\hbar^2}{m} (\log W r[\psi_\sigma^{[\alpha]}(X), X])''. \quad (6.18)$$

Para simplificar os cálculos, seguindo [64], reescrevemos o termo perturbativo da seguinte forma

$$\Delta V^{[\alpha]\sigma} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i(m_i + 1)}{(X - X_i)^2} + C, \quad (6.19)$$

os números $m_i \in \mathbb{N}$ são chamados de multiplicidades do polo X_i de $\Delta V^{[\alpha]\sigma}$ e C é constante que depende de σ . Dessa forma, usando a definição das autofunções $\psi_n^{[\alpha]}(X)$ em (5.69) e a diferença de potencial (6.19), as correções de energia de primeira e segunda ordem são obtidas com a ajuda da seguinte integral-mestre (produto de uma função Gaussiana por uma função racional)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-X^2}}{(X - xp)^2} dX = \frac{d}{d xp} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-X^2}}{X - xp} dX,$$

onde xp é o polo. Usando essa relação, encontramos o seguinte resultado para a integral-mestre, parte imaginária de xp diferente de zero

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-X^2}}{(X - xp)^2} dX = -2e^{-xp^2} xp \left(-\pi \operatorname{Erfi}(xp) + \log\left(-\frac{1}{xp}\right) + \log(xp) \right) - 2\sqrt{\pi}, \quad (6.20)$$

onde i é a unidade imaginária e $\operatorname{Erfi}(xp) = -i \operatorname{Erf}(i xp)$ é a função erro imaginária, introduzida por Gauss. Abaixo, nós obtivemos as correções de energia para as três sequências distintas, $\sigma_1 = \{1, 2\}$, $\sigma_2 = \{2, 3\}$ e $\sigma_3 = \{3, 4\}$. Também consideramos a constante $\alpha = 1$ ($\hbar \rightarrow 1$, $\omega \rightarrow 1$, $m \rightarrow 1/2$). Para desenvolver os cálculos e construir os gráficos utilizamos o Software Computacional Wolfram Mathematica.

Nas figuras 6, 7 e 8 representamos graficamente as correções de primeira e segunda ordem por meio dos traços horizontais em azul (eles forma o espectro da extensão racionais H^σ). Também em azul, representamos os gráficos dos potenciais $V^\sigma(X)$. Em vermelho temos o espectro e o potencial do oscilador harmônico (iguais em todos os gráficos). Os traços inclinados em preto estabelece a relação entre os níveis de energia do oscilador e as respectivas correções. Assim, tais traços conectam a energia fundamental do oscilador à energia fundamental da extensão, conectam a energia do primeiro estado excitado do oscilador à energia do primeiro estado excitado da extensão, e assim por diante. Eles foram representados apenas para facilitar nossa visualização.

Vamos analisar a Figura 6. No modelo ideal, o espectro da extensão racional $H^{\{1,2\}}$, a partir do primeiro estado excitado, é deslocado dois níveis de energia quando comparado com o espectro do oscilador. Assim, o primeiro nível de energia de $H^{\{1,2\}}$ deve coincidir com o terceiro níveis de energia de H_{osc} , o segundo nível de $H^{\{1,2\}}$ ao quarto de H_{osc} , e assim por diante. Olhando para o gráfico (a) da Figura 6, vemos que esse fato fica evidente a partir do terceiro nível excitado da extensão (quinto nível excitado do oscilador). Enquanto que, no gráfico (b), maior precisão já é atingida a partir do primeiro estado excitado da extensão. Os estados fundamentais do oscilador e da extensão também coincidem na situação ideal. Mas em ambas as correções, (a) e (b), esse resultado não

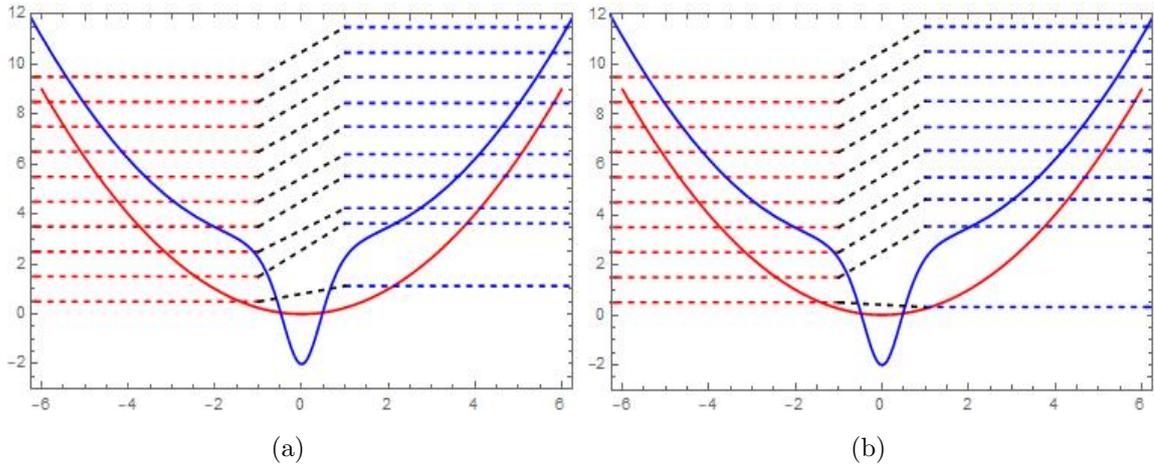


Figura 6 – Correções de primeira (a) e segunda (b) ordem para $\sigma_1 = \{1, 2\}$.

Fonte: Dados da pesquisa.

é atingido, nomeadamente, elas diferem da energia fundamental do oscilador em ≈ 0.62 (acima) na primeira correção e ≈ 0.19 (abaixo) na segunda correção.

Na situação ideal para a sequência $\sigma_2 = \{2, 3\}$, o nível de energia do segundo estado excitado da extensão $H^{\{2,3\}}$ deve corresponder ao quarto nível de energia do oscilador, e assim por diante. Já as energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado da extensão devem permanecer iguais aos do oscilador. Note que, as correções de primeira ordem, representadas no gráfico (a) da Figura 7, não são boas para os quatro primeiros

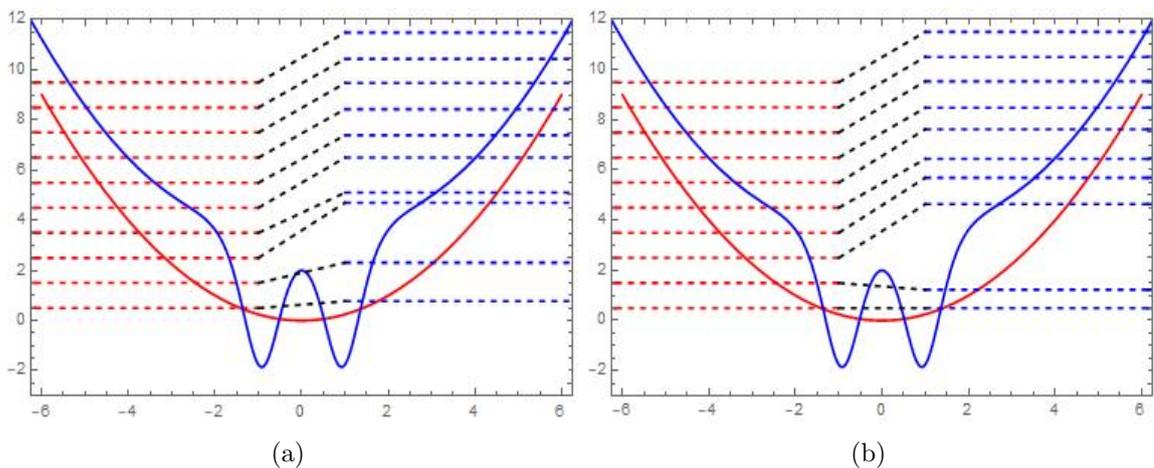


Figura 7 – Correções de primeira (a) e segunda (b) ordem para $\sigma_2 = \{2, 3\}$.

Fonte: Dados da pesquisa.

níveis de energia (incluindo o nível do estado fundamental). As correções de segunda ordem apresentadas em (b) são boas mais ainda contem pequenos desvios nos primeiros níveis.

Por fim, para a sequência $\sigma_3 = \{3, 4\}$, o ideal é que os três primeiros níveis de

energia da extensão $H^{\{3,4\}}$ e do oscilador coincidam mas o terceiro nível excitado da extensão deve corresponder ao quinto nível excitado do oscilador e assim por diante. Observando o gráfico (a) da Figura 8, vemos um erro acentuado na correção de primeira

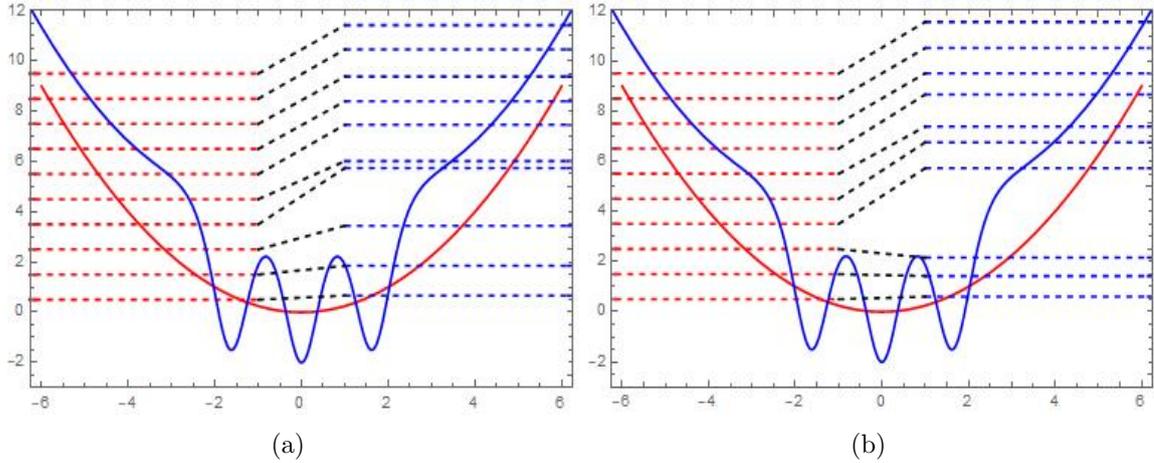


Figura 8 – Correções de primeira (a) e segunda (b) ordem para $\sigma_3 = \{3, 4\}$.
Fonte: Dados da pesquisa.

ordem para o quarto nível excitado da extensão. Esse erro é parcialmente contornado na correção de segunda ordem ilustrada no gráfico (b), no entanto, o quinto estado excitado sofre uma pequena perturbação nesse processo de correção.

Observando e comparando as figuras 6, 7 e 8 vemos que os gráficos dos potenciais $V^{\{1,2\}}$, $V^{\{2,3\}}$ e $V^{\{3,4\}}$ diferem quanto ao número de poços (um, dois e três poços, respectivamente). Essa diferença reside na presença, ou não, dos parâmetros s, h (splitting) e g (gap) em σ_1, σ_2 e σ_3 . A sequência σ_1 possui apenas o parâmetro s , σ_2 possui s e g , por fim, a sequência σ_3 possui s, h e g . Esse três valores (s, h, g), são muito importantes no estudo da topologia dos potenciais das extensões. O parâmetro s é dado pela divisão do primeiro estado excitado pelo estado fundamental, $\Delta E_s = E_1^\sigma - E_0^\sigma = 2s + 1$, $s = 0, 1, 2, \dots$; h é obtido pela divisão entre o segundo e primeiro estado excitado, $\Delta E_h = E_2^\sigma - E_1^\sigma = 2h + 1$, $h = 0, 1, 2, \dots$; finalmente, o parâmetro g é dado pela lacuna entre o segundo e terceiro estado excitado, $\Delta E_g = E_3^\sigma - E_2^\sigma = 2g + 1$, $g = 1, 2, 3, \dots$. Dependendo da sequência, mais parâmetros de splitting podem ser necessários (s, h, k, l , etc). Para exemplificar, vamos tomar a sequência $\sigma = \{1, 2, 4, 5, 7, 8\}$. Ela possui s, h e g . Nesse caso, temos $\Delta E_s = 3 - 0 = 2s + 1 \implies s = 1$; $\Delta E_h = 6 - 3 = 2h + 1 \implies h = 1$; e $\Delta E_g = 9 - 6 = 2g + 1 \implies g = 1$. Veja [70].

A Figuras 9 ilustra os gráficos de $V^\sigma(X)$ sobre o plano complexo, para σ_1 em (a), σ_2 em (b) e σ_3 em (c). Nesse tipo de gráfico, cada ponto possui uma cor e intensidade que o distingue dos demais. As cores representam as fases (ou argumento do número complexo), enquanto a intensidade representa o módulo desses números. Em torno da origem as cores obedecem a seguinte sequência (início \rightarrow fim) ciano ($-\pi$), azul ($\mp 2\pi/3$), magenta ($\mp \pi/3$),

vermelho (0), amarelo ($\pm\pi/3$) e verde ($\pm2\pi/3$). A intensidade representa o valor absoluto do número complexo, indo do preto (0) ao branco ($+\infty$). Assim, os zeros são representados por um ponto preto e os polos por um ponto branco. Em torno dos zeros de uma função as cores percorrem o sentido anti-horário ($-\pi, -2\pi/3, -\pi/3, 0, \pi/3, 2\pi/3$), enquanto que em torno dos polos, elas percorrem o sentido horário ($-\pi, 2\pi/3, \pi/3, 0, -\pi/3, -2\pi/3$). Quando as raízes ou polos possuem multiplicidades as cores repetem-se o mesmo número dessas multiplicidades (o sentido não muda).

Analisando a Figura 9 localizamos facilmente os zeros e os polos de $V^\sigma(X)$. Note que, em torno das raízes (pontos preto) as cores não repetem (raízes sem multiplicidade) mas em torno de cada polo (região branca) elas repetem duas vezes (polos tem multiplicidade dois). Raízes e polos formam pares conjugados e simétricos em relação ao eixo imaginário. Assim, no gráfico (a) podemos ver seis raízes e dois polos para $V^{\sigma_1}(X)$. No gráfico (b) identificamos dez raízes e quatro polos para o potencial $V^{\sigma_2}(X)$. Por fim, no gráfico (c) visualizamos quatorze raízes e seis polos para $V^{\sigma_3}(X)$. Na Figura 10 representamos os

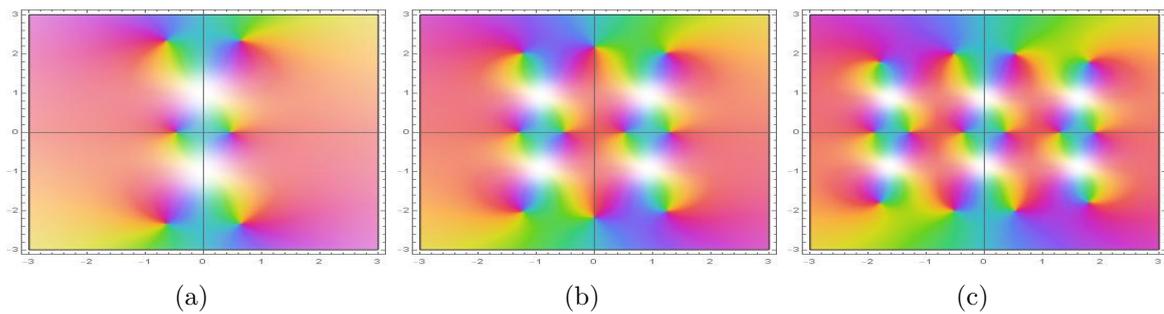


Figura 9 – Polos e raízes dos potenciais $V^\sigma(X)$, para σ_1, σ_2 e σ_3 , respectivamente.
Fonte: Dados da pesquisa.

gráficos dos valores absolutos dos potenciais $V^\sigma(X)$ coloridos pelas fases de $V^\sigma(X)$ sobre o retângulo complexo de lados X_{min} e X_{max} . Os gráficos foram posicionado de maneira a fornecer a melhor visualização das raízes das funções. Observando os gráficos da Figura 10 vemos claramente as raízes (depressões) e os polos (protuberâncias).

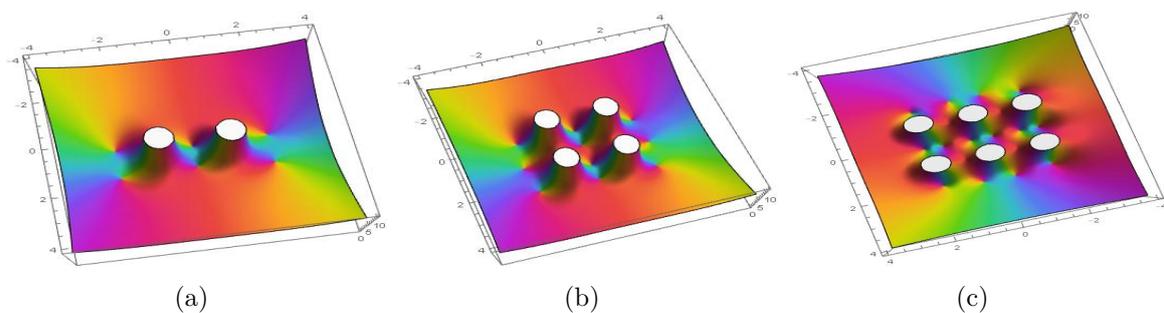


Figura 10 – Gráficos de $|V^{\sigma_1}|$, $|V^{\sigma_2}|$ e $|V^{\sigma_3}|$, respectivamente.
Fonte: Dados da pesquisa.

6.2 MÉTODO VARIACIONAL

O método variacional é baseado no princípio variacional. Ele fornece um caminho alternativo (mais preciso) à teoria da perturbação para encontrar aproximações do estado fundamental e os estados excitados de um sistema quântico. Assim, dada a equação de Schrödinger

$$H\psi(x) = E\psi(x), \quad (6.21)$$

com soluções ortonormais, o valor esperado do operador H , no estado ψ , é definido como o seguinte funcional não-linear

$$E[\psi] = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H \psi dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H \psi dx. \quad (6.22)$$

Como as funções ψ são autoestados de H , o funcional $E[\psi]$ é estacionário para qualquer variação de ψ . Obviamente, quando tomamos funções teste, para as quais não exigimos a ortonormalidade imediata, ficamos apenas com a primeira igualdade em (6.22). Assim, substituímos $\psi(x)$ por $\psi_{test}(x; \beta_1, \dots, \beta_n)$, onde os β_k 's são parâmetros reais livres que depende da função teste. Podemos escolher qualquer sequência conhecida de funções que formam uma base do espaço de Hilbert, por exemplo, sequências de polinômios, funções trigonométricas, etc. Nós consideramos apenas um subespaço de dimensão finita formado pelas primeiras N funções dessa sequência.

Um dos principais resultados do método variacional é o fato do valor esperado de H , para qualquer estado ψ , ser maior do que ou igual a energia do estado fundamental,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H \psi dx \geq E_0. \quad (6.23)$$

Para demonstrar esse resultado devemos considerar o autoestado ψ escrito como uma combinação linear das autofunções ψ_n de H , da seguinte forma

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n. \quad (6.24)$$

Sendo assim, temos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_n C_m^* \psi_m^* H \sum_n C_n \psi_n dx,$$

retirando os somatórios com as constantes do interior da integral e usando o fato de que E_n é autovalor associado a ψ_n , isto é, $H\psi_n = E_n\psi_n$, temos

$$\sum_m C_m^* \sum_n C_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* E_n \psi_n dx = \sum_m C_m^* \sum_n C_n E_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx.$$

Sabendo que as soluções ψ_n são ortonormais e, portanto, $\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}$, ficamos com

$$\begin{aligned} \sum_m C_m^* \sum_n C_n E_n \delta_{mn} &= \sum_m C_m^* C_m E_m \\ &= \sum_m |C_m|^2 E_m \end{aligned}$$

Relembre que os autoestados ψ estão normalizados, isto é, $\sum_n |C_n|^2 = 1$, além disso, $E_m \geq E_0, \forall m$, pois E_0 é a energia do estado fundamental (estado com menor energia). Dessa maneira,

$$\sum_m |C_m|^2 E_m \geq \sum_m |C_m|^2 E_0 = E_0.$$

Portanto,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H \psi dx \geq E_0.$$

Note que, a igualdade ocorre apenas quando $C_0 = 1$ e $C_n = 0, \forall n \neq 0$, ou seja, quando a função de onda ψ corresponde a ψ_0 . Na prática é improvável que consigamos fazer variações arbitrárias no estado ψ para encontrarmos a energia do estado fundamental. Entretanto, o método variacional garante que sempre obteremos um limite superior para a energia E_0 , ainda que não façamos variações arbitrárias em ψ .

Outro método variacional útil para calcular sequência de auto-funções, além do estado principal, é o método de Rayleigh–Ritz. Tal método consiste, basicamente, de duas partes. Na primeira parte, escolhemos uma classe limitada de funções dependentes de n parâmetros reais livres $(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n) := \beta$. Essas funções são chamadas de funções variacionais lineares e também denotamos por $\psi_{test}(x; \beta)$, os parâmetros reais livres entram como coeficientes das combinações lineares que as definem

$$\psi_{test}(x; \beta) = \sum_{j=1}^n \beta_j \phi_j(x), \quad (6.25)$$

onde ϕ_j são funções linearmente independentes que cumprem com as condições de contorno do problema inicial. Na segunda parte, aplicamos o funcional (6.22) em ψ_{test}

$$E[\psi_{test}(x; \beta)] = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{test}^*(x; \beta) H \psi_{test}(x; \beta) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{test}^*(x; \beta) \psi_{test}(x; \beta) dx}, \quad (6.26)$$

para encontrarmos as coordenadas de β que forneçam o menor resultado possível do valor esperado da energia $E(\beta)$. Aqui, não exigimos a normalização das funções ψ_{test} , com é feito em (6.22).

Vamos desenvolver o numerador e denominador do funcional (6.26). Para o numerador, temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{test}^* H \psi_{test} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^n \beta_i^* \phi_i^* H \sum_{j=1}^n \beta_j \phi_j dx = \sum_{i=1}^n \beta_i^* \sum_{j=1}^n \beta_j \int_{-\infty}^{\infty} \phi_i^* H \phi_j dx.$$

Usando a abreviação

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_i^* H \phi_j dx = H_{ij},$$

finalmente, o numerador fica

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{test}^* H \psi_{test} dx = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i^* \beta_j H_{ij}. \quad (6.27)$$

Analogamente, para o denominador, obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{test}^* \psi_{test} dx = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i^* \beta_j S_{ij} \quad \text{onde} \quad S_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_i^* \phi_j dx. \quad (6.28)$$

Sendo assim, das equações (6.27) e (6.28), o funcional (6.26) reduz-se a

$$E(\beta) = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i^* \beta_j H_{ij}}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i^* \beta_j S_{ij}}. \quad (6.29)$$

Para obtermos estimativas da energia do estado fundamental, devemos minimizar o funcional $E(\beta)$. Uma condição necessária para minimizar $E(\beta)$ é que suas derivadas parciais, com respeito a cada uma das suas n variáveis $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$, sejam zero no ponto mínimo, isto é,

$$\left. \frac{\partial E}{\partial \beta_i} \right|_{\bar{\beta}_k} = 0 \quad \text{onde} \quad i = 1, \dots, n. \quad (6.30)$$

Dessa forma, rearranjando a equação (6.29)

$$E(\beta) \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j S_{ij} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j H_{ij}$$

e derivando-a parcialmente com respeito a β_k , $k = 1, \dots, n$, temos

$$\frac{\partial E}{\partial \beta_k} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j S_{ij} + E \frac{\partial}{\partial \beta_k} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j S_{ij} = \frac{\partial}{\partial \beta_k} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j H_{ij},$$

ou simplesmente,

$$E \frac{\partial}{\partial \beta_k} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j S_{ij} = \frac{\partial}{\partial \beta_k} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j H_{ij}. \quad (6.31)$$

Aqui usamos a igualdade (6.30). Vamos simplificar essa relação entre S_{kj} e H_{kj} .

Note que, o elemento S_{ij} não depende de β_k , assim, podemos simplificar o primeiro membro de (6.31) (sem o termo E), como segue

$$\frac{\partial}{\partial \beta_k} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j S_{ij} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left(\beta_j \frac{\partial \beta_i}{\partial \beta_k} + \beta_i \frac{\partial \beta_j}{\partial \beta_k} \right) S_{ij}.$$

Como β_l , $l = 1, \dots, n$, são parâmetros reais independentes ($\frac{\partial \beta_l}{\partial \beta_k} = \delta_{lk}$), temos que

$$\frac{\partial}{\partial \beta_k} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j S_{ij} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_j \delta_{ik} S_{ij} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \delta_{jk} S_{ij}.$$

Rearranjando os índices das somas e simplificando, produzimos

$$\frac{\partial}{\partial \beta_k} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j S_{ij} = \sum_{j=1}^n \beta_j S_{kj} + \sum_{i=1}^n \beta_i S_{ik}.$$

Usando o fato de que $S_{ik} = S_{ki}$ (ver definição de S_{ij}) e considerando as somas apenas em j , ficamos com

$$\frac{\partial}{\partial \beta_k} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j S_{ij} = \sum_{j=1}^n \beta_j S_{kj} + \sum_{j=1}^n \beta_j S_{kj}.$$

Sendo assim, chegamos a igualdade

$$\frac{\partial}{\partial \beta_k} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j S_{ij} = 2 \sum_{j=1}^n \beta_j S_{kj}. \quad (6.32)$$

Procedendo de forma análoga para o segundo membro de (6.31) e usando fato de que o hamiltoniano H é hermitiano, concluímos que

$$\frac{\partial}{\partial \beta_k} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j H_{ij} = 2 \sum_{j=1}^n \beta_j H_{kj}. \quad (6.33)$$

Finalmente, substituindo (6.32) e (6.33) na equação (6.31), ficamos com a seguinte relação entre S_{kj} e H_{kj}

$$2E \sum_{j=1}^n \beta_j S_{kj} = 2 \sum_{j=1}^n \beta_j H_{kj},$$

ou melhor,

$$\sum_{j=1}^n (H_{kj} - E S_{kj}) \beta_j = 0 \quad \text{onde } k = 1, \dots, n. \quad (6.34)$$

Observe que, desenvolvendo a equação (6.34) para cada k obtemos um sistema de equações. Esse sistema pode ser escrito em forma matricial da seguinte forma

$$\left[\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix} - E \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} & \cdots & S_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{n1} & S_{n2} & \cdots & S_{nn} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix} = 0,$$

ou em forma mais compacta

$$(\mathbf{H} - E\mathbf{S})\beta^t = \mathbf{0}. \quad (6.35)$$

Essa expressão é bem conhecida na mecânica quântica e ela é chamada de equação secular. Para resolvê-la devemos encontrar a matriz \mathbf{A} , de uma transformação A , tal que a operação $\mathbf{A}^+ \mathbf{S} \mathbf{A} = \mathbf{I}$ seja válida, \mathbf{I} é a matriz identidade e \mathbf{A}^+ é a matriz adjunta de \mathbf{A} .

Agora, vamos aplicar o método variacional não-linear (6.22) nas extensões racionais do oscilador. Nesse caso, o valor esperado da energia (6.22) fica

$$E[\psi_{test}] = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{test}^* H^{[\alpha]\sigma} \psi_{test} dX}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{test}^* \psi_{test} dX}. \quad (6.36)$$

Relembramos que $H^{[\alpha]\sigma}$ é a extensão racional do oscilador harmônico com parâmetros

físicos H_{osc} , para uma dada sequência de Krein-Adler $\sigma = \{n_1, n_1 + 1, \dots, n_M, n_M + 1\}$ e $\alpha = \hbar/(2m\omega)$. Explicitamente, temos

$$H^{[\alpha]\sigma} = H_{osc} + \Delta V^{[\alpha]\sigma}(X). \quad (6.37)$$

As vezes, para calcula a expressão do funcional $E[\psi]$, é mais conveniente reescrevermos a diferença de potencial da extensão (6.37) em torno dos seus polos. Sendo assim, nós reescrevemos $\Delta V^{[\alpha]\sigma}(X) = \Delta v^{[\alpha]\sigma}(X) + C$, onde C é uma constante e [64]

$$\Delta v^{[\alpha]\sigma}(X) = \sum_{i=1}^N \frac{(m_i^2 + m_i)}{(X - X_i)^2}, \quad (6.38)$$

na qual X_i é um polo de $\Delta V^{[\alpha]\sigma}(X)$. A constante C depende da sequência σ tomada. Feita as devidas alterações na diferença de potencial, podemos reescrevermos a extensão racional $H^{[\alpha]\sigma}$ da seguinte forma

$$H^{[\alpha]\sigma} = H_{osc} + \Delta v^{[\alpha]\sigma} + C. \quad (6.39)$$

Agora estamos prontos para calcular o valor esperado das energias, isto é, calcular $E[\psi]$.

A seguir, avaliamos o método variacional nas extensões racionais do oscilador para as sequências $\sigma_1 = \{1, 2\}$, $\sigma_2 = \{2, 3\}$ e $\sigma_3 = \{3, 4\}$ para a constante $\alpha = 1$ ($\hbar \rightarrow 1$, $\omega \rightarrow 1$, $m \rightarrow 1/2$). Como veremos, a forma das funções testes sofre grande influência da topologia de cada potencial $V^\sigma(X)$. As funções testes utilizadas nesse estudo são as distribuições de Gauss e Lorentz

$$G(X; a, l, x_0) = ae^{-l(X-x_0)^2} \quad \text{e} \quad L(X; a, l, x_0) = \frac{a}{1 + l^2(X - x_0)^2} \quad (6.40)$$

onde a, l e x_0 definem amplitude, largura e localização do pico, respectivamente.

Vamos iniciar analisando o método para a sequência $\sigma = \{1, 2\}$, o hamiltoniano utilizado nos cálculos é $H^{\{1,2\}}$. Nesse caso, temos o potencial $V^{\{1,2\}}(X)$ que possui um único poço. Logo, as funções teste para esse caso, devem conter três parâmetros, um para amplitude, um para largura, e outro para a localização do pico. Mas como o pico sempre esta localizado na posição zero (a auto-função tem que respeitar a simetria do hamiltoniano em relação a inversão da coordenada X) e devido a característica do funcional energia, $E(a\psi) = E(\psi)$, apenas o parâmetro de largura é relevante. Assim, as funções Gaussiana e Lorentziana são simplificadas para

$$G1(X; l) = e^{-lX^2} \quad \text{e} \quad L1(X; l) = \frac{1}{1 + l^2X^2}. \quad (6.41)$$

Chamamos $G1$ de Gaussiana 1 e $L1$ de Lorentziana 1. Devido as características dessas duas funções, dizemos que elas respeitam a topologia do potencial $V^{\{1,2\}}(X)$. No entanto, nós também podemos usar as combinações lineares da Gaussiana 1 e as combinações lineares da Lorentziana 1. Essas novas funções testes não respeitam a topologia do potencial de

$H^{\{1,2\}}$ porque elas possuem mais de um pico, no entanto esses picos podem degenerar em um único pico. Dessa forma, conseguimos adaptar a topologia dessas combinações a topologia do potencial da extensão. As novas Gaussianas são

$$\begin{aligned} G2(X; l, x_0) &= e^{-l(X-x_0)^2} + e^{-l(X+x_0)^2}, \\ G3(X; l, x_0) &= e^{-l(X-x_0)^2} + e^{-lX^2} + e^{-l(X+x_0)^2}. \end{aligned} \quad (6.42)$$

As novas Lorentzianas, obtidas das combinações lineares da Lorentziana 1, são

$$\begin{aligned} L2(X; l, x_0) &= \frac{1}{1+l^2(X-x_0)^2} + \frac{1}{1+l^2(X+x_0)^2}, \\ L3(X; l, x_0) &= \frac{1}{1+l^2(X-x_0)^2} + \frac{1}{1+l^2X^2} + \frac{1}{1+l^2(X+x_0)^2}. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Nós também usamos cada uma dessas funções teste nas extensões com dois e três poços.

Devido a simplicidade de $G1$ e $L1$ conseguimos calcular o funcional energia usando diretamente a extensão (6.37), em contrapartida, devido a complexidade das Gaussianas em (6.42) e das Lorentzianas em (6.43) utilizamos a extensão modificada (6.39). Nesse segundo caso, o funcional energia é dado pelas integrais (a contante $C = 2$ para $\sigma = \{1, 2\}$)

$$E[\psi] = \frac{-\int_{-\infty}^{\infty} \psi \psi'' dX + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{X^2 + 8}{4} \psi^2 dX + \sum_{i=1}^N m_i(m_i + 1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\psi^2}{(X - X_i)^2} dX}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dX}. \quad (6.44)$$

Para calcular o valor desse funcional podemos dividir seu numerador em três partes, a cinética (primeira integral), a potencial (segunda integral) e a diferença de potencial (terceira integral). Quando substituimos ψ por uma das Gaussianas, a integral da diferença de potencial é similar a integral-mestre

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-X^2}}{(X - xp)^2} dX. \quad (6.45)$$

Analogamente, substituindo ψ por uma das Lorentzianas, a integral da diferença de potencial é calculada usando a seguinte integral-mestre, produto de funções racionais

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(X - xp)^2} \frac{dX}{1 + (X - x_0)^2} \frac{1}{1 + (X + x_1)^2} = \\ &\frac{\pi (x_0^2 - 2x_0(xp + 2i) + 2xp(x_1 + xp) + x_1(x_1 + 4i) + 8ixp - 6)}{((x_0 + x_1)^2 + 4) (-x_0 + xp + i)^2 (x_1 + xp + i)^2}. \end{aligned} \quad (6.46)$$

Sempre que necessário, recorreremos as integrais-mestre descritas acima para calcular o funcional energia das extensões.

A seguir descrevemos o processo de minimizar o funcional energia para $G1$ e $L1$, os resultados da minimização para as demais Gaussianas e Lorentzianas são apresentadas

na Tabela 5. Assim, nosso objetivo é encontrar o parâmetro de largura l que minimiza o funcional energia $E(l)$ ou equivalentemente, encontrar o valor de l que faz a melhor aproximação das funções testes $G1(X)$ e $L1(X)$ da auto-função exata do estado fundamental para $V^{\{1,2\}}(X)$

$$\psi_0^{\{1,2\}}(X) = \sqrt[4]{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{X^2 + 1} e^{-X^2/4}. \quad (6.47)$$

Um resultado importante é que a função teste obtida do produto de $G1$ e $L1$, depois da minimização da energia, vai dar a resposta exata!

Na Figura 11(a) apresentamos o gráfico do valor esperado da energia em função da constante l para a função teste $G1$. Nesse caso, o valor de l que fornece o menor resultado para a energia é $l = 0.891645$, sendo assim, temos $E(0.891645) = 0.538954$. Para entendermos esses resultados, vamos calcular seu erro relativo com respeito a escala de energia do espectro quase-equidistante da extensão $H^{\{1,2\}}$, $E_n = (n + \frac{1}{2})$, $n \in \mathbb{N} \setminus \{1, 2\}$. De modo geral, temos a seguinte expressão para o erro relativo

$$ER = \frac{100(E_{0\text{apr}} - E_0)}{E_1 - E_0}, \quad (6.48)$$

onde $E_{0\text{apr}}$ é a energia mínima obtida pelo método, E_0 e E_1 são a energia fundamental e o primeiro estado excitado da extensão H^σ , com $E_n = (n + \frac{1}{2})$, $n \in \mathbb{N} \setminus \sigma$. Sendo assim, para o potencial $V^{\{1,2\}}$ temos que o erro relativo é de 1.3%, aproximadamente. Na Figura

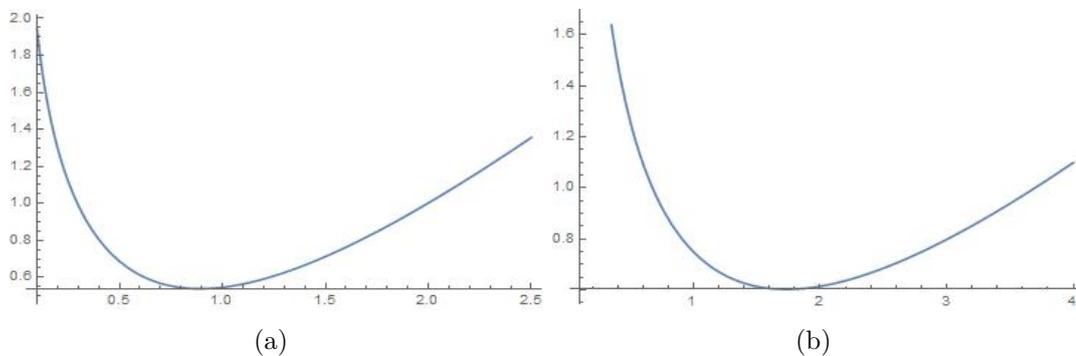


Figura 11 – Gráficos de $E(l)$ para $\sigma = \{1, 2\}$.

11(b) mostramos o valor esperado da energia em função da constante l para a função Lorentziana. Como podemos ver, o menor valor de E é dado por $l = 1.73304$, nesse ponto $E(1.73304) = 0.603495$. Assim, temos um erro relativo de aproximadamente 3.4% para o estado fundamental do oscilador. A Figura 12 ilustra o potencial $V^{\{1,2\}}(X)$ e compara o gráfico de $\psi_0^{\{1,2\}}(X)$ com os gráficos de $G1(X)$ e $L1(X)$ com valores minimais dos parâmetros.

Agora, vamos aplicar o método para a sequência $\sigma = \{2, 3\}$, o hamiltoniano utilizado é $H^{\{2,3\}}$. O potencial $V^{\{2,3\}}(X)$ possui dois poços. Assim, de forma geral, as funções testes devem conter dois parâmetros para larguras dos "sinos", dois parâmetros para as posições dos pico e duas amplitudes. Mas devido a simetria temos que as larguras são iguais,

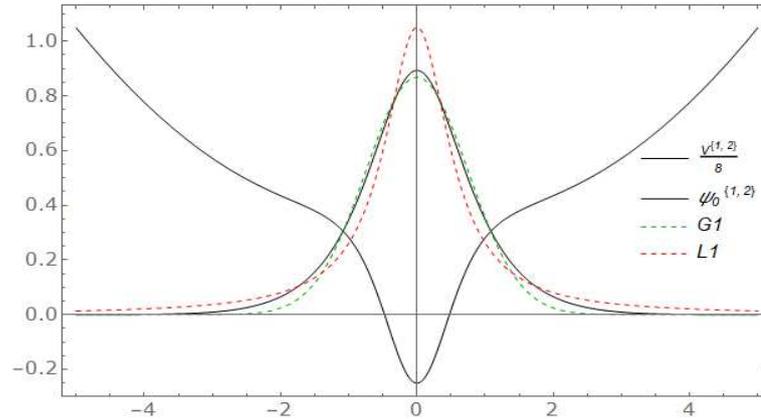


Figura 12 – Potencial, funções teste e auto-estado fundamental para $\sigma = \{1, 2\}$.

logo, ficamos com apenas um parâmetro para essa medida. Também devido a simetria, a posição de cada pico é equidistante da origem, restando apenas um parâmetro de separação pico-origem. As amplitudes também são iguais pela simetria e como $E(a\psi) = E(\psi)$, temos que esse parâmetro é irrelevante. Logo, as funções testes devem conter apenas dois parâmetros, um para largura do "sino" e outro para posição do pico. As funções testes que respeitam a topologia do potencial $V^{\{2,3\}}(X)$ são $G2$ e $L2$. O objetivo agora é determinar os parâmetros l e x_0 que minimizam o funcional $E(l, x_0)$, ou seja, os valores de l e x_0 que melhor aproxima as funções teste da função exata

$$\psi_0^{\{2,3\}}(X) = \sqrt[4]{\frac{18}{\pi} \frac{(X^2 + 1)}{X^4 + 3}} e^{-X^2/4}. \quad (6.49)$$

Os resultados para as demais Gaussianas e Lorentzianas aplicadas a extensão $H^{\{2,3\}}$ são apresentados na Tabela 5.

O gráfico da Figura 13(a) representa o funcional $E(l, x_0)$ para a Gaussiana 2. O valor do par (l, x_0) que fornece o menor resultado para $E[G2]$ é $(l, x_0) = (1.16287, 0.846242)$, dessa forma $E(1.16287, 0.846242) = 0.516902$. Comparando esse resultado com a energia do estado fundamental do oscilador harmônico, $E_0 = 0.5$, podemos notar que o erro relativo é de aproximadamente 1.7%. O gráfico da Figura 13(b) ilustra o funcional $E(l, x_0)$

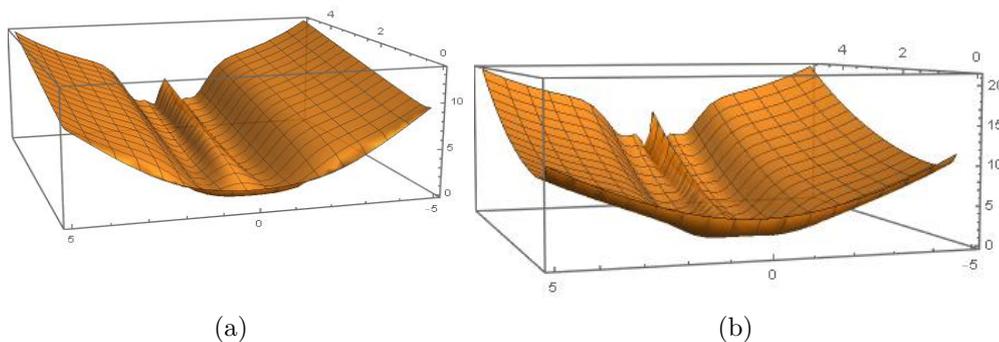


Figura 13 – Gráficos de $E(l, x_0)$ para $\sigma = \{2, 3\}$.

da Lorentziana 2. O menor valor de $E[L2]$ é dado pelo par $(l, x_0) = (1.41596, 0.823106)$,

nesse ponto $E(1.41596, 0.823106) = 0.621164$. O erro relativo é de 12.1% para o estado fundamental do oscilador. A Figura 14 apresenta o potencial $V^{\{2,3\}}(X)$ e compara o gráfico de $\psi_0^{\{2,3\}}(X)$ com os gráficos de $G2(X)$ e $L2(X)$ com valores minimais dos parâmetros.

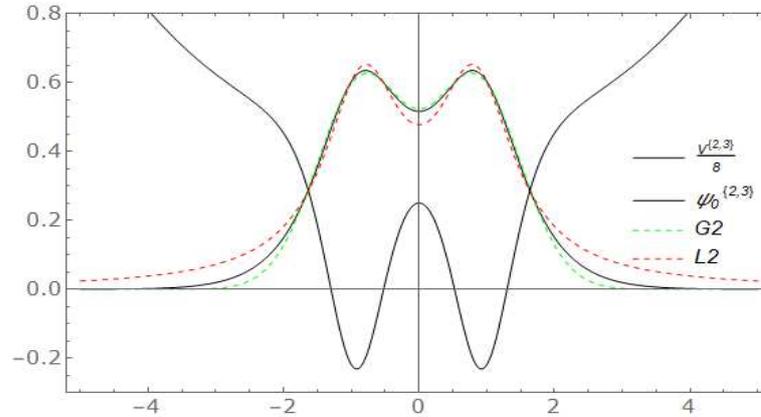


Figura 14 – Potencial, funções teste e auto-estado fundamental para $\sigma = \{2, 3\}$.

Finalmente, vamos usar o método para a sequência $\sigma = \{3, 4\}$, a extensão obtida é $H^{\{3,4\}}$. O potencial $V^{\{3,4\}}(X)$ tem três poços potenciais. Nesse caso, as soluções testes devem conter nove parâmetros. Três para as posições dos picos, três para as larguras dos "sinos" e três para as amplitudes de cada pico. A simetria desempenha papel importante na redução desse número de parâmetros. Assim, devido a simetria um dos picos sempre tem posição zero e os outros dois são equidistantes da origem. Logo, ao invés de três parâmetros independentes para as posições dos picos, teremos apenas um, o de separação entre eles. Também devido a simetria, os três parâmetros das larguras dos "sinos" são reduzidos a dois, uma vez que as larguras laterais são iguais. Logo, ficamos apenas com a largura central e lateral (l_l, l_c). Por simplicidade, usamos o caso $l_l = l_c = l$. Por fim, a simetria garante que as amplitudes laterais são iguais, ficando apenas com a amplitude lateral e central. Mas como devemos normalizar a função de onda, temos que um fator comum para a função teste é irrelevante. Logo, em vez de três parâmetros de amplitude, temos apenas um parâmetro de amplitude relativa central/lateral (a_c). Dessa forma, conseguimos reduzir de nove para quatro parâmetros independentes. Portanto, a família de funções testes minimais para um potencial de 3 poços deve conter quatro parâmetros. Sendo assim, as soluções testes $G3$ e $L3$ sofrem as seguintes modificações

$$\begin{aligned} G3(X; l, x_0, a_c) &= e^{-l(X-x_0)^2} + a_c e^{-lX^2} + e^{-l(X+x_0)^2} & e \\ L3(X; l, x_0, a_c) &= \frac{1}{1+l^2(X-x_0)^2} + \frac{a_c}{1+l^2X^2} + \frac{1}{1+l^2(X+x_0)^2}. \end{aligned} \quad (6.50)$$

Cada um desses parâmetros devem ser determinados de maneira a minimizar o funcional $E(l, x_0, a_c)$, ou ainda, a aproximar $G3$ e $L3$ da solução exata

$$\psi_0^{\{3,4\}}(X) = \sqrt[4]{\frac{72}{\pi}} \frac{X^4 + 3}{X^6 - 3X^4 + 9X^2 + 9} e^{-\frac{X^2}{4}}. \quad (6.51)$$

Além das soluções testes em (6.50) usamos também $G1, G2$ e $L1, L2$ para a extensão $H^{\{3,4\}}(X)$, ver Tabela 5.

Na Figura 15(a) apresentamos o gráfico do valor esperado da energia em função dos parâmetros (l, x_0, a_c) para a função Gaussiana 3. Os valores de (l, x_0, a_c) que fornecem

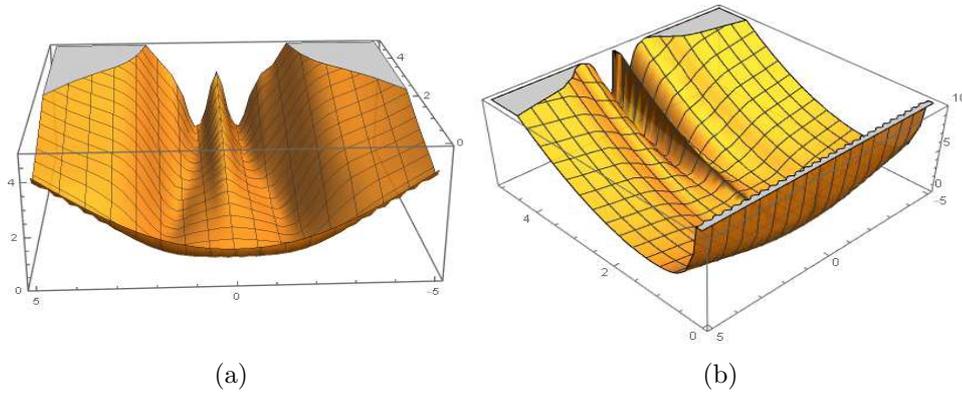


Figura 15 – Gráficos de $E(l, x_0, a_c)$ para $\sigma = \{3, 4\}$.

o menor resultado para $E[G3]$ é $(l, x_0, a_c) = (1.42475, 1.49168, 1.90222)$, sendo assim, encontramos $E(1.42475, 1.49168, 1.90222) = 0.50721$. Quando comparamos esse resultado com a energia do estado fundamental, $E_0 = 0.5$, vemos que o erro relativo é de 0.7%, aproximadamente. Na Figura 15(b) mostramos o valor esperado da energia em função das constantes (l, x_0, a_c) para a função Lorentziana 3. O menor valor de $E[L3]$ é dado por $(l, x_0, a_c) = (1.43457, 1.46138, 2.62225)$, onde $E(1.43457, 1.46138, 2.62225) = 0.604736$. Obtemos assim, um erro relativo de aproximadamente 10.5%. A Figura 16 ilustra o potencial $V^{\{3,4\}}(X)$ e compara o gráfico de $\psi_0^{\{3,4\}}(X)$ com os gráficos de $G3(X)$ e $L3(X)$ com valores minimais dos parâmetros.

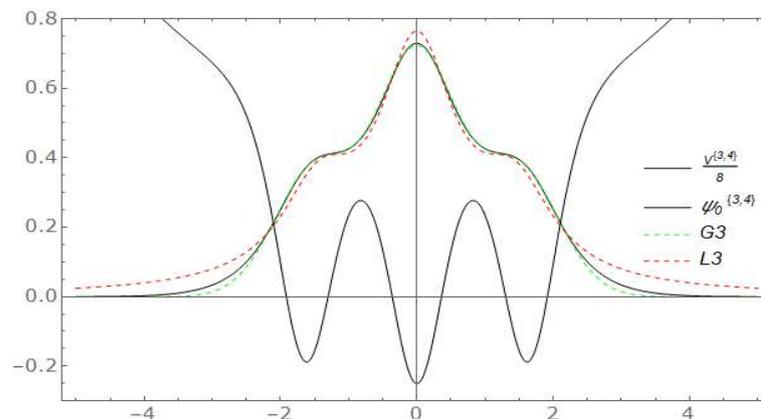


Figura 16 – Potencial, funções teste e auto-estado fundamental para $\sigma = \{3, 4\}$.

Na Tabela 5 resumimos todos os resultados para cada sequência e cada função Gaussiana\Lorentziana. Nela consta também os resultados obtidos para a Teoria da Perturbação de Primeira e Segunda Ordem. Observando a tabela, vemos que a melhor aproximação é dada pela teoria da perturbação de segunda ordem aplicada a extensão

racional $H^{\{2,3\}}$ (erro relativo de 0.02%). Por outro lado, o resultado com maior erro relativo é obtido usando a Lorentziana 1 na mesma extensão $H^{\{2,3\}}$ (69.6%). Na tabela podemos ver também que as Gaussianas sempre vai dar melhor resultados do que as Lorentzianas, mas que L (numero de poços) melhor que G (numero de poços ± 1) ou seja, por exemplo, no caso de $V^{\{3,4\}}$ temos $L3$ melhor que $G2$ e $G1$. Comparando o comportamento de G com L no infinito, vemos que a diferença consiste na seguinte característica, G tende para 0 mais rápido e tem assintótica próxima a autofunções exatas, enquanto L tende para 0 mais lentamente (comparando com G), então sempre vai dar contribuições de energias mais altas para funcional. Porém, as correção na topologia de L é mais importante do que comportamento no infinito para calculo de energia de estado principal.

	$\sigma = \{1, 2\}$	$\sigma = \{2, 3\}$	$\sigma = \{3, 4\}$
E_0	0.50000	0.50000	0.50000
T.P 1ª Or	1.12272	0.77197	0.66571
T.P 2ª Or	0.31041	0.50024	0.60164
M.V G1	0.53895	0.74227	0.66007
M.V L1	0.60349	1.19613	0.74499
M.V G2	0.53895	0.51690	0.65973
M.V L2	0.55947	0.62116	0.74363
M.V G3	0.53895	0.59805	0.50721
M.V L3	0.55082	0.69591	0.60474

Tabela 5 – Comparação dos métodos para cada sequência.

7 POLINÔMIOS DE CONEXÃO

Nessa seção, nós vamos aprofundar nossos estudos e observações sobre o polinômio de conexão não-linear $Q_k^\sigma(x, y)$, definido na equação (5.64). Originalmente, os polinômios $Q_k^\sigma(x, y)$ surgiram no processo de encontrar uma ansatz racional para o propagador K^σ em [73]. Eles são chamados de polinômios de conexão não-linear porque fornecem uma conexão não-linear entre duas famílias de polinômios ortogonais. A seguir, apresentaremos um lema muito importante sobre esses polinômios. Apresentamos também, algumas de suas propriedades características. O lema é chamado de Lema de Conexão Não-Linear. As principais referências desse capítulo são os trabalhos de Pupasov [70, 73].

Lema 7.0.1 [70, 73]. *Dada a sequência de Krein-Adler $\sigma = \{k_1, k_1 + 1, \dots, k_M, k_M + 1\}$, a família normalizada de polinômios excepcionais de Hermite correspondente $h_n^\sigma(x)$, cumpre a relação*

$$\sum_{k=0}^{\sigma[[-1]]+1} h_{m-k}(x)h_{m-k}(y)Q_k^\sigma(x, y) = h_m^\sigma(x)h_m^\sigma(y). \quad (7.1)$$

Além disso, a soma dos polinômios de conexão é dado pelo seguinte produto

$$\sum_{k=0}^{\sigma[[-1]]+1} Q_k^\sigma(x, y) = w(x)w(y), \quad (7.2)$$

onde $w(x)$ denota o determinante Wronskiano da sequência σ dos polinômios de Hermite normalizados

$$w(x) = Wr[h_\sigma(x), x]. \quad (7.3)$$

A demonstração desse lema é apresentada no artigo [73].

Seguindo Pupasov [70], vamos reescrever as relações apresentadas no Lema de Conexão Não-Linear em termo das funções de ondas e na forma matricial. Em termo das funções de ondas correspondentes a equação (7.1) fica

$$\frac{\sum_{k=0}^{\sigma[[-1]]+1} \psi_{m-k}(x)\psi_{m-k}(y)Q_k^\sigma(x, y)}{w(x)w(y)} = \psi_m^\sigma(x)\psi_m^\sigma(y).$$

Essa relação pode ser simplificada se introduzida as notações de projeções, definidas por

$$\Pi_n(x, y) = \psi_n(x)\psi_n(y) \quad \text{e} \quad \Pi_n^\sigma(x, y) = \psi_n^\sigma(x)\psi_n^\sigma(y). \quad (7.4)$$

Sendo assim, temos

$$\frac{\sum_{k=0}^{\sigma[[-1]]+1} \Pi_{m-k}(x, y)Q_k^\sigma(x, y)}{w(x)w(y)} = \Pi_m^\sigma(x, y). \quad (7.5)$$

Para obtermos a versão matricial precisamos introduzir a seguinte matriz e vetores

$$\hat{\Pi}_t := \begin{bmatrix} \Pi_0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \Pi_1 & \Pi_0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \Pi_{2M+1} & \Pi_{2M} & \Pi_{2M-1} & \dots & \Pi_0 \end{bmatrix}, \quad \vec{Q}^\sigma := \begin{bmatrix} Q_0^\sigma \\ Q_1^\sigma \\ \dots \\ Q_{2M+1}^\sigma \end{bmatrix}, \quad \vec{\Pi}^\sigma := \begin{bmatrix} \Pi_0^\sigma \\ \Pi_1^\sigma \\ \dots \\ \Pi_{2M+1}^\sigma \end{bmatrix}.$$

A matriz quadrada $\vec{\Pi}_t$ é a matriz Toeplitz, $\vec{\Pi}^\sigma$ é um vetor com $2M$ componentes nulas e o vetor $(\sigma[[-1]] + 2)$ -dimensional \vec{Q}^σ é definido por

$$\vec{Q}^\sigma = w(x)w(y)\hat{\Pi}_t^{-1}\vec{\Pi}^\sigma. \quad (7.6)$$

Sendo assim, a versão matricial do Lema de Conexão Não-Linear é dada pela equação

$$\vec{\Pi}_n \vec{Q}^\sigma = w(x)w(y)\vec{\Pi}_n^\sigma, \quad (7.7)$$

cuja solução é o vetor \vec{Q}^σ . Por outro lado, também podemos obter a equação matricial semi-infinita [70]

$$\begin{bmatrix} Q_0^\sigma & 0 & \dots & 0 & \dots \\ Q_1^\sigma & Q_0^\sigma & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ Q_{\sigma[[-1]]+1}^\sigma & Q_{\sigma[[-1]]}^\sigma & \dots & Q_0^\sigma & \dots \\ 0 & Q_{\sigma[[-1]]+1}^\sigma & Q_{\sigma[[-1]]}^\sigma & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Pi_0 \\ \Pi_1 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{bmatrix} = w(x)w(y) \begin{bmatrix} \Pi_0^\sigma \\ \Pi_1^\sigma \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{bmatrix}. \quad (7.8)$$

Os polinômios de conexão não-linear possuem as seguintes propriedades de simetria e paridade [70, 73]

- 1) $Q_k^\sigma(x, y) = Q_k^\sigma(y, x)$
- 2) $Q_k^\sigma(-x, -y) = Q_k^\sigma(x, y)$
- 3) $Q_{2k}^\sigma(-x, y) = (-1)^{(gr h_0^\sigma)} Q_{2k}^\sigma(x, y)$
- 4) $Q_{2k+1}^\sigma(-x, y) = -(-1)^{(gr h_0^\sigma)} Q_{2k+1}^\sigma(x, y)$

onde $gr h_0^\sigma = \sum_{j=1}^{|\sigma|} (\sigma[[j]] - j + 1) - |\sigma|$. Do grau de $h_0^\sigma(x)$, denotado por g_0 , nos obtemos os graus de $h_n^\sigma(x)$ e $Q_k^\sigma(x, y)$, da seguinte forma

$$gr h_n^\sigma = g_0 + n \quad \text{e} \quad gr Q_k^\sigma = \begin{cases} 2(g_0 + k), & k \leq |\sigma| \\ 2(g_0 + 2|\sigma| - k), & k > |\sigma|. \end{cases} \quad (7.9)$$

Lema 7.0.2 *O polinômio de conexão de maior grau é $Q_{|\sigma|}^\sigma(x, y)$, onde $|\sigma|$ é o comprimento da sequência σ .*

Demonstração: Segue da segunda expressão em (7.9).

8 CONCLUSÃO

Nós estudamos extensões racionais do oscilador harmônico. Esse modelo exatamente solúvel da mecânica quântica possui propriedades muito interessantes. O espectro de todas as extensões racionais (sem monodromia) é quasiequidistante. Como uma consequência, a evolução temporânea de qualquer estado quântico é periódico. As auto-funções são dadas pelo x -polinômios de Hermite. Propagadores de todas extensões racionais são calculados analiticamente em termos de funções elementares (mesmo para topologias de potenciais complicados, ou seja vários números e posições de pontos estacionários). Nós usamos essas extensões racionais para estudar o comportamento de métodos aproximados (Teoria da Perturbação e Método Variacional) nos casos de "multi-well" potenciais. Fração parcial de uma extensão racional permite reduzir uma problema de cálculo de elementos matriciais da teoria de perturbação ou de funcional de energia até uma integral-mestre. Vimos que para funções de teste dados por meio de produto de uma gaussiana e uma função racional essa integral-mestre possui calculo analítico. Isso permite nos realizar a Teoria da Perturbação e o Método Variacional de forma eficiente. Podemos notar também, que as integrais-mestre usados para as extensões racionais, sem monodromia, podem ser aplicadas para extensões racionais arbitrárias (não somente transformação de Darboux de Oscilador Harmônico).

REFERÊNCIAS

- [1] ADLER, V.E. A modification of Crum's method. *Theor. Math. Phys.* 101 (1994), 1381–1386.
- [2] AMREIN, W. O.; HINZA, A. M.; PEARSON, D. B. *Sturm-Liouville Theory Past and Present*. Basel, Switzerland: Birkhäuser Verlag, 2005.
- [3] Aufenthaltswahrscheinlichkeit harmonischer Oszillator.png. *Wikimedia Commons, the free media repository*. Disponível em: <https://bit.ly/3b6VtVZ>. Acesso em: 10 de abr. de 2020.
- [4] AVELLAR, J. et al. Dealing with rational second order ordinary differential equations where both Darboux and Lie find it difficult: The S-function method. *Computer Physics Communications*. vol. 234. p. 302–314, 2019.
- [5] BAGROV, V. G.; SAMSONOV, B. F. Darboux Transformation, Factorization, and Supersymmetry in One-Dimensional Quantum Mechanics. *Theoretical and Mathematical Physics*, Vol. 10, N^o. 2, 1995.
- [6] BAKALOV, B.; Horozov, E.; YAKIMOV, M. General methods for constructing bispectral operators. *Physics Letters A*, 222(1-2):59–66, 1996.
- [7] BARONE, F. A; BOSCHI, F. H; and FARINAC C. Three methods for calculating the Feynman propagator. *American Association of Physics Teachers*, 71, 5, p.483–491, 2003
- [8] BENDER, M.; *et al.* Complex Square Well - A New Exactly Solvable Quantum Mechanical Model. *J.Phys.A*. Vol. 32, p. 6771-6781, 1999.
- [9] BEREST, Y. Y.; and VESELOV, A. P. On the singularities of potentials of exactly soluble Schrödinger equations and on Hadamard's problem. *Russian Mathematical Surveys*, 53, 2, p.208, 1998.
- [10] BEREZIN, F. A.; SHUBIN, M. A. *The Schrödinger Equation*. Kluwer, Dordrecht, 1991.
- [11] BONNEUX, N.; DUNNING, C.; STEVENS, M. *Coefficients of Wronskian Hermite polynomials*, arXiv preprint arXiv:1909.03874, 2019.
- [12] BONNEUX, N.; STEVENS, M. Recurrence relations for Wronskian Hermite polynomials. *Symmetry Integrability and Geometry: Methods and Applications* 14 (2018), 048, 29 pages, arXiv:1801.07980.
- [13] CHALYKH, O. A. Darboux transformations for multidimensional Schrödinger operators. *Russian Mathematical Surveys*, 53, 2, p.377, 1998.
- [14] CHUMAKOV, S. M.; WOLF, K. B. Supersymmetry in Helmholtz optics. *Physics Letters A*. 193, p.51-53, 1994.
- [15] CRUM, M. M. Associated Sturm-Liouville systems. *The Quarterly Journal of Mathematics Oxford*. 2, 6, p.121-127, 1955. arXiv:physics/9908019

- [16] DARBOUX, J. G. On a Proposition Relative to Linear Equations. *Comptes Rendus Acad. Sci. Paris* 94 (1882), 1456-1459. Translated from French by Mr. H.C. Rosu (1999).
- [17] DELSART, J. Sur une extension de la formule de Taylor. *Math. Pures Appl.* 17, p.213-230, 1938.
- [18] DIRAC, P. The Lagrangian in quantum mechanics. *Phys. Zeits. der Sowjetunion.* 3, 1, p.64-72, 1933.
- [19] DIRAC, P. *The principles of quantum mechanics*. Clarendon Pres, Oxford, 1935.
- [20] DUBOV, S. Y.; ELEONSKII, V. M.; KULAGIN, N. E. Equidistant spectra of anharmonic oscillators. *Chaos* 4, 1, p.47-53, 1994.
- [21] DUISTERMAAT, J. J.; GRÜNBAUM, F. A. Differential equations in the spectral parameter. *Communications in Mathematical Physics*, 103, p.177-240, 1986.
- [22] DURÁN, A. J. Exceptional Charlier and Hermite orthogonal polynomials. *Journal of Approximation Theory*, 182 (2014), 29-58.
- [23] DURÁN, A. J. Higher order recurrence relation for exceptional Charlier, Meixner, Hermite and Laguerre orthogonal polynomials. *Integral Transforms and Special Functions*, 26(5):357-376, 2015.
- [24] FADDEEV, L. D.; SECKLER, B. The Inverse problem in the quantum theory of scattering. *Journal of Mathematical Physics* 4, 72, 1963.
- [25] FELDER, G.; HEMERY, A. D.; VESELOV, A. Zeros of Wronskians of Hermite polynomials and Young diagrams. *Physica D* 241, 2131-7, 2012.
- [26] FERNÁNDEZ, F, M. A class of exactly solvable models in quantum mechanics. *European Journal of Physics*. Vol. 22, no. 4, 2001.
- [27] FEYNMAN, R. P. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys.* 20, 2, p.367-387, 1948.
- [28] FEYNMAN, R. P.; HIBBIS, A. R.; STYER, D. F. *Quantum mechanics and path integrals: Emended edition*. Dover, New York, 2010.
- [29] File:HarmOsziFunktionen.png. *Wikimedia Commons, the free media repository*. Disponível em: <https://bit.ly/2VmBQTb>. Acesso em: 10 de abr. de 2020.
- [30] GARCIA, A.; LEQUAIN, Y. *Elementos de Álgebra*. 6.ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2015.
- [31] GARCÍA-FERRERO, M. A.; GÓMEZ-ULLATE, D.; MILSON R. *A Bochner type classification theorem for exceptional orthogonal polynomials*. preprint arXiv:1603.04358.
- [32] GEL'FAND, Y. A.; LIKHTMAN, E. P. Extension of the Algebra of Poincare Group Generators and Violation of P Invariance. *JETP Letters*. 13, 323, 1971.
- [33] GEVORKYAN, A.; and UDALOV, A. *Exactly solvable models of quantum mechanics including fluctuations in the framework of representation of the wave function by random process*. 28 jul 2000. arXiv:quant-ph/0007108.

- [34] GÓMEZ-ULLATE, D.; *et al.* Recurrence Relations for Exceptional Hermite Polynomials. *Journal of Approximation Theory*, 204 (2016), 1-16.
- [35] GÓMEZ-ULLATE, D.; GRANDATI, Y.; MILSON, R. Rational extensions of the quantum harmonic oscillator and exceptional Hermite polynomials. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 47 (2014), 015203.
- [36] GÓMEZ-ULLATE, D.; KAMRAN, N.; MILSON, R. An extended class of orthogonal polynomials defined by a Sturm-Liouville problem. *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 359 (2009), 352–367.
- [37] GÓMEZ-ULLATE, D.; MARCELLAN, F.; MILSON, R. Asymptotic and interlacing properties of zeros of exceptional Jacobi and Laguerre polynomials. *J. Math. Anal. Appl.* 399 (2013), no. 2, 480–495.
- [38] GONCHARENKO, V. M.; and VESELOV, A. P. Monodromy of the matrix Schrödinger equations and Darboux transformations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 31, 23, p.5315, 1998.
- [39] GRANDATI, Y. Exceptional orthogonal polynomials and generalized Schur polynomials. *Journal of Mathematical Physics* 55 (2014), 083509.
- [40] GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. 2. ed. Tradução de Lara Freitas. Pearson Prentice Hall (2011).
- [41] GRÜNBAUM, F. A.; HAINE, L.; HOROZOV, E. Some functions that generalize the Krall-Laguerre polynomials. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 106(2):271–297, 1999.
- [42] GRÜNBAUM, F. A.; YAKIMOV, M. Discrete bispectral Darboux transformations from Jacobi operators. *Pacific Journal of Mathematics*, 204(2):395–431, 2002.
- [43] GU, C.; HU, H.; ZHOU, Z. *Darboux Transformations in Integrable Systems: Theory and their Applications to Geometry*. vol. 26. Holanda: Springer, 2005.
- [44] HAESE-HILL W.A.; HALLNÄS M.A.; VESELOV A.P. *Complex exceptional orthogonal polynomials and quasi-invariance*. Letters in Mathematical Physics 106 (2016), 583–606.
- [45] HEINRICH, M.; *et al.* Supersymmetric mode converters. *Nature Communications*, 2014.
- [46] HIRA, K. Derivation of the harmonic oscillator propagator using the Feynman path integral and recursive relations. *Eur. J. Phys.* 34, p.777–785, 2013.
- [47] HOWARD, A.; RORRES, C. *Álgebra Linear com aplicações*. 10. ed. Tradução de Claus Ivo Doering. Porto Alegre: Bookman, 2012.
- [48] HULL, H.; and INFELD, T. E. *Phys. Rev.* 74, 905, 1948.
- [49] INFELD, T. E.; and HULL, H. *Rev. Mod. Phys.* 53, 21, 1951.
- [50] IVANCEVIC, V. G.; IVANCEVIC, T. T. *Complex Nonlinearity: Chaos, Phase Transitions, Topology Change and Path Integrals*. vol. 1. Edinburgh SA: Springer, 2008.

- [51] KASMAN, A.; ROTHSTEIN, M. Bispectral Darboux transformations: The generalized Airy case. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 102(3-4):159–176, 1997.
- [52] KREIN, M.G. A continual analogue of a Christoffel formula from the theory of orthogonal polynomials. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* 113 (1957), 970–973.
- [53] KUIJLAARS, A. B. J.; MILON, R. Zeros of exceptional Hermite polynomials. *Journal of Approximation Theory* 200 (2015).
- [54] LIMA, E. L. *Álgebra Linear*. 1.ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2014.
- [55] MACHNIKOWSKI, P. Exactly Solvable Problems in Quantum Mechanics. Thesis - Institute of Physics, Technical University of Wrcalaw, 1995.
- [56] MAGLAPERIDZE, T. I.; and USHVERIDZE, A. G. Quasi-Exactly Solable Probelms Of Quantum Mechanics and $sl(2)$ -Symetric Gaudin Model. *Modern Physics Letters A*. Vol. 05, no. 23, p. 1891-1899, 1990.
- [57] MARQUETTE, I.; QUESNE, C. Two-step rational extensions of the harmonic oscillator: Exceptional orthogonal polynomials and ladder operators. *Journal of Physics A Mathematical and Theoretical*. 2012. arXiv:1212.3474.
- [58] MEHRA, J.; FEYNMAN, R. P. *11 May 1918-15 Feb. 1988, Biogr. Memos. Fell. R. Soc.* 48, p.97-128, 2002.
- [59] MIKI, H.; TSUJIMOTO, S. A new recurrence formula for generic exceptional orthogonal polynomials. *Journal of Mathematical Physics*, 56:033502, 2015.
- [60] MILLER, J. Differential operators. *Solitary Road*. Disponível em: <<https://solitaryroad.com/c655.html>>. Acesso em: 09 abr. 2020.
- [61] MIRI, M A.; *et al.* Supersymmetric Optical Structures. *Phys. Rev. Lett.* 110, 233902, 2013.
- [62] NEVEU, A.; SCHWARZ, J. H. Factorizable dual model of pions. *Nucl. Phys. B*. 31, 86, 1971.
- [63] NOVOKSHENOV, V. Y. Generalized Hermite Polynomials and Monodromy-Free Schrödinger Operators. *Symmetry, Integrability and Geometry: Methods and Applications*. 14, 106, 13p., 2018.
- [64] OBLOMKOV, A. A. Monodromy-Free Schrödinger Operators With Quadratically Increasing Rational Potentials. *Theoretical and Mathematical Physics*, Moscow, vol. 121, n. 3, 1999. Translated from *Teoreticheskaya i Matematicheskaya Fizika*, 121, 3, pp. 374-386, December, 1999.
- [65] ODAKE, S. Recurrence relations of the multi-indexed orthogonal polynomials. *Journal of Mathematical Physics*, 54(8):083506, 2013. arXiv:1303.5820.
- [66] ODAKE, S. Recurrence relations of the multi-indexed orthogonal polynomials. II. *Journal of Mathematical Physics*, 56(5):053506, 2015, arXiv:1410.8236.
- [67] ODAKE S.; SASAKI, R. Infinitely many shape invariant potentials and new orthogonal polynomials. *Physics Letters B* 679 (2009), 414–417.

- [68] OEFTIGER, A. *Supersymmetric Quantum Mechanics*. 2010. 44 f. Bachelor Thesis (University Graduate) - Institute for Theoretical Physics, Faculty of Science, University of Bern, 2010.
- [69] PERPELITSA, D. V. *Path Integrals in Quantum Mechanics*. MIT Department of Physics, Cambridge.
- [70] PUPASOV, A. M. Analytical simulations of double-well, triple-well and multi-well dynamics via rationally extended Harmonic oscillator. *Journal of Physics: Conference Series* 670 (2016) 012042. Disponível em: <http://iopscience.iop.org/1742-6596/670/1/012042>.
- [71] PUPASOV, A. M. Darboux transformation of the Green's function of a regular Sturm-Liouville problem. *Russian Physics Journal*. 48, 10, 2005.
- [72] PUPASOV, A. M. *Investigation of the dynamics of physical systems by supersymmetric quantum mechanics*. (Unpublished doctoral dissertation) Université libre de Bruxelles, Faculté des sciences appliquées – Physique, Bruxelles, 2010.
- [73] PUPASOV, A. M. Propagators of isochronous an-harmonic oscillators and Mehler formula for the exceptional Hermite polynomials. *Annals of Physics* 363 (2015) 122–135. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.aop.2015.09.021>.
- [74] PUPASOV, A. M.; SAMSONOV, B. F. Exact Propagators for Soliton Potentials. *Symmetry, Integrability and Geometry: Methods and Applications*. Vol. 1, Paper 020, 7 p, 2005.
- [75] PUPASOV, A. M.; SAMSONOV, B. F.; GÜNTHER, U. Exact propagators for SUSY partners. *J. Phys. A: Math. Theor.* 40, p.10557–10587, 2007.
- [76] QUESNE C. Exceptional orthogonal polynomials, exactly solvable potentials and supersymmetry. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 41, 392001, 2008.
- [77] RAMOND, P. Dual Theory for Free Fermions. *Phys. Rev. D*. 3, 2415, 1971.
- [78] RIZOS, S. K. *Darboux Transformations, Discrete Integrable Systems and Related Yang-Baxter Maps*. Tese (Doutorado em Matemática Aplicada) - Department of Applied Mathematics, University of Leeds, 2014.
- [79] SAKHNOVICH, A. Hamiltonian systems and Sturm-Liouville equations: Darboux transformation and applications. *Integr. Equ. Oper. Theory*. 88, p.535-557, 2017.
- [80] SASAKI, R. Exactly Solvable Quantum Mechanics. *The Universe*. Vol. 2, no.2, p.2-32, 2014.
- [81] SASAKI, R.; TSUJIMOTO, S.; ZHEDANOV, A. Exceptional Laguerre and Jacobi polynomials and the corresponding potentials through Darboux-Crum transformations. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 43(31):315204, 2010.
- [82] SILVA, C. A. P. *O Problema de Sturm-Liouville e Aplicações*. 2011. 46 f. Monografia (Especialização) - Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Estadual da Paraíba, Campina Grande, 2011.

- [83] SOKOLOV, A. V. *Quantum mechanics with nonlinear supersymmetry for one-dimensional Hermitian and non-Hermitian Hamiltonians*. PhD thesis, St.Petersburg State University, 2008.
- [84] SOUZA, V. A. de. *Um estudo sobre a Teoria de Sturm-Liouville*. 2016. 139 f. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista, Rio Claro, 2016.
- [85] SPIRIDONOV, V.; VINET, L.; ZHEDANOV, A. Bispectrality and Darboux transformations in the theory of orthogonal polynomials. *The Bispectral Problem, CRM. Proc. and Lecture Notes*, 14:111–122, 1998.
- [86] TOMKA, M.; PLETYUKHOV, M.; GRITSEV, V. Supersymmetry in quantum optics and in spin-orbit coupled systems. *Scientific Reports*. 5, 13097, 2015.
- [87] VOLKOV, D. V.; AKULOV, V. P. Is the neutrino a goldstone particle? *Phys. Lett. B*. 46, 109, 1973.
- [88] WESS, J.; ZUMINO, B. Supergauge Transformations in Four-Dimensions. *Nucl. Phys. B*. 70, 39, 1974.
- [89] WITTEN, E. Dynamical breaking of supersymmetry. *Nucl. Phys. B*. 185, 513, 1981.
- [90] ZETTL, A. *Sturm-Liouville Theory*. United States of America: American Mathematical Society, 2005. (Mathematical surveys and monographs, v. 121).