Universidade de São Paulo

Instituto de Física

**POTENCIAIS MODULARES E NOVAS SOLUÇÕES
EM MECÂNICA QUÂNTICA SUPERSIMÉTRICA**

OSVALDO NEGRINI NETO

Orientador: Prof. Dr. Adilson José da Silva

Tese de doutorado apresentada ao Instituto de
Física para a obtenção do título de Doutor em
Ciências

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Adilson José da Silva – (IFUSP)

Prof. Dr. Josif Frankel – (IFUSP)

Prof. Dr. Fernando Tadeu Caldeira Brandt (IFUSP)

Prof. Dr. Alysson Fabio Ferrari (UFABC)

Prof. Dr. Alex Gomes Dias (UFABC)

São Paulo

2014

-
-
-

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

Negrini Neto, Osvaldo

Potenciais modulares e novas soluções em mecânica quântica supersimétrica.
São Paulo, 2014.

Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física. Depto. Física Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Adilson José da Silva

Área de Concentração: Física clássica e Física Quântica; Mecânica e Campos

Unitermos: 1. Mecânica quântica; 2. Supersimetria; 3. Potenciais.

USP/IF/SBI-010/2014

Aos meus filhos,

Ricardo e Katia

*O sentimento religioso cósmico é o
maís nobre e poderoso incentivo à
pesquisa científica. É este
sentimento que dá ao homem
forças para a incansável busca
pelas respostas.*

Albert Einstein

AGRADECIMENTOS

Nestes anos de pesquisa sobre a mecânica quântica supersimétrica, inúmeras foram as colaborações de toda sorte com que contamos. Desde simples palpites até complexas sugestões sobre cálculos, todas foram, em maior ou menos grau, importantíssimas para o desenvolvimento deste trabalho. A começar pelo pessoal administrativo do Departamento de Física Matemática: *Amélia*, *Simone* e *Cecília*. Sem o apoio constante delas, o caminho teria sido bem mais íngreme. E o *João* e a *Sybele*, na informática, que por tantas vezes solucionaram em poucos minutos problemas que me pareciam assombrosamente difíceis, como o acesso remoto às publicações na área ou o funcionamento do MATHEMATICA... Enfim, toda a estrutura do IFUSP em muito auxilia na elaboração dos trabalhos acadêmicos. Quantas vezes recorremos, por exemplo, à bibliotecária *Virginia*, sempre pronta a prestar esclarecimentos sobre publicações internacionais.

Queremos registrar também as profícuas discussões e o constante incentivo do *Prof. Josif Frankel*. Ele nos ensinou como algumas sugestões nos fazem poupar um enorme tempo de trabalho. E aos Professores visitantes do Departamento, *Dionisio Baseia* e *Ashok Das*, que dedicaram parte de seu precioso tempo para discutir conosco

algumas soluções aos nossos problemas, fica aqui meu muito obrigado.

Mais especificamente, agradeço também ao *Fabício Marques*, que compartilhou conosco os primeiros anos de pesquisa, desenvolvendo sua dissertação em MQS, quando as coisas ainda eram obscuras. A ele devemos o acesso ao mundo do MATHEMATICA, que nos possibilitou um avanço rápido na conclusão deste trabalho.

E, como não poderia deixar de ser, agradecemos de coração à orientação do *Prof. Adilson José da Silva*. Um profissional que age com intensa seriedade em tudo o que faz; em especial, na orientação de teses. Pela segunda vez na vida, ele tomou nossa orientação acadêmica (a ele devemos também nosso mestrado) e possibilitou que galgássemos uma posição que já considerávamos impossível.

Enfim, estendemos ainda nossos agradecimentos a todos que, de uma forma ou de outra, nos auxiliaram neste caminho, em especial, à minha esposa Jeane, que compreendeu que, por vezes, temos que abandonar momentos e viagens de lazer para alcançar nossos objetivos.

Sozinhos, seria impossível completar esta jornada, bem sabemos.

RESUMO

Neste trabalho estudamos uma nova classe de superpotenciais em mecânica quântica supersimétrica, os quais denominamos de *modulares*, por serem funções do módulo da coordenada x . O superpotencial de partida proposto é da forma $x|x|$. Esta ideia permite tornar solúvel exatamente, a energia zero, um incontável número de potenciais gerados por estas funções no âmbito da mecânica quântica supersimétrica. Exploramos algumas aplicações para estes superpotenciais, com ênfase para uma representação da molécula de amônia supersimétrica e, em particular, mostramos que um sistema muito estudado na literatura, gerado pelo superpotencial $x - 1/x$, pode ser resolvido mais facilmente recorrendo-se à representação modular. Procuramos estudar as soluções – exatas ou aproximadas – do espectro de energias dos Hamiltonianos parceiros supersimétricos utilizando metodologias adequadas ao respectivo caso, incluindo-se o conhecido potencial x^4 , sendo que o *método variacional de coeficientes de funções* foi o que melhor se adaptou ao estudo. Este método, pouco utilizado até o momento na literatura, permitiu não apenas resolver com excelente aproximação os primeiros níveis do sistema em estudo, como também comprovou a supersimetria do sistema modular. Mostramos também que em sistemas quânticos supersimétricos, a equação de Schroedinger pode ser colocada na forma da equação de Sturm-Liouville e apresentar soluções de polinômios ortogonais, sendo que a função-peso de tais polinômios é gerada pelo superpotencial. Uma breve abordagem da simetria PT envolvendo diretamente o potencial por nós proposto também foi investigada, e mostramos que o sistema é equivalente a um Hamiltoniano não Hermitiano com potencial $V(z) = (-z^4)$.

ABSTRACT

In this work we study a new class of superpotentials in supersymmetric quantum mechanics, which we call *modular* because of their dependence on the modulus of the x coordinate. The starting superpotential is of the form $x/|x|$. This idea helps make exactly solvable, at zero energy, several potentials generated by these functions in the context of supersymmetric quantum mechanics. We explore some applications for these superpotentials, with emphasis on a representation of the supersymmetric ammonia molecule and, in particular, we show that a system generated by the superpotential $x-1/x$, widely studied in the literature, can be solved more easily making use to the modular representation. We also seek for spectral solutions – exact or approximated - of the partner Hamiltonians based on the exact ground state wave function of zero energy including the conventional x^4 potential. The use of the *variational method of functions coefficients*. These methods, rarely used to date in the literature, allowed not only solve with excellent approximation the first levels of the system under study, but also proved the supersymmetry of the modular system. The results were compared with others found in the literature. We also show that for supersymmetric quantum systems, the Schroedinger equation can be put in a form of the Sturm-Liouville equation, and so, orthogonal polynomials solutions can be found through a weight-function generated by the superpotential. A brief overview of the PT-symmetry of the system directly involving a *modular* model proposed was also investigated, and we show that this system is equivalent to the non-Hermitian Hamiltonian one with potential $V(z) = -z^4$.

Nota introdutória

O estudo da mecânica quântica supersimétrica (MQS) é entusiasmante. Nem mesmo E. Witten, ao propor uma simplificação para o estudo da supersimetria, poderia supor que este novo campo de pesquisas fosse se estender a tal ponto, chegando a estabelecer o que podemos chamar de uma “nova” teoria, embora embasada na velha e conhecida mecânica quântica. Nos últimos trinta anos, centenas e centenas (talvez milhares) de trabalhos cobriram o tema, envolvendo as mais diversas abordagens. E certamente outros tantos virão pela frente. A fonte de estudos parece infindável; quando um tema parece esgotado, logo surge outro que atrai pesquisadores ávidos de se aprofundar na nova ideia. Desde seu princípio, a MQS deixou de ser um “modelo de brinquedo” para a teoria de campos supersimétrica e ganhou vida própria, renovando muitos estudos da mecânica quântica que se achavam aparentemente esgotados, como a busca por soluções analíticas da equação de Schroedinger.

Nosso trabalho começou com um “insight” sobre o papel do superpotencial na MQS. Introduzido inicialmente como uma função matemática resultante da solução da equação de Riccati satisfeita pelo potencial, pareceu-nos mais lógico encará-lo como um ente físico, pré-existente, capaz de gerar dois Hamiltonianos parceiros que respeitam a álgebra de Lie e que são interpretados como componentes bosônico e fermiônico. Uma das restrições para uma função candidata a superpotencial é que ela seja real e que mude de sinal ao cruzar o eixo x , ou melhor dizendo, que assuma sinal positivo no infinito positivo, e negativo no caso oposto. A contribuição deste trabalho se assenta sobre a ideia de estender o conceito

de superpotencial aos monômios pares de x . Uma ideia simples e modesta, mas que nos trouxe a possibilidade de abrir novas portas na teoria. Pelo caminho, várias ideias foram exploradas e, como sempre em matéria de pesquisa científica, algumas ficaram por lá, outras ocuparam grande tempo de nosso trabalho e revelaram-se inúteis (por ora, pelo menos) e outras prosperaram. A investigação da supersimetria com massa variável, ou induzida por transformação de coordenadas, tópicos interessantíssimos, deixamos de lado por opção; não se encaixava bem neste trabalho. Já, a busca por soluções polinomiais exatas – tratada no capítulo 5 – é o exemplo mais claro de uma ideia frustrada, mas justifica-se: existe uma similaridade matemática entre o sistema por nós proposto e o oscilador harmônico quântico, logo, por que não buscar soluções exatas similares? Infelizmente a matemática não confirmou nossa visão. Tópicos fascinantes como a simetria PT, por outro lado, poderiam, por si só, render uma tese nova, mas optamos por nos limitar a estudar brevemente suas relações com o tema central deste trabalho.

Os pesquisadores na área da MQS talvez critiquem a relativa escassez de citações neste trabalho. Desde já vamos nos justificar, e para ficar em paz com nossa consciência, devemos explicar que consideramos praticamente impossível citar todos os trabalhos sobre os tópicos aqui abrangidos. Para sermos mais justos, teríamos que acrescentar, a cada artigo citado, o jargão: “*e todas as referências ali citadas*”. Optamos, assim, por citar aquelas que mais se ajustavam ao assunto tratado, e desde já nos desculpamos com as (muitas) centenas de autores que deixaram de comparecer nas nossas citações. Podem ter certeza que eles estão nas entrelinhas.

ÍNDICE

I.	INTRODUÇÃO	1
II.	Princípios e Formalismo	8
1.	Revisão dos conceitos básicos da MQS	8
2.	Aplicações da MQS	13
3.	Quebra da Supersimetria na MQS	18
4.	Estados de Espalhamento	20
5.	Potenciais Invariantes de Forma (PIF)	23
6.	Hierarquia dos Hamiltonianos e Suas Relações com os PIFs	26
III.	UMA NOVA CLASSE DE SUPERPOTENCIAIS	31
1.	Superpotenciais Monomiais Com Potências Ímpares de x	31
2.	Superpotenciais monomiais com potências pares de x	32
a)	O caso $n = 0$	33
b)	O caso $n = 2$	35
3.	Potenciais Modulares Generalizados	40
4.	Regularização de Superpotenciais Modulares	49
IV.	MÉTODOS APROXIMATIVOS	54
1.	O Método de Frobenius	54
2.	Aproximações Variacionais Gaussiana e Exponencial Cúbica	55
3.	Aproximação Variacional de Coeficientes de Funções (ACF)	60
V.	INVESTIGAÇÃO DE SOLUÇÕES EXATAS	64
1.	Soluções Polinomiais	64
2.	O Problema de Sturm-Liouville	65
3.	A função peso gerada pelo superpotencial	67
4.	Soluções supersimétricas generalizadas	69
5.	Soluções exatas e quase-exatas	73

6.	Existe MQ na semi-reta?	76
7.	O Hamiltoniano gerado por $W(x)=x^2\mathcal{E}(x)$ e a Simetria $\mathcal{PT}$	79
VI.	DISCUSSÃO E CONCLUSÕES.....	83
VII.	APÊNDICE A - <i>Outros Métodos Aproximativos</i>	86
VIII.	APÊNDICE B - <i>Aproximantes de Padè</i>	94
IX.	APÊNDICE C - <i>Solução do método variacional dos coeficientes no programa MATHEMATICA</i>	97
X.	APÊNDICE D - <i>Operadores auto-adjuntos (ou Hermitianos)</i>	98
XI.	APÊNDICE E – <i>Representação da “função” sign (x)</i>	100
	Referências:	104

INTRODUÇÃO

As teorias supersimétricas estão entre os mais modernos e interessantes tópicos desenvolvidos na física de partículas e campos. O termo “Supersimetria” se refere a uma relação estabelecida entre bósons e férmions, a qual permite considerar estas partículas como duas manifestações diferentes de uma mesma partícula [1], tanto no cenário do espaço-tempo plano como no curvo. Teorias de supergravidade com supersimetrias locais unificam as teorias gravitacionais com as demais. Entretanto, tais teorias esbarram nas dificuldades experimentais: a escala de energia na qual os efeitos gravitacionais e quânticos se tornam de intensidade comparável pode ser estimada a partir da massa de Planck, que é a única expressão com dimensão de massa que pode ser formada a partir das constantes fundamentais da natureza $\hbar$, c e G :

$$m_p = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} \approx 10^{19} \frac{GeV}{c^2} \approx 2,176 \times 10^{-8} kg$$

Este valor, diferentemente das outras unidades de Planck, é concebível a humanos, uma vez que modernos espectrógrafos trabalham com massas ainda menores – da ordem de picogramas. Por outro lado, para uma partícula com essa massa, o raio de Schwarzschild (para o qual seu campo gravitacional se torna forte) é apenas o dobro do comprimento de onda de Compton, que corresponde à mínima dimensão de espaço no qual ela pode ser localizada:

$$r_p = \frac{2Gm_p}{c^2} = 2\lambda_c \approx 3,2 \times 10^{-35} m$$

Estas ordens de grandeza se tornam obstáculos (até agora intransponíveis) para as teorias de unificação.

Transformações de supersimetria (SUSY) relacionam bósons e férmions, ou seja, partículas de spins diferentes. As partículas formam multipletos e as transformações de supersimetria transformam cada membro distinto deste “supermultipeto” no outro. Cada supermultipeto deve conter ao menos um bóson e um férmion (cujos spins diferem de $\frac{1}{2} \hbar$) e todos os estados em um

INTRODUÇÃO

mesmo multiplete, no caso da SUSI ser uma simetria não quebrada, têm a mesma massa.

Até o presente momento, nenhuma observação experimental revelou partículas ou forças que manifestem tal tipo de simetria; não obstante, as teorias supersimétricas despertam ainda grande entusiasmo e interesse na comunidade dos físicos, não apenas por sua beleza matemática, mas também por suas aplicações no contexto das teorias de supercordas. Costuma-se dizer que a SUSI é “tão bela que deve ser verdadeira”.

O fato de nenhuma partícula prevista nas teorias SUSI ter sido observada deve-se, segundo as ideias correntes, à condição de que a SUSI é quebrada, o que significa que as energias dos parceiros bosônicos e fermiônicos são distintas. Com o início das operações do Large Hadron Collider (LHC), as perspectivas de se encontrar mesmo o mais leve (100 GeV) parceiro SUSI de uma partícula conhecida se tornaram mais distantes. Recentes resultados anunciados no experimento LHCb indicaram o decaimento do méson $B_s \rightarrow \mu^+ \mu^-$ com uma frequência muito menor que a prevista nas teorias SUSI. Entretanto, muitos físicos ainda acreditam fortemente na SUSI, considerando que a experiência acima é ainda consistente com as previsões da teoria.

Na realidade, existem evidências circunstanciais da existência de partículas parceiras. Por exemplo, a teoria quântica de campos supersimétrica pode explicar a observada quebra de simetria $SU(2) \times U(1)$ pelo mecanismo de Higgs na escala de 300 GeV, o que requer partículas parceiras dentro desta provável escala de massa. Outro argumento a favor da SUSI refere-se à unificação das forças eletrofracas e nucleares (fortes) em energias muito elevadas: os dados experimentais são inconsistentes, a não ser que partículas supersimétricas de massas 100 – 1000 GeV sejam incluídas na teoria. Por último, considera-se o exemplo da matéria escura, a qual poderia ser formada por partículas supersimétricas leves (100 GeV) não observáveis e seriam responsáveis pela massa considerável do universo.

Para a descrição de partículas e interações nos modelos supersimétricos, um moderno aparelhamento de Teoria Quântica de Campos, via aplicações de álgebras de supersimetria, é utilizado [2].

INTRODUÇÃO

Isto torna o estudo das propriedades de interdependência entre campos de matéria (férmions) e campos de interação (bósons), bastante complicado. Contudo, podem-se reduzir as dificuldades sobremaneira, examinando-se modelos SUSI a $(1+0)$ dimensões. Neste caso a álgebra de Poincaré se reduz a translações temporais geradas pelo Hamiltoniano H e o campo Hermitiano $\Phi(t)$ e os operadores de momento $\Pi(t)$ podem ser interpretados, respectivamente, como os operadores de posição e momento de uma partícula pontual no eixo real. Em outras palavras, teorias de campos em $(1+0)$ dimensões correspondem a sistemas quanto-mecânicos.

Em um trabalho pioneiro, *E. Witten* [3] construiu um exemplo simples de um sistema SUSI unidimensional, o qual não trazia qualquer referência à teoria de campos. Abriu-se assim a possibilidade de se estudar propriedades absolutamente independentes das transformações supersimétricas entre objetos “parceiros” (potenciais, Hamiltonianos, operadores) baseados em exemplos simples, sem se utilizar as ferramentas das teorias de campos – e logicamente, sem o formalismo da descrição do spin. Desde então, com a publicação de inúmeros trabalhos, um novo tópico da física foi criado e se desenvolveu vigorosamente: a Mecânica Quântica Supersimétrica (MQS) [4].

A MQS, agrupando a beleza das teorias supersimétricas originais à simplicidade matemática da mecânica quântica, logo se tornou um ramo praticamente novo de pesquisas em física, baseado sobre uma das teorias mais tradicionais do século passado. Vieram à luz, pela nova metodologia, novas soluções para velhos problemas quanto-mecânicos e um refinamento dos métodos da mecânica quântica diretamente. Incontáveis se tornaram as aplicações dos métodos matemáticos simples para o cálculo das características espectrais dos sistemas quânticos; surgiram respostas a questões antes vagas e obscuras, como alguns métodos aproximativos, espalhamento inverso, etc.

Uma das razões do sucesso e da simplicidade das aplicações da MQS reside no método da fatoração. A utilização deste método matemático na física acarretou uma série de novas contribuições nas pesquisas. No âmbito da física – especialmente na Mecânica Quântica –, até onde sabemos, o primeiro trabalho sobre o método deve-se a *Schroedinger* [5] e foi posteriormente refinado por *Infeld* e *Hull* [6]. Posteriormente, *Dirac* o utilizou em sua obra “*The Principles*

of *Quantum Mechanics*” em 1932 [7]. Desde então, o método vem sendo refinado e utilizado como um padrão para resolver problemas de MQS, iniciando-se com os trabalhos de *Andrianov et al* [8] e independentemente por *Sukumar* [9], que construíram o formalismo básico do método. Do ponto de vista matemático, entretanto, o método da fatoração na MQS pode ser visto como uma aplicação das *Transformações de Darboux* [10]. Um interessante trabalho de revisão sobre estas transformações foi apresentado por *Rosu* [11]. Várias abordagens sobre o método, incluindo as transformações inversas de Darboux, foram usadas na solução exata de certos potenciais [12,13].

Desde a ideia original de Witten, uma enorme quantidade de trabalhos envolvendo novos tipos de potenciais com espectros característicos e forma analítica explícita foi compondo, ao longo das últimas três décadas, uma espécie de *teoria unificada de potenciais exatamente solúveis*. Os métodos da MQS, introduzindo soluções exatas para novos tipos de potenciais, parecem mostrar ser esta uma teoria original que, aplicada à mecânica quântica, produz novos resultados e estabelece novos conceitos. Cite-se, por exemplo, os *potenciais invariantes de forma* (PIF) [4,14,15,16,17,18]; com *translações de parâmetros* [17,18,19], com *escalonamento de parâmetros* (ou com auto-similaridades) [15,16], com *rotação de parâmetros* [15], além de inúmeras outras abordagens que vêm sendo estudadas e discutidas recentemente. Pode-se dizer que a MQS gerou uma espécie de “revolução” nos estudos da Mecânica Quântica. Nesse sentido, ideias das mais diversas correntes ganharam um novo campo de atuação e ideias novas surgiram, revigorando uma das mais bem conhecidas teorias da física e abrindo novos campos de pesquisa, com implicações inclusive nas modernas teorias de campo. Neste contexto, enquadram-se a simetria PT [20,21,22], os modelos “deformados” [24,25], com massa dependente da posição [25,26] e ainda outros.

Enfim, existe todo um mundo novo de pesquisas inaugurado pela ideia original de Witten. O resumo acima foi apenas um esboço do campo de estudos existente.

Outro aspecto importante a se considerar é a influência da SUSI na abordagem de tópicos de outros ramos da física, como na física atômica, matéria condensada e física estatística. Neste trabalho, levantamos também a hipótese

de que a MQS possa representar ainda interações moleculares – especificamente, a molécula de amônia – através de ligações por uma força que não tem analogia simples com a mecânica clássica, fato este que quebra o conceito da relação entre sistemas clássicos e quânticos: “... *na verdade, as relações por analogia, como a correlação entre o Hamiltoniano clássico (...) e a correspondente expressão do operador, na qual o operador diferencial vetorial $\hbar\nabla$ substitui “p”, parecem ser indispensáveis para desenvolver a teoria (quântica)*”, afirma Max Jammer, em “Conceitos de Força” [27]. De fato, o conceito clássico de “força” subsiste na mecânica quântica. Não obstante, o potencial que introduzimos apresenta grande similaridade com outros sistemas propostos para a citada molécula [28, 29, 30, 31,32].

O estudo da MQS estimula algumas interpretações além da simetria Fermi-Bose. Partindo-se da realização da álgebra SUSI envolvendo operadores bosônicos e fermiônicos, obtêm-se relações específicas entre autovalores da energia, autofunções e matrizes-S de partes componentes do Hamiltoniano supersimétrico, o que leva a novos potenciais analiticamente solúveis em MQ.

Figura central nesta metodologia SUSI é o superpotencial (Sp), função introduzida no método da fatoração do Hamiltoniano, que pode ser interpretado como a função geratriz dos potenciais parceiros. Na mecânica quântica “clássica”, a maioria dos potenciais da equação de Schroedinger é colocada “à mão”, por analogia com potenciais clássicos. Por exemplo, no oscilador harmônico quântico o potencial é o próprio potencial clássico que origina a força proporcional à elongação (restauradora). Na MQS, este potencial (e seu parceiro) é gerado a partir de um Sp $W(x)$ proporcional à coordenada x , que tem dimensão de $E^{1/2}$ e obedece à simples restrição de ter sinais diferentes nos semieixos opostos. Os potenciais são gerados a partir da equação de Riccati $W^2 \pm (\hbar/\sqrt{2m})W' = V_{\pm}$, onde V_+ e V_- são os potenciais parceiros gerados. Vê-se que o processo inverso, isto é, de buscar um Sp que gere potenciais parceiros conhecidos, envolve a solução da equação de Riccati, que por ser não linear, apresenta grandes dificuldades matemáticas. Assim, a MQS se torna muito mais simples se imaginarmos que os sistemas quânticos SUSI são estabelecidos a partir de um Sp gerador que não tem análogo clássico. De fato, a partir de Sp arbitrários (mas que obedeçam as restrições expostas acima), é possível criar-se

infinitos sistemas em MQS.

O conceito de *potenciais invariantes de forma* (PIF) merece um destaque especial pela popularidade que encontrou entre os pesquisadores. Um potencial é dito *invariante de forma* se seu parceiro SUSI tem a mesma dependência espacial e dele difere apenas por alguns parâmetros distintos. Para tais potenciais, o espectro de autovalores da energia pode ser obtido algebricamente [4,14,15] e, desde sua descoberta, uma série de potenciais deste tipo foi estabelecida, mas o problema geral de se classificar PIFs ainda é um campo em aberto. Cooper *et al* propuseram uma classificação parcial envolvendo a translação de parâmetros e mostraram que a invariância de forma, embora suficiente, não é necessária para que existam soluções exatas.

Na presente tese, nosso objetivo primordial é estudar um novo tipo de superpotenciais que introduzimos recentemente [33] e ainda pouco explorado: o superpotencial que denominamos de *modular*, por ser expresso em função do *módulo* de x . Isto é feito pela multiplicação da coordenada pela função *sin*al de x ($\varepsilon(x)$). Com esta ideia, abre-se mais um campo de estudos à já fascinante MQS. Mostramos que, pelo método citado, novas soluções *físicas* (normalizáveis) surgem deste tratamento “modular”. O valor esperado do módulo da coordenada pode ser interpretado como *a probabilidade da medida da distância da partícula em relação à origem*. Em certos sistemas, como no caso do oscilador harmônico, a probabilidade de se localizar a partícula num ponto “ x ” é nula; neste mesmo sistema, a probabilidade de medir a distância em que ela se encontra em relação à origem é finita.

Organizamos este trabalho da seguinte forma:

O segundo capítulo destina-se a uma revisão dos princípios da MQS. Nele, procuramos expor didaticamente o que é a MQS, como funciona e quais são suas relações com a mecânica quântica tradicional. Em um exemplo, a partir do oscilador harmônico linear, mostramos como é feita a analogia entre a MQS e as teorias com *spin*. Limitamo-nos ao caso unidimensional.

No terceiro capítulo introduzimos os superpotenciais modulares monomiais $x^{2n} \varepsilon(x)$, com n inteiro, e estudamos com maior profundidade os casos $n=0$ e $n=1$. Algumas generalizações são ali desenvolvidas, com o objetivo de mostrar que o

INTRODUÇÃO

método pode ser aplicado a infinitos novos sistemas, os quais até então não eram considerados *físicos* – por não apresentarem soluções normalizáveis –, mas apenas matemáticos.

O quarto capítulo é dedicado à busca de soluções aproximativas para o espectro do sistema gerado pelo $Sp\ x^2\varepsilon(x)$, com destaque para o *método variacional dos coeficientes de funções*. Utilizado anteriormente na Ref. [33], foi agora aperfeiçoado para fornecer resultados mais precisos, com o uso de uma função tentativa mais específica.

No capítulo seguinte (quinto), a busca direciona-se a soluções exatas – se é que elas existam. Uma motivação para isso veio através de estudos anteriores, principalmente as Refs. [34] e [35], que mostram que potenciais similares ao aqui proposto *podem* apresentar soluções *exatas* ou *quase-exatas*. Outro aspecto que nos levou a esta busca refere-se à similaridade entre o sistema gerado pelo $Sp\ x^2\varepsilon(x)$ e o oscilador harmônico convencional: enquanto este apresenta soluções *gaussianas*, via polinômios de Hermite, aquele tem por solução a *função exponencial cúbica* (FEC), fato este que nos levou a questionar se seria possível encontrar polinômios ortogonais que se adaptem à questão.

O último capítulo é destinado às discussões sobre o trabalho e algumas conclusões e previsões são apresentadas.

Acrescentamos, ainda, cinco Apêndices destinados a tornar mais claros alguns conceitos e cálculos utilizados neste trabalho.

PRINCÍPIOS E FORMALISMO

1. Revisão dos conceitos básicos da MQS

Neste capítulo introduziremos os conceitos básicos e a matemática envolvida na MQS. Algumas propriedades da SUSI serão mostradas através de exemplos básicos como o poço quadrado infinito e o oscilador harmônico. A propósito, a MQS pode ser vista como uma generalização do método de fatoração do Hamiltoniano do oscilador harmônico. Conceitos fundamentais relativos à MQS são o superpotencial e as supercargas, sendo que estas, juntamente com o superhamiltoniano, formam um álgebra fechada – a superálgebra de Lie (os símbolos $[\bullet, \bullet]$ e $\{\bullet, \bullet\}$ representam comutador e anticomutador, respectivamente):

$$[H_S, Q] = [H_S, Q^\dagger] = 0 \quad (2.1)$$

$$\{Q, Q^\dagger\} = H_S \quad (2.2)$$

$$\{Q, Q\} = \{Q^\dagger, Q^\dagger\} = 0 \quad (2.3)$$

H_S é o Hamiltoniano supersimétrico e Q , e seu conjugado Hermitiano $Q^\dagger$, são as supercargas, que comutam com o Hamiltoniano e possuem a seguinte propriedade:

$$Q^2 = (Q^\dagger)^2 = 0 \quad (2.4)$$

Como as supercargas comutam com o Hamiltoniano (o qual é o gerador das translações temporais ($i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi$)), elas são constantes do movimento e, por essa razão, formam uma simetria.

A partir da mecânica quântica, podemos formar a superálgebra. Consideremos o exemplo de um Hamiltoniano unidimensional com potencial $V(x)$ cuja energia do estado fundamental seja nula. Para simplificar, fixamos $2m = \hbar = 1$ ao longo deste capítulo, salvo notação em contrário. Como primeiro passo, relacionemos a função de onda do estado fundamental ao Hamiltoniano H_- . O índice (-) está colocado para distinguir entre os parceiros supersimétricos bosônicos (índice -) e fermiônicos (índice +) que serão introduzidos a seguir.

Em termos do estado fundamental Ψ_0 , a equação de Schroedinger fica:

$$H_- \Psi_0 = -\frac{d^2}{dx^2} \Psi_0 + V_-(x) \Psi_0(x) = 0 \quad (2.5)$$

Podemos então escrever o potencial em termos do estado fundamental:

$$V_-(x) = \frac{\Psi_0''(x)}{\Psi_0(x)} \quad (2.6)$$

Inspirados no oscilador harmônico, procuremos uma fatoração do Hamiltoniano através do seguinte *ansatz*:

$$H_- = A^\dagger A \quad (2.7)$$

onde

$$A = \frac{d}{dx} + W(x) \quad ; \quad A^\dagger = -\frac{d}{dx} + W(x) \quad (2.8a)$$

$$\begin{aligned} A \Psi_0(x) = 0 &\Rightarrow \Psi_0(x) \\ &= N \text{Exp} \left(- \int_0^x W(y) dy \right) \end{aligned} \quad (2.8b)$$

o que fornece explicitamente:

$$H_- = -\frac{d^2}{dx^2} + W^2(x) - W'(x) \equiv -\frac{d^2}{dx^2} + V_-(x) \quad (2.9)$$

(para o potencial $V_+(x)$, uma solução matemática da equação homogênea, porém não-física, é dada por $(\Psi_0)^{-1}$).

Identificamos, então

$$V_-(x) = W^2(x) - W'(x) \quad (2.10)$$

e observamos que o superpotencial $W(x)$ obedece à equação de Riccati. $W(x)$ é denominado superpotencial na MQS, o que sugere que, nesta teoria, ele é o gerador dos potenciais parceiros. Invertendo a ordem dos operadores A e $A^\dagger$,

definimos um segundo Hamiltoniano, que terá o índice “+”

$$H_+ = A A^\dagger \quad (2.11)$$

e, em consequência,

$$H_+ = -\frac{d^2}{dx^2} + W^2(x) + W'(x) \equiv -\frac{d^2}{dx^2} + V_+(x) \quad (2.12)$$

$$V_+(x) = W^2(x) + W'(x) \quad (2.13)$$

Temos, então, duas maneiras de interpretar as equações (2.10) e (2.13): dado o superpotencial $W(x)$, definimos os Hamiltonianos $H_\pm$ e os potenciais parceiros $V_\pm(x)$; ou então, dado um dos potenciais V_+ ou V_- , o superpotencial $W(x)$ pode ser encontrado resolvendo-se a equação de Riccati - a qual, por ser não linear, acarreta dificuldades matemáticas (restituindo por um instante as unidades originais, é importante notar que o termo $W'(x)$ é de origem puramente quântica, pois aparece multiplicado por $\hbar/\sqrt{2m}$.)

Uma vez obtido o superpotencial, os operadores A e $A^\dagger$ são construídos e a superálgebra é estabelecida com a definição das supercargas Q e $Q^\dagger$ como matrizes que conterão como elementos os operadores A e $A^\dagger$:

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Uma notável propriedade da MQS é que os autovalores e as autofunções de H_- e H_+ se relacionam; além disso, os autovalores são positivos semi-definidos: ($E_n^{(+,-)} \geq 0$). Para demonstrar esta propriedade, partimos de H_- :

$$H_- \left| \Psi_n^{(-)} \right\rangle = A^\dagger A \left| \Psi_n^{(-)} \right\rangle = E_n^{(-)} \left| \Psi_n^{(-)} \right\rangle \quad (2.15)$$

Como $E_n^{(-)}$ é autovalor, podemos escrever para H_+ :

$$H_+ A \left| \Psi_n^{(-)} \right\rangle = A A^\dagger A \left| \Psi_n^{(-)} \right\rangle = A H_- \left| \Psi_n^{(-)} \right\rangle = E_n^{(-)} A \left| \Psi_n^{(-)} \right\rangle \quad (2.16)$$

Usando o mesmo processo para H_+ ,

$$H_+ \left| \Psi_n^{(+)} \right\rangle = A A^+ \left| \Psi_n^{(+)} \right\rangle = E_n^{(+)} \left| \Psi_n^{(+)} \right\rangle \quad (2.17)$$

obtemos:

$$H_- A^+ \left| \Psi_n^{(2)} \right\rangle = A^+ A A^+ \left| \Psi_n^{(2)} \right\rangle = E_n^{(2)} A^+ \left| \Psi_n^{(2)} \right\rangle \quad (2.18)$$

Vemos assim que $A \left| \Psi_n^{(-)} \right\rangle$ é uma autofunção de H_+ e $A^+ \left| \Psi_n^{(+)} \right\rangle$ é autofunção de H_- , logo:

$$\left| \Psi_n^{(+)} \right\rangle = c \left| \Psi_m^{(-)} \right\rangle, \quad c = \text{const.} \quad (2.19)$$

de modo que $E_n^{(-)} = E_m^{(+)}$, se o espectro é não-degenerado. Para determinar a constante c e a relação entre n e m , apliquemos a condição de normalização às autofunções dadas:

$$\left| \Psi_n^{(+)} \right\rangle = c A \left| \Psi_m^{(-)} \right\rangle, \quad c \in \mathbb{C}$$

$$\begin{aligned} 1 &= \left\langle \Psi_m^{(-)} \left| \Psi_m^{(-)} \right\rangle = \left\langle \Psi_n^{(+)} \left| \Psi_n^{(+)} \right\rangle \right. \\ &= \left\langle c A \Psi_m^{(-)} \left| c A \Psi_m^{(-)} \right\rangle \right. \\ &= \left\langle \Psi_m^{(-)} \left| A^+ c^* c A \Psi_m^{(-)} \right\rangle \right. \\ &= c^* c \left\langle \Psi_m^{(-)} \left| H_- \right| \Psi_m^{(-)} \right\rangle \\ &= c^* c E_m^{(-)} \end{aligned}$$

Logo,

$$c^* c = \frac{1}{E_m^{(-)}} \quad (2.20)$$

Como E_m é positivo, podemos tomar $C \in \mathbb{R}$:

$$c = \frac{1}{\sqrt{E_m^{(-)}}} \Rightarrow |\Psi_n^{(+)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{E_m^{(-)}}} A |\Psi_m^{(-)}\rangle \quad (2.21)$$

Repetindo o procedimento para encontrar a relação entre $|\Psi_m^{(-)}\rangle$ e $A^+ |\Psi_n^{(+)}\rangle$, temos:

$$|\Psi_m^{(-)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(+)}}} A^+ |\Psi_n^{(+)}\rangle \quad (2.22)$$

Segue-se que todo autovalor de H_+ é também autovalor de H_- , exceto o estado fundamental de H_- , pois para $E_0^{(-)} = 0$ a equação (2.21) não é definida. Portanto, esta relação de correspondência biunívoca implica que $m = n + 1, n \in \{0, 1, 2, \dots\}$:

$$E_{n+1}^{(-)} = E_n^{(+)} \quad (2.23)$$

$$|\Psi_n^{(+)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(-)}}} A |\Psi_{n+1}^{(-)}\rangle \quad (2.24)$$

$$|\Psi_{n+1}^{(-)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(+)}}} A^+ |\Psi_n^{(+)}\rangle \quad (2.25)$$

Note-se que se o estado $\Psi_{n+1}^{(-)}$ de H_- é normalizado, segue-se que $\Psi_n^{(+)}$ nas equações (2.24) e (2.25) é também normalizável, e vice-versa. Destas equações concluímos que o operador A converte uma autofunção de H_- em uma de H_+ e aumenta n de uma unidade, enquanto que A^+ converte uma autofunção de H_- em uma de H_+ e diminui n de uma unidade. O estado fundamental de H_- é aniquilado por A , o que significa que não existe parceiro supersimétrico deste estado.

Outra notável propriedade da MQS é que as autofunções e os autovalores de H_+ são facilmente encontrados quando se conhece os de H_- . Em outras palavras: dois potenciais que podem ser completamente diferentes possuem o mesmo espectro de energia. Podemos construir, a partir destas propriedades, uma

completa hierarquia de Hamiltonianos a partir de H_+ , subtraindo dele a energia de seu estado fundamental e renomeando-o como, digamos, H'_- . Definimos então novos operadores A e A'^+ de modo que $H'_- = A'^+ A$ e definimos outro $H'_+ = A A'^+$. A partir deste novo Hamiltoniano, outro pode ser construído e assim sucessivamente, até que se esgotem os estados ligados (se o número destes for finito, é claro). Todo novo Hamiltoniano possui um estado a menos do que aquele a partir do qual foi construído.

Para implementar a superálgebra, combinamos os espaços de Hilbert dos dois Hamiltonianos $H_S = H_- \oplus H_+$, o que pode ser materializado na matriz 2×2 :

$$H_S = \begin{pmatrix} H_- & 0 \\ 0 & H_+ \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

Com essa representação para H_S e as definições das supercargas, equações (2.14), é fácil observar que a superálgebra $s\ell(1,1)$ dadas pelas equações (2.1) – (2.3) é obedecida:

$$\begin{aligned} [H_S, Q] &= \begin{pmatrix} A^+ A & 0 \\ 0 & A A^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^+ A & 0 \\ 0 & A A^+ \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A A^+ A & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A A^+ A & 0 \end{pmatrix} = 0 \\ \{Q, Q\} &= 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix} = 0 \end{aligned}$$

2. Aplicações da MQS

Como foi visto, A MQS permite encontrar os espectros de energia de dois potenciais parceiros totalmente diferentes. Problemas antes impossíveis de resolver analiticamente podem ser tratados via MQS e fornecer soluções simples.

Consideremos como um exemplo de aplicação básica da MQS o poço quadrado infinito com largura a [4], que representa o potencial:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & -\infty < x < 0, \quad x > a \end{cases}$$

Primeiramente, fatoraremos o Hamiltoniano, impondo $H_- \Psi_0^{(-)} = 0$. Subtraímos então a energia do estado fundamental para obter:

$$H_- = -\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\pi^2}{a^2} \quad (2.27)$$

de modo que $V_-(x) = -\pi^2/a^2$. Os autovalores e as autofunções dos n estados serão:

$$E_n^- = \frac{n(n+2)\pi^2}{a^2}, \quad n=0,1,2,\dots \quad (2.28)$$

$$\Psi_n^{(-)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{(n+1)\pi x}{a}, \quad 0 \leq x \leq a, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.29)$$

Obtemos o superpotencial $W(x)$ pela equação (2.6):

$$W(x) = -\frac{\pi}{a} \cot \left(\frac{\pi x}{a} \right) \quad (2.30)$$

E o potencial parceiro de $V_-(x)$ será

$$V_+(x) = \frac{\pi^2}{a^2} \left[2 \operatorname{cosec}^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right) - 1 \right] \quad (2.31)$$

com $E_n^{(+)} = E_{n+1}^{(-)}$. Vemos, assim, que dois potenciais possuem o mesmo espectro (exceto pelo estado fundamental de H_-), embora totalmente diferentes (Fig. 1).

Outro importante exemplo de aplicação da MQS é o caso do *oscilador harmônico supersimétrico* (OHS), escolhido tal que $E_o = 0$. Em certo sentido, a MQS pode ser vista como uma generalização do OHS. No caso da MQS, tratamos de uma única partícula, portanto, não faz sentido falar em bósons e férmions. Entretanto, lembrando que a ideia original de estudar a teoria de campo supersimétrica através da simplificação pela mecânica quântica, devida a Witten, propõe justamente o conceito de bósons e férmions na MQS, usaremos esta terminologia para tornar mais clara a analogia com a teoria de campos. Por simplicidade definiremos o Hamiltoniano como adimensional, o que significa que o operador H é dado em termos de ω . Inicialmente, consideramos o oscilador harmônico bosônico, que nada mais é do que o tradicional:

$$H_b = p^2 + \frac{1}{4} x^2 - \frac{1}{2} \quad ; \quad p = -i \frac{d}{dx} \quad (2.32)$$

Introduzindo os operadores de criação e aniquilação,

$$a = \left(\frac{x}{2} + ip \right), \quad a^+ = \left(\frac{x}{2} - ip \right) \quad (2.33)$$

o Hamiltoniano pode ser fatorado:

$$H_b = a^+ a \quad (2.34)$$

O estado fundamental é aniquilado por a dado por (2.33):

$$a|0\rangle = 0 \Rightarrow |0\rangle \sim e^{-x^2} \quad (2.35)$$

Os autoestados são dados por:

$$|n_b\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (2.36)$$

Como próximo passo, introduzimos os operadores Ψ e Ψ^+ que obedecem à álgebra dos operadores de criação e aniquilação fermiônicos:

$$\{\Psi^+, \Psi\} = 1, \quad \{\Psi^+, \Psi^+\} = \{\Psi, \Psi\} = 0 \quad (2.37)$$

onde o parênteses representa o anticomutador.

A superálgebra pode então ser realizada representando os estados como um vetor de $\mathbb{R}^2$, com o estado bosônico como primeiro elemento:

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_b \\ \phi_f \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

Este vetor representa o estado fundamental bosônico e o vácuo fermiônico (exceto para o estado $|0\rangle = |\phi_b^0\rangle$).

Nesta base, os operadores fermiônicos são:

$$\Psi = \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

$$\Psi^+ = \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

onde $\sigma_+ = (1/2)(\sigma_x + i\sigma_y)$. A relação de comutação entre eles será:

$$[\Psi, \Psi^+] = \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

Podemos agora construir o Hamiltoniano fermiônico do oscilador analogamente a H_b , mas usando Ψ e Ψ^+ e subtraindo o estado fundamental fermiônico:

$$H_f = \Psi^+ \Psi \quad (2.42)$$

O Hamiltoniano supersimétrico se torna:

$$H_s = H_b + H_f = (a^+ a + \Psi^+ \Psi) \quad (2.43)$$

As supercargas são formadas a partir da combinação dos operadores bosônicos e fermiônicos:

$$Q = a\Psi^+, \quad Q^+ = a^+\Psi \quad (2.44)$$

Com isso, o Hamiltoniano supersimétrico é dado através da matriz:

$$H_s = Q Q^+ + Q^+ Q \equiv \left(-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{4} \right) I + \frac{1}{2} [\Psi, \Psi^+] \quad (2.45)$$

onde I é a matriz identidade 2×2 . Um estado será então a combinação de uma parte bosônica e uma fermiônica, que representaremos por $|n_b, n_f\rangle$. Estes estados estão no “espaço de Fock”. O estado fundamental não tem a parte fermiônica, o que significa que seu número fermiônico é zero. Observe-se que o primeiro termo em (2.45) é a usual energia cinética, o segundo; a energia potencial de uma partícula sem spin e o terceiro – de origem puramente quântica, visto que, nas unidades originais, aparece multiplicado por $\hbar$ – representa a energia potencial de uma partícula de spin $1/2$ em um campo magnético (possivelmente dependente da posição). O operador do número fermiônico N_f é dado por:

$$N_f = \frac{1 - [\Psi, \Psi^+]}{2} \quad (2.46)$$

Os autovalores de N_f são zero ou um, o que está de acordo com o princípio de Pauli. As energias dos estados do setor fermiônico (em unidades de ω) são:

$$E_f = \left(n_f - \frac{1}{2} \right) = \pm \frac{1}{2} \quad (2.47)$$

Portanto, o espectro é degenerado. Os operadores $a, a^+, \Psi, \Psi^+, Q, Q^+$ neste espaço de Fock atuam da seguinte forma:

$$a |n_b, n_f\rangle = |n_b - 1, n_f\rangle \quad (2.48a)$$

$$a^+ |n_b, n_f\rangle = |n_b + 1, n_f\rangle \quad (2.48b)$$

$$\Psi |n_b, n_f\rangle = |n_b, n_f - 1\rangle \quad (2.48c)$$

$$\Psi^+ |n_b, n_f\rangle = |n_b, n_f + 1\rangle \quad (2.48d)$$

$$Q |n_b, n_f\rangle = |n_b + 1, n_f - 1\rangle \quad (2.48e)$$

$$Q^+ |n_b, n_f\rangle = |n_b - 1, n_f + 1\rangle \quad (2.48f)$$

A supercarga Q transforma um férmion em um bóson e a Q^+ um bóson em um férmion, como se vê em (2,48e) e (2,48f). Este resultado é crucial na MQS: demonstra a propriedade da degenerescência bóson – férmion.

3. Quebra da Supersimetria na MQS

O fato de que a supersimetria não foi ainda observada na natureza não significa que não existam aplicações práticas para as teorias supersimétricas. É possível que todos os casos onde ocorra a supersimetria, ela seja quebrada. Entretanto,

ainda teremos uma supercarga e um super-hamiltoniano obedecendo à superálgebra. Por outro lado, a supersimetria pode ser espontaneamente quebrada, no caso em que não exista um estado fundamental invariante.

Para que exista a supersimetria, e ela seja não quebrada, devemos ter um estado fundamental tal que $H_b|0\rangle = H_F|0\rangle = 0|0\rangle$, o que significa que o estado fundamental é aniquilado pelos geradores Q e Q^+ da supersimetria.

Índice de Witten – E. Witten [3] definiu um índice que indica se a SUSI é quebrada ou não. Formalmente, esse índice é dado por:

$$\Delta = \text{Tr}(-1)^N \quad (2.49)$$

onde N é o número fermiônico e o traço é tomado sobre todos os estados ligados e contínuos do super-hamiltoniano. Em MQS, o número fermiônico N é definido como $\frac{1}{2}(1 - \sigma_3)$ - eq.(2.46) -, e podemos representar $(-1)^N$ pela matriz de Pauli σ_3 . Por simplicidade, vamos assumir que o espectro de energia é discreto e usar as autofunções da energia para calcular Δ . Se a supersimetria for *quebrada*, não haverá nenhum estado normalizável de energia zero. Logo, todos os estados de H terão energia positiva e virão aos pares: um estado bosônico com $N=0$ e um fermiônico com $N=1$ com a mesma energia. Suas contribuições para Δ se cancelam. Se, por outro lado, houver n_b estados bosônicos e n_f estados fermiônicos, a contribuição total para Δ será:

$$\Delta = n_b - n_f \quad (2.50)$$

uma vez que os estados excitados cancelam-se aos pares. Em resumo, se $n_b \neq n_f$:

$$\Delta \neq 0 \Rightarrow \text{SUSI não - quebrada} \quad (2.51)$$

A recíproca não é verdadeira. Pode ocorrer que a SUSI seja *não-quebrada* e o número de estados de energia zero nos setores bosônico e fermiônico seja igual, de modo que Δ se anula. Mas isso não ocorre na MQS, logo a expressão (2.51) é sempre válida neste caso. Para ficar mais claro este ponto, nas teorias de campo o índice de Witten deve ser regularizado, considerando-se não a equação (2.49) mas, ao invés [4]:

$$\Delta(\beta) = T_r(-1)^N e^{-\beta H} \quad (2.52)$$

que para a MQS se torna:

$$\Delta(\beta) = T_r(e^{-\beta H_1} - e^{-\beta H_2}) \quad (2.53)$$

Após calcular o índice regularizado, toma-se o limite $\beta \rightarrow 0$. Na MQS com espectro discreto, $\Delta(\beta)$ não depende de β , uma vez que a contribuição de todos os superparceiros se cancela em (2.52b). A contribuição dos estados de energia zero continua sendo $n_b - n_f$.

Em teorias de campo, é bastante difícil determinar se a SUSI é quebrada não perturbativamente; na MQS a quebra da SUSI é relacionada diretamente à questão sobre existir ou não uma solução normalizável para a equação $A|0\rangle = 0|0\rangle$ com A definido em (2.8), o que implica que:

$$\Psi_0(x) = N e^{-\int^x W(y) dy} \quad (2.8b)$$

Nas seções seguintes introduziremos um superpotencial que, a princípio, gera uma supersimetria quebrada, mas mediante uma “regularização” a SUSI é restaurada. Para este caso mostraremos que o índice de Witten é igual a 1.

4. Estados de Espalhamento

Cooper et al. [4], que seguimos de perto nesta seção, fazem uma interessante discussão sobre os estados de espalhamento. Consideremos um superpotencial $W(x)$ tal que, para grandes valores positivos de x , W tende a um valor constante $W_+(x)$ e para grandes valores negativos, para $W_-(x)$:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} W(x) = W_{\pm} \quad (2.54a)$$

o que implica que:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V_b(x) = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V_f(x) = W_{\pm}^2 \quad (2.54b)$$

Neste caso, a supersimetria relaciona os coeficientes de *transmissão* e *reflexão* de

H_b e H_f [19]. Consideremos uma onda plana vinda pela esquerda. A forma assintótica da função de onda para o espalhamento a partir do potencial V_b é dada por:

$$\Psi_b(k, x) \rightarrow \begin{cases} e^{ikx} + R_b e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ T_b e^{ik'x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2.55)$$

onde R_b e T_b são os coeficientes de reflexão e transmissão, respectivamente (do estado bosônico). O estado fermiônico parceiro, devidamente normalizado, tem a forma assintótica (2.22):

$$\Psi_f(k, x) = -\frac{1}{k + iW} A^+ \Psi_b(x) \rightarrow \begin{cases} e^{ikx} + R_f e^{-ikx} \\ T_f e^{ik'x} \end{cases} \quad (2.56)$$

com os seguintes coeficientes de reflexão e transmissão:

$$R_f = \frac{W_- + ik}{W_- - ik} R_b ; T_f = \frac{W_+ - ik'}{W_- - ik} T_b \quad (2.57)$$

onde k e k' são dados por:

$$k = (E - W_-^2)^{1/2} ; k' = (E - W_+^2)^{1/2} \quad (2.58)$$

A expressão acima relaciona de maneira simples os estados de espalhamento dos parceiros supersimétricos. Para k e k' reais, temos:

$$|R_b|^2 = |R_f|^2 ; |T_b|^2 = |T_f|^2 \quad (2.59)$$

Observe-se ainda que pela Eq. (2.57), o coeficiente de transmissão possui *polos físicos* no semiplano superior do plano complexo k nas posições $k_j = i\alpha_j$ correspondendo às energias dos estados ligados:

$$E_j = W_-^2 - \alpha_j^2 \quad (2.60)$$

Para $W_- < 0$ e $W_+ > 0$ existe um estado ligado de energia zero a mais em H_f e para

$W_- > 0$ e $W_+ < 0$, H_b tem um estado de energia zero a mais.

Um interessante exemplo desta propriedade é o superpotencial $W(x) = -c \tanh x$, com $W_- = -W_+ = c$, que gera os potenciais parceiros:

$$V_b(c, x) = c^2 - c(c+1) \operatorname{sech}^2 x \quad (2.61a)$$

$$V_f(c, x) = c^2 - c(c-1) \operatorname{sech}^2 x \quad (2.61b)$$

Note-se que este potencial é *invariante de forma* (discutiremos esta propriedade a seguir):

$$V_f(x, a_1) = V_b(x, a_2) + R(a_1) \quad (2.62)$$

com

$$a_1 = c \quad ; \quad a_2 = c - 1 \quad ; \quad R(c) = 2c - 1 \quad (2.63)$$

A supersimetria permite encontrar os coeficientes de espalhamento para uma hierarquia infinita de potenciais. Suponhamos que conhecemos os coeficientes $R_b(c)$ e $T_b(c)$ para um certo c . Então, pela eq. (2.57):

$$T_b(c-1) = T_f(c) = -\frac{c+ik}{c-ik} \quad (2.64)$$

e analogamente para R_b e R_f . Iterando esta relação, vemos que:

$$\begin{aligned} T_b(c) &= \frac{c-ik}{c+ik} T_b(c-1) \\ &= \frac{c-ik}{c+ik} \frac{c-1-ik}{c-1+ik} T_b(c-2) \\ &= -\frac{c-ik}{c+ik} \cdot \frac{c-1-ik}{c-1+ik} \cdot \frac{c-2-ik}{c-2+ik} T_b(c-3) \\ &= \dots \end{aligned}$$

ou, após m iterações:

$$T_b(c) = (-)^m \prod_{n=0}^{m-1} \frac{c - n - ik}{c - n + ik} T_b(c - m) \quad (2.65)$$

Para $c = m$, $T_b(c - m) = 1$, logo

$$T_b(m) = (-)^m \prod_{n=0}^{m-1} \frac{m - n - ik}{m - n + ik} \quad (2.66)$$

Se c for um número natural, T_b na equação acima é o coeficiente de transmissão para o potencial

$$V_b(m) = m^2 - m(m+1) \operatorname{sech}^2 x,$$

conhecido como o potencial de Pöschl-Teller. Os coeficientes de reflexão para tal potencial é nulo, visto que $T_b(0) = 1$. Denominam-se potenciais deste tipo como *irreflexíveis*. Os polos $k_m = i(m - n)$ de T_b fornecem as energias dos estados, conforme (2.60):

$$E_n = m^2 - (m - n)^2, \quad n = 0 \dots m - 1 \quad (2.67)$$

Neste caso temos supersimetria não-quebrada, pois $E_0 = 0$.

5. Potenciais Invariantes de Forma (PIF)

Sejam dois Hamiltonianos H_b e H_f relacionados mediante a seguinte condição:

$$\begin{aligned} H_f(a) &= A(a)A^+(a) = A^+(f(a))A(f(a)) + R(a) \\ &= H_b(f(a)) + R(a) \end{aligned} \quad (2.68)$$

onde f é um mapeamento do espaço das constantes de acoplamento nele mesmo e $R(a)$ é uma função a valores reais. Quando esta condição se verifica, dizemos que o Hamiltoniano H_b é *invariante de forma*. Por exemplo, os potenciais definidos nas equações (2.61) definem um sistema invariante de forma com o parâmetro a identificado em (2.63).

Com base nesta propriedade, podemos prontamente deduzir relações de recorrência para as energias e os coeficientes de espalhamento. Para demonstrar, consideremos o sistema supersimétrico representado na figura 2 abaixo (N é o número fermiônico)

Como indica a figura 2 abaixo, no caso de PIF, a equação (2.68) implica:

$$E'_{n+1}(a) = E_n(f(a)) + R_a \quad n = 0, 1, 2 \dots \quad (2.69)$$

por outro lado, a supersimetria implica

$$E'_n(a) = E_n(a) \quad n = 1, 2 \dots \quad (2.70)$$

Combinando estas duas propriedades, teremos:

$$E_{n+1}(a) = E'_{n+1}(a) = E_n(f(a)) + R_a \quad (2.71)$$

Aplicando repetidamente a condição de invariância de forma (2.68), obtemos:

$$E_s(a) = E_0(f^{s-1}(a)) + \sum_{n=0}^{s-1} R(f^n(a)) \quad (2.72)$$

onde f^s indica que o mapeamento f foi aplicado s vezes. Este resultado fornece, então, uma fórmula explícita para as energias E_s no caso de $H_b(f^{s-1}(a))$ admitir um estado ligado de energia zero.

Neste ponto, é interessante notar que, similarmente ao caso do oscilador harmônico unidimensional, a n -ésima função de onda de estado ligado de H_b , $\Psi_n(x, a)$ para qualquer PIF pode ser facilmente obtida a partir da função de onda

do estado fundamental $\Psi_0(x,a)$, a qual é conhecida a partir do superpotencial $W(x,a)$. Isto decorre do fato de que os operadores A e $A^\dagger$ ligam as autofunções de mesma energia dos Hamiltonianos parceiros supersimétricos H_b e H_f . Primeiramente, notemos que, a partir do Hamiltoniano $H_b^1(x,a)$, podemos construir uma série de Hamiltonianos $H_b^2, H_b^3, H_b^4, \dots, H_b^m$ tais que o enésimo Hamiltoniano H^n terá o mesmo espectro de H^1 , com exceção de que os $n-1$ níveis de H^1 estarão ausentes em H^n :

$$H^n = -\frac{d^2}{dx^2} + V_b(x,a) + \sum_{k=1}^{n-1} R(a_k) \quad (2.73)$$

A função de onda do estado fundamental de H^n é dada por $\Psi_0(x, na)$. Usando a propriedade que relaciona as funções de onda SUSI (2.36), pode-se verificar que a autofunção de energia (não normalizada) do enésimo nível do Hamiltoniano original $H(x,a)$ é dada por:

$$\Psi_n(x,a) \propto A^+(x,a)A^+(x,a_1)A^+(x,a_2)\dots A^+(x,a_n)\Psi_0(x,a_{n+1}) \quad (2.74)$$

o que corresponde a uma generalização do caso do oscilador harmônico (2.36).

A invariança de forma (2.68) também implica que os coeficientes de espalhamento de $H_1(a)$ e $H_b(f(a))$ são os mesmos. As relações (2.57), no caso dos PIF, assumem a forma simples

$$R_b(a) = \frac{W_-(a) + ik}{W_-(a) - ik} R_b(a_1) \quad (2.74a)$$

$$T_b(a) = \frac{W_+(a) - ik'}{W_-(a) - ik} T_b(a_1) \quad (2.74b)$$

com $a_1 = f^{-1}(a)$. Portanto, ficam relacionados os coeficientes de transmissão e reflexão de um mesmo Hamiltoniano em a e $a_1 (=f^{-1}(a))$.

6. Hierarquia dos Hamiltonianos e Suas Relações com os PIFs

Como vimos na seção anterior, se o Hamiltoniano H_1 possui um estado fundamental de energia zero, ele pode sempre ser fatorado como o produto de um par de operadores diferenciais lineares. Portanto, fica claro que se o estado fundamental de H_1 é $\Psi_0^{(1)}$ com autovalor $E_0^{(1)}$ poderá sempre ser escrito na forma

$$H_1 = A_1 A_1^+ - E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1 \quad (2.75)$$

onde

$$A_1 = \frac{d}{dx} + W_1(x), \quad A_1^+ = -\frac{d}{dx} + W_1(x), \quad W_1(x) = -\frac{d \ln \Psi_0^{(1)}}{dx} \quad (2.76)$$

Assim, dado um conjunto de Hamiltonianos H_n , $n = 1, 2, 3, \dots$ com estados fundamentais $\Psi_0^{(n)}$ de energias $E_0^{(n)}$ (não necessariamente nulas), podemos construir, a partir deles, novos Hamiltonianos $\tilde{H}_n = H_n - E_0^{(n)}$ com energias de seus estados fundamentais nulas e cujos autoestados sejam os mesmos dos H_n . Vamos supor que estes novos Hamiltonianos possam ser escritos nas formas fatoradas $\tilde{H}_n = A_n^+ A_n$, de modo que se possa definir superpotenciais $W_n(x)$ que gerem os potenciais parceiros de H_n :

$$\tilde{V}(x) = V(x) - E_0^{(n)} = W_n(x)^2 - W_n'(x) \quad (2.77)$$

Os estados fundamentais de $\Psi_0^{(n)}$ poderão ser escritos como:

$$\Psi_0^{(n)}(x) = N_n \exp\left(-\int^x W_n(y) dy\right) \quad (2.78)$$

e os operadores A_n^+ e A_n como:

$$\begin{aligned} A_n^+ &= \left(-\frac{d}{dx} + W_n(x)\right) \\ A_n &= \left(+\frac{d}{dx} + W_n(x)\right) \end{aligned} \quad (2.79)$$

Deste modo, os Hamiltonianos originais H_n podem então ser escritos em função dos operadores (eliminamos o til para facilitar a notação):

$$H_n = A_n^+ A_n + E_0^n \quad (2.80)$$

Assim, por exemplo, se H_2 é o parceiro supersimétrico de H_1 ; se H_3 é o parceiro de H_2 e assim sucessivamente, poderemos escrever H_{n+1} como o parceiro supersimétrico de H_n :

$$H_{n+1} = A_n A_n^+ + E_0^n \quad (2.81)$$

Portanto, H_n terá energia E_0^n e todos os outros estados terão energias $E_k^n = E_{k-1}^{n+1}$, com $k = 1, 2, 3, \dots$ sendo que os índices k e n se referem, respectivamente, ao nível de energia e ao Hamiltoniano considerado. A esta sequência de funções denominamos *Hierarquia de Hamiltonianos*. A relação (2.82) entre os níveis de energia dos Hamiltonianos na hierarquia pode ser representada através da tabela abaixo:

$$E_{k-j}^{n+j} = E_k^n \quad (2.82)$$

E_k^n	E_{k-1}^{n+1}	E_{k-2}^{n+2}	E_{k-3}^{n+3}
-	-	-	-
-	-	-	-
E_5^n	E_4^{n+1}	E_3^{n+2}	E_2^{n+3}
E_4^n	E_3^{n+1}	E_2^{n+2}	E_1^{n+3}
E_3^n	E_2^{n+1}	E_1^{n+2}	E_0^{n+3}
E_2^n	E_1^{n+1}	E_0^{n+2}	

E_1^n —	E_0^{n+1} —		
-----------	---------------	--	--

E_0^n —			
-----------	--	--	--

$\dots H_n$	H_{n+1}	H_{n+2}	$H_{n+3} \dots$
-------------	-----------	-----------	-----------------

Além disso, a relação entre os autoestados correspondentes a cada nível energético fica determinada por meio da generalização das equações (2.23) a (2.25):

$$\begin{aligned}\psi_{k-j}^{n+j} &= \left(\prod_{l=1}^j (E_{k-j+l}^{n+j-l} - E_0^{n+j-l})^{-1/2} A_{n+j-l} \right) \psi_k^n \\ \psi_k^n &= \left(\prod_{l=1}^j (E_{k+j-l}^{n+l} - E_0^{n+l})^{-1/2} A_{n+l-l}^+ \right) \psi_{k-j}^{n+j}\end{aligned}\tag{2.83}$$

A importante propriedade dos *potenciais invariantes de forma* (PIF), amplamente discutida na ref. [4], e definida matematicamente pela condição (2.68), pode ser escrita em termos dos potenciais correspondentes, respectivamente, a Hamiltonianos parceiros sucessivos da hierarquia H_n e H_{n+1} :

$$V_{n+1}(x; a_{n+1}) = V_n(x; a_n(a_{n+1})) + R(a_{n+1})\tag{2.84}$$

Aplicando-se recursivamente esta condição podemos construir uma sequência de potenciais tais que:

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

Ou, genericamente,

$$V_{n+j}(x; a_{n+j+1}) = V_n(x; a_n) + \sum_{k=n}^{n+j-1} R_k(a_{k+1}) \quad (2.85 \text{ a})$$

E os correspondentes Hamiltonianos serão:

$$\begin{aligned} H_{n+j} &= H_n(x; a_n) + \sum_{k=n}^{n+j-1} R(a_{k+1}) \\ H_{n+j+1} &= H_{n+1} + \sum_{k=n}^{n+j-1} R(a_{k+1}) \end{aligned} \quad (2.85 \text{ b})$$

E, portanto, são parceiros supersimétricos, isto é, a sequência assim formada constrói uma hierarquia de Hamiltonianos. Esta propriedade facilitará a resolução de muitos problemas em MQ, uma vez que, quando aplicável, permite encontrar os valores das energias dos diversos níveis e suas respectivas autofunções. Sabendo que $E_n^0 = 0$, a energia do estado fundamental de H_{n+j} é dada por:

$$E_{n+j}^0 = \sum_{k=n}^{n+j-1} R(a_{k+1}) \quad (2.86)$$

Usando a propriedade da hierarquia $E_{nk-j}^{n+j} = E_k^n$, temos:

$$E_0^n(a_n) = 0 \quad ; \quad E_j^n(a_n) = \sum_{k=n}^{n+j-1} R(a_{k+1}) \quad (2.87)$$

Os estados de H_n também podem ser determinados a partir da hierarquia, uma vez que cada Hamiltoniano difere de seu antecessor hierárquico por uma soma de termos constantes, que no caso é a energia do estado fundamental de H_{n+j} :

$$\begin{aligned} H_{n+j} \psi_0^{n+j} &= (H_n + E_0^{n+j}) \psi_0^{n+j} = E_0^{n+j} \psi_0^{n+j} \\ H_{n+j} \psi_0^{n+j} &= 0 \Rightarrow \psi_0^{n+j} = \psi_0^n \end{aligned} \quad (2.88)$$

Todos os outros estados podem ser determinados a partir da hierarquia pela aplicação do operador A^+ :

$$\psi_j^n = \left(\prod_{l=1}^j (E_{2j-l}^{n+l} - E_0^{n+l})^{-1/2} A_{n+l-l}^\dagger \right) \psi_0^n \quad (2.89)$$

UMA NOVA CLASSE DE SUPERPOTENCIAIS

A mecânica quântica supersimétrica pode ser introduzida, como vimos no capítulo anterior, através da definição de um superpotencial $W(x)$ que pode ser interpretado como o gerador dos potenciais parceiros $V_+(x)$ e $V_-(x)$. Assim, para que um sistema quanto-mecânico seja supersimétrico, as equações (2.10) e (2.13) devem ser obedecidas. No caso unidimensional, $W(x)$ deve obedecer à regra de mudar de sinal ao cruzar o eixo dos x ; num caso particular, $W(x) = -W(-x)$.

1. Superpotenciais Monomiais Com Potências Ímpares de x

Superpotenciais monomiais cujas potências sejam pares, levam, *a princípio*, a uma quebra da supersimetria. Desta forma, não seria possível construir um sistema em MQS para $W(x)$ na forma de monômios de potências pares de x , isto porque não é possível encontrar-se uma função de onda do estado fundamental que seja normalizável nestas condições, pois:

$$\Psi_0(x) = N \exp\left(-\int^x y^{2n} dy\right) = N \exp\left(-\frac{x^{2n+1}}{2n+1}\right), n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.1)$$

não é normalizável.

A classe mais simples de superpotenciais que manifestam supersimetria são monômios de potências ímpares de x , ou seja:

$$W(x) = g x^{2n+1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2)$$

Da equação de Riccati (2.10) obtemos os potenciais parceiros:

$$V_{\pm}(x) = W^2(x) \pm W'(x) = g^2 x^{4n+2} \pm g(2n+1)x^{2n} \quad (3.3)$$

O estado fundamental normalizável da classe (3.2) é dado por:

$$\Psi_0^-(x) = \text{Nexp} \left[\frac{-gx^{2n+2}}{(2n+2)} \right] \quad (3.4)$$

$$\text{com } N = \left[\frac{(g/(n+1))^{1/(2n+2)}}{\Gamma(1/(2n+2))} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.5)$$

O exemplo mais simples de um Sp dessa classe é $W(x) = g x$. Neste caso, os potenciais parceiros:

$$V_{\pm}(x) = g^2 x^2 \pm g \quad (3.6)$$

são simplesmente os potenciais de dois osciladores harmônicos de mesma frequência, com uma constante g adicionada ou subtraída. Neste caso para $g = 1$,

$$\Psi_0^- = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2/2} \quad (3.7)$$

é a autofunção normalizada do estado fundamental de energia zero para o potencial $V_-(x) = x^2 - 1$. Os estados excitados de H_+ são dados por $E_n^- = E_{n+1}^+ = 2n$ para $n = 1, 2, \dots$

Neste trabalho não serão considerados superpotenciais deste tipo, uma vez que são bem conhecidos.

2. Superpotenciais monomiais com potências pares de x

Outra classe de potenciais são os gerados por Sp com potências *pares* de x : $W(x) = g x^{2n}$. Como afirmamos acima, tais superpotenciais geram funções de onda do estado fundamental que não são normalizáveis.

Entretanto, vamos mostrar que é possível encontrar soluções normalizáveis do estado fundamental para tais sistemas introduzindo uma classe de superpotenciais com potências pares que, multiplicados pela função¹

¹ Neste trabalho definimos $\text{sign}(x) \equiv \mathcal{E}(x) = 1, x > 0$; $\mathcal{E}(x) = -1, x < 0$ e $\mathcal{E}(0) = 0$. Usaremos também a representação mais conveniente $\mathcal{E}(x) = \lim_{a \rightarrow 0} (x/\sqrt{x^2+a^2})$.

$sign(x)=\varepsilon(x)$ se tornam funções ímpares e passam a obedecer à regra $W(x) = -W(-x)$.

Nas seções seguintes estudaremos dois casos particulares.

a) O caso $n = 0$

Consideremos o superpotencial

$$W(x) = g \varepsilon(x) \quad (3.8)$$

onde g é uma constante positiva. Para tal superpotencial, as equações de Riccati (2.10) fornecem os seguintes potenciais parceiros SUSI:

$$V_{\pm}(x) = W^2(x) \pm W'(x) = g^2 \pm 2g\delta(x) \quad (3.9)$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac. Observe-se que V_- é um poço delta, enquanto que V_+ representa uma barreira delta. As equações de Schroedinger correspondentes são:

$$-\frac{d^2}{dx^2}\Psi^{\pm} \pm 2g\delta(x)\Psi^{\pm}(x) = (E^{\pm} - g^2)\Psi^{\pm}(x) \quad (3.10)$$

cujas soluções são bem conhecidas [20] [21] [22]. O poço V_- possui um único estado ligado com nível de energia $E_0^- = 0$ e energia de ligação $-g^2$, com função de onda dada por:

$$\Psi_0^-(x) = \sqrt{g} e^{-g|x|} \quad (3.11)$$

Todos os demais estados são ondas planas com espectro contínuo de energias, sendo o mais baixo $E = g^2$. As soluções de espalhamento do poço V_- e da barreira V_+ podem ser escritas como:

$$\Psi_I^{\pm}(x) = A_{\pm} e^{ikx} + B_{\pm} e^{-ikx}, \quad x \leq 0 \quad (3.12 a)$$

$$\Psi_{II}^{\pm}(x) = C_{\pm} e^{ikx} + D_{\pm} e^{-ikx} \quad , \quad x \geq 0 \quad (3.12 \text{ b})$$

onde $k = \sqrt{E^{\pm} - g^2}$ com $E^{\pm} > g^2$ e as constantes respectivas são relacionadas de acordo com as condições de contorno $\Psi_I(o) = \Psi_{II}(o)$ e $\Psi'_I(o) \pm 2g \Psi(o) = \Psi'_{II}(o)$ requeridas pelo potencial delta.

Para entender o papel da supersimetria neste sistema, consideremos uma partícula vinda de $-\infty$ cruzando o poço (ou encontrando a barreira). Neste caso, podemos escolher $D_{\pm} = 0$. Com as condições de contorno apropriadas em $x = 0$, podemos determinar $B_{\pm}$ e $C_{\pm}$, obtendo as soluções espalhada e transmitida como funções da amplitude incidente $A_{\pm}$. Os resultados podem ser escritos como:

$$\Psi_I^{\pm}(x) = A_{\pm} \left[e^{ikx} + i \frac{(\mp g)/k}{(1 - i(\mp g)/k)} e^{-ikx} \right] \quad (3.13 \text{ a})$$

$$\Psi_{II}^{\pm}(x) = A_{\pm} \frac{1}{(1 - i(\mp g)/k)} e^{ikx} \quad (3.13 \text{ b})$$

É fácil observar que as soluções Ψ^{-} e Ψ^{+} se relacionam pelas equações supersimétricas (2.24) e (2.25). Por exemplo, aplicando o operador A a $\Psi_I(x)$, obtemos:

$$\begin{aligned} A\Psi_I^{-}(x) &\propto \left(g \in (x) + \frac{d}{dx} \right) \left[e^{ikx} + i \frac{g/k}{(1 - i g/k)} e^{-ikx} \right] \\ &\propto \left[e^{ikx} + i \frac{-g/k}{(1 + i g/k)} e^{-ikx} \right] \propto \Psi_I^{+}(x), \end{aligned} \quad (3.14)$$

o que mostra explicitamente a manifestação da SUSI no sistema.

b) O caso $n = 2$

Neste caso também é possível restaurar a supersimetria. Para $n=1$, multiplicamos x^2 por $\varepsilon(x)$, introduzindo o superpotencial *modular*:

$$W(x) = g x^2 \varepsilon(x) \quad (3.15)$$

Com essa imposição, a função de onda do estado fundamental:

$$\psi_0(x) = N \exp\left(-g \int^x y^2 \varepsilon(y) dy\right) = N \exp\left(-g \frac{|x|^3}{3}\right) \quad (3.16)$$

se torna *normalizável*, ou seja, fisicamente interpretável à luz da mecânica quântica. Para $g=1$:

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{|x|^3}{3}} dx \Rightarrow N^2 \frac{2}{3} \frac{\Gamma(1/3)}{(1/3)^{1/3}} = 1 \Rightarrow N^2 = \left[\frac{2}{3^{2/3}} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \right]^{-1} \quad (3.17)$$

A função de onda normalizada do estado fundamental, que denominamos de *função exponencial cúbica* (FEC),

$$\psi_0(x) = \sqrt[3]{\frac{3}{2}} \frac{g^{1/6}}{\sqrt{\Gamma(1/3)}} e^{-g \frac{|x|^3}{3}} \quad (3.18)$$

é a solução de energia zero da equação de Schroedinger

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_0(x) - (g^2 x^4 - 2g|x|) \Psi_0(x) = 0 \quad (3.19)$$

onde (doravante, usaremos os índices “1” e “2” no lugar de “+” e “-” por comodidade):

$$V(x) \equiv V_1(x) = g^2 x^4 - 2g|x| \quad (3.20 a)$$

é o potencial que resulta da equação de Riccati $V_1(x) = W^2 - W'$, sendo seu parceiro

$$V_2(x) = g^2 x^4 + 2g|x| \quad (3.20 \text{ b})$$

Os potenciais parceiros estão representados na Figura 3, pg. 35.

Pode-se mostrar que para estes potenciais, o índice de Witten - Eqs. (2.52) – resulta igual a 1, o que realmente comprova que o sistema possui supersimetria não quebrada. Representando $(-1)^N$ pela matriz σ_3 , e supondo que o limite $\beta \rightarrow 0$ corresponde ao limite clássico (uma vez que neste caso $T \rightarrow \infty$), podemos substituir o traço por uma integração sobre o espaço de fase clássico:

$$\Delta(\beta) = \text{Tr} \sigma_3 \int \left[\frac{dp dx}{2\pi} \right] e^{-\beta (p^2/2 + W^2/2 - \sigma_3 W'(x)/2)} \quad (3.21 \text{ a})$$

Expandindo o termo proporcional a σ_3 no expoente e tomando o traço, vem:

$$\Delta(\beta) = \text{Tr} \sigma_3 \int \left[\frac{dp dx}{2\pi} \right] e^{-\beta (p^2/2 + W^2/2)} \sinh\left(\frac{\beta W'(x)}{2}\right) \quad (3.21 \text{ b})$$

Para $\beta \rightarrow 0$, devemos calcular a integral:

$$\Delta(\beta) = \text{Tr} \sigma_3 \int \left[\frac{dp dx}{2\pi} \right] e^{-\beta (p^2/2 + W^2/2)} \left(\frac{-\beta W'(x)}{2} \right) \quad (3.21 \text{ c})$$

Mas o termo W' para o superpotencial $x^2 \epsilon(x)$ é, por construção, uma função par, o que leva às integrais acima resultarem em funções gama. Logo, o índice de Witten para o caso considerado resulta = 1, indicando que o sistema tem supersimetria não quebrada.

É interessante observar que o procedimento de “modular” a variável x pode ser generalizado para qualquer potência de x (com $g = 1$):

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_0(x) - (x^{2q} - q|x|^{q-1}) \Psi_0(x) = 0 \Rightarrow \Psi_0(x) = A \exp \left(-\frac{|x|^{q+1}}{q+1} \right)$$

$$A = \left[\frac{(q+1) \cdot \left(\frac{2}{q+1} \right)^{1/(q+1)}}{2\Gamma\left(\frac{1}{q+1}\right)} \right]^{1/2} ; \quad W(x) = |x|^q [\mathcal{E}(x)]^p \quad (3.22),$$

Onde o expoente p é igual a zero ou um, dependendo de q ser *ímpar* ($p=0$) ou *par* ($p=1$), ou ainda fracionário. Por exemplo, para $q = 3/2$, tem-se $W(x) = |x|^{3/2} \mathcal{E}(x) = (x^2)^{3/4}$, e a solução normalizada de energia zero da equação de Schroedinger

$$\frac{d^2 f}{dx^2} - \left(x^3 - \frac{3}{2} \sqrt{|x|} \right) f = 0$$

é dada por:

$$f(x) = \left[\frac{\left(\frac{5}{4} \right)^{3/5}}{\Gamma\left(\frac{2}{5}\right)} \right]^{(1/2)} \times \exp \left(-\frac{2|x|^{5/2}}{5} \right)$$

O oscilador harmônico é o caso especial de $q = 1$; $p = 1$. Na próxima seção discutiremos mais algumas generalizações.

Duas questões sobre o desenvolvimento acima devem ser consideradas com respeito à função $\delta(x)$ de Dirac:

1) Nos potenciais parceiros um termo $\delta V = \pm 2gx^2 \delta(x)$ foi eliminado. Em primeiro lugar, porque o produto da função delta por x é, por definição, sempre nulo (e, analogamente, também por x^2). Além disso, a ação de tal termo nas funções de onda envolvidas neste problema é nula. Conforme os potenciais parceiros tendam a infinito para x tendendo a $\pm\infty$, os espectros de $H_{\pm} = p^2 + V_{\pm}$ são discretos e suas autofunções normalizáveis. Se tratarmos δV como correção perturbativa para $H_{\pm}$, sua ação não será nula apenas se $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \delta(x) |\psi(x)|^2 dx \neq 0$. Mas esta condição requer que uma função de onda próxima de $x=0$ se comporte como $f(x)/x$, com $f(0) \neq 0$, a qual é não-normalizável e não pertence ao espectro de $H_{\pm}$.

FIG. 3 - Os potenciais parceiros das eqs. (3.20): V_2 (pontilhado) e V_1 . - O potencial V_1 , como definido, apresenta dois mínimos simétricos em $x = +2g^{(-1/3)}$ e $x = -2g^{(-1/3)}$, onde $V_1 = -3g^{(2/3)}/16^{(1/3)}$. No gráfico acima, escolhemos a escala ali indicada, onde o valor de $g = 1,5 \times 10^{11}$. Também restituímos a unidade de $\hbar$ e usamos $m = 4 \times 10^{-28}$ (unidades do SI). A razão desta escolha tem a ver com a semelhança entre o potencial V_1 e o experimental da molécula de amônia, que voltaremos a discutir adiante nesta tese.

2) Por outro lado, o termo δV , tratado como parte de $H_{\pm}$ poderia não fornecer condições de contorno não triviais para Ψ' em $x=0$. Para estudar essa possibilidade, deveríamos integrar a equação de Schroedinger no intervalo definido por $(-\epsilon, \epsilon)$ para $\epsilon \rightarrow 0$. Um efeito não nulo de δV somente apareceria se $\Psi(x)$ se comportasse como $f(x)/x^2$ com $f(0) \neq 0$, que também está fora do espectro de $H_{\pm}$;

3) Entretanto, estas dificuldades podem ser facilmente eliminadas num tratamento computacional, substituindo-se o *módulo* de x por $\sqrt{x^2}$ (e consequentemente, a função *senal* de x por $x/\sqrt{x^2}$). De um modo mais rigoroso,

podemos representar a função sinal como um limite de função, por exemplo:

$$\varepsilon(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n x}{\sqrt{1 + n^2 x^2}}$$

O APÊNDICE E apresenta outras funções que podem representar função sinal. Embora esta representação não resolva totalmente as dificuldades acima apontadas, será demonstrado, mais adiante, que dois processos de regularização, o primeiro baseado na proposta de *Das e Pernice* [60, 61] e o segundo, por nós introduzido, eliminam as funções delta de Dirac dos problemas envolvendo superpotenciais (ou potenciais) modulares.

A solução (3.18) apresenta interessantes características. Em primeiro lugar, porque, como se sabe, uma solução exata para o estado fundamental (ou mesmo para estados excitados) de potenciais do tipo $V(x) = g^2 x^4$ ou $V(x) = w^2 x^2 + g^2 x^4$ não pode ser obtida analiticamente; portanto, a solução exata para o potencial V_- chega a ser surpreendente. Em segundo lugar, note-se que esta solução caracteriza-se por apresentar um máximo (*lump*) em $x=0$ (que é um máximo local de V_-) e não dois picos centrados nos dois mínimos simétricos, $x=\pm(1/2g)^{1/3}$ de V_- , não obstante o fato de que, em uma dimensão, todo poço atrativo suporta ao menos um estado ligado. Isto ocorre porque o “volume” de cada poço não é grande o suficiente para suportar um estado ligado. Adiante mostraremos que este potencial não apresenta energia negativa, como seria de se esperar, mas por ora, vale observar que o “volume” do poço $[\Delta x \cdot (\Delta E)^{1/2}]$ não depende de g .

Neste ponto, é ainda conveniente mais uma observação: como é bem sabido, o potencial duplo-poço em mecânica quântica é um dos mais importantes, não apenas pela analogia com a quebra espontânea de simetria em teoria de campos, mas também porque a solução normalmente contém a noção de um estado como superposição linear de estados “clássicos”. Por exemplo, *Feynman* usa o exemplo da molécula de amônia para ilustrar a superposição de estados na mecânica quântica [63]. Em sistemas como este, existem tipicamente dois estados degenerados; o sistema pode residir numa superposição de ambos ou, mais importante, pode “tunelar” de um a outro. Na figura 3 abaixo, as escalas escolhidas foram “forçadas” para representar a molécula de amônia, de modo que o espectro de absorção observado experimentalmente da molécula corresponda

ao potencial em estudo. Fisicamente, os dois mínimos correspondem às duas posições possíveis de equilíbrio para o átomo de nitrogênio e a origem ($x=0$), um ponto de equilíbrio instável.

Vários autores estudaram formas de potenciais que se adaptassem à molécula citada [24,25,26], sendo o proposto por *Merzbacher* [27], $V(x) = a(|x|-b)^2$, o que representa o (possivelmente único) potencial duplo-poço com solução analítica exata, e que mais se aproxima de V_- por nós proposto. Voltaremos ao assunto mais adiante.

3. Potenciais Modulares Generalizados

A ideia do potencial modular introduzido pela eq. (3.16) pode ser generalizada para abranger uma classe de problemas de mecânica quântica exatamente solúveis a energia zero.

Uma possível generalização é expressa pela equação:

$$W(x) = \sum_i a_i x^{\alpha_i} [\mathcal{E}(x)]^{p_j} \quad (3.23)$$

sendo a_i e α_i todos reais, não necessariamente inteiros. Os casos $a_1 = 1$ e $\alpha_1 = 0$; 2, com $a_i = 0$ para $i \neq 1$ foram estudados na seção anterior. O expoente p_j ($= 0$ ou 1 , dependendo do expoente α_j correspondente ser *ímpar* ou *par*) da função sinal foi introduzido para assegurar a propriedade de o superpotencial gerar funções de onda do estado fundamental normalizáveis em todo o eixo real.

O superpotencial, em mecânica quântica, não possui análogo clássico e, ao que entendemos, não pode ser interpretado fisicamente (aliás, alguns potenciais introduzidos em MQ também não possuem interpretação clássica simples). Isto se pode ver numa simples análise dimensional. Sendo o potencial físico proporcional ao quadrado do superpotencial, este último teria dimensão de $(\text{Energia})^{(1/2)}$. Assim, podemos entendê-lo com um ente puramente abstrato, introduzido na MQS apenas como função geratriz dos potenciais parceiros. Isto nos leva a admitir o uso de expressões que, embora não possuam o devido rigor matemático, geram potenciais solúveis com energia zero para a equação de

Schroedinger. A expressão (3.23) é um exemplo: rigorosamente falando, $W(x)$ pode ser singular; além disso, a função *senal*, que na expressão poderia aparecer com expoentes positivos ou negativos, inteiros ou fracionários, se multiplicada diretamente por x , não teria significado matemático preciso. Esta questão é amplamente discutida por *Lighthill* [62]. Por essa razão foi introduzido o expoente p . Podemos mostrar que tais superpotenciais dão origem a potenciais físicos, solúveis para $E_0 = 0$, para certos valores dos parâmetros a_i e α_i . Por outro lado, o Sp generalizado acima definido pode ser ainda combinado com certas funções da variável x para produzir novos potenciais parceiros supersimétricos, alguns deles novos na literatura da MQS.

Estudaremos brevemente alguns casos que entendemos relevantes. Para tanto, vamos limitar a classe acima definida para a soma dos primeiros três termos:

$$W(x) = a_1 x^{\alpha_1} [\mathcal{E}(x)]^{p_1} + a_2 x^{\alpha_2} [\mathcal{E}(x)]^{p_2} + a_3 x^{\alpha_3} [\mathcal{E}(x)]^{p_3} \quad (3.24)$$

$$\mathbf{I.} \quad \mathbf{a_1 = -a_2 = 1; \alpha_1 = 1; \alpha_2 = -1; a_3 = 0; p_1 = p_2 = 0}$$

O Sp assim definido, quando tratado pelo método aqui desenvolvido, resolve um “enigma” muito discutido na literatura:

$$W(x) = x - \frac{1}{x} \quad (3.25)$$

$$V_1(x) = x^2 - 3 \quad (3.26a)$$

$$V_2(x) = x^2 + \frac{2}{x^2} - 1 \quad (3.26b)$$

A figura 4 (pg. 40) mostra o gráfico dos potenciais acima. Apesar de o Sp ter um polo em $x = 0$, os potenciais parceiros são ambos exatamente solúveis [29, 43, 61]. Os dois espectros de autovalores são:

$$E_n^1 = 2n ; E_n^2 = 2(n+1) ; n = 0,1,2... \quad (3.26c)$$

Note-se que (parece que) ocorre uma energia negativa $E_0^1 = -2$. Embora pareça estranho (pois, em SUSI, os autovalores da energia são positivos semi-definidos),

esta energia é explicada ao examinarmos a função de onda gerada por $W(x)$:

$$\psi_0(x) = N \text{Exp}[-\int^x W(y)dy] = N x e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad N = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \quad (3.26d),$$

que corresponde ao primeiro estado excitado do oscilador harmônico. A energia $E_0^1=0$, portanto, joga o estado fundamental para uma energia negativa. Por outro lado, a função de onda do “estado fundamental” gerada pelo superpotencial (3.25) apresenta um nó na origem (Fig. 4a) e não pode representar o estado fundamental de um sistema supersimétrico *original*.

Fig. 4a – A função de onda do estado fundamental gerada pelo superpotencial (3.25) apresenta um nó na origem.

Como interpretar esse “enigma”? A resposta é simples: o superpotencial acima nada mais é do que o segundo Sp na hierarquia do oscilador harmônico linear, cujo *original* é dado por $W(x) = x$. Denominamos tais sistemas de *derivados*, uma vez que decorrem da aplicação da equação (2.76) ao estado fundamental do sistema, isto é:

$$W_1(x) = -\frac{1}{\Psi_1} \frac{d\Psi_1}{dx} = \frac{x^2 - 1}{x} = x - \frac{1}{x}$$

Cabe aqui, então, considerar uma importante questão: que tipo de método de “supersimetrização” poderíamos utilizar, a partir do Sp (3.25), para excluir a função de onda do estado fundamental do oscilador harmônico e buscar uma função de onda que seja *par* e cuja energia seja nula? Uma solução a este

“enigma” foi apontada por *Das* e *Pernice* [61]: o Sp (3.25) deve ser regularizado, de modo que represente uma função contínua em $x=0$. O regulador é levado a zero no final e a supersimetria se mantém. Propomos ainda outra forma, que entendemos mais simples, de resolver o mesmo problema: trata-se de utilizar, no lugar da expressão (3.25) para o superpotencial, uma função *modular* regularizada. Na próxima seção detalharemos estes processos. Seja qual for a forma de regularizar o superpotencial, a função de onda do estado fundamental do oscilador harmônico $\psi_0 \sim e^{-x^2}$ não fará parte do sistema supersimétrico regularizado gerado por (3.25). Como veremos adiante, a “nova” função de onda do estado fundamental será agora uma função *par*:

$$\psi_0(x) = N \text{Exp}[-\int^x W_R(y)dy] = N|x| e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad N = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \quad (3.27)$$

onde W_R é o Sp regularizado (Fig. 4c). É fácil checar que a função de onda (3.27) tem realmente energia do estado fundamental nula, consistente com o nosso processo de análise supersimétrica.

Com relação a este mesmo problema, *Jevicki* e *Rodrigues* [43] discutem a quebra de supersimetria pelo potencial singular gerado pelo Sp $W(x) = (g/x) - x$ e mostram que, para diferentes intervalos de valores de g o comportamento do sistema muda, isto é, ele depende da força da barreira na origem. Por exemplo, para $g < -3/2$, a SUSI é quebrada, com $E_0^1 = -2g + 1$; para $1/2 < g < 3/2$ (que corresponde ao caso acima, no qual $g = 1$), a supersimetria também é *quebrada* (conclusão esta que é discutível e será debatida nas próximas seções deste trabalho. Pode-se verificar que o índice de Witten, no caso do Sp definido em (3.25), é não nulo, como se vê abaixo). Já, no intervalo $-1/2 < g < 1/2$, a supersimetria é restaurada, assim como para $g > 3/2$.

Para finalizar a discussão, é interessante calcular o *índice de Witten* para este sistema. Pela Eq. (3.22), obtemos:

$$\Delta = \int_{-\infty}^{\infty} \text{Exp}[-W^2(x)] W'(x) dx = 2\sqrt{\pi} \neq 0 \Rightarrow \text{SUSI não - quebrada!}$$

FIG. 4b - Os potenciais “parceiros” V_1 (linha cheia) e $V_2(x)$ – eq. (3.25).

FIG. 4c – A função de onda do estado fundamental, Eq. (3.27)

II. $a_1 = -a_2 = 1; a_3 = 2; \alpha_1 = 1; \alpha_2 = -3; \alpha_3 = -1; p_1 = p_2 = p_3 = 0$

A expressão para $W(x)$ e para os potenciais parceiros, ambos singulares, se torna:

$$W(x) = x + \frac{2}{x} - \frac{1}{x^3} \quad (3.28)$$

$$V_1(x) = x^2 + \frac{4}{x^2} - \frac{7}{x^4} + \frac{1}{x^6} + 3 \quad (3.29 a)$$

$$V_2(x) = x^2 - \frac{1}{x^4} + \frac{1}{x^6} + 5 \quad (3.29 \text{ b})$$

(Estes potenciais, embora não modulares, interessam por apresentar singularidades. Estão representados na Fig. 5b). A função de onda normalizável do estado fundamental apresenta dois *lumps* e satisfaz a equação de Schroedinger com $V(x) = V_I$:

$$\psi_0(x) = N \frac{1}{x^2} \text{Exp} \left[-\left(\frac{1}{2}\right) \left(x^2 + \frac{1}{x^2}\right) \right] , \quad N = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{e}{\pi^{1/4}} \quad (3.30)$$

Uma observação interessante é que este sistema tem como solução exata para a equação de Schroedinger a função (3.29) com autovalor 3:

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi_0(x) + \left(x^2 + \frac{4}{x^2} - \frac{7}{x^4} + \frac{1}{x^6} \right) \psi_0(x) = 3\psi_0(x) \quad (3.31)$$

FIG. 5a – A função de onda do estado fundamental, eq. (3.30).

Potenciais deste tipo foram estudados por *E. Drigo et al* [59], sem recorrer às funções modulares. O sistema gerado pelo Sp (3.28) tem supersimetria não quebrada. Isto se pode verificar calculando-se o índice de Witten conforme o procedimento exposto na Eq. (3.22). O resultado é diferente de zero ($\approx 3,545$). As singularidades dos potenciais parceiros atuam como uma barreira infinita na origem, como se observa na Figura 5. Na realidade, este é um problema que tem despertado grande interesse na mecânica quântica e, em especial, na MQS. Diversos autores propõem que potenciais singulares possam ser regularizados escolhendo-se um processo conveniente [43, 60, 61]; entretanto, deve-se considerar que tais processos devem ser usados criteriosamente, como será discutido na próxima seção.

III. $\mathbf{a_1 = a_2 = 1; \alpha_1 = \alpha_2 = 0; a_3 = 0; p_1 = 1; p_2 = 0}$

Como foi observado no Capítulo II, *Merzbacher* [31] propôs um potencial tipo modular para representar a molécula de amônia. É interessante verificar se este potencial, ou outro similar, possa ser gerado por supersimetria. Assim, como último exemplo de interesse, vamos trabalhar o Sp acima definido, o qual gera os potenciais expressos a seguir e que será devidamente regularizado como será mostrado na próxima seção.

$$W(x) = x - \varepsilon(x) \quad (3.32)$$

$$V_1(x) = x^2 - 2|x| \quad (3.33 \text{ a})$$

$$V_2(x) = x^2 - 2|x| + 2 \quad (3.33 \text{ b})$$

O Sp (3.32) é similar ao do oscilador harmônico linear (OHL) deslocado de uma unidade (a mais ou a menos), aqui representada pela função sinal. A solução de energia zero para a equação de Schroedinger será:

$$\psi_0(x) = N \text{Exp}\left(\frac{-x^2}{2} + |x|\right) \quad , \quad N = \frac{1}{e\pi^{1/2}} \quad (3.34)$$

FIG. 6a – A função de onda “modular” do estado fundamental, eq. (3.34).

FIG. 6b – Os potenciais V1 (pontilhado) e V2, eqs. (3.33).

Vemos assim, pelas figuras acima, que os potenciais parceiros, a menos de uma constante, apresentam o aspecto do potencial proposto por *Merzbacher* para a molécula de amônia, e guardam também grande similaridade com o potencial V_I por nós proposto (Fig. 3). Estes potenciais formam um modelo supersimétrico da molécula de amônia. Uma notável diferença com relação ao potencial V_I é que a função de onda do estado fundamental, neste caso, possui dois *lumps* correspondentes aos valores mínimos de $V_I(x)$. Observamos aqui que os potenciais (3.33), na forma apresentada, não poderiam ser gerados diretamente de um Sp que fosse função de $\varepsilon(x)$, isto porque encontraríamos descontinuidades para $x = 1$ em ambos os parceiros, o que implica na existência de uma função delta de Dirac na origem. Entretanto, procedendo à adequada regularização do superpotencial (3.32) acima, esta questão, como já afirmamos, será resolvida em definitivo mediante um processo de *regularização* dos superpotenciais modulares.

Também podemos gerar sistemas com soluções exatas de energia zero partindo de um Sp que seja dado pela soma de um monômio com uma função ímpar de x , como, por exemplo:

$$W(x) = x^2 \varepsilon(x) + \tanh(x) \quad (3.35)$$

que satisfaz à condição $W(x \rightarrow \infty) = -W(x \rightarrow -\infty)$ e gera a função de onda normalizável do estado fundamental:

$$\psi_0(x) = N e^{-|x^3|/3} \operatorname{sech}(x) \quad , \quad N \cong 0,828 \quad (3.36)$$

Os potenciais parceiros gerados por $W(x)$ são dados por (FIG. 7):

$$V_{1/2}(x) = \left(x\sqrt{x^2 + \tanh(x)} \right)^2 \mp \operatorname{Sech}^2(x) \mp 2\sqrt{x^2} \quad (3.37)$$

FIG. 7a – A função de onda do estado fundamental, eq. (3.37b).

FIG. 7b – Os potenciais V_+ (pontilhado) e V_- , eqs. (3.37c).

É fácil verificar que a função (3.37b) satisfaz à equação de Schroedinger para o potencial $V_I(x)$ com $E = 0$.

4. Regularização de Superpotenciais Modulares

4.1. – Regularização de Das-Pernice:

Como vimos, as generalizações dos potenciais modulares acarreta, em alguns casos, uma dificuldade adicional: o surgimento de funções delta de Dirac que representam uma descontinuidade indesejável. Queremos impor que os

potenciais gerados por um Sp modular tenham continuidade na origem, como é o caso do Sp $x^2 \varepsilon(x)$ já estudado (vimos que, neste caso, a função delta é eliminada por aparecer multiplicada por x^2 , entre outros fatores), para que tenham um significado físico claro.

Para eliminar tais descontinuidades, iremos introduzir um *regulador* R nas vizinhanças da origem de modo a tornar contínua a função neste ponto, mesmo quando este regulador for retirado, ou seja, levado a zero no final. O processo que aplicaremos é uma generalização do proposto por *Das e Pernice*, na referência já citada [61]. Tal procedimento justifica a representação usada para a função $\varepsilon(x)$ no presente trabalho.

Para encontrar tal regulador, basta impor a condição de que $f(R)$ torne contínuo o Sp em R . Para o Sp (3.32) é fácil de ver que uma função simples para $f(R)$ é:

$$f(R) = \left(1 - \frac{1}{R}\right)$$

Consideremos, então, o Sp definido pela equação (3.32), sujeito às condições adicionais seguintes:

$$W(x) = \left(x - \frac{x}{\sqrt{x^2}}\right), \text{ para } |x| > R \quad (3.38a)$$

$$W(x) = \left(1 - \frac{1}{R}\right)x, \text{ para } R > |x| \quad (3.38b)$$

Ou, expressando de forma equivalente:

$$W(x) = \Theta(|x| - R) \left(x - \frac{x}{\sqrt{x^2}}\right) + \Theta(R - |x|) \left(1 - \frac{1}{R}\right)x \quad (3.38c),$$

onde $\Theta(x)$ é a função “escada” de Heaviside.

Com estas condições, as funções delta de Dirac que surgem nas derivadas das funções de Heaviside são eliminadas e os potenciais parceiros serão dados por:

$$V_1(x) = \Theta(|x| - R)(x^2 - 2|x|) + \Theta(R - |x|)\left(1 - \frac{1}{R}\right)\left[\left(1 - \frac{1}{R}\right)x^2 - 1\right] \quad (3.39a)$$

$$V_2(x) = \Theta(|x| - R)(x^2 - 2|x| + 2) - \Theta(R - |x|)\left(1 - \frac{1}{R}\right)\left[\left(1 - \frac{1}{R}\right)x^2 + 1\right] \quad (3.39b)$$

A função de onda do estado fundamental, após eliminação do regulador, é então expressa pela eq. (3.34):

$$\psi_0(x) = N \exp\left(\frac{-x^2}{2} + |x|\right), \quad N = \frac{1}{e\pi^{1/2}} \quad (3.34)$$

O mesmo raciocínio pode ser estendido a outros superpotenciais modulares. O processo se resume a encontrar a função regularizadora adequada. Por exemplo, para o Sp (3.25), $f(R) = (1 - (1/R^2))$. Para maior clareza, faremos os cálculos com mais detalhes. A expressão para o Sp (3.25) regularizado se torna:

$$W(x) = \Theta(|x| - R)\left(x - \frac{1}{x}\right) + \Theta(R - |x|)\left(1 - \frac{1}{R^2}\right)x \quad (3.40),$$

Os potenciais parceiros regularizados são dados por:

$$V_1(x) = \Theta(|x| - R)(x^2 - 3) + \Theta(R - |x|)\left[\left(1 - \frac{1}{R}\right)^2 x^2 + \frac{1}{R^2} - 1\right] \quad (3.41)$$

$$V_2(x) = \Theta(|x| - R)\left(x^2 + \frac{2}{x^2} - 2\right) - \Theta(R - |x|)\left[\left(1 - \frac{1}{R}\right)^2 x^2 - \frac{1}{R^2} + 1\right] \quad (3.42)$$

Sendo o sistema supersimétrico, podemos agora calcular a função de onda do estado fundamental para cada região (na realidade, basta fazê-lo para $x > R$ e $(-R < x < R)$). Tomando-se um ponto C no eixo negativo, distante de $-R$ como limite inferior das integrais, usamos o seguinte esquema para efetuar as integrações:

$$\Psi_0(x) = e^{-G(x)} \Rightarrow G_i(x) = \int_C^{x_i} W(y) dy$$

$$G_1(x) = \int_c^{x_1} \left(y - \frac{1}{y} \right) dy ; G_2(x) = \left(\int_c^{x_2} \left(y - \frac{1}{y} \right) dy - \int_{-R}^{x_2} \left(1 - \frac{1}{R^2} \right) y dy \right) ;$$

$$G_3(x) = \left(\int_c^{x_2} \left(y - \frac{1}{y} \right) dy - \int_{-R}^R \left(1 - \frac{1}{R^2} \right) y dy \right) \quad (3.43)$$

Impondo agora as condições de continuidade da função de onda gerada por (3.38) e sua derivada em R (ou em $-R$), obtemos o resultado:

$$\Psi_0(x > R) = N |x| \text{Exp} \left(-\frac{1}{2} x^2 \right) ;$$

$$\Psi_0(-R < x < R) = \bar{N} R \text{Exp} \left[\frac{1}{2} \left(-x^2 - \frac{x^2}{R^2} + R^2 \right) \right] \quad (3.43a),$$

$$\Rightarrow \frac{\Psi_0'(x > R)}{\Psi_0(x > R)} \Big|_R = \frac{\Psi_0'(-R < x < R)}{\Psi_0(-R < x < R)} \Big|_R$$

Eliminando-se o regulador no final, obtemos a função de onda dada por (3.27).

4.2.- Regularização por função modular:

Para regularizar Sp descontínuos, propomos outra solução, mais simples, que também preserva a supersimetria do sistema e elimina funções delta de Dirac. Para expor o método através de um caso específico, partimos do Sp definido em (3.25), reescrevendo-o na forma:

$$W(x) = x - \frac{1}{x} \equiv \text{Lim}_{a \rightarrow 0} \left(x - \frac{x}{x^2 + a^2} \right) \quad (3.44)$$

Calculamos os potenciais parceiros e a função de onda do estado fundamental e fazemos $a \rightarrow 0$ no final. Lembrando que

$$\text{Lim}_{a \rightarrow 0} \sqrt{x^2 + a^2} = |x|$$

resulta a expressão (3.25) obtida pelo método anterior.

Para regularizar o Sp dado por (3.32) pelo mesmo método aqui proposto, basta reescrevê-lo na forma:

$$W(x) = x - \varepsilon(x) \equiv \lim_{a \rightarrow 0} \left(x - \frac{x}{\sqrt{x^2 + a^2}} \right) \quad (3.45)$$

Para complementar este capítulo, podemos enfatizar que muitos outros sistemas poderiam ser gerados a partir de monômios ímpares ou com o auxílio das funções modulares. Entretanto, não é nosso objetivo principal estender a discussão sobre esse procedimento neste ponto. Interessa-nos, agora, buscar possíveis soluções – exatas ou aproximadas – para o sistema gerado por $W(x) = x^2 \varepsilon(x)$. São os nossos próximos assuntos.

MÉTODOS APROXIMATIVOS

Como se pode observar, o tipo de superpotencial introduzido na seção anterior gera um potencial duplo-poço e um parceiro quártico com uma “perturbação” linear. A literatura está repleta de métodos aproximativos para a solução do potencial quártico $V(x) = x^4$, mas, ao que sabemos, não existem tratamentos do potencial x^4 com uma perturbação linear como o obtido. Procuremos, então, uma solução para a equação de Schroedinger para o potencial V_1 e a respectiva parceira para o potencial V_2 , abaixo especificadas:

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + g^2 x^4 \pm 2g|x| \right) \psi^\pm(x) = E^\pm \psi^\pm(x) \quad (4.1)$$

1. O Método de Frobenius

Para o potencial V_1 , especificamente, temos (omitindo os índices):

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + g^2 x^4 - 2g|x| \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (4.2)$$

Conhecendo-se a solução exata de energia zero (3.2), e inspirados pelo oscilador harmônico, buscamos inicialmente uma solução em série de potências pelo método de Frobenius, fazendo:

$$\psi(x) = A(x) e^{-g \frac{|x|^3}{3}} \quad (4.3)$$

que, substituída na equação de Schroedinger, fornece a equação² para $A(x)$:

² Para uma particular escolha de parâmetros, trata-se da *equação triconfluente de Heun* (F. M. do Carmo, Dissertação de Mestrado – IFUSP - 2011).

$$A''(x) - 2g x^2 \varepsilon(x) A'(x) + E A(x) = 0 \quad (4.4)$$

A solução natural é buscar uma solução do tipo

$$A(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j \quad (4.5)$$

que leva à seguinte expressão para os coeficientes a_j :

$$2a_2 + E a_0 + \sum_{j=1}^{\infty} [(j+2)(j+1)a_{j+2} - 2g \varepsilon(x)(j-1)a_{j-1} + E a_j] = 0$$

Dados a_0 e a_1 , a equação acima, para $j \geq 2$ é satisfeita para os coeficientes dados por:

$$a_2 = -\frac{E}{2} a_0 \quad ; \quad j=2 \quad (4.6)$$

$$a_j = \frac{2g \varepsilon(x)(j-3)a_{j-3} - E a_{j-2}}{j(j+1)} \quad ; \quad j \geq 3$$

Entretanto, a relação de recorrência entre os coeficientes da série, de três índices, não permite a escolha de um valor para E que corte a série para certo valor de n que quantize a energia, como no caso do oscilador harmônico.

2. Aproximações Variacionais Gaussiana e Exponencial Cúbica

O princípio variacional (PV), quando utilizado para encontrar soluções aproximadas para o estado fundamental de um sistema quântico, nos casos em que a equação de Schroedinger não tem solução física – caso no nosso potencial $V_2(x)$ – constitui-se em uma ferramenta matemática simples, porém muito poderosa. Na físico-química, por exemplo, soluções incrivelmente boas para moléculas altamente complexas são encontradas pelo PV a partir de uma função-teste com um grande número de parâmetros, minimizados no cálculo de $\langle H \rangle$. É claro que, quanto mais próxima esta função-teste for da que seria a *real*

(fisicamente aceitável) tanto melhor a aproximação. No caso do potencial $V_2(x)$, pode-se verificar que a função que resolve a energia zero é dada por $1/\Psi_0(x)$, fisicamente inaceitável. Portanto, sendo o sistema supersimétrico por construção, devemos encontrar soluções que representem a inter-relação de energias dos parceiros, eqs. (2.24) e (2.25).

Uma das funções mais populares usadas no PV é a *gaussiana*. Escolhendo-se uma função gaussiana com parâmetros adequados, é possível chegar a aproximações muito próximas do valor real (entende-se por *valor real* aquele obtido por cálculo numérico ou experimentalmente), inclusive em teoria quântica de campos [44].

No caso em estudo, conhecemos a função de onda do estado fundamental de $V_1(x)$, que tem forma similar à exponencial gaussiana, que denominamos de *função exponencial cúbica* (FEC). Nada mais lógico que partir dela para buscar soluções para o estado fundamental de $V_2(x)$. À vista da dificuldade apontada na seção anterior, tentaremos uma primeira aproximação para a energia do primeiro estado excitado de H_1 (i.é, estado fundamental de H_2) pelo PV. Para tanto, escolheremos um *ansatz* gaussiano e faremos a expansão da função de onda deste estado em torno do mínimo do potencial [31]. Como parâmetros variacionais, usaremos β como o ajuste da largura da gaussiana e α como a posição do mínimo. Estudemos para o caso $x > 0$. Como ψ_1 tem energia do estado fundamental $E = 0$, devemos esperar que os estados de mínima energia (normalizáveis) tenham energia negativa. Temos:

$$H_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + g^2 x^4 - 2gx$$

A função de onda gaussiana é dada por:

$$\psi_g = N \exp\left[-\beta(x-\alpha)^2\right] \quad ; \quad \langle \psi_g | \psi_g \rangle = \sqrt{\frac{\pi}{2\beta}} \quad (4.7)$$

Fazendo $(x-a) = y$ e substituindo na equação acima e eliminando os termos lineares em y , temos:

$$\langle H_1 \rangle = \int_0^{+\infty} dy \{ \exp(-\beta y^2) [g^2 y^4 + (6a^2 g^2 - 4\beta^2) y^2 + 2\beta + g^2 a^4 - 2ag] \}$$

Usando o fator de normalização, obtemos o valor esperado E_o de H_I :

$$E_o = \frac{3g^2}{16} \beta^{-2} + \frac{3a^2 g^2}{2} \beta^{-1} + \beta + g^2 a^4 - 2ag$$

Impondo as condições variacionais $\partial E_o / \partial \beta = \partial E_o / \partial \alpha = 0$, obtemos o sistema:

$$\begin{cases} \beta^3 - 3 \frac{a^2 g^2}{2} \beta + \frac{3g^2}{8} = 0 \\ \beta = \frac{3ag}{2(1 - 2a^3 g)} \end{cases} \quad (4.8)$$

Com a substituição $\gamma = (1 - 2a^3 g)$ o sistema acima resulta na equação para γ :

$$\gamma^3 - 3(1 - \gamma) \left(\gamma^2 + \frac{3}{2} \right) = 0 \quad (4.9)$$

a qual apresenta uma única solução real, menor que 1, conforme tabela abaixo. Numericamente, obtivemos o valor de $\gamma = 0,8935$ que fornece E_o positiva.

γ	$1-\gamma$	α	β	E_o	V_o	$x \text{ min}$
0,8940	0,106	0,376	0,630	0,707	-1,191	0,794
0,8935	0,107	0,376	0,632	0,705	-1,191	0,794
0,8930	0,107	0,377	0,633	0,704	-1,191	0,794

Assim, a aproximação gaussiana parece confirmar que não há energia negativa no sistema. Isto nos levará a interpretar o potencial de forma diferente, conforme explicaremos nas seções seguintes. Antes, porém, convém testar a função-teste exponencial cúbica em um sistema com solução exata. É bem sabido que, se usarmos uma função-teste gaussiana para resolver o estado fundamental do oscilador harmônico, obtemos a solução exata, $E_o = (1/2)\hbar\omega$. Como seria se escolhêssemos a FEC? Vejamos: o Hamiltoniano do oscilador harmônico é dado por (restituindo as constantes fundamentais):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

Para calcular a energia do estado fundamental, vamos partir da GC:

$$\psi(x) = N \text{Exp} \left(-b|x|^3/3 \right)$$

onde b é o (único, para facilitar) parâmetro variacional. A condição de normalização fornece N :

$$N = \left[\frac{b^{1/3}}{\Gamma(1/3)} \right]^{1/2}$$

Sendo $\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$, temos:

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-b|x|^3} \frac{d^2}{dx^2} \left(e^{-b|x|^3} \right) dx$$

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2b|x|^3} x^2 dx$$

Aplicando o PV: $d\langle H \rangle/db = 0$, obtemos:

$$b = \frac{1}{2} \left(\frac{m \omega}{\hbar} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\Gamma(2/3)} \right)^{3/4}$$

Substituindo este valor em $\langle H \rangle$, vem:

$$\langle H \rangle = 0,43 \hbar \omega$$

que corresponde a um erro de cerca de 15% sobre o valor real. Logicamente, este valor seria mais bem aproximado se tivéssemos escolhido um maior número de parâmetros; entretanto, cumpriu nosso objetivo, que era estabelecer uma comparação entre a solução obtida com a FEC e a exata.

Nos cálculos acima foi usada a propriedade das integrais gama, específica para funções “modulares”:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-b|x|^{2m}} dx = \left(\frac{1}{m} \right) \frac{\Gamma\left(\frac{2n+1}{2m}\right)}{b^{(2n+1)/2m}}, n=0,1,2...; m=1,2,3.... \quad (4.10 a)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x|^{2n+1} e^{-b|x|^{2m+1}} dx = \left(\frac{2}{2m+1} \right) \frac{\Gamma\left(\frac{2n+2}{2m+1}\right)}{b^{(2n+2)/(2m+1)}} ; n, m = 0,1,2... \quad (4.10 b)$$

As aproximações antecedentes sugerem que se possa utilizar como *ansatz* a função exponencial cúbica no método descrito na seção 4.2. Pode-se prever que, por ser solução do estado de energia zero, uma função deste tipo pode se ajustar melhor aos cálculos variacionais. O problema que encontramos, usando uma

aproximação com a função de partida $\exp\left(-\beta \frac{|x-a|^3}{3}\right)$, com a e β como

parâmetros variacionais, é que ele não apresenta solução analítica, uma vez que as integrais acarretam funções hipergeométricas ${}_3F_3$ dependentes destes parâmetros às quais não é possível aplicar o método variacional. Por exemplo, uma integração que surge no cálculo, do tipo [45]:

$$\int_0^u x^{v-1} (a-x)^{\mu-1} e^{-\beta x^n} = B(\mu, v) \times \\ \times {}_nF_n\left(\frac{v}{n}, \frac{v+1}{n}, \dots, \frac{v+n-1}{n}; \frac{\mu+v}{n}, \frac{\mu+v+1}{n}, \dots, \frac{\mu+v+n-1}{n}; \left(-\beta u^n\right)\right)$$

não pode ser tratada variacionalmente e, mesmo com ajuda do *MATHEMATICA*, se revela problemático, pelo aparecimento de funções $\gamma(v/p; 2\beta a^3)$. Usando-se um único parâmetro (β), a aproximação, além de muito pobre, gera uma solução não física ($\beta < 0$) para H_- e outra, com β positivo ($=1$), que leva a uma energia zero. Entretanto, aplicando-se o método para H_+ , obtemos:

$$\langle E \rangle = \sqrt[3]{\frac{16}{3}} \beta^{1/3} + \sqrt[3]{\frac{16}{3}} \beta^{-2/3} + \sqrt[3]{\frac{2}{3}} \beta^{-5/3} - \sqrt[3]{\frac{2}{3}} \beta^{1/3}$$

A condição variacional implica na equação algébrica:

$$\beta^2 - 4\beta - 5 = 0$$

cuja solução física $\beta=5$ fornece a energia variacional $E_{o+} = 2,15$, que é próxima do valor do estado fundamental de H_+ obtido pelo método descrito a seguir.

3. Aproximação Variacional de Coeficientes de Funções (ACF)

A aproximação variacional é tanto melhor quanto maior o número de parâmetros variacionais. Nossa função tentativa agora será da forma:

$$\psi(x) = \sum_{j=1}^m \alpha_j f_j(x) \quad (4.11)$$

onde $j = 1, 2, \dots, m$ e os coeficientes α_j são os parâmetros variacionais [33]. O funcional da energia é definido a partir da função tentativa:

$$E[\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (4.12)$$

Assim, encontrando os valores dos parâmetros α_j que minimizam o funcional de energia, teremos um valor aproximado para o estado fundamental descrito pelo Hamiltoniano H . Lembrando que, sendo os α_j parâmetros que correspondem ao mínimo de E , $\partial E / \partial \alpha_j = 0$, obtemos da condição imposta:

$$E \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \sum_{i,j=1}^m \alpha_i \alpha_j \langle f_i | f_j \rangle = \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \sum_{i,j=1}^m \alpha_i \alpha_j \langle f_i | H | f_j \rangle \quad (4.13)$$

Definindo

$$S_{ij} = \langle f_i | f_j \rangle; H_{ij} = \langle f_i | H | f_j \rangle \quad (4.14)$$

temos:

$$\begin{aligned}
 E \sum_{j=1}^m \alpha_j (S_{kj} + S_{jk}) &= \sum_{j=1}^m \alpha_j (H_{kj} + H_{jk}) \\
 \Rightarrow \sum_{j=1}^m [E(S_{kj} + S_{jk}) - (H_{kj} + H_{jk})] \alpha_j &= 0
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

A expressão acima corresponde a um sistema de m equações (uma para cada k) a m incógnitas, que pode ser representada como $M\alpha = 0$, onde α é uma matriz coluna e M uma matriz ($m \times m$), cujos elementos são:

$$M_{kj} = E(S_{kj} + S_{jk}) - (H_{kj} + H_{jk}) \tag{4.16}$$

Para o sistema ter solução, devemos impor $\text{Det } M = 0$. A solução desta equação de grau m em E são os valores aproximados das energias E_{j-1} dos m primeiros níveis do sistema. Assim, uma vez obtido o n -ésimo valor E_n , substituímos novamente no sistema e, usando a condição de normalização $\sum \alpha_i \alpha_j = 1$, determinamos os valores dos parâmetros α .

Desta forma, e com base na solução de energia zero da equação de Schroedinger, vamos procurar uma solução para o nosso problema usando agora como função tentativa a FEC abaixo:

$$f_i = |x|^{i-1} e^{-\frac{|x|^3}{3}} \tag{4.17}$$

onde fizemos $g = 1$. Com a escolha de uma função tentativa real, os elementos de matriz S_{kl} e H_{kl} serão simétricos e dados por:

$$M_{kl} = 2(E S_{kl} - H_{kl}) \tag{4.18}$$

O método variacional descrito, aplicado aos potenciais parceiros $V_{\pm} = x^4 \pm 2|x|$ (com $g = 1$) fornece:

$$\begin{aligned}
 S_{kl} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{2}{3}|x|^3} x^{k+l-2} \\
 (H_{\pm})_{kl} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{2}{3}|x|^3} \left[-(l-1)(l-2)x^{k+l-4} + 2(l \pm 1)\varepsilon(x)x^{k+l-1} \right]
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

Com isso, a matriz M fica definida. Resolvendo a equação $\text{Det } M = 0$ para 5 parâmetros variacionais com auxílio do programa *MATHEMATICA*, construímos a tabela abaixo. Note-se a clara convergência dos valores da energia para os potenciais V_+ e V_- , indicando que o sistema é, de fato, supersimétrico.

O método variacional aqui utilizado mostrou-se o que melhor se adapta ao nosso problema. Embora acarrete grande esforço computacional, o uso do *ansatz* (4.17), ao invés do utilizado na Ref. [33] simplifica os cálculos e os resultados correspondem praticamente aos mesmos obtidos pelo método de Rayleigh-Ritz utilizado por *Fernandez* [36], no artigo em que comenta o trabalho da Ref. anterior.

Com os resultados obtidos para os parâmetros α_j , podemos então construir as primeiras funções onda aproximadas dos potenciais $V_{\pm}$ e pode-se mostrar, assim, que as funções obtidas apresentam paridade bem definidas, intercalando soluções pares e ímpares, partindo de soluções pares para o estado fundamental. Com 4 parâmetros, as funções de onda $\psi_{2,3}^+$ são dadas por:

$$\psi_2^+ \approx 1,3031 x e^{-|x|^3/3} - 0,2775 x^3 e^{-|x|^3/3} ; \psi_3^+ \approx 0,4533 e^{-|x|^3/3} - 1,1814 x^2 e^{-|x|^3/3} \quad (4.21)$$

M	E0	E1	E2	E3	E4	E5
1	0					
2	0	1,970247				
3	0	1,970246	5,765408			
4	0	1,969640	5,507909	9,488542		
5	0	1,969516	5,5074408	9,488418	14,130078	
6	0	1,9695076	5,507202	9,406979	13,892662	19,486292
7	0	1,969507	5,507178	9,394324	13,874350	19,021077

MÉTODOS APROXIMATIVOS

<i>M</i>	E0+	E1+	E2+	E3+	E4+
1	1,970247				
2	1,970246	5,529040			
3	1,969640	5,514419	9,488542		
4	1,969516	5,511076	9,488418	14,357212	
5	1,969508	5,507493	9,406979	14,001035	19,489630
6	1,969508	5,507186	9,394325	13,86492	19,021077
7	1,969508	5,507178	9,394287	13,858511	18,660095

TABELA 2 – Autovalores de energia para os potenciais parceiros (4.19)

INVESTIGAÇÃO DE SOLUÇÕES EXATAS

No capítulo anterior, várias metodologias foram desenvolvidas para resolver o espectro do problema supersimétrico (4.1), sendo que o ACF se revelou o mais adequado ao nosso tratamento. Além disso, dos métodos testados, foi o único capaz de fornecer os primeiros níveis de energia dos potenciais parceiros com boa precisão e permitindo, assim, comprovar que o sistema é, de fato, supersimétrico. *Fernandez* [66], em um *comment* sobre o trabalho da Ref. [33], chegou aos mesmos resultados aqui obtidos.

Inicialmente, inspirados pelas soluções do oscilador harmônico linear (OHL), vamos procurar soluções polinomiais ao sistema gerado pelo $\text{Sp } x |x|$. Sabemos que, no caso do OHL, tais soluções são representadas pelos *polinômios de Hermite*, gerados através da solução gaussiana do estado fundamental. A questão agora é investigar se no presente caso é possível encontrar soluções representadas por polinômios ortogonais gerados pela FGC.

1. Soluções Polinomiais Supersimétricas

Revisando brevemente os conceitos básicos da MQS, vimos que, dado um Hamiltoniano Hermitiano:

$$H = p^2 + V(x) \tag{5.1}$$

e introduzindo os operadores:

$$A = \frac{d}{dx} + W(x) \quad ; \quad A^+ = -\frac{d}{dx} + W(x) \tag{5.2},$$

ficam definidos dois Hamiltonianos parceiros:

$$H_1 = A^+ A = -\frac{d^2}{dx^2} + W^2(x) - W'(x) \tag{5.3a}$$

$$H_2 = A A^+ = -\frac{d^2}{dx^2} + W^2(x) + W'(x) \quad (5.3b)$$

Este Hamiltonianos compartilham os mesmo autovalores, exceto para o estado fundamental de H_1 , que assumimos ter autovalor nulo. Os operadores A e A^+ funcionam como “levantadores” e “abaixadores” de autoestados e levam autoestados de H_1 a autoestados de H_2 de mesma energia, e vice-versa. Os potenciais V_1 e V_2 e o superpotencial (Sp) $W(x)$ são definidos através da equação de Riccati:

$$V_1(x) = W^2(x) - W'(x) \quad (5.4a)$$

$$V_2(x) = W^2(x) + W'(x) \quad (5.4b)$$

Podemos então assumir que a característica fundamental para que um sistema com Hamiltoniano Hermitiano seja supersimétrico é que seus potenciais parceiros sejam gerados por $W(x)$, conforme as equações (5.4).

Neste capítulo vamos mostrar que, sob certas condições que serão expostas, é possível escrever uma equação de autovalores que admita por solução polinômios ortogonais gerados por $W(x)$.

2. O Problema de Sturm-Liouville

Consideremos uma equação diferencial que possa ser colocada na forma da equação de Sturm-Liouville (S-L):

$$\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{df(x)}{dx} \right] - s(x)f(x) + \lambda r(x)f(x) = 0 \quad (5.5)$$

Em mecânica quântica, as soluções da equação de Schroedinger, sempre que for possível colocá-la na forma de S-L acima, obedecerão às condições de integrabilidade e de contorno bem conhecidas:

$$f(x) \in L^2(\mathfrak{R}); \text{ devem ser contínuas e ter derivadas contínuas, etc.}$$

A equação (5.5) define o operador diferencial linear de segunda ordem:

$$\ell = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} \right] - s(x) \quad (5.6)$$

de modo que

$$\ell f(x) = -\lambda r(x) f(x) \quad (5.7)$$

TEOREMA 1:

“As autofunções de ℓ formam um conjunto ortogonal no intervalo (a,b) ”

PROVA:

Consideremos duas autofunções $f_n(x)$ e $f_m(x)$ de ℓ correspondentes aos autovalores λ_n e λ_m :

$$\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{df_n}{dx} \right] - s(x) f_n(x) + \lambda_n r(x) f_n(x) = 0 \quad (5.8a)$$

$$\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{df_m}{dx} \right] - s(x) f_m(x) + \lambda_m r(x) f_m(x) = 0 \quad (5.8b)$$

Multiplicando a primeira por $f_m(x)$ e a segunda por $f_n(x)$, subtraindo a segunda da primeira e integrando no intervalo (a,b) , vem:

$$\begin{aligned} \int_a^b f_m \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{df_n}{dx} \right] dx - \int_a^b f_n \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{df_m}{dx} \right] dx \\ = (\lambda_n - \lambda_m) \int_a^b r(x) f_m f_n dx = 0. \end{aligned} \quad (5.8c)$$

As integrais do lado esquerdo podem ser resolvidas por partes, fornecendo:

$$\begin{aligned}
 f_m p(x) \frac{df_n}{dx} \Big|_a^b - \int_a^b p(x) \frac{df_n}{dx} \frac{df_m}{dx} dx - f_n p(x) \frac{df_m}{dx} \Big|_a^b + \int_a^b p(x) \frac{df_m}{dx} \frac{df_n}{dx} dx \\
 = (\lambda_n - \lambda_m) \int_a^b r(x) f_m f_n dx
 \end{aligned} \tag{5.8d}$$

Portanto,

$$p(x) \left[f_m \frac{df_n}{dx} - f_n \frac{df_m}{dx} \right] \Big|_a^b = (\lambda_n - \lambda_m) \int_a^b r(x) f_m f_n dx \tag{5.8e}$$

Usando as condições de contorno aplicáveis ao caso em estudo, teremos os seguintes resultados possíveis (consideramos soluções não-periódicas):

$f_i = 0$, em a ou em b ;

ou:

$\frac{df_i}{dx} = 0$, em a ou em b ;

ou ainda, $p(a) = p(b) = 0$.

o que leva ao resultado:

$$(\lambda_n - \lambda_m) \int_a^b r(x) f_m f_n dx = 0 \Rightarrow f_n \text{ e } f_m \text{ ortogonais.} \tag{5.9}$$

A equação (5.9) implica que autofunções correspondentes a autovalores distintos são ortogonais duas a duas com *função peso* $r(x)$, isto é, formam uma base ortogonal no espaço de Hilbert $\langle L^2[a,b], r(x) dx \rangle$

QED.

3. A função peso gerada pelo superpotencial

Estamos agora em posição de aplicar o T-1 acima na MQS. Consideremos a equação de Schroedinger para o potencial V_i :

$$H_1 \psi(x) \equiv \left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (5.10)$$

O estado fundamental de H_1 é dado por (2.53): $\psi_0 = \text{Exp}(-\int^x W(y)dy)$, e o potencial V_1 satisfaz à condição de supersimetria (5.4a).

Busquemos uma solução para a equação de autovalores (5.10) na forma:

$$\psi(x) = f(x) e^{-\int^x W(y)dy} \quad (5.11)$$

Derivando em relação a x , vem:

$$\psi'(x) = (f'(x) - W(x)f(x)) e^{-\int^x W(y)dy} \quad (5.12a)$$

$$\psi''(x) = [f''(x) - 2W(x)f'(x) + (W^2(x) - W'(x))f] e^{-\int^x W(y)dy} \quad (5.12b)$$

Inserindo (5.12) em (5.10), obtemos (omitindo a dependência em x por comodidade):

$$-f'' + 2Wf' - (W^2 - W')f + V_1 f = E f \quad (5.13)$$

que, com a condição da MQS (5.4) fornece:

$$f'' - 2Wf' + E f = 0 \quad (5.14)$$

Multiplicando a equação acima por $\text{Exp}[-\int^x W(y)dy]$, podemos colocá-la na forma de S-L:

$$\frac{d}{dx} \left[e^{-2\int^x W(y)dy} \frac{df}{dx} \right] + E f e^{-2\int^x W(y)dy} = 0 \quad (5.15)$$

Expandindo agora $f(x)$ numa base completa,

$$f(x) = \sum_n \lambda_n f_n(x) \quad (5.16)$$

e usando o T-1, vem:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2 \int^x W(y) dy} f_m(x) f_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (5.15)$$

O que mostra que a função peso das autofunções f_i é gerada pelo $Sp W(x)$. Além disso, o coeficiente de $f'(x)$ em (5.14) é o próprio superpotencial. Isto nos leva a supor, então, que é possível construir soluções generalizadas da equação de Schroedinger supersimétrica mesmo sem se conhecer a forma de $W(x)$.

4. Soluções supersimétricas generalizadas

Como as equações (5.10) e (5.14) obedecem à equação de S-L, procuremos uma solução polinomial geral. As questões que devemos enfrentar são as seguintes:

1. Quais são as condições para encontrar soluções de polinômios ortogonais para a equação de Schroedinger supersimétrica?
2. Como podem ser construídos os polinômios a partir de (5.10) ou (5.14)?

Para investigar estas questões, teremos em foco que existem condições bastante restritivas para a construção de polinômios ortogonais. O ponto principal é determinar a classe de funções peso F que satisfaçam às condições seguintes [46]:

- 1) Os polinômios são gerados pela “fórmula de Rodrigues”:

$$\Pi_n(x) = \frac{1}{F(x)} \frac{d^n}{dx^n} [F(x) p^n(x)] \quad , n=0,1,2,\dots \quad (5.16a)$$

- 2) $\Pi_1(x)$; $F(x)$ e $p(x)$ satisfazem às condições:

- a. $\Pi_1(x)$ é um polinômios de primeiro grau em x ;
- b. $p(x)$ é um polinômio em x de grau ≤ 2 , com raízes reais;
- c. $F(x)$ é real, positiva e integrável em $[a,b]$ e satisfaz às condições de contorno:

$$F(a)p(a)=F(b)p(b) \quad (5.16b)$$

3) Dado um polinômio qualquer $Q(x)$ de grau $\leq k$, a seguinte identidade se verifica:

$$\frac{d^n}{dx^n} [F p^m Q_{\leq k}] = F p^{(n-m)} Q_{(\leq k+m)} \quad (5.16c)$$

4) Todas as derivadas $\frac{d^n}{dx^n} (F p^m)$, com $m < n$ se anulam nos extremos do intervalo $[a,b]$;

5) $\Pi_n(x)$ é ortogonal em $[a,b]$ a qualquer polinômio $Q(x)_{(m < n)}$:

$$\int_a^b Q(x) \Pi_n(x) F(x) dx = 0 \quad (5.16d)$$

As provas destas propriedades, que deixamos de demonstrar aqui, podem ser encontradas na Ref. [46] citada.

Por conveniência, inserimos uma constante de normalização em (5.16a) e definimos a “fórmula generalizada de Rodrigues” (FGR):

$$\Pi_n(x) = \frac{1}{N_n F(x)} \frac{d^n}{dx^n} [F(x) p^n(x)] \quad , n=0,1,2,... \quad (5.17)$$

Aplicando esses conceitos à equação de S-L obtida a partir da MQS, identificamos:

$$F(x) \rightarrow e^{-2 \int^x W(y) dy} \quad (5.18)$$

$$\Pi_n^{MQS}(x) = \frac{1}{N_n} e^{2 \int^x W(y) dy} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-2 \int^x W(y) dy} p^n(x) \right) \quad (5.19)$$

onde: $p^n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \dots$

Por exemplo, os primeiros quatro polinômios gerados pelo superpotencial para $p^n(x) = 1$ serão:

$$\Pi_0=1 \quad (5.20a)$$

$$\Pi_1(x)=2W(x) \quad (5.20b)$$

$$\Pi_2(x)=4W^2(x)-2W'(x) \quad (5.20c)$$

$$\Pi_3(x)=8W^3(x)-12W(x)W'(x)+2W''(x) \quad (5.20d)$$

$$\Pi_4(x)=16W^4-48W^2W'+16WW''+(W')^2-2W'' \quad (5.20e)$$

Pela condição (2.a), vemos que a classe dos superpotenciais que se aplicam é bastante restrita, pois $\Pi_1 = 2W = ax + b$. Esta restrição impede, por exemplo, que o superpotencial x^2 gere polinômios ortogonais como solução da equação de Schroedinger. É interessante notar que, para $p^n(x) = 1$ e $W(x) = x$, os polinômios gerados são exatamente os *polinômios de Hermite* $\mathcal{H}_n(x)$.

Vamos estudar com um pouco mais de profundidade as possíveis soluções polinomiais ao potencial $V(x) = x^4 - 2|x|$ geradas pelo Sp $W(x) = x^2 \varepsilon(x)$. Pela (5.19), os primeiros polinômios gerados pelo superpotencial citado são dados pela fórmula ($p^n(x) = 1$):

$$\Pi_n^{MQS}(x) = \frac{1}{N_n} e^{\frac{|x^3|}{3}} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\frac{|x^3|}{3}} \quad (5.21)$$

$$\Pi_0=1 \quad (5.22a)$$

$$\Pi_1(x)=x|x| \quad (5.22b)$$

$$\Pi_2(x)=x^4-2|x| \quad (5.22c)$$

$$\Pi_3(x)=\frac{x}{|x|} (x^6-6x^2|x|+2) \quad (5.22d)$$

$$\Pi_4(x)=x^2(x^6-12x^2|x|+20) \quad (5.22e)$$

$$\Pi_5(x) = x(x^8|x| - 20x^6 + 80x^2|x| - 40) \quad (5.22f)$$

Nota-se que a presença da função módulo impede a ortogonalidade dos polinômios no caso mais geral, porém, observa-se que todos os polinômios definidos acima são normalizáveis na reta real. Já a incômoda presença, em alguns polinômios, de uma função delta de Dirac - a qual originaria um produto escalar não nulo quando estes termos estivessem isolados -, foi eliminada da forma exposta no capítulo 3: substituindo-se a *função sinal* pelo limite para $a \rightarrow 0$ de $x/\sqrt{(x^2+a^2)}$. O que é realmente importante, e talvez um pouco surpreendente, é que, embora tenhamos uma receita para encontrar soluções polinomiais exatas nos sistemas supersimétricos, ela parece não se aplicar ao caso do potencial em estudo, isto é, não gera soluções exatas para os potenciais baseados em $W(x) = x^2\varepsilon(x)$. Supomos que isto acontece por uma das duas razões: ou porque os polinômios (5.22) não obedecem à restrição 2.a acima ou, então, porque a fórmula de Rodrigues não se aplica ao caso da forma como foi proposta, e sua expressão generalizada (5.17) também não se aplica pelo mesmo motivo, referente à restrição 2.a.

Olhando com um pouco mais de atenção os polinômios acima definidos, entretanto, percebe-se que eles possuem algumas propriedades incomuns. Por exemplo, parece existir alguma lei que torna algumas duplas de polinômios ortogonais, enquanto que outras, não. Após um lento e tedioso cálculo com os primeiros 8 polinômios, pode-se verificar que são ortogonais: Π_0 e Π_n para qualquer n ; Π_1 e Π_m , para $m \neq 3$; Π_2 e Π_k , para $k \neq 4, 8$; etc. Alterando-se a definição (5.21), estas relações de ortogonalidade também mudam. A simples eliminação do fator 2 na expressão (5.21) já implica no produto escalar não-nulo entre P_1 e P_3 ; P_5 e P_7 (no entanto, o fator 2 é imposto pelas equações de S-L, como vimos). É um caso de “polinômios *quase-ortogonais*”. Isto nos leva a conjecturar que pode haver uma definição mais geral destes polinômios que os tornem ortogonais dois a dois e que conduza a uma solução exata da equação (4.2). É uma questão que fica em aberto para posteriores estudos.

A pesquisa por soluções exatas polinomiais pode também ser feita diretamente das equações diferenciais que geram tais soluções em termos do Hamiltoniano supersimétrico. *Baseia* e *Das* [47] obtiveram soluções polinomiais com

invariância de forma escrevendo a equação de Legendre ($\cos \theta = x$) na forma:

$$\left(\frac{d}{dx} (x^2 - 1) \frac{d}{dx} - n(n+1) \right) P_n(x) = 0 \quad (5.22)$$

Pode-se mostrar que o mesmo resultado pode ser obtido pelo procedimento desenvolvido acima, se definirmos a função peso (ou seja, o Sp) através da integral:

$$W(x) = \left(e^{-2 \int^x \frac{y}{1-y^2} dy} \right) = e^{\ln|x^2-1|} = |x^2-1| \quad (5.23)$$

o que conduz à equação de S-L na forma:

$$(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} f_n(x) - 2x \frac{d}{dx} f_n(x) + E_n f_n(x) = 0 \quad (5.23)$$

que é a conhecida equação de Legendre. A determinação dos autovalores da energia é feita desenvolvendo-se $f(x)$ em série de potências de x e igualando os coeficientes de f'' , obtendo-se:

$$(1-x^2)(n(n-1)x^{n-2} + \dots) - 2x(n x^{n-1} + \dots) \Rightarrow E_n = n(n+1)$$

5. Soluções exatas e quase-exatas

Em mecânica quântica existem certos potenciais para os quais é possível encontrar uma parte finita do espectro de energia e das correspondentes autofunções. Tais sistemas são chamados de “quase-exatos”. Um exemplo de potencial deste tipo é o definido pela equação (3.31), cujo autovalor exato do estado fundamental foi definido. Nesta seção discutiremos brevemente, do ponto de vista físico: a) uma solução quase-exata para o $Sp\ x^2\varepsilon(x)$ adicionado de uma constante que originará um termo de “massa” (tipo m^2) nos potenciais; b) uma solução “exata” apresentada por Voros [35] para o potencial do tipo V -introduzido pela Eq. (3.20a). As aspas na palavra “exata” serão explicadas no

desenvolvimento desta seção.

a) Seja o Sp dado por:

$$W(x) = mx + g x \sqrt{x^2} \quad (5.24)$$

Onde substituímos o módulo de x pelo termo $\sqrt{x^2}$, visando eventual tratamento computacional. Os potenciais $V_{1,2}$ e a função de onda do estado fundamental de V_1 gerados por $W(x)$ serão:

$$V_1(x) \equiv W^2 - W' = g^2 x^4 + m^2 x^2 + 2 g x^2 \sqrt{x^2} (1 - 2 m x^2) - m \quad (5.25a)$$

$$V_2(x) \equiv W^2 + W' = g^2 x^4 + m^2 x^2 + 2 g x^2 \sqrt{x^2} (1 + 2 m x^2) + m \quad (5.25b)$$

$$\psi_0(x) = N \exp\left(-g \frac{|x^3|}{3} + \frac{m x^2}{2}\right), \quad N = 0,62058 \quad (5.25c)$$

Pode-se verificar que a função de onda acima é exata para o potencial $V = V_-(x) + m$, com $E_0 = m$, ou seja, é uma solução *quase-exata* da equação de Schroedinger para $\bar{V}(x) = V_-(x) - m$. A figura 8 abaixo ilustra a função de onda e os potenciais parceiros gerados por $W(x)$.

FIG. 8a – A função de onda do estado fundamental, eq. (5.25c).

É interessante observar que este mesmo sistema foi estudado por *Turbiner* [34] para obter soluções aproximativas da derivada logarítmica da função de onda do estado fundamental para o potencial V_- . O tratamento dado, entretanto, não é supersimétrico nem modular, o que impede a normalização da função em todo o eixo real. Neste caso, para calcular os dois primeiros termos em teoria de perturbação, as integrações são feitas na semi-reta, e um autovalor negativo para a energia E_2 é obtido. A precisão nos cálculos aumenta consideravelmente introduzindo um fator do tipo $(1/x)$ multiplicando a função de onda.

b) A busca por soluções exatas de potenciais em mecânica quântica é, muitas vezes, uma tarefa árdua, criativa, e por vezes, frustrante. Nesta subseção vamos focar brevemente uma solução apresentada por *Voros* [35] para potenciais generalizados do tipo $V(x) = x^N + v x^M$, com N par. Interessa-nos, em particular, o caso $M = (N/2) - 1$ e $N = 4$. A equação de Schroedinger para tal potencial, com $v = 2$, na semi-reta, é dada por:

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + (x^4 + 2x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (5.26),$$

que é justamente a nossa equação para o potencial $V_+(x)$, com $g = 1$. A solução encontrada pelo autor se baseou num refinado cálculo matemático a partir do conceito de *determinantes espectrais* (veja-se, p. ex., [48]). Sem entrar em detalhes, citamos apenas que *Voros* obteve o seguinte espectro para (5.26): $E_n = 3n + 2$ para n par; $E_n = 3n + 1$ para n ímpar.

Este resultado se afasta do espectro por nós obtido via ACF (v. Tabela 2), exceto quanto ao estado fundamental.

Sem querer desconsiderar a beleza matemática da dedução de Voros, o método incorre em um problema bastante comum nas aproximações em mecânica quântica. Trata-se do *paradoxo da mecânica quântica na semi-reta*. Como é bem sabido, de acordo com os postulados básicos da mecânica quântica, os observáveis são representados por operadores Hermitianos. Tais operadores, do ponto de vista matemático, são denominados *auto-adjuntos*. Griffiths [49], por exemplo, alerta para o fato de que “*em intervalos finitos, entretanto, deve-se realmente ser mais cuidadoso com os termos de contorno, e um operador que seja Hermitiano em $(-\infty, \infty)$ pode não sê-lo em $(0, \infty)$ ou $(-\pi, \pi)$ (...)*”. Em particular, vamos mostrar, na seção seguinte, que operadores fundamentais como a energia e o momento *não são observáveis na semi-reta*. Em outras palavras, problemas de mecânica quântica tratados na semi-reta tornam-se apenas *matemáticos*, embora muitas vezes revestidos de beleza e criatividade ímpares.

6. Existe MQ na semi-reta?

Algumas soluções da equação de Schroedinger 1-D são estudadas reduzindo o “universo” a “meio universo”, isto é, procurando soluções no semieixo positivo. A questão que levantamos é: com esta redução, as grandezas fundamentais da MQ são preservadas? Ou, em outras palavras, os operadores que representam observáveis são Hermitianos?

Para sermos mais objetivos, consideremos o exemplo do poço infinito:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ \infty, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Estados estacionários são obtidos através da equação de Schroedinger

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

com a condição adicional de que suas funções de onda se anulam nos extremos.

Isto significa que a ação do operador Hamiltoniano para uma partícula livre no intervalo descrito é definido por:

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} D^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad \mathcal{D}(H) = \left\{ \psi, H\psi \in \mathcal{L}^2\left(-\frac{L}{2}, +\frac{L}{2}\right), \psi\left(\pm\frac{L}{2}\right) = 0 \right\}$$

onde $\mathcal{D}(H)$ é o domínio definido do operador H .

Temos soluções ímpares:

$$\begin{aligned} \psi\left(\frac{L}{2}\right) &= \psi\left(-\frac{L}{2}\right) = 0 \\ \phi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen}\left(2n\pi \frac{x}{L}\right) \\ E_n &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2n\pi}{L}\right)^2 \end{aligned} \tag{5.28}$$

e pares:

$$\begin{aligned} \Psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left[(2n-1)\pi \frac{x}{L}\right] \\ E'_n &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{(2n-1)\pi}{L}\right)^2 \end{aligned} \tag{5.29}$$

Verifiquemos se é cumprido o postulado básico da MQ: A energia é um observável? Esta questão foi estudada por *G. Bonneau et al* [50], cujos passos aqui reconstruímos: Consideremos o seguinte estado par normalizado:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= -\sqrt{\frac{30}{L^5}} \left(x^2 - \frac{L^2}{4}\right) ; \quad |x| \leq \frac{L}{2} \\ \Psi(x) &= 0 ; \quad |x| \geq \frac{L}{2} \end{aligned} \tag{5.30}$$

Expandindo na base completa das autofunções de H dadas por (5.28-5.29), vem:

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \Psi_n(x); \tag{5.31a}$$

$$b_n = (\Psi_n, \Psi) = \frac{(-)^{n-1}}{(2n-1)^3} \cdot \frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \quad (5.31b)$$

Vamos definir agora a seguinte função, resultante de aplicação do operador H sobre $\Psi(n)$:

$$\tilde{\Psi}(x) = H\Psi(x) = \frac{\hbar^2}{m} \sqrt{\frac{30}{L^5}} \quad ; |x| < \frac{L}{2} \quad (5.32a)$$

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |b_n|^2 E'_n = \frac{480\hbar^2}{m\pi^4 L^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} = \frac{5\hbar^2}{mL^2} \quad (5.32b)$$

Mas existe outra forma absolutamente equivalente de calcular o valor da energia. É a seguinte:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= (\Psi, H\Psi) = (\Psi, \tilde{\Psi}) \\ &= -\frac{30\hbar^2}{mL^5} \int_{-L/2}^{L/2} \left(x^2 - \frac{L^2}{4} \right) dx = \frac{5\hbar^2}{mL^2} = \frac{10}{\pi^2} E'_1 \end{aligned} \quad (5.33),$$

resultados que são coerentes. Por outro lado, calculemos agora o desvio médio quadrático:

$$\langle E^2 \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |b_n|^2 (E'_n)^2 = \frac{240\hbar^4}{m^2\pi^2 L^4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} = \frac{30\hbar^4}{m^2 L^4} \quad (5.34)$$

Com isto, a incerteza na energia é dada por:

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \frac{\sqrt{5}\hbar^2}{mL^2} \quad (5.35)$$

Entretanto, também se pode calcular o desvio médio quadrático como:

$$\langle E^2 \rangle = (\Psi, H^2\Psi) = (\Psi, H\tilde{\Psi}) = 0 \quad (5.36)$$

E aqui surge o problema em questão: no primeiro caso, aplicamos H a uma função que se anula nos extremos, e $\tilde{\Psi}$ não pertence a este conjunto!

Concluimos, assim, que a definição de um operador diferencial $(-\hbar^2/2m)D^2$ traz uma dificuldade matemática *intransponível* (no APÊNDICE D são apresentados mais detalhes sobre operadores Hermitianos e uma prova de que o momento não é um observável na semi-reta).

Em outras palavras: *não existe mecânica quântica na semi-reta!*

7. O Hamiltoniano gerado por $W(x)=x^2\mathfrak{A}(x)$ e a Simetria $\mathcal{PT}$

Um fato notável observado em mecânica quântica foi a recente descoberta (por volta de 1999) de Hamiltonianos não Hermitianos com autovalores reais e positivos [51]. Dizemos notável porque, de acordo com o axioma da MQ, a hermiticidade (transposição + conjugação complexa) do Hamiltoniano garante que seu espectro de energias é real e sua evolução temporal é unitária, isto é, a probabilidade é conservada. Entretanto, uma formulação alternativa da MQ, na qual o axioma da hermiticidade é substituído pela simetria $\mathcal{PT}$ (reflexão no espaço-tempo: $x \rightarrow -x$; $i \rightarrow -i$; $p \rightarrow -p$) explica, segundo vários autores [51,52,53,54], os autovalores reais e positivos dos citados Hamiltonianos. Um exemplo clássico é o Hamiltoniano não Hermitiano

$$h = -\frac{d^2}{dz^2} - z^4 \quad (5.37)$$

Aqui indicaremos por minúscula o Hamiltoniano não-Hermitiano, e a variável z é usada para refletir seu caráter complexo. É dele que trataremos nesta seção. Demonstraremos que, curiosamente, nosso Hamiltoniano

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + x^4 - 2|x| \quad (5.38)$$

(que é real; portanto, Hermitiano e, como se pode ver, $\mathcal{PT}$ -simétrico) é equivalente a h . Em outras palavras, h tem o mesmo espectro real e positivo de H , a menos, talvez, de uma constante. Este fato é realmente surpreendente, pois (aparentemente) o Hamiltoniano h é ilimitado por baixo. Entretanto, *Bender* [64] e *Jones e Mateo* [52] contra argumentam dizendo que o termo “ilimitado por baixo” não se aplica ao caso de potenciais complexos porque as relações de

ordenamento não podem ser usadas para números complexos, e as condições de contorno da simetria $\mathcal{PT}$ sobre a equação de Schroedinger proíbem a ocorrência de autovalores negativos. Por outro lado, tratando z em um contorno no semiplano inferior complexo, como veremos, o potencial se torna um problema bem definido de estado ligado.

Uma revisão geral da história, dos conceitos e do desenvolvimento da simetria $\mathcal{PT}$, por *C. Bender*, pode ser encontrado na Ref. [53], e a estrutura de sistemas supersimétricos nas teorias quanto-mecânicas $\mathcal{PT}$ -simétricas foi analisada detalhadamente por *Baseia et al* [54]. Deixando de lado a questão teórica, vamos direcionar nossos objetivos à prova da equivalência dos Hamiltonianos citados. Embora não se trate de uma “solução” exata como as demais tratadas neste capítulo, a equivalência entre H e h pode ser vista como uma nova característica dos potenciais modulares introduzidos, uma vez que leva a soluções de outro sistema, complexo, bem diferente do gerado por H .

A demonstração será desenvolvida tomando por base a receita da Ref. [52], introduzindo-se o seguinte:

TEOREMA:

“O Hamiltoniano real, Hermitiano e $\mathcal{PT}$ -simétrico $\mathbf{H}$ definido pela Eq. (5.38) é equivalente ao Hamiltoniano não Hermitiano, mas $\mathcal{PT}$ -simétrico, $\mathbf{h}$, definido em (5.37)”.

PROVA:

Partindo da equação de Schroedinger para H :

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + (x^4 - 2|x|)\psi(x) = E\psi(x) \quad (5.39)$$

Introduzimos a nova variável p , que tem a dimensão de momento:

$$x = p/4L$$

(nas unidades originais, $x = p/(4L\sqrt{2mg})$. A constante com dimensão de comprimento L foi introduzida por conveniência).

Obtemos, assim,:

$$-16L^2 \frac{d^2 \psi(p)}{dp^2} + \left(\frac{p^4}{256L^4} - \frac{|p|}{2L} \right) \psi(p) = E \psi(p)$$

Com a transformação $\psi(p) = f(p) \text{Exp} \left(-L|p| + \frac{p^3}{96L^3} \right)$, a equação pode ser escrita, após algumas manipulações:

$$\left(1 - \frac{1}{L} \frac{d}{dp} \right) p^2 f(p) + \frac{1}{2L} |p| f(p) - 16L^4 \left(1 - \frac{1}{L} \frac{d}{dp} \right)^2 f(p) = E f(p)$$

Fazendo uma transformação de Fourier $f(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{i|p|y} \phi(y)$, vem:

$$\begin{aligned} \phi'(y) &= -i|p|f(p) ; \quad y\phi(y) = -if'(p) \\ \Rightarrow -\left(1 + \frac{iy}{L} \right) \phi''(y) - \frac{i}{2L} \phi'(y) - 16L^4 \left(1 + \frac{iy}{L} \right)^2 \phi(y) &= E \phi(y) \end{aligned}$$

Uma nova transformação $z = -2iL \sqrt{1 + \frac{iy}{L}}$ (*) leva a:

$$\begin{aligned} \frac{z^2}{4L^2} \left(-\frac{4L^2}{z^2} \frac{d^2}{dz^2} \phi(z) \right) + \frac{z^2}{4L^2} \left(\frac{4L^2}{z^3} \frac{d}{dz} \phi(z) \right)^2 + \\ - \frac{i}{2L} \left(\frac{-2iL}{z} \frac{d}{dz} \phi(z) \right) - 16L^4 \frac{z^4}{16L^4} \phi(z) = E \phi(z) \end{aligned}$$

Que se reduz, finalmente, a:

$$-\frac{d^2}{dz^2} \phi(z) - z^4 \phi(z) = E \phi(z) \quad (5.40)$$

QED

Isto completa a prova e demonstra a equivalência entre os Hamiltonianos H e h . Note-se que neste desenvolvimento não foi feita nenhuma aproximação, sendo a demonstração, portanto, exata. Outro caminho, talvez mais elegante, encontra-se na Ref. [52]. Na realidade, a transformação (*) acima corresponde à escolha de um contorno de integração da equação de Schroedinger movido do eixo real para o semiplano inferior do plano complexo, cujas assíntotas são formadas por $\arg(z) = \pm\pi/4$, com o objetivo de manter a simetria $\mathcal{PT}$ original de h . Isto é

simples de ver se reescrevermos a transformação citada como:

$$z \rightarrow -2iL \left(1 + \frac{y^2}{L^2}\right)^{1/4} e^{i\theta/2}, \quad \theta = \tan^{-1} \left(\frac{y}{L}\right)$$

Com essa escolha, as assíntotas em $\pi/4$ e $-\pi/4$ são espelhos uma da outra com relação ao eixo y imaginário, o que implica na simetria $\mathcal{PT}$: tomando-se qualquer ponto y no plano complexo y e fazendo-se uma reflexão de paridade, $y \rightarrow -y$, a reversão temporal $\mathcal{T}$ troca i por $-i$ (isto é, $y \rightarrow -y^*$). Portanto, na representação das coordenadas, a simetria $\mathcal{PT}$ corresponde a uma simetria *esquerda-direita*.

É notável que o Hamiltoniano H , além de ser equivalente a h , é Hermitiano, supersimétrico e também $\mathcal{PT}$ -simétrico. O Hamiltoniano estudado na Ref.[51], embora real, não é $\mathcal{PT}$ -simétrico (não respeita a invariância por reflexão espacial). O termo proporcional a x é tratado, naquele trabalho, como uma *anomalia*, definida esta como um termo que *não tem correspondente clássico*, uma vez que as equações *clássicas* do movimento de (5.37) são simétricas por paridade. Tal termo, porém, não está presente em H . O módulo de x torna-o $\mathcal{PT}$ -simétrico e assim a *anomalia* desaparece. O termo linear em (5.38) corresponde ao problema clássico de uma partícula no campo gravitacional constante. Este problema, visto como uma aproximação $g \ll 1$ ao nosso potencial $g^2 x^4 - 2g|x|$ encontra-se no APÊNDICE A desta tese. Desprezando-se o termo quártico, o potencial continua tendo as propriedades da simetria $\mathcal{PT}$.

Aprofundar estas discussões sobre as propriedades $\mathcal{PT}$ -simétricas do Hamiltoniano H neste trabalho foge dos nossos objetivos. Vale ressaltar, porém, que as observações feitas nesta seção sobre a equivalência entre H e h abrem um novo campo de estudos para os potenciais “modulares” introduzidos, incluindo-se aí a extensão à teoria quântica de campos. A $\mathcal{PT}$ -simetria é amplamente discutida na literatura [55], em casos mais gerais.

DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

Neste trabalho tratamos de alguns aspectos da Mecânica Quântica Supersimétrica. Nossa modesta contribuição na área veio através da ampliação do conjunto de soluções normalizáveis a energia zero, o que foi feito por meio da inserção da função módulo de x . Este procedimento permitiu, ainda, estender certas técnicas antes usadas na semi-reta, a todo o eixo real. Uma imediata consequência, até certo ponto surpreendente, foi a possibilidade de escrevermos uma solução exata para o potencial x^4 , com duplo-poço, inexistente na literatura, a qual abre um novo campo de pesquisas, não só na MQS, mas também para a teoria quântica de campos.

Como vimos, o problema da mecânica quântica na semi-reta traz em seu bojo uma contradição fundamental: o momento não é um operador hermitiano nestas condições e torna-se, assim, um objeto estranho à teoria, ou seja, uma grandeza *não observável*.

Introduzido originalmente como uma função auxiliar na MQS, o superpotencial, neste trabalho, tornou-se um elemento fundamental, fazendo o papel de função geratriz dos potenciais parceiros. Ainda mais, pode induzir soluções polinomiais, aparecendo como função peso. Sua interpretação física não parece ser simples, ao menos nos moldes em que a MQ é interpretada à luz das grandezas clássicas.

No caso específico dos potenciais estudados neste trabalho, $x^4 \pm 2|x|$, a interpretação em moldes clássicos também não é simples: representaria uma força proporcional ao cubo da distância à qual é adicionada (ou subtraída) uma força constante, do tipo gravitacional (ou “levitacional”) newtoniana. Este termo, entretanto, é de origem puramente quântica (proporcional a $\hbar$): restituindo as unidades básicas, temos: $V_I(x) = g^2 x^4 - 2g(\hbar/\sqrt{2m}) |x|$.

O uso da função *senal de x* ($\epsilon(x)$), convenientemente representada pelo limite de $x/\sqrt{(x^2+a^2)}$ para a tendendo a zero, ou também pelo processo de regularização de *Das-Pernice*, tornou possível evitar o aparecimento de inconvenientes funções delta de Dirac decorrentes da descontinuidade do Sp na origem. Assim, mostramos que incontáveis sistemas, não tratados anteriormente na literatura,

encontram soluções exatas com energia zero, ou seja, supersimétricas. Em particular, apresentamos uma proposta simples para contornar uma dificuldade que tem sido discutida há cerca de quatro décadas pelos físicos teóricos: o superpotencial singular $x - (1/x)$. Mostramos que, através de uma conveniente definição modular e sua regularização, a função de onda do estado fundamental supersimétrico assim obtido, de energia zero, não mais corresponde ao primeiro estado excitado do oscilador harmônico, pois, embora tenha forma similar a este, no lugar da coordenada x , no caso por nós estudado entra seu *módulo*.

Explorando os inúmeros campos de estudo abertos pela MQS *Modular*, discutimos algumas aplicações, como um modelo supersimétrico da molécula de amônia, baseado no estudo de *Merzbacher*. No que tange à Simetria $\mathcal{PT}$, demonstramos que, surpreendentemente, o sistema quântico supersimétrico gerado pelo superpotencial $x^2\varepsilon(x)$ com o potencial $V_I(x) = x^4 - 2|x|$ - onde o termo proporcional ao módulo de x , lembramos, é de origem puramente quântica - é equivalente ao sistema com o Hamiltoniano não-hermitiano dado pelo potencial $-x^4$.

Logicamente, muitos outros aspectos que estudamos com afincos ficaram de fora, cabendo citar aqui: o problema da massa variável $m(x)$, as soluções por transformações de coordenadas, a generalização para 2 e 3 dimensões e as aplicações mais atuais da MQS em nuclear, matéria condensada, etc.

O problema de encontrar soluções exatas para o espectro dos sistemas aqui estudados permanece em aberto. Neste trabalho, mostramos que em um sistema quântico supersimétrico que pode ser colocado na forma de Sturm – Liouville, o superpotencial $W(x)$ faz o papel de função-peso numa solução de polinômios ortogonais. No caso do oscilador harmônico, em particular, apresentamos uma nova forma de se deduzir os polinômios de Hermite através do superpotencial.

Soluções polinomiais não se adaptam ao nosso problema específico (embora se apliquem aos casos mencionados no corpo do texto: o oscilador harmônico e a equação de Legendre), apesar de certa similaridade com o OHL, muito embora o sistema proposto obedeça à equação de Sturm-Liouville; por outro lado, o método matematicamente belo e engenhoso de *Voros*, apresentado no capítulo V, esbarra na questão da definição de operadores na semi-reta. Porém, foi

confortável observar que o método variacional dos coeficientes de funções apresentou resultados que podemos considerar bastante animadores e podem ser aplicados a outros sistemas supersimétricos.

O estudo aqui desenvolvido possibilitou, pela primeira vez, ao que sabemos, introduzir uma *função exponencial cúbica* que, em alguns casos, pode substituir a gaussiana nas aproximações variacionais, mas à custa de esforços adicionais: as integrações aqui envolvem uma álgebra das funções $\Gamma_3(x)$, isto é, funções gama que são geradas pela exponencial cúbica (todavia, com os novos processos computacionais, isto deixa de ser um sério obstáculo). Não tratamos deste assunto no trabalho porque o objetivo principal disso seria usar a álgebra nos polinômios definidos a partir do superpotencial $W(x)=x^2\mathcal{E}(x)$ que, lamentavelmente, não se revelaram úteis.

Por fim, as propriedades dos potenciais modulares, demonstradas neste trabalho, abrem um novo campo de aplicações para a mecânica quântica supersimétrica, tornando normalizáveis funções de onda do estado fundamental de sistemas que, no caso convencional, levavam à quebra de supersimetria.

APÊNDICE A - OUTROS MÉTODOS APROXIMATIVOS

Em busca das soluções do potencial por nós introduzido, muitos outros métodos aproximativos foram utilizados, mas não com muito sucesso. Nesta seção vamos resumir as principais aproximações, sem apresentar detalhes nos desenvolvimentos algébricos, mas com as principais ideias de cada um expostas convenientemente.

A.1. Teoria da Perturbação Logarítmica (ou “Expansão Delta” de Cooper-Roy)

Um dos métodos utilizados na busca de soluções foi a Teoria da Perturbação Logarítmica (TPL) para o potencial quártico [38,39,58]. Trata-se de um método de certa forma limitado, pois serve para determinar o estado fundamental de um sistema em MQ. Nesta seção seguiremos de perto o trabalho de Cooper & Roy [38]. O método parte de uma teoria MQS e se baseia em substituir o expoente do potencial V_1 por um parâmetro δ e expandir em torno deste parâmetro como uma série em δ . Usando a propriedade dos logaritmos: $x^{2+2\delta} = e^{(2+2\delta)\ln x}$, o superpotencial $W(x)$, bem como o potencial $V_-(x) = (1/2)M^{2+2\delta}x^{2+2\delta}$ são expandidos como:

$$W(x) = \sum \delta^n W_n(x) \quad (\text{A.1a})$$

$$V_-(x) = M^2 x^2 \sum \delta^n \left(\ln Mx^2 \right)^n / n! - \sum 2E_n \delta^n \quad (\text{A.1b})$$

onde E_n é a correção de n -ésima ordem em δ ao estado fundamental do problema. A seguir estas expansões são inseridas na equação de Riccati:

$$W_0^2 - W_0' = V_1(x) \quad (\text{A.2})$$

Inicialmente, é dado um exemplo para o oscilador harmônico supersimétrico (caso $\delta = 0$), mostrando que o primeiro termo da série em δ para W (W_1) envolve

uma reparametrização do potencial. Usando-se, então, a expansão do superpotencial como $W(x) = Mx + \sum \delta_n W^n(x)$ pode-se resolver recursivamente para $W_n(x)$.

Para os potenciais x^4 e x^6 ($\delta = 1, 2$ respectivamente), mostra-se graficamente que, fazendo-se a soma de Padè [2,2] para os primeiros 5 termos da série, a aproximação é quase indistinguível de x^4 para $x < 1$ e fornece bom resultado até $x = 3$. Assim, uma vez que a série aproxima bem o potencial para $x < 3$, espera-se que também $W(x)$ seja bem determinado para pequenos valores de x pela aproximante de Padè (2,2) (v. APÊNDICE B). A mesma ideia se aplica à função de onda do estado fundamental para pequenos valores de x , com $\psi_0 = N_0 \exp\left(-\int^x W(y)dy\right)$.

Trazendo estas ideias ao caso em estudo, os potenciais parceiros $V_{\pm}$ podem ser reparametrizados em termos de δ na forma (usaremos como cálculo apenas V_I) :

$$V(x; \delta) = \left(x^2\right)^{1+\delta} - \left(4x^2\right)^{\delta/2} \quad (\text{A.3})$$

Para $\delta = 1$, temos os potenciais parceiros gerados por $W(x) = x^2 \varepsilon(x)$. Expandindo em série de Taylor até ordem n , temos:

$$\begin{aligned} V(x; \delta) &= \sum_{m=0}^n \frac{\delta^m}{m!} \left\{ x^2 \left[\ln(x^2) \right]^m - \left[\ln 2 + \frac{1}{2} \ln(x^2) \right]^m \right\} \\ &= \sum_{m=0}^n \frac{\delta^m}{m!} \left\{ x^2 \left[\ln(x^2) \right]^m - \sum_{j=0}^m \frac{m!}{2^j j! (m-j)!} (\ln 2)^{m-j} \left[\ln(x^2) \right]^j \right\} \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

A equação de ordem zero de perturbação é então:

$$\left(x^2 - 1\right) - E_0 = W_0(x)^2 - W_0'(x) \quad (\text{A.5})$$

Com solução $W_0 = x$ e $E_0 = 0$. A função de onda nesta ordem é determinada como:

$$\psi_0 = N e^{-x^2/2} \quad (\text{A.6})$$

Em primeira ordem de perturbação, temos a equação:

$$\left[x^2 \ln(x^2) - \frac{1}{2} \ln(x^2) - \ln 2 \right] - E_1 = 2W_0 W_1 - W_1' \quad (\text{A.7})$$

A correção de primeira ordem à energia E_1 e o coeficiente $W_1(x)$ de $W(x)$ que satisfazem a esta equação são, respectivamente:

$$E_1 = \frac{\langle \psi_0 | V_1(x) | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \left[x^2 \ln(x^2) - \frac{1}{2} \ln(x^2) - \ln 2 \right] e^{-x^2} dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx} \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} W_1(x) &= \frac{1}{|\psi_0(x)|^2} \int_0^x |\psi_0(y)|^2 [E_1 - V_1(y)] dy \\ &= e^{x^2} \int_0^x dy \left[e^{-y^2} \ln(y^2) - 2 \ln y \right] \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Substituindo a equação para E_1 nesta última, obtemos:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{1}{2} \Psi\left(\frac{3}{2}\right) - \frac{1}{2} \Psi\left(\frac{1}{2}\right) - \ln 2 ; \\ W_1(x) &= e^{x^2} \int_0^x dy e^{-y^2} \left[\frac{1}{2} \Psi\left(\frac{3}{2}\right) - \frac{1}{2} \Psi\left(\frac{1}{2}\right) - y^2 \ln y^2 - \ln y \right] \\ (\Psi(z) &= \Gamma'(z)/\Gamma(z)) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Para $n = 1$, vemos que, para $\delta = 1$ esta aproximação fornece $E_0 = 0,307$, muito longe do valor real calculado analiticamente, $E_0 = 0,000$.

Refazendo as contas, agora para calcular a aproximação de mesma ordem para o potencial parceiro V_2 , o valor encontrado para $E_1^{(1)}$ é 1,973 que fornece praticamente o mesmo resultado da aproximação da seção 4.2. Em um recente trabalho, Gallegos *et al* [56] obtiveram, pelo mesmo método, $E_1^{(1)} = 2,00626$, usando o aproximante de Padè (1,1).

A aproximação aqui apresentada pode ser melhorada se for possível entender a

utilização da soma de Padè conforme prescreve a ref. [38]. Entretanto, várias tentativas de esclarecer aquelas contas resultaram infrutíferas. De qualquer forma, o método não vai além da aproximação para o estado fundamental.

Recentemente testamos uma nova ideia nossa que parece trazer um definitivo esclarecimento: trata-se de associar a TPL aos métodos da MQSUSI.

O procedimento básico é o seguinte:

- Na aproximação da TPL define-se o logaritmo da função de onda $F(x) = \ln \Psi(x)$ e a função F é expandida;
- Na LPT as aproximações são calculadas para o estado fundamental do sistema, uma vez que, para o primeiro estado excitado, por exemplo, a função de onda tem um nó e é indefinida neste ponto;
- Não obstante, sabendo-se que o potencial parceiro de $V_2(x)$ é $V_1(x)$ podemos calcular V_1 a partir da aproximação para $W(x)$ encontrada ao resolver perturbativamente;
- Podemos agora interpretar V_1 como o parceiro de um novo par, de modo que um “novo” superpotencial $X(x)$ pode ser calculado como $X(x)^2 + X' = V_1 - E_0^{(-)}$, onde $E_0^{(-)}$ é o estado fundamental de V_1 ;
- Resolve-se então a equação de Riccati acima definida perturbativamente em ordem de δ .
- Encontrando-se desta forma $E_0^{(-)}$, estaremos na realidade achando o primeiro estado excitado de potencial original V_+ em ordem de δ^n , em virtude da relação entre os níveis de energia dos potenciais supersimétricos.

Ao testarmos o método aqui apresentado, verificamos existir na literatura um trabalho que estabelece justamente esta mesma equivalência entre a TPL e a MQS [37]. A ideia vem da identificação entre as equações de Riccati que aparecem tanto na TPL como na MQS. Se definirmos $G(x)$ da TPL como a derivada de $F(x)$, teremos, restituindo temporariamente as constantes $\hbar$ e $2m$:

$$G(x) = F'(x) \Rightarrow G^2 + G' = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]$$

Na MQS, o superpotencial é definido também por uma equação de Riccati:

$$W(x)^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) = V_2 - E_0^{(+)}$$

$$W(x)^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) = V_1 - E_0^{(+)}$$

Isto nos leva a identificar $G(TPL) \equiv -\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} W(MQS)$.

Resultados obtidos para o oscilador harmônico, seguindo o exemplo da ref. [37] indicam valer a pena prosseguir este estudo, muito embora nos pareça que, ainda assim, a TPL é de difícil aplicação ao potencial V_2 que estamos estudando, podendo ser útil apenas em relação ao estado fundamental, o qual já obtivemos com boa precisão, no capítulo 4. Acreditamos também que pode ter sido este o método (*truque*) usado e não exposto por Cooper e Roy [38] – e depois seguido por *Bender et al* [39] – no trabalho por eles apresentado. Assim se justificaria o uso da *soma de Padè* na série logarítmica, que não é explicitado no método. A equivalência entre a TPL e a aproximação convencional (Rayleigh-Schroedinger) já havia sido demonstrada na literatura [40].

Outra possibilidade que verificamos é usar como ponto de partida uma solução exata para o potencial e considerar a outra como perturbação. Para $g \ll 1$, podemos considerar o termo $g^2 x^4$ como uma perturbação do potencial linear. Neste caso, utilizando λ como parâmetro perturbativo:

Fig. 7 – Os potenciais $V_1(x)$ para $g \gg 1$ e $V_2(x)$ para $g < 1$

$$V(x) = 2|x| + \lambda x^4 \quad (\text{A.11})$$

A equação não perturbada

$$\psi_n''(x) + 2(E_n - |x|)\psi_n(x) = 0 \quad (\text{A.12})$$

apresenta solução exata através da função de *Airy* [41]:

$$\psi_n(x) = N \text{Ai} \left[2^{1/3} (x - E_n) \right], \quad x > 0 \quad (\text{A.13})$$

Os níveis energéticos são determinados relacionando-se duas funções de onda $\psi_n^{(1)}$ e $\psi_n^{(2)}$ em $x = 0$. Neste ponto, as respectivas funções de onda e suas derivadas devem ser iguais (a menos do sinal):

$$\begin{aligned} \psi_n^{(1)}(0) &= \psi_n^{(2)}(0) \\ \psi_n^{\prime(1)}(0) &= \pm \psi_n^{\prime(2)}(0) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Devemos separar os dois casos:

a) para n par, a função tem um número par de nós, o eixo $x = 0$ é um eixo de simetria e, em consequência, sua derivada é nula na origem (ou seja, $\psi_n(x)$ tem um extremo local em $x = 0$). Temos, então:

$$\begin{aligned} \psi_n^{(1)} &= N \text{Ai} \left[-2^{1/3} (x + E_n) \right], \quad x > 0; \\ \psi_n^{(2)} &= N \text{Ai} \left[2^{1/3} (x - E_n) \right], \quad x > 0 \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

A relação das derivadas fornece, então:

$$\text{Ai}'(-E_n) = 0 \Rightarrow E_n = -a'_{n+1} \quad (\text{A.16})$$

onde a'_n indica o n -ésimo zero de Ai' .

b) para n ímpar, a função tem um número ímpar de nós, localizados no eixo $x = 0$. Não há mais simetria axial, mas uma simetria central na origem. As funções de onda são então:

$$\Psi_n^{(1)} = -N \operatorname{Ai} \left[-2^{1/3} (x + E_n) \right], \quad x < 0; \quad (\text{A.17})$$

$$\Psi_n^{(2)} = N \operatorname{Ai} \left[2^{1/3} (x - E_n) \right], \quad x > 0$$

A relação de continuidade das funções de onda fornece, no caso:

$$\operatorname{Ai}(-E_n) = 0 \Rightarrow E_n = -a_{n+1} \quad (\text{A.18})$$

onde a_n indica o n -ésimo zero da função de Airy $\operatorname{Ai}(x)$. O coeficiente de normalização N é determinado pela condição:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_n^*(x) dx = \delta(E_n - E_m)$$

Ou:

$$N^2 \int_0^{+\infty} \operatorname{Ai}(x - E_n) \operatorname{Ai}(x - E_m) dx = \delta(E_n - E_m) \quad (\text{A.19})$$

Usando as fórmulas de *Abramowicz & Stegun* [41], as constantes de normalização acima são obtidas: Para n par, $N = \frac{1}{\sqrt{-a'_n} \operatorname{Ai}(a'_n)}$ e para n ímpar,

$N = \frac{1}{\operatorname{Ai}'(a_n)}$ e também os zeros da função de Airy que determinam os níveis energéticos:

$$E_0 = 2,338; E_1 = 4,088; E_2 = 5,52, \dots$$

Com a solução exata do potencial linear, podemos então calcular perturbativamente o potencial $V(x) = 2|x| + \lambda x^4$. A solução acima mostra que os valores não se afastam muito dos calculados pelo método variacional para os potenciais parceiros; entretanto, um novo nível aparece entre E_0 e E_1 obtido anteriormente. Utilizando o mesmo método variacional dos coeficientes de funções para calcular as energias dos primeiros níveis do potencial $V_I(x)$, para $g \gg 1$ (potencial x^4 puro) obtemos os seguintes valores:

APÊNDICE A

E ₀	E ₁	E ₂	E ₃	E ₅	E ₆
1,06	3,8	7,58	11,89	18,03	23,8

os quais muito se aproximam dos obtidos pelo método de Rayleigh-Schroedinger [36], abaixo reproduzidos:

E_0	E_1	E_2	E_3	E_5	E_6
1,06	3,8	7,46	11,87	16,26	21,23

APÊNDICE B - APROXIMANTES DE PADÈ

Seja uma função $f(x)$ representada por sua série de Taylor:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$$

A série para $f(x)$ pode ser ou não convergente. O *aproximante de Padè* [42] para a soma da série acima – também chamada de *soma de Padè* – é definido pela função racional

$$P_M^N(x) \equiv \frac{\sum_{n=0}^N A_n x^n}{\sum_{n=0}^M B_n x^n} =: \sum_{n=0}^{M+N} a_n x^n + O(x^{M+N})$$

Uma definição alternativa para o aproximante de Padè é:

$$\sum_{j=0}^{N+M} a_j x^j - \sum_{k=0}^M B_k x^k \sum_{n=0}^N A_n x^n \equiv O(x^{N+M+1}), \quad x \rightarrow 0$$

Os aproximantes são determinados por uma sequência de operações matriciais. Os coeficientes $B_1, \dots, B_M$ no denominador são calculados resolvendo-se a equação matricial:

$$A \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_M \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} a_{N+1} \\ a_{N+2} \\ \vdots \\ a_{N+M} \end{bmatrix}$$

onde A é uma matriz $M \times M$ de elementos $A_{ij} = a_{n+i-j}$, sendo $i \geq 1$ e $j \leq M$. Os coeficientes do numerador são então determinados:

$$A_n = \sum_{j=0}^n a_{n-j} B_j, \quad 0 \leq n \leq N$$

Exemplo de cálculo:

$$P_3^3(x) \equiv \frac{\sum_{n=0}^3 A_n x^n}{\sum_{n=0}^3 B_n x^n} = \sum_{n=0}^{N+M-1} a_n x^n + O(x^6)$$

$$\begin{bmatrix} a_3 & a_2 & a_1 \\ a_4 & a_3 & a_2 \\ a_5 & a_4 & a_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} a_4 \\ a_5 \\ a_6 \end{bmatrix}$$

$$A_0 = a_0 B_0$$

$$A_n = \sum_{j=0}^5 a_{n-j} B_j \Rightarrow \begin{aligned} A_1 &= a_1 + a_0 B_1 \\ A_2 &= a_2 B_0 + a_1 B_1 + a_0 B_2 \\ A_3 &= a_3 B_0 + a_2 B_1 + a_1 B_2 + a_0 B_3 \end{aligned}$$

Ou seja,

$$P_3^3(x) \equiv \frac{a_0 B_0 + (a_1 + a_0 B_1)x + (a_2 B_0 + a_1 B_1 + a_0 B_2)x^2 + x^3}{1 + B_1 x + B_2 x^2 + B_3 x^3} + \frac{(a_3 B_0 + a_2 B_1 + a_1 B_2 + a_0 B_3)}{1 + B_1 x + B_2 x^2 + B_3 x^3}$$

Exemplo Numérico

$$f(x) = e^x = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \dots$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{6} & \frac{1}{2} & 1 \\ \frac{1}{24} & \frac{1}{6} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{120} & \frac{1}{24} & \frac{1}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{1}{24} \\ \frac{1}{120} \\ \frac{1}{720} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} B_1 + 3 B_2 + 6 B_3 &= -\frac{1}{4} & B_1 &= -\frac{1}{2} & A_0 &= 1 \\ B_1 + 4 B_2 + 12 B_3 &= -\frac{1}{5} & B_2 &= \frac{1}{10} & A_1 &= \frac{1}{2} \\ B_1 + 5 B_2 + 20 B_3 &= -\frac{1}{6} & B_3 &= -\frac{1}{120} & A_2 &= \frac{1}{10} \\ & & & & A_3 &= \frac{1}{120} \end{aligned}$$

$$\text{Logo, } P_3^3(x) \equiv \frac{1 + \frac{1}{2}x + \frac{1}{10}x^2 + \frac{1}{120}x^3}{1 - \frac{1}{2}x + \frac{1}{10}x^2 - \frac{1}{120}x^3}$$

$$P_3^3(1) \equiv \frac{1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{10} + \frac{1}{120}}{1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{10} - \frac{1}{120}} \approx 2,71, \text{ resultado que é o mesmo da ref. [k].}$$

• **Aplicação à TPL de Cooper-Roy**

Nos cálculos da ref. [11], os cinco primeiros termos da série em δ são:

$$x^2 \left[1 + 2\delta \ln x + 2\delta^2 \ln^2 x + \frac{4}{3}\delta^3 \ln^3 x + \frac{2}{3}\delta^4 \ln^4 x \right]$$

Seguindo o procedimento acima apresentado, obtemos facilmente os aproximantes de Padè [1,1] e [2,2]:

$$P[1,1] = \frac{-x^2(\ln x)\delta + x^2}{(\ln x)\delta - 1}$$

$$P[2,2] = \frac{x^2(\ln x)^2\delta^2 + 3x^2(\ln x)\delta + 3x^2}{(\ln x)^2\delta^2 - 3(\ln x)\delta + 3}$$

APÊNDICE C - SOLUÇÃO DO MÉTODO VARIACIONAL DOS COEFICIENTES NO PROGRAMA MATHEMATICA

1 - Para o método variacional dos coeficientes de funções, programamos o MATHEMATICA conforme abaixo:

```
f[x_,j_]:= (x^2)^((j-1)/2) Exp[-(1/3) ((x^2)^(3/2)) ]

v[i_,x_]:= x^4+ ((-1)^i)2 (x^2)^(1/2)

H[i_,j_,k_]:= Integrate[f[x,j] (-D[f[x,k],{x,2}]+v[i,x] f[x,k]),{x,-
∞,∞}]

S[j_,k_]:= Integrate[f[x,j] f[x,k],{x,-∞,∞}]

(A[i_])[j_,k_]:= B S[j,k]-H[i,j,k]

(A[i_])[k_,j_]:= B S[k,j]-H[i,k,j]

M[i_,j_]:= Array[A[i],{j,j}]

Variacional[i_,m_]:= Solve[Det[M[i,m]]==0,B]

NVariacional[i_,m_]:= NSolve[Det[M[i,m]]==0,B]

Energia[i_,n_,m_]:= Root[Det[M[i,m]],n]
```

2 – Para calcular os níveis do potencial x^4 , o programa que escrevemos foi o seguinte:

```
f[x_,j_]:= (x^2)((j-1)/2)*Exp[(-1/3)*(x^2)^(3/2)]

V[i_,x_]:= ((-1)^i)*x^4

H[i_,j_,k_]:= Integrate[f[x,j]*(-D[f[x,k],{x,2}]+V[x]*f[x,k]),{x,-
∞,∞}]

S[j_,k_]:= Integrate[f[x,j]*f[x,k],{x,-∞,∞}]

(A[i_])[j_,k_]:= B*(S[j,k]+S[k,j])-(H[i,j,k]+H[i,k,j])

M[i_,j_]:= Array[A[i],{j,j}]

Variacional[i_,m_]:= Solve[Det[M[i,m]]==0,B]

NVariacional[i_,m_]:= NSolve[Det[M[i,m]]==0,B]
```

APÊNDICE D - OPERADORES AUTO-ADJUNTOS (OU HERMITIANOS)

1) Extensões Auto-Adjuntas de Operadores

Teorema de Von Neumann:

Seja um operador A e seu Domínio, $(A, D(A))$ densamente definido, simétrico e fechado e $(A^+, D(A^+))$ seu adjunto. Definem-se os subespaços deficientes:

$$\begin{aligned} N_+ &= \left\{ \Psi \in D(A^+) , A^+ \Psi = z_+ \Psi, \text{Im } z_+ > 0 \right\} \\ N_- &= \left\{ \Psi \in D(A^+) , A^+ \Psi = z_- \Psi, \text{Im } z_- < 0 \right\} \\ &\text{com } \dim(n_+, n_-) \end{aligned}$$

(Na prática, $z = i\lambda$, sendo λ uma constante de dimensionalidade e os valores de n (+,-) se resumem a contar quantas soluções da equação $A^+ \Psi = z \Psi$ tem norma finita).

O Teorema de Von Newman afirma que:

a) $n_+ = n_- = 0 \rightarrow A$ é auto-adjunto (a.a.);

b) $n_+ = n_- \geq 1 \rightarrow A$ tem infinitas extensões a.a.

c) $n_+ \neq n_- \rightarrow A$ não tem extensão a.a.

Vamos estudar o caso do operador $P (= -i \hbar d/dx)$ no espaço $H = L^2(a,b)$

$$\begin{aligned} P^+ \Psi_{\pm}(x) &:= -i \hbar \frac{d}{dx} \Psi_{\pm}(x) = \pm i \frac{\hbar}{d} \Psi_{\pm}(x) \\ \Rightarrow \Psi_{\pm}(x) &= C_{\pm} e^{\mp x/d} \end{aligned}$$

1º. Caso: $(a,b) = \mathbb{R}$. Neste caso, nenhuma das auto funções pertencem a $L^2(a,b)$, logo, $n_+ = n_- = 0 \rightarrow P$ é a.a.;

2º. Caso: $(a,b) = (0, +\infty)$. Neste caso, somente Ψ_+ pertence a $L^2(a,b)$, logo, $(n_+, n_-) = (1,0) \rightarrow P$ não tem extensão a.a. Ou seja,

O MOMENTO NÃO É UM OBSERVÁVEL NA SEMI-RETA!

3º. Caso: $(a,b) = (0, L)$. Neste caso $n_+ = n_- = 1$, pois ambas as auto funções. pertencem a $L^2 \rightarrow A$ tem infinitas extensões a.a.

OBS: estas (infinitas) extensões são parametrizadas por uma matriz $n \times n$, no caso $U(1)$ o que implica numa fase e^{iq} , e o espectro é discreto.

2) Definições:

a) Operadores simétricos:

Um operador $(A, D(A))$ é simétrico se, para quaisquer Φ e Ψ pertencentes ao domínio $D(A)$, tem-se:

$$(A\Phi, \Psi) = (\Phi, A\Psi)$$

O domínio $D(A^\dagger)$ é o espaço das funções Ψ tais que a forma linear

$$f \rightarrow (\Psi, A\Phi)$$

é contínua para a norma de H . Existe então um $\Psi^\dagger$ em H tal que

$$(\Psi, A\Phi) = (\Psi^\dagger, \Phi)$$

e define-se

$$A^\dagger \Psi = \Psi^\dagger.$$

b) Operadores Auto-Adjuntos:

Se A é um operador tal que:

$$A = A^\dagger \wedge D(A) = D(A^\dagger) \implies A \text{ é a.a.}$$

APÊNDICE E – REPRESENTAÇÃO DA “FUNÇÃO” SIGN (X)

A representação da função $\text{sign}(x)$, pela definição

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} +1 & , \quad x > 0 ; \\ -1 & , \quad x < 0 ; \\ 0 & , \quad x = 0 \end{cases} \quad (\text{E.1}),$$

como vimos, trás algumas dificuldades quando lidamos com suas derivadas. Elas ocorrem, por exemplo, ao definirmos os potenciais parceiros a partir de um superpotencial dependente de $|x|$. Para evitar estas dificuldades, nossa proposta foi representar a função sinal através da expressão:

$$\varepsilon(x) = \frac{x}{\sqrt{x^2}} \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\frac{nx}{\sqrt{1+n^2 x^2}} \right] \quad (\text{E.2})$$

(Fig. E1). Outras representações para a mesma função poderiam ter sido propostas, como por exemplo:

$$\begin{aligned} \varepsilon(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} [\tanh(nx)] \\ \varepsilon(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\frac{2n}{\pi} \arctan(nx) \right]; \\ \varepsilon(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} [\text{Erf}(nx)] \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

Todavia, as dificuldades matemáticas que surgiriam tornariam o trabalho fastidioso e, muitas vezes, poderiam levar a incoerências. Partimos do princípio de que certas “funções” surgem em física para *auxiliar* em alguns cálculos que, sem elas, ou seriam impossíveis realizar ou extremamente difíceis. É o caso da função *delta de Dirac*, por exemplo.

Com a escolha de (E.2), os potenciais parceiros gerados por $W(x) = x^2 \varepsilon(x)$, com todas as passagens intermediárias, são calculados como:

APÊNDICE **E**

$$\begin{aligned}
 W(x, n) &= x^2 \cdot \frac{x}{\sqrt{x^2 + \frac{1}{n^2}}} \\
 V_-(x, n) &= \frac{x^4}{\left(\frac{1}{n^2} + x^2\right)^{3/2}} + \frac{x^6}{\frac{1}{n^2} + x^2} - \frac{3x^2}{\sqrt{\frac{1}{n^2} + x^2}}; \\
 V_-(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} [V_-(x, n)] = x^4 - 2\sqrt{x^2} \equiv x^4 - 2|x|
 \end{aligned} \tag{E.5}$$

Analogamente, a função de onda do estado fundamental é calculada como o limite de $\Psi(x, n)$:

$$\begin{aligned}
 \psi(x, n) &= \text{Exp} \left[-\frac{\sqrt{\frac{1}{n^2} + x^2} (-2 + n^2 x^2)}{3n^2} \right] \\
 \psi(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\text{Exp} \left[-\frac{\sqrt{\frac{1}{n^2} + x^2} (-2 + n^2 x^2)}{3n^2} \right] \right] \equiv \text{Exp} \left(-\frac{1}{3} (x^2)^{3/2} \right)
 \end{aligned} \tag{E.6}$$

A expressão exponencial acima foi a utilizada nos cálculos variacionais pelo programa MATHEMATICA.

No caso acima (E.5), não existe qualquer dificuldade matemática para substituir

APÊNDICE **E**

a função sinal pelo seu limite dado em (E.2). Mas como seria se este termos aparecesse isolado, como na Eq. (3.32) ? Vamos calcular a derivada deste termo pela definição:

$$F(x, n) = \frac{x}{\sqrt{x^2 + \frac{1}{n^2}}}$$

$$\frac{dF}{dx} = \frac{1}{\sqrt{1/n^2 + x^2} (1 + n^2 x^2)} = 0 \quad (\text{E.6})$$

Pela definição de derivada, obtemos o mesmo resultado:

$$\frac{dF}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{\frac{-x}{\sqrt{1/n^2 + x^2}} + \frac{x + \Delta x}{\sqrt{1/n^2 + (x + \Delta x)^2}}}{\Delta x} \right) = \frac{1}{\sqrt{1/n^2 + x^2} (1 + n^2 x^2)} \quad (\text{E.7})$$

Entretanto, tomando agora o limite $n \rightarrow \infty$ usando o gráfico da função acima (E.7) para valores crescentes de n , vemos que, na realidade, para n grande, ($n=10$, por exemplo, Figura E2), a função se aproxima da função *delta de Dirac*, o que nos leva à conclusão que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{\sqrt{1/n^2 + x^2} (1 + n^2 x^2)} \right) = \delta(x) \quad (\text{E.8})$$

APÊNDICE ***E***

FIG. E2 – Gráfico da função definida em (E.8) para $n = 10$

Referências:

- [1] J. Wess and B. Zumino, N. Phys. **B70** (1), 39–50 (1974)
- [2] A. Salam and J. Strathdee, Phys. Rev. **D11** (6–15), 1521 – 1535 (1975)
- [3] E. Witten, N. Phys. **B188** (3), 513 – 554 (1981)
- [4] F. Cooper, A. Kare and U. Sukhatme, Phys. Rep. 251 (5–6), 267–385 (1995), arXiv:hep-ph/0001257
- [5] E. Schroedinger, Proc. R. Irish. Acad. **A46**, 9, 183 (1940)
- [6] L. Infeld e T. E. Hull, Rev. Mod. Phys. **23** (1), 21-68 (1951)
- [7] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* 2nd. Ed. Oxford, Clarendon (1932)
- [8] A. A. Andrianov, N. V. Borisov and M. V. Ioffe, Phys. Lett. **A105** (1–2), 19–22 (1984)
- [9] C. V. Sukumar, J. Phys. **A18** (2), 157–161 (1985)
- [10] G. Darboux, C. R. Acad. Sci. **94**, 1456 (1882)
- [11] H. C. Rosu, arXiv:quant-ph:9809056 (1998)
- [12] D. Gomez-Ullate, N. Kamran e R. Milson, J. Phys. **A37**, 1789-1804 (2004); A. Schulze-Haldeberg, Int. J. Mod. Phys. **A21** (6), 1359-1377 (2006)
- [13] A. V. Rybin, J. Phys. **A24** (22), 5235-5244 (1991); A. Shabat, *Inverse Problems* **8**, 303 (1992)
- [14] R. Dutt, A. Khare and U. Sukhatme, Am. J. Phys **56** (2), 163-168 (1988)
- [15] D. T. Barclay, R. Dutt, A. Gangopadhyaya, A. Khare, A. Pagnamenta and U. Sukhatme, Phys. Rev. **A48**, 2786-2797 (1993)
- [16] A. Khare and U. Sukhatme, J. Phys. **A26**, 1901-1904 (1993); arXiv:hep/th/9212147 (1992)
- [17] L. Gendenshtein, JETP Letters **38**, 645 (1983)
- [18] F. Cooper, J. N. Ginocchio and A. Khare, Phys. Rev. **D36** (8-15), 2458 (1987)
- [19] D. T. Barclay and C. J. Maxwell, Phys. Letters **A157**, 357 (1991)
- [20] C. M. Bender, S. Boettcher, H. F. Jones, and V. M. Savage, J. Phys. **A32**, 6771 (1999)
- [21] C. M. Bender, arXiv:quant-ph/0501052v1 (2005)
- [22] H. F. Jones e J. Mateo, arXiv:quant-ph/0601188v2 (2006)
- [23] V. Spiridonov, Mod. Phys. Lett. **A7**, 1241-1252 (1992)
- [24] B. Bagchi, A. Banerjee, C. Quesne, V. M. Tkachuk, **arXiv:**
- [25] C. Quesne and V. M. Tkachuk, arXiv:math-ph/0403047 (2004)
- [26] C. Quesne, arXiv:math-ph/08074650 (2008); arXiv:math-ph/07121971 (2007)

- [27] Max Jammer, *Conceitos de Força*, Ed. PUC-Rio (2011)
- [28] D. M. Dennison; Uhlenbeck, G. E. Phys. Ver. **41**, 313-321 (1934)
- [29] M. F Manning, J. Chem. Phys. **3**, 136-138 (1935)
- [30] N. Rosen and P. M. Morse, Phys. Rev. **42**, 210-217 (1932)
- [31] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley Ed, New York (1970)
- [32] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloe, *Quantum Mechanics*, Hermann (1992)
- [33] F. Marques, O. Negrini and A. J. da Silva, J. Phys **A45** (2012)
- [34] A. Turbiner, Lett. Math Phys. **74**, 169 (2005)
- [35] A. Voros, arXiv:math-ph/0005029v2 (2003)
- [36] F. M. Fernández, arXiv:math-ph/12040229v1 (2012)
- [37] C. Lee, Phys. Lett. **A267** (2000) 101-108.
- [38] F. Cooper and P. Roy (or. art.) LA-UR-89-**2847** (1989)
- [39] C. M. Bender, S. Boettcher, H. F. Jones, and V. M. Savage, J. Phys. **A 32**, 6771 (1999)
- [40] A. Bandyopadhyaya, Bhattacharyya – *Equivalence Logarithm Expansion and Rayleigh-Schroedinger Aproximations*
- [41] Abramowitz, M., Stegun, I.A. – *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables*, Dover (1972)
- [42] C. Bender and S. Orzsag. - *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers* – Mc Graw-Hill (1978)
- [43] A. Jevicki e J. P. Rodrigues, Phys. Lett. B146 (1984) 55
- [44] O. Negrini-Neto – Dissertação de Mestrado – IFUSP (1988).
- [45] Gradshteyn, I.S., Ryzhik, I.M. *Table of Integrals, Series and Products – Corrected and Enlarged Edition* – Academic Press (1980).
- [46] Demery e Krzywicki, *Mathematics for Physicists* (1967).
- [47] D. Bazeia and Ashok Das arXiv: math-ph/1207.4985 (2012)
- [48] P. Ramond, *Field Theory: A Modern Primer* – WestViv (Oxford), 2nd Ed. (1997)
- [49] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson, New Jersey, 2nd. Ed. (2005)
- [50] Bonneau, G., Faraut, J., Valent, G. – arXiv:quant-ph/0103153 (2001)
- [51] C. M. Bender and S. Boettcher, “*Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonian Having PT-Symmetry*” – arXiv:math-ph/0712001v3 (1998)
- [52] H. F. Jones and J. Mateo arXiv:quant-ph/0601188v2 (2006).
- [53] C. M. Bender, Contemp.Phys.46:277-292 (2005).

- [54] D. Baseia, A. Das, L. Greenood and L. Losano, arXiv:hep-th/08110923v2 (2009).
- [55] Mostafazadeh, A - J. Math. Phys. 43, 205 (2002) e refs. ali citadas; C. M. Bender, D. C. Brody, J-H. Chen, – arXiv:hep-th/0605066v2 (2006).
- [56] E. A. Gallegos, A. J. da Silva and D. Spehler, arXiv:1307.1107v1 (2013).
- [57] R. Kriveks and V. B. Mandelzweig, – arXiv:physics/0112024v1 (2001)
- [58] T. Imbo and U. Sukhatme – Am. J. Phys 52, 140-146 (1984).
- [59] E. Drigo, V. Andrea, L. Kiyoshi e S. Herval: *Equação de Schrödinger Para Potenciais Não Polinomiais* (não publicado).
- [60] Ashok Das – arXiv:hp-th/0005042v1 (2000)
- [61] A. Das and S. A. Pernice, Nucl. Phys. B505 (1999)
- [62] M. J. Lighthill, *Introduction to Fourier Analysis and Generalized Functions*, Cambridge (1964)
- [63] R. Feynman, *Lectures on Physics v IV* (1963)
- [64] C. Bender, arXiv:hep-th/060566v2 (2206)
- [65] I. S. Gradshtein and I. M. Ryzhik, “*Table of Integrals, Series, and Products*” (1979).
- [66] F. M. Fernández – arXiv:math-ph/1204229v1 (2012)