

POTENCIAIS INDEPENDENTES DA VELOCIDADE

Este exemplar corresponde a redação final da tese devidamente corrigida e defendida pelo Sr. Eduardo Alfonso Notte Cuello e aprovada pela Comissão Julgadora.

Prof.Dr. Edmundo Capelas de Oliveira

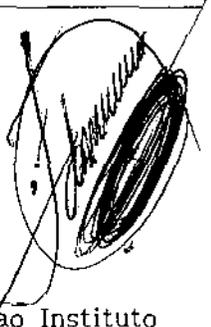
Prof.Dr. Waldyr Aives Rodrigues Jr.

Prof.Dr. José Luiz Boldrini

Prof.Dr. Erasmo Recami

Campinas, 29 de novembro de 1991

Prof.Dr. Edmundo Capelas de Oliveira



Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação, UNICAP, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Matemática Aplicada.

N849p

15327/BC

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

POTENCIAIS INDEPENDENTE DA VELOCIDADE

AUTOR: EDUARDO A. NOTTE CUELLO

ORIENTADOR: PROF. DR. EDMUNDO CAPELAS DE OLIVEIRA

IMECC - UNICAMP

1991

CAMPINAS S.P

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Edmundo Capelas de Oliveira pela valiosa orientação e pela disponibilidade em atender-me continuamente.

Ao Prof. Dr. Waldir A. Rodrigues pela disponibilidade em atender-me continuamente.

Ao Departamento de Matemática Aplicada pelas facilidades concedidas para a realização deste trabalho.

A Eugenia pela infinita paciência e pelo seu apoio durante o período de mestrado.

Às instituições CNPQ e CAPES pelo suporte financeiro.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO.

1.	TRANSFORMAÇÕES SOBRE AS EQUAÇÕES HIPERGEOMÉTRICAS E HIPERGEOMÉTRICAS CONFLUENTES.....	01
2.	TÉCNICAS DE TEORIA DE GRUPOS.....	07
3.	O MÉTODO DE FATORAÇÃO.....	22
4.	ÁLGBRAS DE LIE PARA POTENCIAIS DE ESPALHAMENTO.....	34
5.	CONCLUSÕES.....	39
6.	APÊNDICE A : CONCEITOS BÁSICOS DE ÁLGEBRA DE LIE.....	41
7.	APÊNDICE B : TEORIA FORMAL DE ESPALHAMENTO.....	45
8.	REFERÊNCIAS.....	54

INTRODUÇÃO

O problema da colisão de uma partícula com o núcleo pesado do átomo (espalhamento) assume um interesse particular, uma vez que evidencia o significado físico da função de onda. Como é sabido, a função de onda, $\Psi(r,t): \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ serve para escrever o estado de uma partícula e é solução da equação de Schrödinger $i\hbar\partial\Psi/\partial t = H\Psi$ onde H é o operador energia, também chamado hamiltoniano do sistema.

Suponhamos uma função de onda do seguinte tipo:

$$\Psi = \{ c_1 \exp[ixp/\hbar] + c_2 \exp[iyp/\hbar] \} \exp[-ip^2 t/2m]$$

neste estado a energia é igual a $E = p^2/2m$ porém o movimento não tem uma direção definida. Fazendo-se um experimento que permita constatar a direção do movimento (por exemplo, por meio de um diafragma com a abertura orientada de uma certa maneira) e o repetirmo muitas vezes, verificamos que existe uma certa probabilidade de detectarmos a partícula deslocando-se, ao longo do eixo dos x , com velocidade $v = p/m$, assim como existe a probabilidade de a detectarmos, deslocando-se ao longo do eixo dos y , com a mesma velocidade.

No estado descrito pela função de onda acima, a partícula tem uma certa potencialidade de ser detectada ao deslocar-se segundo qualquer uma das duas direções. É claro que isto pressupõe um estado totalmente diferente daquele que corresponde ao movimento da partícula segundo a resultante da soma das duas direções.

Agora, se a partícula se deslocasse ao longo da bissetriz do ângulo formado pelos eixos dos x e y , com a velocidade correspondente à energia $E = p^2/2m$ a sua função de onda seria igual a

$$\Psi = C \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{x+y}{2^{1/2}} p \right] \exp[-iEt/\hbar]$$

sendo esta função de onda completamente distinta da anterior.

A probabilidade de existirem estados nos quais uma dada grandeza não ter valor determinado e que se obtém a partir da superposição de

estados com um determinado valor desta grandeza, constitui uma característica da mecânica quântica que a distingue radicalmente da mecânica clássica.

A necessidade de adotar o princípio da superposição resulta do fato de só com base neste princípio é possível explicar a natureza dualística da luz e da matéria que se manifesta tanto sob a forma de onda como sob a forma de partículas.

Analisando do ponto de vista da potencialidade é possível escrever uma expressão que nos dê a probabilidade de detectar a partícula deslocando-se segundo o eixe dos x ou segundo o eixo dos y , se inicialmente ela se encontrava no estado caracterizado por Ψ . Estas probabilidades são proporcionais aos quadrados dos módulos das amplitudes e a razão entre elas é igual a $|C_1|^2 : |C_2|^2$ onde os C_1 são os coeficientes de expansão da base do espaço considerado.

No início da mecânica ondulatória, De Broglie interpretava a função de onda como uma certa onda especial, a qual representava um conjunto de partículas susceptíveis de se difratarem, as chamadas ondas de De Broglie⁽¹⁾.

A secção de choque de espalhamento elástico de uma partícula com energia E , movendo-se num campo de forças central, é determinado pela diferença de fase das ondas parciais, de diferentes momentos angulares na qual a função de onda da partícula pode ser descomposta⁽²⁾. No final da década de quarenta Bargmann⁽³⁾ discutiu a conexão entre diferença de fase e o potencial espalhador, construindo e discutindo potenciais com fases equivalentes.

No começo da década de sessenta Bhattacharjie e Sudatshan⁽⁴⁾ apresentaram um método de construir potenciais independentes da velocidade, para os quais a equação diferencial de Schrödinger, independente do tempo, é resolvida em termos de funções analíticas e daí estudaram as correspondentes amplitudes de espalhamentos.

No contexto da física matemática são várias as aplicações^(5,6,7,8,9) onde propriedades das funções analíticas são usadas para fornecer aproximações numéricas razoáveis. Assim, pelo

menos para sistemas simples- potenciais solúveis- a solução analítica exata joga um papel importante. Entende-se por potenciais solúveis aqueles para os quais a equação diferencial de Schrödinger possa ser resolvida em termos das funções analíticas, as chamadas funções especiais da física-matemática.

Infelizmente são poucos os potenciais solúveis, quase todos encontrados isoladamente. Dentre estes potenciais solúveis podemos citar: Oscilador Harmônico Isotônico⁽⁷⁾; Potencial de Morse e Potencial de Pöschl-Teller⁽⁶⁾ e Átomo de Hidrogênio⁽⁸⁾.

Para que um problema dinâmico esteja completamente resolvido devemos conhecer os auto-valores, as auto-funções e a respectiva função de Green associada ao potencial em questão. Os dois métodos mais usados para determinarmos o espectro mecânico-quântico são: O método de fatoração⁽¹⁰⁾ e as técnicas de teoria de grupo⁽¹¹⁾. O método clássico para obtenção da função de Green é o método de expansão tipo Sturm-Liouville⁽¹²⁾.

O método de fatoração é um procedimento que nos capacita responder, de modo direto, questões sobre problemas de autovalores. Tal método considera um par de equações diferenciais de primeira ordem como sendo equivalente à equação diferencial de segunda ordem com condições de contorno. Utilizando este método Dongpei⁽⁷⁾ obteve um novo potencial com o espectro de um oscilador harmônico com uma barreira centrípeta, também chamada oscilador isotônico. Barut-Inomata-Wilson⁽⁵⁾, também, utilizando o método de fatoração obtiveram os operadores escada da respectiva álgebra dinâmica.

As considerações em termos de técnicas de grupos têm mostrado ser importante no que tange a obtenção de novas equações de movimento bem como a determinação das soluções de equações já conhecidas. Na década de sessenta Barut⁽¹⁹⁾ encontrou, para certos sistemas, um grupo não compacto tal que suas representações irredutíveis continham todas as representações irredutíveis do grupo simétrico maximal, associado com os níveis de energia do respectivo sistema. Este fato culminou com a idéia da assim chamada álgebra dinâmica, a qual não é uma álgebra do grupo

simétrico uma vez que contém operadores conectando diferentes níveis de energia. A partir do estudo das álgebras dinâmicas surgiram duas correntes, uma das quais concentra a atenção na derivação explícita das álgebras dinâmicas para dados sistemas quânticos⁽¹⁴⁾ e o outro grupo investigando a possibilidade de estender o formalismo à física das partículas elementares⁽¹⁵⁾.

Budini⁽⁸⁾ mostrou que o espectro de energia de um dado sistema físico pode ser deduzido dos operadores de Casimir da correspondente álgebra dinâmica. Aida, o mesmo autor⁽¹⁶⁾ mostrou que um problema dinâmico pode ser completamente resolvido dentro da estrutura da álgebra dinâmica sem o conhecimento explícito do potencial. Então, podemos esperar que seja possível resolver o problema inverso, ou seja, determinar o potencial ou uma classe de potenciais para uma dada álgebra dinâmica.

Na presente dissertação pretendemos, a partir de transformações funcionais efetuadas sobre uma equação diferencial ordinária, linear de segunda ordem, reduzi-la a uma equação de Schrödinger unidimensional, uma única variável espacial e, portanto, obter a forma mais geral para o potencial, com o qual a equação de Schrödinger possa ser resolvida em termos de funções analíticas. Também pretende-se obter a forma mais geral para o potencial via técnicas de teoria de grupo.

Uma vez obtido a forma mais geral para o potencial, mostraremos a redução da respectiva equação a uma classe de equações hipergeométricas, a qual será identificada com a respectiva álgebra dinâmica do problema em questão. A partir de processo de limite discutiremos a forma mais geral para o potencial que nos leva à outra classe de equações, ou seja: equações hipergeométricas confluentes.

Para a resolução destas equações utilizaremos o método de fatoração nos respectivos casos, equações hipergeométricas e hipergeométricas confluentes, bem como técnicas de teoria de grupo discutindo as álgebras associadas aos grupos correspondentes a tais funções.

Resumindo, construiremos potenciais unidimensionais independentes

da velocidade para os quais a equação de Schrödinger possa ser resolvida em termos de funções hipergeométricas e hipergeométricas confluentes. Então, para tais potenciais, conhecemos a solução analítica completa com a qual podemos estudar a sua forma assintótica e daí estudar a matriz de espalhamento associada ao respectivo potencial em questão.

O presente trabalho está organizado da seguinte maneira: No primeiro capítulo construímos a forma mais geral para o potencial com o qual a equação de Schrödinger possa ser resolvida em termos das funções hipergeométricas e hipergeométricas confluentes. No segundo capítulo discutiremos as técnicas de grupo, apresentando a álgebra simétrica, a álgebra geradora do espectro e a álgebra dinâmica relacionadas com a álgebra $so(2,1)$ que está associada as funções consideradas. No capítulo três discutiremos o método de fatoração, enfatizando as fatorações tipo A e tipo B as quais estão associadas as funções hipergeométricas e hipergeométricas confluentes, respectivamente. No capítulo quarto discutiremos uma aplicação ao problema do potencial de Pöschl-Teller bem como a maneira a ser seguida para obter a respectiva matriz de espalhamento. Finalmente apresentamos as conclusões.

CAPÍTULO I

TRANSFORMAÇÕES SOBRE AS EQUAÇÕES HIPERGEOMÉTRICA E HIPERGEOMÉTRICA CONFLUENTE

Neste capítulo discutiremos a transformação funcional sobre as equações hipergeométricas e hipergeométricas confluentes a partir de uma equação diferencial geral linear de segunda ordem. Obtemos assim um potencial geral, e, como um caso particular, obtemos potenciais da forma de Schrödinger.

Consideremos então a equação diferencial geral linear e de segunda ordem, em uma variável independente

$$(1.1) \quad \frac{d^2}{dz^2} u(z) + P(z) \frac{d}{dz} u(z) + Q(z) u(z) = 0.$$

Introduzindo-se as seguintes substituições, nas variáveis independente e dependente

$$(1.2) \quad z = f(r) \quad ; \quad u(z) = g(r)\varphi(r); g(r) \neq 0$$

obtemos

$$(1.3) \quad \frac{d}{dr^2} \varphi(r) + A(r) \frac{d}{dr} \varphi(r) + B(r) \varphi(r) = 0$$

onde A(r) e B(r) são dadas, respectivamente, por:

$$(1.4) \quad \left\{ \begin{array}{l} A(r) = \frac{2}{g(r)} \frac{d}{dr} g(r) + P(r) \frac{d}{dr} f(r) - \frac{d^2 f(r)/dr^2}{df(r)/dr} \\ B(r) = \left[\frac{d^2 g(r)/dr^2}{g(r)} \right] + Q(r) \left[\frac{d}{dr} f(r) \right]^2 + \left[\frac{dg(r)/dr}{g(r)} \right] \\ \quad \cdot \left[P(r) \frac{d}{dr} f(r) - \frac{d^2 f(r)/dr^2}{df(r)/dr} \right] \\ P(r) = p[f(r)] \quad ; \quad Q(r) = q[f(r)] \end{array} \right.$$

então, tomando-se $A(r) = 0$; $B(r) = K^2 - V(r)$; $\frac{d}{dk}V(r) = 0$ obtemos a equação de Schrödinger

$$(1.5) \quad \frac{d^2}{dr^2} \varphi(r) + K^2 \varphi(r) = V(r) \varphi(r)$$

Para o caso particular da equação hipergeométrica tomamos

$$P(r) = \frac{c-(a+b-1)f(r)}{f(r)(1-f(r))} ; \quad Q(r) = -\frac{ab}{f(r)(1-f(r))}$$

e daí, temos:

$$(1.6) \quad B(r) = \frac{g''(r)}{g(r)} - \frac{ab}{f(r)[1-f(r)]} [f'(r)]^2 + \\ + \frac{g'(r)}{g(r)} \left[\frac{c-(a+b+1)f(r)}{f(r)[1-f(r)]} f'(r) - \frac{f''(r)}{f'(r)} \right]$$

onde a (') denota a diferenciação.

Por outro lado temos a condição $A(r) = 0$ logo com

$$P(r) = c - \frac{(a+b+1)f(r)}{f(r)[1-f(r)]}$$

obtemos a seguinte equação diferencial

$$\frac{2}{g(r)} g'(r) + \frac{c-(a+b+1)f(r)}{f(r)[1-f(r)]} f'(r) - \frac{f''(r)}{f'(r)} = 0 .$$

Integrando esta equação diferencial obtemos

$$f'(r) = M g^2(r) f^c(r) [1-f(r)]^{a+b-c+1}$$

ou, ainda

$$(1.7) \quad g^2(r) = \left[\frac{f'(r)}{M} f^{-c}(r) [1-f(r)]^{c-a-b-1} \right]$$

onde M é uma constante.

Introduzindo $g(r)$ em $B(r)$ e usando a condição $B(r) = K^2 - V(r)$ obtemos uma equação diferencial de terceira ordem, não linear, para f , ou seja:

$$(1.8) \quad \frac{1}{2} \frac{f'''}{f'} - \frac{3}{4} \left[\frac{f''}{f'} \right]^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{2c - c^2}{2f^2} + \frac{a + b + 1 - c}{[1 - f]^2} - \frac{(a + b + 1 - c)^2}{2[1 - f]^2} - \frac{2ab - (a + b + 1 - c)c}{f[1 - f]} \right] f'^2 = K^2 - V(r)$$

onde $f = f(r)$.

Já que a solução geral desta equação diferencial é intratável, devemos encontrar soluções particulares, isto é, funções particulares $f(r)$, $g(r)$ as quais levam à forma da equação de Schrödinger (1.5).

Como um exemplo consideremos a seguinte escolha

$$\frac{[f']^2}{f[1 - f]} = 4\alpha^2 = \frac{-K^2}{ab}$$

onde ab é um parâmetro real arbitrário. Logo integrando obtemos

$$f(r) = \text{sen}^2[\alpha r + \beta]$$

onde β é uma constante de integração. E por (1.7) obtemos para $g(r)$

$$g^2(r) = \frac{2\alpha}{M} \text{sen}^{1-2c}[\alpha r + \beta] \cos^{-1-2(a+b-c)}[\alpha r + \beta]$$

assim

$$\frac{g'(r)}{g(r)} = \alpha \left((a+b-c+1/2) \tan[\alpha r + \beta] - (c-1/2) \cot[\alpha r + \beta] \right)$$

e de (1.4) temos

$$B(r) = K^2 - V(r)$$

logo substituído (1.6) e usando (1.8) nesta expressão obtemos

$$V(r) = \frac{g''(r)}{g(r)} - 2 \left[\frac{g'(r)}{g(r)} \right]^2$$

portanto, temos para o potencial

$$V(r) = \alpha^2 \left[(a+b)^2 + \frac{1/4 - (a+b-c)^2}{\cos^2[\alpha r + \beta]} - \frac{(c-1/2)(c-3/2)}{\sin^2[\alpha r + \beta]} \right].$$

Agora, para obter potenciais independentes da velocidade, escolhamos α e $a+b$ independentes de K , logo

$$a = \gamma + \left(\gamma^2 + K^2/4\alpha^2 \right)^{1/2} = \gamma + \frac{i\kappa}{2\alpha}$$

$$b = \gamma - \left(\gamma^2 + K^2/4\alpha^2 \right)^{1/2} = \gamma - \frac{i\kappa}{2\alpha}$$

então (1.3) se reduz a

$$\varphi''(r) + [K^2 - V(r)] \varphi(r) = 0$$

com $K^2 = \chi^2 - 4\alpha\gamma^2$ e substituindo a e b em $V(r)$ obtemos

$$\varphi''(r) + \left\{ \chi^2 + \alpha^2 \left[\frac{1/4 - (2\gamma-c)^2}{\cos^2[\alpha r + \beta]} - \frac{(c-1/2)(c-2/3)}{\sin^2[\alpha r + \beta]} \right] \right\} \varphi(r) = 0$$

com $0 \leq r < \infty$, a qual é uma equação com potencial de Pöschl-Teller de primeiro tipo.

Na última equação podemos introduzir as seguintes mudanças

$$\varphi(r) = \text{sen}^{1/2}[\alpha r + \beta] \psi(\rho)$$

$$r = 2 \tan^{-1}[\exp(\rho)]$$

e obtemos

$$\psi''(\rho) + \alpha^2 \left[\frac{\{1/4 - (2\gamma - c)^2\}}{\text{senh}^2[\rho]} + \frac{(\chi - 1/2)(\chi + 1/2)}{\cosh^2[\rho]} \right] \psi(\rho) - (c - 1)^2 \psi(\rho) = 0$$

a qual é uma equação de Schrödinger com potencial de Pöschl-Teller de segundo tipo. As equações acima com ambos potenciais, primeiro e segundo tipos, serão resolvidas no capítulo III, pelo método de fatoração.

Agora, para passar ao caso da equação hipergeométrica confluyente, a partir da equação (1.8), tomamos $f(r) \Rightarrow \epsilon f(\epsilon r)$, $b \Rightarrow 1/\epsilon$ e obtemos um potencial geral quando $\epsilon \Rightarrow 0$ da seguinte forma:

$$1.10) \quad \frac{1}{2} \frac{f'''}{f'} - \frac{3}{4} \left[\frac{f''}{f'} \right]^2 + \frac{c}{2} \left(1 - \frac{c}{2} \right) \left[\frac{f'}{f} \right]^2 + \left(\frac{c}{2} - a \right) \frac{[f']^2}{f} - \frac{1}{4} [f']^2 = K^2 - V(r) = B(r)$$

onde $f = f(r)$

Este potencial é igual ao potencial obtido fazendo uma transformação funcional na equação hipergeométrica confluyente da mesma forma que fizemos para a equação hipergeométrica.

Como exemplo consideremos a escolha

$$f(r) = r \quad ; \quad f'(r) = 1 \quad ; \quad f''(r) = f'''(r) = 0$$

logo obtemos

$$B(r) = \frac{1}{r^2} \left[\frac{c}{2} - \frac{c^2}{4} \right] - \frac{1}{8} - \frac{1}{r} \left[a - \frac{c}{2} \right]$$

assim

$$\phi''(r) + \left[-\frac{1}{4} + \left(\frac{c}{2} - a \right) \frac{1}{r} - \left(\frac{c^2 - 2c}{4r^2} \right) \right] \phi(r) = 0$$

Esta é a equação de Whittaker, cuja solução é

$$\phi(r) = \exp[r/2] r^{(c-1)/2} F(a; c; r).$$

onde $F(a; c; r)$ é solução da equação hipergeométrica confluyente.

Agora podemos escolher $f(r) = \exp[\alpha r]$ logo temos que

$$f'(r) = \alpha \exp[\alpha r] ; f''(r) = \alpha^2 \exp[\alpha r] ; f'''(r) = \alpha^3 \exp[\alpha r]$$

portanto substituindo em (1.10) obtemos, com $\alpha = 1$

$$B(r) = -\frac{1}{4} + \left(\frac{c}{2} - \frac{c^2}{4} \right) + \left(\frac{c}{2} - a \right) \exp[r] - \frac{1}{4} \exp[2r]$$

Seja, agora, $s+1/2 = c/2 - a$ e $m = (c/2 - 1/2)$, obtemos

$$B(r) = -m^2 + (s + 1/2) \exp[r] - 1/4 \exp[2r]$$

logo

$$\phi''(r) + \left(-1/4 \exp[2r] + (s + 1/2) \exp[r] - m^2 \right) \phi(r) = 0$$

esta é a equação com potencial Morse, onde $J = 0$ da equação sugerida por Morse⁽²⁰⁾.

CAPÍTULO II

TÉCNICAS DE TEORIA DE GRUPO

Neste capítulo discutiremos os tratamentos algébricos e representações de álgebra de Lie para obter o espectro mecânico-quântico de alguns potenciais solúveis para os quais a equação diferencial de Schrödinger possa ser resolvida analiticamente. No apêndice A, definimos o conceito de álgebra de Lie e as álgebras de Lie envolvidas no presente capítulo.

Passamos agora a discutir o problema geral de construção sobre realizações de uma dada álgebra de Lie e subsequentemente mostramos como a obtenção de representações, pode ser usada para conjuntos sobre formalismos algébricos que permitem a solução completa de um problema de mecânica quântica. Nós damos aqui uma formulação matemática do que entendemos pelas técnicas que permitem desenvolver um tal programa. A saber, as técnicas são: Álgebra Simétrica (AS), Álgebra de Geração Espectral (AGE) e Álgebra Dinâmica (AD).

Por AS, usualmente se entende uma álgebra \mathcal{L} associada a um grupo invariante do sistema quântico considerado. Nós só estudaremos um sistema tendo uma A.S. de tipo maximal, isto é, quando existe uma correspondência um a um entre os níveis de energia do sistema e um conjunto de representações irredutíveis de \mathcal{L} (ver apêndice A). Nosso propósito é encontrar a conexão entre o Hamiltoniano, H , e os operadores de Casimir, C , da A.S., já que as Representações Irredutíveis (R.I) de \mathcal{L} são completamente determinadas fornecendo-se o valor de um número suficiente de operadores de Casimir da álgebra⁽¹⁸⁾, então

$$(2.1) \quad H = f(C_1)$$

Por AGE, para um sistema, entendemos uma álgebra tal que seus geradores possam ser usados para substituir as variáveis canônicas na equação de Schrödinger de tal forma que o espectro de energia é então

conectado ao espectro de geradores simultaneamente diagonalizáveis da álgebra.

Dada uma representação R de uma álgebra de Lie \mathcal{L} em termos de um conjunto irredutível de operadores, consideramos uma combinação linear, com coeficientes reais dos geradores J_1 da álgebra e formalmente encontramos uma expressão contendo o Hamiltoniano, como segue

$$(2.2) \quad G(H - E) = \sum_1 a_1 J_1 - d$$

onde G é um operador não singular arbitrário. Os coeficientes a_1 e d assim como os geradores J_1 podem, em geral, depender da energia. Uma vez que a representação dos geradores J_1 é dada, da equação (2.2), determinamos, em geral, uma família de Hamiltonianos tendo \mathcal{L} como AGE e as mesmas restrições físicas, tal como hermiticidade ou propriedades simétricas particulares serão impostas a H. É possível determinar o espectro discreto por meio de uma transformação de similaridade, para mudar o lado direito da equação (2.2) em uma combinação linear de geradores compactos (operadores com espectro discreto) comutativos. De fato, se este é o caso temos

$$(2.3) \quad TG(H - E)T^{-1} = \sum_1 b_1 J_1^{CD} - d$$

onde os J_1^{CD} são geradores compactos e assim podem ser simultaneamente diagonalizados. Logo, por hipótese, se o conjunto irredutível da representação induzida pelos J_1 's é conhecida, conhecemos, em particular, os autovalores $J_1(r)$ dos operadores J_1^{CD} , assim o espectro discreto de H é determinado, de acordo com a equação (2.3), por

$$(2.4) \quad \sum_1 b_1(E) J_1(r) - d(E) = 0$$

Ainda mais, podemos ver de um ponto de vista mais geral a AGE, fazendo uma analogia entre a equação (2.2) e o novo formalismo. Isto é, escrevendo

$$(2.5) \quad C \varphi_m(y)\psi = G(H - E)\varphi_m(y)\psi$$

onde C é o operador de Casimir da álgebra \mathcal{L} , $\varphi_m(y)$ é uma função que depende só da parte angular, G é um operador arbitrário não singular e a função ψ depende só da variável fisicamente relevante para o sistema cujo hamiltoniano é H , aqui o hamiltoniano H não depende da variável y .

Podemos definir a AD como a menor álgebra contendo a A.S. e A.G.E., isto é, uma vez conhecida a A.S. e a A.G.E. é considerado todo o conjunto de operadores os quais representam estas duas álgebras então as fechamos em uma única álgebra.

Discutiremos agora um exemplo usando o enfoque da AS, o oscilador harmônico em três dimensões, o qual tem como A.S. a álgebra $su(3)$ e ela é de tipo maximal. Nós usaremos os operadores de criação e aniquilação para esquematizar as representações. O problema é o seguinte:

- a) Esquematizar uma representação da álgebra $su(3)$ em termos de pares de operadores de criação e aniquilação.
- b) Identificar estes operadores como funções de observáveis físicos.
- c) Resolver a equação de autovalores para os correspondentes operadores de Casimir.
- d) Expressar o Hamiltoniano do sistema como uma função destes operadores.

O Hamiltoniano do oscilador harmônico em três dimensões, com massa μ , é

$$(2.6) \quad H = \frac{1}{2\mu} p^2 + \frac{\beta}{2\mu} q^2$$

onde β é constante. Da representação de $su(3)$ obtém-se definindo os operadores,

$$(2.7) \quad E_{ij} = R_{ij} - \frac{1}{3} R \delta_{ij} \quad , \quad (i,j = 1,2,3)$$

onde

$$R = \sum_i^3 R_{ii} \quad e$$

$$(2.8) \quad R_{ij} = b_i a_j + \frac{1}{2} \delta_{ij}$$

onde b_i , a_i são os operadores de criação e aniquilação, respectivamente, e eles satisfazem a relações de comutação

$$[a_i, b_j] = \delta_{ij} \quad ; \quad [a_i, a_j] = [b_i, b_j] = 0$$

Pode-se verificar então a relação de comutação

$$[E_{ij} , E_{kl}] = \delta_{jk} E_{il} - \delta_{il} E_{kj}$$

da álgebra $su(3)$.

Agora para estudar o operador de Casimir desta representação definimos as bases standard F_a ($a = 1, \dots, 8$)

$$(2.9) \quad \left\{ \begin{array}{l} F_1 = (E_{12} + E_{21})/2 \quad ; \quad F_2 = (E_{12} - E_{21})/2 \\ F_3 = (E_{11} - E_{22})/2 \quad ; \quad F_4 = (E_{13} + E_{31})/2 \\ F_5 = (E_{13} - E_{31})/2i \quad ; \quad F_6 = (E_{23} + E_{32})/2 \\ F_7 = (E_{23} - E_{32})/2i \quad ; \quad F_8 = \frac{-(3)^{1/2}}{2} E_{33} \end{array} \right.$$

estes operadores satisfazem a relação de comutação

$$[F_a , F_b] = i f_{abc} F_c$$

onde as constantes f_{abc} são totalmente antisimétricas⁽³⁾.

Os operadores de Casimir para a álgebra são

$$C_1 = \sum_{a=1}^8 F_a^2 \quad \text{e} \quad C_2 = \sum_{a,b,c} d_{abc} F_a F_b F_c$$

com d_{abc} completamente simétricos⁽³⁾.

Logo, podemos obter os operadores de Casimir, usando (2.7), (2.8) e (2.9):

$$C_1 = \frac{1}{3} \left[\left(\sum_{i=1}^3 b_{i1} a_i \right) \left(\sum_{i=1}^3 b_{i1} a_i + 3 \right) \right]$$

Agora escolhendo os operadores b_i e a_i em termos das variáveis posição e momento, como

$$a_i = \frac{1}{(2\beta)^{1/2}} (p_i - i\beta q_i)$$

$$b_i = \frac{1}{(2\beta)^{1/2}} (p_i + i\beta q_i) = a_i^+$$

obtemos

$$C_1 = N (N + 3) / 3$$

onde N é o operador numérico, dado por

$$N = \sum_{i=1}^3 a_i^+ a_i$$

e, por outro lado, os autovalores de N são os inteiros não negativos, logo o espectro de C_1 é dado pelos autovalores

$$(2.10) \quad C_1(n) = n (n + 3) / 3 \quad ; \quad (n = 0, 1, \dots)$$

e da mesma forma obtém-se para C_2

$$C_2 = N (N + 3) (2N + 3) / 18$$

$$C_2(n) = n (n + 3) (2n + 3) / 18 ; (n = 0, 1, \dots)$$

Falta ainda expressar o Hamiltoniano como uma função destes operadores, para tanto escrevemos

$$N = \frac{1}{2\beta} p^2 + \frac{\beta}{2} q^2 - \frac{3}{2}$$

logo

$$12C_1 = \frac{1}{\beta^2} p^4 + q^2 p^2 + \beta^2 q^4 - 9$$

e de (2.6), obtemos

$$H^2 = (p^4 + \beta^2 q^2 p^2 + \beta^2 p^2 q^2 + \beta^4 q^4) / 4\mu^2$$

portanto

$$(2.11) \quad H^2 = \left[\frac{\beta}{2\mu} \right]^2 (12C_1 + 9) .$$

E, como $H^2 \varphi_n = E_n^2 \varphi_n$ obtemos a partir de (2.10) e (2.11) o espectro de energia para o sistema mecânico quântico considerado, ou seja

$$E_n = \beta (n + 3/2) / \mu$$

Da mesma forma pode-se tratar o problema do átomo de hidrogênio, mas acontece que a representação explícita da A.S. para obter (2.1),

não pode ser construída de modo fácil, através de representações equivalentes da álgebra abstrata⁽¹¹⁾. Então os geradores L's da A.S. serão conectados com os operadores L's de outra representação da álgebra por uma transformação unitária U que não pertence ao grupo, logo os operadores de Casimir das duas representações não terão a mesma expressão e em lugar da equação (2.1) teremos uma relação da forma

$$H = U^\dagger f(C'_1)U$$

onde C'_1 's são os operadores de Casimir da representação principal⁽²⁾.

Agora passamos a aplicar a AGE como técnica para resolver problemas concretos de mecânica quântica.

Começamos considerando a representação da álgebra de Lie so(2,1)

$$(2.12) \quad \left\{ \begin{array}{l} J_0 = (S + T)/4 \\ J_1 = (S - T)/4 \\ J_2 = -i R / 2 \end{array} \right.$$

onde $S = a^2 + \rho T^{-1}$; $T = b^2$; $R = ab + \frac{1}{2}$; $[a,b] = 1$

$$[J_0, J_1] = iJ_2 \quad ; \quad [J_2, J_0] = iJ_1 \quad ; \quad [J_2, J_1] = iJ_0$$

e o operador de Casimir definido por

$$C = J_0^2 - J_1^2 - J_2^2$$

é igual a $c = -3/16 - \rho/4$

Dada então, a representação em termos dos operadores criação e aniquilação a, b expressamos estes operadores em termos da posição relativa e operadores momenta de duas partículas sem spin.

Supomos que b é uma função só do módulo q do vetor posição, em três dimensões

$$b = ig(q)$$

tal que $g(q)$ é invertível. Então podemos tomar

$$a = f(q) \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} + j(q)$$

onde

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{p} = q_1 p_1 + q_2 p_2 + q_3 p_3$$

assim calculando os comutadores

$$[f(q)q_1 p_1, ig(q)] = f(q)q_1 \hbar \frac{d}{dq_1} g(q)$$

$$[f(q)q_2 p_2, ig(q)] = f(q)q_2 \hbar \frac{d}{dq_2} g(q)$$

$$[f(q)q_3 p_3, ig(q)] = f(q)q_3 \hbar \frac{d}{dq_3} g(q)$$

e usando o fato que $[a, b] = 1$, obtemos

$$[a, b] = f(q)\hbar q g'(q) = 1$$

logo

$$f(q) = [q g'(q)]^{-1}$$

onde $\hbar = 1$ e $j(q)$ é uma função a ser determinada convenientemente, e a (') indica a primeira derivada em relação a q .

Também obtém-se expressões para S, T e R como segue:

$$\begin{aligned} S &= a^2 + \rho T^{-1} = \left(f(q) \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} + j(q) \right)^2 - \rho/g(q) \\ &= \left(qg'(q) \right)^{-2} \left(\mathbf{q} \cdot \mathbf{p} \right)^2 + 2 \left(qg'(q) \right) \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} j(q) \\ &\quad + \left(j(q) \right)^2 - \rho/g^2(q) \end{aligned}$$

e usando a identidade

$$(q \cdot p)^2 = q^2 p^2 + iq \cdot p - L^2$$

obtemos

$$S = (g'(q))^{-2} p^2 + [i/qg'(q)] \{ 2/qg'(q) + g''(q)/(g'(q))^2 \} q \cdot p \\ - L^2 / (qg'(q))^2 - ij'(q)/g'(q) + (j(q)) - \rho/g^2(q)$$

$$R = (ig(q)/qg'(q))q \cdot p + ig(q)j(q) + 1/2$$

$$T = -g^2(q)$$

Escolhendo, agora, $j(q)$ tal que o termo $q \cdot p$ de S desapareça, temos

$$j(q) = -i/2 \{ 2/qg'(q) + g''(q)/(g'(q))^2 \},$$

e daí obtemos

$$S = (g'(q))^{-2} p^2 - (qg'(q))^{-2} L^2 - 1/2 g'''(q) (g'(q))^{-3} + \\ + 3/4 (g''(q))^2 (g'(q))^{-4} - \rho (g(q))^{-2}$$

$$R = (ig(q)/qg'(q))q \cdot p + g(q)/2 \{ [2/qg'(q)] + g''(q)/(g'(q))^2 \} + \\ + 1/2$$

$$T = -g^2(q)$$

estas equações conduzem à representação geral da álgebra $so(2,1)$ por meio das equações (2.12).

Introduzindo a função $h(q) = g^2(q)/4$ e usando as equações acima, com (2.12) e colocando $\lambda = -\rho/16$ obtemos

$$(2.13) \quad J_0 = \\ = \frac{1}{4} \frac{h}{h'^2} p^2 - \frac{1}{8} \frac{h'''}{h'^3} h + \frac{3}{16} \frac{[h'']^2}{[h']^4} h - \left[\lambda - \frac{3}{16} \right] \frac{1}{h} \pm h$$

onde $h = h(q)$ e J_2 se obtêm usando a relação $J_2 = -i[J_0, J_1]$.

Agora já temos a representação geral de $so(2,1)$, logo podemos escrever, de acordo com a equação (2.2)

$$(2.14) \quad 2\alpha(J_0 + J_1) - 2\beta(J_0 - J_1) + \delta = G(q) \left[\frac{p^2}{2m} + V(q) - E \right]$$

e, usando (2.13) e escolhendo $G(q) = 2m\alpha \frac{h(q)}{[h'(q)]^2}$ para ter coeficientes iguais dos termos em p^2 , em ambos os lados de (2.14), obtemos

$$(2.15) \quad \frac{h'''}{2h'} - \frac{3}{4} \left[\frac{h''}{h'} \right]^2 - \left[4\lambda(L^2, E) - \frac{3}{16} \right] \left[\frac{h'}{h} \right]^2 + \frac{4\beta}{\alpha} (h')^2 - \frac{\delta}{\alpha} \frac{[h']^2}{h} + \frac{L^2}{q^2} = 2m[E - V(q)]$$

desta equação podemos achar o potencial $V(q)$ escolhendo uma função $h(q)$ particular. O problema chave então, consiste em isolar o lado esquerdo de (2.15) em termos que não dependam de q e possa assim ser identificado com o termo $2mE$ do lado direito.

Escolhamos, por exemplo, $h(q) = q^2$; $\delta = -\frac{m\alpha E}{2}$; $\beta = -\frac{\alpha m\omega^2}{8}$

$$e \quad \lambda(L^2) = \frac{L^2}{16} + \frac{m\gamma}{8} \quad ; \quad \alpha \text{ arbitrário} \quad ; \quad \alpha, \beta < 0$$

a qual nos conduz à

$$V(q) = \omega^2 q^2 + \frac{\gamma}{q}$$

que é um potencial tipo oscilador harmônico com barreira.

$$\text{Escolhamos agora, } h(q) = \exp[-a(q-q_0)] \quad ; \quad \delta = \frac{4mbD\alpha}{a^2}$$

$$\beta = -\frac{m\alpha D}{2a^2} \quad ; \quad \lambda(E) = -\frac{mE}{128a^2} \quad ; \quad \alpha \text{ arbitrário; } a > 0$$

onde a, b, D são constantes arbitrárias, com a condição $L^2 = 0$ obtemos

$$V(q) = D \left(\exp[-2a(q - q_0)] - 2b \exp[-a(q - q_0)] \right).$$

o qual é um potencial de Morse, igual ao potencial obtido em (1.10) com $a = 1$; $q - q_0 = r$; $D = -1/4$; $b = 2s + 1$

Passemos agora a discutir o tratamento geral, usando a fórmula (2.5). Começamos então por considerar uma representação geral da álgebra $so(2,1)$, introduzindo os três operadores

$$(2.16) \quad \begin{cases} J_3 = -i \frac{\partial}{\partial y} \\ J^\pm = \exp[\pm iy] \left[A_\pm(r) \frac{\partial}{\partial r} - iB_\pm(r) \frac{\partial}{\partial y} + C_\pm(r) \right] \end{cases}$$

que satisfazem às relações

$$[J_3, J^\pm] = \pm J^\pm, \quad [J^+, J^-] = 2J_3$$

e o operador de Casimir é dado por:

$$(2.17) \quad C = J^+ J^- + J_3^2 - J_3.$$

Da relação $[J^+, J^-] = 2J_3$ obtemos as seguintes equações diferenciais

$$(2.18) \quad \begin{cases} A_- A'_+ - A_+ A'_- + A_- B_+ + B_- A_+ = 0 \\ A_+ B'_- - A_- B'_+ - 2B_+ B_- = 2 \\ A_- C'_+ - A_+ C'_- + B_+ C_- + B_- C_+ = 0 \end{cases}$$

onde (') denota a diferenciação em relação a r.

A partir destas últimas equações, podemos obter soluções escolhendo $A_-(r) = -A_+(r)$ logo obtemos que $B_+(r) = B_-(r)$ e agora substituindo estas igualdades na segunda equação de (2.18) obtemos

$$(2.19) \quad A_+(r) = [1 + B'_+(r)] / B'_+(r)$$

e substituindo na terceira equação de (2.18) resulta

$$C_-(r) = -C_+(r) + 2q[1 + B_+^2(r)]^{1/2}$$

onde q é uma constante arbitrária, ou

$$(2.20) \quad C_{\pm}(r) = q[1 + B_+^2(r)]^{1/2} + D(r)$$

portanto (2.16) fica

$$(2.21) \quad \begin{cases} J_3 = -i \frac{\partial}{\partial y} \\ J^{\pm} = \exp[\pm iy] \\ \cdot \left[\pm \frac{1 + B^2(r)}{B'(r)} \frac{\partial}{\partial r} - iB(r) \frac{\partial}{\partial y} + q[1 + B^2(r)]^{1/2} \pm D(r) \right] \end{cases}$$

onde $B(r) = B_+(r)$.

Comparando com o operador de Casimir (2.17) obtemos

$$(2.22) \quad C = - \left[\frac{1 + B^2}{B'} \right]^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1 + B^2}{B'} \left[\frac{(1 + B^2)}{(B')^2} B'' - 2D - B \right] \frac{\partial}{\partial r} - \\ - (1 + B^2) \frac{\partial^2}{\partial y^2} - 2iqB[1 + B^2]^{1/2} \frac{\partial}{\partial y} + (1 + B^2)q^2 - D^2 - \\ - \frac{1 + B^2}{B'} D' + BD.$$

Por outro lado o hamiltoniano é

$$H = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2\mu(E - V) - \frac{l(l+1)}{r^2}$$

logo para escrever a relação (2.5) o termo contendo $\partial/\partial r$ tem que desaparecer e devemos ter

$$(2.23) \quad D(r) = \frac{1}{2} \left[\frac{1 + B^2}{(B')^2} B'' - B \right]$$

Introduzindo agora, uma nova função $f(r)$ da forma:

$$(2.24) \quad B(r) = \frac{i}{2} \frac{1 + f(r)}{[f(r)]^{1/2}}$$

e substituindo (2.24) e (2.23) em (2.22) obtém-se

$$(2.25) \quad C = \frac{f(1-f)^2}{(f')^2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2} \frac{f'''}{f'} - \frac{3}{4} \left[\frac{f'''}{f'} \right]^2 - \frac{1}{2} \frac{(f')^2}{(1-f)^2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{4} \left[\frac{\partial^2}{\partial y^2} - q^2 + 2iq \frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{2} \right] \frac{(f')^2}{f^2} + \left[iq \frac{\partial}{\partial y} - \frac{1}{2} \right] \frac{(f')^2}{f[1+f]} \right\}$$

e desta equação segue que

$$(2.26) \quad [C - u(u+1)] \exp[imy] \psi(r) = \frac{f[1-f]^2}{(f')^2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \frac{f'''}{f'} - \frac{3}{4} \left[\frac{f'''}{f'} \right]^2 + \frac{1}{4} \left[\frac{1}{2} - (m+q)^2 \right] \frac{(f')^2}{f^2} - \left[\frac{1}{2} + qm + \right. \right. \\ \left. \left. + u(u+1) \right] \frac{(f')^2}{f[1-f]} - \left[\frac{1}{2} + u(u+1) \right] \frac{(f')^2}{(1-f)^2} \right\} \exp[imy] \psi(r)$$

Impondo agora que

$$(2.27) \quad [C - u(u+1)] \exp[imy] \psi(r) = \frac{f[1-f]^2}{(f')^2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \right. \\ \left. + 2\mu(E - V) - \frac{1(1+1)}{r^2} \right\} \exp[imy] \psi(r)$$

obtemos

$$(2.28) \quad \frac{1}{2} \frac{f'''}{f'} - \frac{3}{4} \left[\frac{f'''}{f'} \right]^2 + \frac{1}{4} \left[\frac{1}{2} - (m+q)^2 \right] \left[\frac{f'}{f} \right]^2 - \left[\frac{1}{2} + \right. \\ \left. + qm + u(u+1) \right] \frac{(f')^2}{f[1-f]} - \left[\frac{1}{2} + u(u+1) \right] \frac{(f')^2}{(1-f)^2} = \\ = 2\mu(E - V) - \frac{1(1+1)}{r^2}$$

A equação (2.28) coincide identicamente com a equação (1.8) com:

$$1/2 - (m + q)^2 = 2c - c^2$$

$$1/2 + qm + u(u + 1) = 2ab - (a+b + 1 - c)c$$

$$1/2 + u(u + 1) = 1/2[(a+ b + 1 - c)^2 - (a + b + 1 - c)]$$

E agora, novamente como fizemos no primeiro capítulo, por um processo de limite obtemos a equação de Schrödinger com um potencial independente da velocidade na forma mais geral, relativo às funções hipergeométricas confluentes, portanto a nova representação (2.26) da álgebra $so(2,1)$ é a mais geral, isto é, já não precisamos da representação (2.12) para obter potenciais de tal forma que a equação de Schrödinger tenha solução em função das funções hipergeométricas confluentes.

Os resultados então, para o problema de construir potenciais independentes da velocidade, a partir do ponto de vista da teoria das equações diferenciais, tratado no capítulo I, para os quais a equação de Schrödinger possa ser reduzida às equações hipergeométricas ou hipergeométricas confluentes, são idênticos aos resultados obtidos com as técnicas de teoria de grupo.

O MÉTODO DE FATORAÇÃO

O método clássico para solucionar um problema de autovalores consiste em encontrar a solução geral da equação diferencial e então determinar os possíveis valores do parâmetro λ tal que satisfaçam as condições de fronteira e daí obter as autofunções.

Neste capítulo discutiremos o método de fatoração⁽¹⁰⁾ o qual nos capacita responder, de um modo direto, questões sobre problemas de autovalores. Tal método considera um par de equações diferenciais de primeira ordem no lugar de uma equação diferencial de segunda ordem com as condições de contorno.

A equação a ser resolvida, na forma standard, é dada por

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

onde $r(x,m)$ é uma função que caracteriza um particular problema. Suporemos m como sendo um inteiro não negativo que emerge do processo de separação de variáveis onde seus valores são restritos pelas condições de contorno.

O método de fatoração trata a equação diferencial de primeira ordem diretamente ou substitui a equação diferencial de segunda ordem por um par de equações de primeira ordem, com a seguinte forma

$$\left[k(x,m+1) - \frac{d}{dx} \right] Y_1^m = \left[\lambda - L(m+1) \right]^{1/2} Y_1^{m+1}$$

$$\left[k(x,m) + \frac{d}{dx} \right] Y_1^m = \left[\lambda - L(m) \right]^{1/2} Y_1^{m-1}$$

onde $k(x,m)$ e $L(m)$ estão associados a um dado $r(x,m)$ e Y_1^m é a função

$y(x)$ normalizada, no sentido de $\int |y_1^m|^2 = 1$.

Existem somente seis tipos de fatoração⁽¹⁰⁾ os quais não são

independentes. Uma vez encontrada a fatoração correta, os autovalores e as correspondentes autofunções podem ser obtidos quase que imediatamente.

Nosso procedimento será transformar a equação diferencial considerada na forma padrão, equação (3.1), onde $m = m_0+1, m_0+2, \dots$ tomando $m_0 = 0$. Tal transformação é possível se, na forma original

$$\frac{d}{d\vartheta} \left[P \frac{dP}{d\vartheta} \right] + qP + \lambda \rho P = 0$$

as funções p, ρ são não negativas e ρ/p existe em quase todas partes. A transformação que conecta estas equações é

$$Y = (p\rho)^{1/2}P, \quad dx = (\rho/p)^{1/2}d\vartheta$$

Dizemos que a equação (3.1) pode ser fatorada se esta pode ser substituída por cada uma das seguintes equações

$$(3.2a) \quad {}^+H^{m+1} {}^-H^{m+1}y(x, \lambda, m) = (\lambda - L(m+1)) y(x, \lambda, m)$$

$$(3.2b) \quad {}^-H^m {}^+H^m y(x, \lambda, m) = (\lambda - L(m)) y(x, \lambda, m)$$

onde ${}^\pm H^m = k(x, m) \pm (d/dx)$

Notemos que (3.2a) pode ser obtida de (3.2b) comutando o operador H e trocando m por $m+1$ exceto na função $y(x, \lambda, m)$.

A idéia fundamental do método de fatoração pode agora ser estabelecida através dos cinco teoremas seguintes, apresentados sem prova⁽¹⁰⁾.

TEOREMA I :

Se $y(\lambda, m)$ é uma solução de nossa equação diferencial (3.1) e se ela for fatorável então

$$(3.3a) \quad y(\lambda, m+1) = {}^-H^{m+1}y(\lambda, m)$$

$$(3.3b) \quad y(\lambda, m-1) = {}^+H^m y(\lambda, m)$$

são também soluções correspondentes ao mesmo λ mas para os diferentes m 's sugeridos pela própria notação.

Se nós temos uma solução, podemos, pelo teorema I, usar o operador H para encontrar outras soluções, e continuando o processo, obtemos uma escada de soluções pertencentes a um λ fixo. Agora podemos, então,

interpretar as equações (3.2) como: Indo um passo acima da escada e outro passo abaixo (ou vice versa) chegamos à solução com a qual começamos, mas multiplicada por $\lambda - L(m+1)$ (ou $\lambda - L(m)$). Passando através de (3.3) podemos alcançar uma solução que é identicamente nula.

TEOREMA II:

Se φ e f são funções de quadrado integrável de \mathbb{R} em \mathbb{R} tal que, φf são nulas nos extremos do intervalo (a,b) e os integrandos abaixo são contínuos no intervalo, então

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

Este teorema afirma que os operadores ${}^{-}H$, ${}^{+}H$ são mutuamente adjuntos, isto é, em termos de produto interno

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

TEOREMA III:

Se $y(\lambda, m)$ é quadraticamente integrável sobre todo x e $L(m)$ é uma função crescente de m ($m > 0$), então o operador ${}^{-}H^{m+1}$ produz uma função, a qual é também de quadrado integrável, e nula nos pontos extremos. Se $L(m)$ é uma função decrescente de m ($m > 0$), então o operador ${}^{+}H^m$ produz uma função de quadrado integrável e nula nos pontos extremos.

Passemos agora a discutir a existência de soluções a partir das condições sobre λ . Dividiremos nosso problema em duas classes:

CLASSE I:

Será caracterizada pelo fato de $L(m)$ ser uma função crescente de m . Veremos que esta situação usualmente conduz a uma escada finita de soluções pertencentes a $m=0,1,\dots,l$ para cada conjunto discreto de valores $\lambda_i (i=0,1,2,\dots)$.

CLASSE II:

As soluções aparecerão quando $L(m)$ for uma função decrescente de m . Usualmente obtemos uma infinidade de soluções pertencentes a

$m=1, 1+1, 1+2, \dots$ para cada valor $\lambda_1 (i=0, 1, 2, \dots)$ de λ .

Em cada classe ao final, $y(\lambda_1, i)$, da escada pode ser obtida por uma quadratura simples e as outras soluções por meio da equação (3.3). Nestes casos onde λ é não discreto, utilizamos a fórmula de recorrência, equação (3.3), mas não temos correspondência do início da escada de funções $y(\lambda_1, i)$. É também possível que $L(m)$ seja uma constante, e neste caso temos de novo só a fórmula de recorrência. A equação de Bessel nos leva a um exemplo importante desta possibilidade⁽¹⁰⁾.

Os seguintes teoremas determinam λ_1 como uma função de i .

TEOREMA IV:

Quando $L(m)$ é uma função estritamente crescente do inteiro m para $0 < m \leq M$ e $\lambda \leq$ o maior de $L(M), L(M+1)$, então uma condição necessária para a existência da solução quadraticamente integrável é que $\lambda = \lambda_1 = L(i+1)$, onde i é um inteiro e $m=0, 1, 2, \dots, i$ e usualmente $M = \infty$ e $L(M) = \infty$.

Se $L(m)$ é uma função estritamente decrescente do inteiro m , para $0 \leq m \leq M$ e $\lambda \leq L(0)$ então uma condição necessária para a existência da solução quadraticamente integrável é que $\lambda = \lambda_1 = L(i)$ onde i é um inteiro e $m = i, i+1, i+2, \dots$.

TEOREMA V:

O operador H definido abaixo preserva a normalização das autofunções quando estas funções são normalizáveis.

O teorema III garante que podemos combinar as funções, para ter nosso operador preservando não só a integrabilidade quadrática, mas também a normalização das autofunções.

Escrevemos, a partir da equação (3.2)

$${}^+H_1^{m+1} - {}^-H_1^{m+1} Y_1^m = Y_1^m$$

$${}^-H_1^m + {}^+H_1^m Y_1^m = Y_1^m$$

e em vez da equação (3.3) escrevemos

$$(3.4a) \quad Y_1^{m+1} = {}^{-}H_1^{m+1} Y_1^m$$

$$(3.4b) \quad Y_1^{m-1} = {}^{+}H_1^m Y_1^m$$

$$\text{onde } {}^{\pm}H_1^m = \begin{cases} (L(i+1)-L(m))^{-1/2} \pm H^m & \text{classe I} \\ (L(i)-L(m))^{-1/2} \pm H^m & \text{classe II} \end{cases}$$

e onde a dependência das soluções sobre i é sugerida pela nova notação.

Portanto se Y_1^1 é normalizável, as outras Y_1^m também o serão pelo teorema V.

Passemos agora a discutir as soluções de (3.3). Para tanto, escrevemos os autovalores e autofunções de uma equação uma vez que esta equação possui fatoração, isto é, uma vez que $k(x,m)$ e $L(m)$ correspondentes a um dado $r(x,m)$ são conhecidos.

Consideremos o problema de classe I. Aqui $L(m)$ é uma função crescente de m e estamos interessados só no caso em que $\lambda \leq$ o maior de $L(M), L(M+1)$.

Os autovalores, a partir do teorema IV são

$$\lambda_1 = L(i+1) \quad ; \quad m=0,1,2,\dots,i$$

ainda mais, da demonstração⁽¹⁰⁾ do teorema IV temos que

$$\left(k(x,i+1) - \frac{d}{dx} \right) Y_1^i = 0$$

é condição necessária para a existência de autofunções normalizáveis.

Então temos que

$$(3.5) \quad Y_1^i = C \exp \left(\int k(x,i+1) dx \right)$$

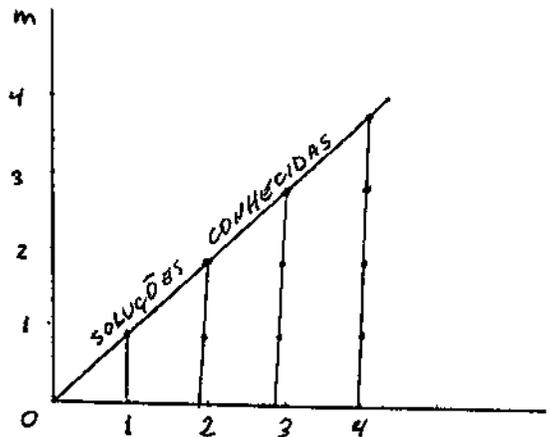
onde C é uma constante a ser determinada, se possível, pela condição

$$\int_a^b (Y_1^l)^2 dx = 1$$

As outras soluções normalizadas são, então, dadas por

$$(3.6) \quad Y_1^{m-1} = {}^+H_1^m Y_1^m = (L(m+1)-L(m))^{-1/2} \left(k(x,m) + \frac{d}{dx} \right) Y_1^m.$$

A figura seguinte representa graficamente a situação usual.



Cada ponto da figura representa uma solução de classe I. As soluções conhecidas são obtidas a partir de (3.5), as outras de (3.6).

As soluções de nossa equação (3.1) dependem de dois parâmetros l, m . A cada par de valores (l, m) correspondem duas soluções. Se uma solução é bem comportada, esta é representada por um ponto na figura. Só para $l \geq m$ pode-se satisfazer a condição de fronteira já que só então $L(l+1) - L(m+1) \geq 0$. As soluções ao longo da linha $m = l$ são dadas imediatamente por uma quadratura simples de (3.5). Depois cada uma destas soluções é levada por uma escada a outras soluções pertencentes ao mesmo $\lambda = L(l+1)$. Elas são obtidas através de (3.6). Da mesma forma trata-se o problema de classe II ⁽¹⁰⁾.

Discutiremos agora as técnicas de fatoração. Voltamos então ao problema de encontrar uma fatoração. Para tanto precisamos conhecer $k(x, m)$ e $L(m)$ correspondentes a um dado $r(x, m)$. Temos seis possíveis tipos de fatoração, logo, quando estes seis possíveis tipos são exibidos, o problema de fatoração é reduzido a identificação de $r(x, m)$

dado como um caso especial de um destes tipos gerais.

De (3.2) temos

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

e comparando com a equação (3.1) temos

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

logo temos

$$(3.7) \quad \begin{cases} k^2(x, m+1) + \frac{d}{dx} k(x, m+1) + L(m+1) = -r(x, m) \\ k^2(x, m) - \frac{d}{dx} k(x, m) + L(m) = -r(x, m) \end{cases}$$

Subtraindo as equações acima obtemos

$$(3.8) \quad k^2(x, m+1) - k^2(x, m) + \frac{d}{dx} k(x, m+1) + \frac{d}{dx} k(x, m) = L(m) - L(m+1)$$

esta é uma condição necessária a ser satisfeita por $k(x, m)$ e $L(m)$. Ela é também suficiente já que qualquer $k(x, m)$ e $L(m)$ satisfazendo esta equação leva, através da equação (3.7) a uma função $r(x, m)$ e logo a uma equação a qual tem fatoração conhecida.

Agora as funções $k(x, m)$ e $L(m)$ que satisfazem (3.8) podem ser do tipo $k(x, m) = f(m)$ e $L(m) = -f^2(m)$ com f uma função qualquer de m , então de (3.7) temos $r(x, m) = 0$ e logo (3.1) fica

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

cuja solução são combinações lineares de $\text{sen} \lambda^{1/2} x$ e $\text{cos} \lambda^{1/2} x$.

Uma outra maneira é começar com uma solução teste do tipo

$$(3.9) \quad K(x,m) = k_0 + m k_1$$

com k_0, k_1 funções só de x . Substituindo em (3.8) obtemos

$$(3.10) \quad \left((m+1) (k_1^2 + k_1') + 2(m+1)(k_0 k_1 + k_0') \right) - \left(m^2 (k_1^2 + k_1') + 2m(k_0 k_1 + k_0') \right) = L(m) - L(m+1)$$

onde a linha (') significa diferenciação.

Logo de (3.10) a solução mais geral para $L(m)$ é

$$L(m) = - m^2(k_1^2 + k_1') - 2m(k_0 k_1 + k_0') + \tilde{I}$$

onde \tilde{I} é uma função de m e x de período 1 em m . Mas nós estamos interessado só nos valores de $L(m)$ para valores inteiros de m assim podemos tomar $\tilde{I} = f(x)$ com $f(x)$ uma função arbitrária de x . Logo, como $L(m)$ é só função de m podemos tomar, sem perda de generalidade, $f(x) = 0$ e

$$(3.11a) \quad k_1^2 + k_1' = - a^2$$

$$(3.11b) \quad k_0' + k_0 k_1 = \begin{cases} -ca^2 & \text{se } a \neq 0 \\ b & \text{se } a = 0 \end{cases}$$

com a, b, c constantes.

Portanto

$$(3.12) \quad L(m) = \begin{cases} a^2 m^2 + 2ca^2 m & \text{se } a \neq 0 \\ -2bm & \text{se } a = 0 \end{cases}$$

as soluções de (3.11) são: se $a \neq 0$

$$(A) \quad \begin{aligned} k_1 &= a \cot[a(x+p)] \\ k_0 &= ca \cot[a(x+p)] + d / \sin[a(x+p)] \end{aligned}$$

$$(B) \quad k_1 = ia \quad ; \quad k_0 = ica + d \exp[-iax]$$

ou, se $a = 0$

$$(C) \quad k_1 = 1/x \quad ; \quad k_0 = bx/2 + d/x$$

$$(D) \quad k_1 = 0 \quad ; \quad k_0 = bx/d$$

onde d, p são constantes quaisquer.

Os quatro resultados não são independentes ; B, C, e D podem ser considerados casos limites de A. Qualquer solução de A a D determina uma função $k(x, m)$, $L(m)$ e $r(x, m)$ através de (3.9), (3.12) e (3.7) respectivamente. Podemos, como segundo caso, supor agora $k(x, m) = k_0 + mk_1 + m^2k_2$, o qual não leva a nada novo⁽¹⁰⁾. Também podemos ter $k(x, m) = k_{-1}/m + k_0 + mk_1$ o qual leva as fatorações tipo (E) e (F), isto é

$$(E) \quad k_1 = a \cot a(x+p) \quad ; \quad k_0 = 0 \quad ; \quad k_{-1} = q$$

$$(F) \quad k_1 = 1/x \quad ; \quad k_0 = 0 \quad ; \quad k_{-1} = q$$

A partir de (3.7), (3.9), (3.12) e fatoração tipo (A) obtemos o primeiro tipo de fatoração geral, correspondente a

$$(3.13) \quad r(x, m) = - \left(\frac{a^2(m+c)(m+c+1) + d^2 + 2ad(m+c+1/2) \cos[a(x+p)]}{\sin^2[a(x+p)]} \right)$$

e a fatoração é dada por

$$(3.14) \quad \begin{cases} k(x, m) = (m+c)a \cot[a(x+p)] + d/\sin[a(x+p)] \\ L(m) = a^2(m+c)^2 \end{cases}$$

Da expressão para (3.13) obtém-se, substituindo as soluções de tipo (A) em (3.9) e em $L(m)$ colocando $\tilde{c} = a^2 c^2$ em vez de zero.

Passemos agora a discutir o caso da função hipergeométrica.

A equação diferencial satisfeita pela função hipergeométrica $F(a, b; c; z)$ é

$$(3.15) \quad z(1-z) \frac{d^2}{dz^2} F + (c - (a+b+1)z) \frac{d}{dz} F - abF = 0$$

Nós fatoraremos esta equação de quatro diferentes modos os quais geram casos particulares da equação hipergeométrica

A equação (3.15) pode ser colocada na forma standard por meio da

substituição

$$z = \text{sen}^2 \rho$$

$$F = \text{sen}^{-c+1/2} \rho \cos^{-a-b+c-1/2} \rho V$$

e obtemos

$$\frac{d^2}{d\rho^2} V - \frac{(c-3/2)(c-1/2)}{\text{sen}^2 \rho} V - \frac{(a+b-c-1/2)(a+b-c+1/2)}{\cos^2 \rho} V + (a-b)^2 V = 0$$

Se, agora, introduzimos o parâmetro m , fazendo $c = c+n$ e $a+b = a+b+2n$, obtemos

$$\frac{d^2}{dx^2} V - \frac{(n+c-3/2)(n+c-1/2)}{\text{sen}^2 \rho} V - \frac{(n+a+b-c-1/2)(n+a+b-c+1/2)}{\cos^2 \rho} V + (a-b)^2 V = 0$$

e sendo $\rho = \alpha(r-r_0)$; $V(\rho) = \Psi(r)$

obtemos

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi - \frac{\alpha^2(n+c-3/2)(n+c-1/2)}{\text{sen}^2[\alpha(r-r_0)]} \Psi - \frac{\alpha^2(n+a+b-c-1/2)(n+a+b-c+1/2)}{\cos^2[\alpha(r-r_0)]} \Psi + \alpha^2(a-b)^2 \Psi = 0$$

Agora, identifiquemos este potencial com o potencial de Pösch-Teller de primeiro⁽¹⁰⁾ tipo obtendo

$$(m+g)(m+g+1) = (n+c-3/2)(n+c-1/2)$$

$$(m-g)(m-g+1) = (n+a+b-c-1/2)(n+a+b-c+1/2)$$

assim temos para g e m

$$g = c - a/2 - b/2 - 1/2 ; \quad m = n + a/2 + b/2 - 1/2$$

logo

$$k(x,m) = (m+g)\alpha \cot[\alpha(r-r_0)] - (m-g)\alpha \tan[\alpha(r-r_0)]$$

$$L(m) = 4\alpha^2 m^2$$

e para as autofunções usando (3.5) obtemos

$$\Psi_1^l = \left(\frac{2\alpha \Gamma(2l+3)}{\Gamma(1+3/2+g) \Gamma(1+3/2-g)} \right)^{1/2} \sin^{l+1+g}[\alpha(r-r_0)] \cos^{l-g+1}[\alpha(r-r_0)]$$

$$\Psi_1^m = \frac{1}{2\alpha} \left((1+2+m)(1-m) \right)^{-1/2} \left(k(x,m) + \frac{d}{dx} \right) \Psi_1^{m+1}$$

com $m + 3/2 > |g|$ e g, m são dados acima.

Em forma similar obtém-se as outras três fatorações da equação hipergeométrica⁽¹⁰⁾.

A partir de (3.7), (3.9), (3.12) e fatoração tipo(B) obtemos o segundo tipo de fatoração geral.

Escrevendo a em vez de $-ia$ e somando $-a^2 c^2$ a $L(m)$ temos

$$(3.16) \quad r(x,m) = -d^2 \exp(2ax) + 2ad(m+c+1/2) \exp(ax)$$

$$(3.17) \quad \begin{cases} k(x,m) = d \exp(ax) - m - c \\ L(m) = -a^2(m+c)^2 \end{cases}$$

Passamos agora a discutir um exemplo deste tipo, ou seja, tipo B, ou ainda, a função hipergeométrica confluenta.

A equação diferencial satisfeita pela função hipergeométrica confluenta, $F(a;c;z)$, é

$$z \frac{d^2}{dz^2} F + (c-z) \frac{d}{dz} F - a F = 0$$

Introduzindo-se $F(a,c;z) = \exp(-z/2) z^{-(c-1)/2} W(z)$ obtemos

$$(3.18) \quad \frac{d^2}{dx^2} W + \left(\frac{-1}{4} + \frac{[s + 1/2]}{z} + \frac{[1/4 - m^2]}{z^2} \right) W = 0$$

onde $s = \frac{c-1-2a}{2}$; $m = \frac{c-1}{2}$; $0 \leq z < \infty$

que é a equação de Whittaker .

A substituição $z=\exp(x)$; $W(z)=\exp(x/z)U(x)$ conduz (3.18) à forma normal desejada :

$$\frac{d^2}{dx^2} U + \left(-\exp(2x)/4 + (s+1/2) \exp(x) \right) U - m^2 U = 0$$

com $-\infty < x < \infty$.

Nós reconhecemos este problema como tipo (B) com $a = 1$, $c = 0$, $d = 1/2$ e com m , λ substituídos por s , $-m^2$ respectivamente, assim

$$k(x,s) = (\exp(x))/2 - s$$

$$L(s) = -s^2$$

$L(s)$ é uma função decrescente de s , então pelo teorema IV $m \leq 1$, logo consideremos m como o menor valor de s Agora, olhemos para as soluções quadraticamente integráveis

$$U_m^m, U_m^{m+1}, \dots, U_m^{m+1}$$

estas soluções são, usando (3.5)

$$(3.19) \quad \left\{ \begin{array}{l} U_m^m = \Gamma^{-1/2}(2m) \exp\left(mx - (\exp(x))/2 \right) ; \quad m > 0 \\ U_m^s = \left((s-m)(s+m) \right)^{-1/2} \left((\exp(x))/2 - s - \frac{d}{dx} \right) U_m^{s-1} \\ U_m^{s-1} = \left((s-m)(s+m) \right)^{-1/2} \left((\exp(x))/2 - s + \frac{d}{dx} \right) U_m^s \end{array} \right.$$

onde a normalização é obtida de

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(U_m^s \right)^2 dx = 1$$

e escrevendo $s = k - 1/2$; $z = \exp(x)$ temos que

$$U_m^s(x) = z^{-1/2} \bar{W}_{k,m}(z)$$

logo (3.19) fica, em termos de \bar{W} e z

$$\bar{W}_{m+1/2,m}(z) = \Gamma^{-1/2}(2m) z^{m+1/2} \exp(-z/2)$$

$$\bar{W}_{k,m}(z) = ((k-m-1/2)(k+m-1/2))^{-1/2} \left(\frac{z}{2} - k + 1 - z \frac{d}{dz} \right) \bar{W}_{k-1,m}(z)$$

$$\bar{W}_{k-1,m}(z) = ((k-m-1/2)(k+m-1/2))^{-1/2} \left(\frac{z}{2} - k + z \frac{d}{dz} \right) \bar{W}_{k,m}(z)$$

onde a normalização é

$$\int_0^\infty \left(\bar{W}_{k,m}^2 / z^2 \right) dz = 1$$

logo esta normalização é diferente da normalização feita por Whittaker. Outros exemplos sobre os tipos de fatorações restantes C, D, E, e F são encontradas em ⁽¹⁰⁾ que lista todas as possibilidades.

CAPÍTULO IV

ÁLGEBRAS DE LIE PARA POTENCIAIS DE ESPALHAMENTO

Neste capítulo estudaremos a forma assintótica e depois a matriz de espalhamento associada ao potencial em questão, que será, no que segue, do tipo de Pösch-Teller⁽¹⁷⁾. Nossa discussão se baseia em técnicas de teoria de grupo, a saber, a técnica usada é AS, pois para cada representação obtemos só um potencial. (No apêndice B, discutimos a teoria formal de espalhamento no contacto clássico). A técnica discutida aqui tem duas vantagens muito interessantes⁽¹⁹⁾.

- a) Ambos estados, ligados e de espalhamento, pertencem ao mesmo grupo.
- b) A matriz de espalhamento ou matriz S pode ser determinada somente por manipulação algébrica, ou seja, não precisamos da forma explícita das funções de onda do potencial em questão.

consideremos a álgebra de Lie $so(2,1)$ gerada pelos operadores⁽¹⁸⁾

$$(4.1) \quad \begin{cases} J_x = -i(z\partial/\partial y + y\partial/\partial z) \\ J_y = i(x\partial/\partial z + z\partial/\partial x) \\ J_z = -i(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x) \end{cases}$$

que satisfazem as relações de comutação

$$[J_x, J_y] = -iJ_z \quad ; \quad [J_z, J_x] = iJ_y \quad ; \quad [J_y, J_z] = iJ_x$$

e com o operador de Casimir dado por

$$(4.2) \quad J^2 = J_z^2 - J_x^2 - J_y^2$$

Introduzindo agora as coordenadas polar-hiperbólicas

$$x = r \cosh[\rho] \cos[\theta] \quad ; \quad y = r \cosh[\rho] \sin[\theta] \quad ; \quad z = r \sinh[\rho]$$

e a transformação de similaridade $\Omega^{1/2} = \{ \cosh[\rho] \}^{1/2}$, obtemos uma representação equivalente com:

$$J_x = \Omega^{-1/2} J_x \Omega^{1/2} \quad ; \quad J_y = \Omega^{-1/2} J_y \Omega^{1/2} \quad ; \quad J_z = \Omega^{-1/2} J_z \Omega^{1/2}$$

O operador de Casimir (4.2) toma a forma

$$J^2 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \operatorname{sech}^2[\rho] \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} - \frac{1}{4} \right) - \frac{1}{4}$$

e $J_z = -i\partial/\partial\vartheta$ onde $0 \leq \vartheta < 4\pi$.

Agora esquematizamos, as autofunções normalizadas $|KM\rangle$ de J^2 e J_z classificadas por seus autovalores

$$(4.3) \quad J^2 |K_m\rangle = K(K-1) |K_m\rangle ; \quad J_z |K_m\rangle = m |K_m\rangle$$

As representações de $so(2,1)$ podem ser divididas em duas séries, continua C e série discreta D como segue:

$$(4.4a) \quad C : K = \frac{1}{2} + \kappa, \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{em } C_K^0 : \kappa > 1/2, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ \text{em } C_K^0 : \kappa > 1/(2)^{1/2}, m = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots \end{array} \right.$$

$$(4.4b) \quad D : K = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{em } D_k^+ : m = k, k+1, k+2, \dots \\ \text{em } D_k^- : m = -k, -k-1, -k-2, \dots \end{array} \right.$$

O operador de Casimir tem assim um espectro misto⁽¹⁸⁾. Por outro lado as funções de onda (4.3) têm a forma

$$(4.5) \quad |K_m\rangle = \mu_m^k(\rho) \exp[i m \vartheta]$$

onde $\mu_m^k(\rho)$ satisfaz a equação

$$J^2 \mu_m^k(\rho) \exp[i m \vartheta] = K(K-1) \mu_m^k(\rho) \exp[i m \vartheta]$$

ou ainda

$$(4.6) \quad \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \operatorname{sech}^2[\rho] \left(m^2 - 1/4 \right) \right] \mu_m^k(\rho) = \left(K - 1/2 \right) \mu_m^k(\rho).$$

A equação (4.6) é uma equação de Schrödinger com potencial de Pöschl-Teller de segundo tipo.

Observemos que (4.4b) juntamente com (4.6) descrevem corretamente o espectro de energia ligado do potencial Pöschl-Teller, já que para um m fixo temos

$$E_k = (K - 1/2)^2 \quad ; \quad K = 1/2, 1, 3/2, \dots |m|.$$

Mas nosso interesse é considerar a equação (4.6) para a série de representação C . Agora $K = 1/2 + \kappa$, com m inteiro e m semi-inteiro em C^0 e $C^{1/2}$ respectivamente, logo a equação (4.6) se transforma na equação de espalhamento com potencial Pöschl-Teller de segundo tipo

$$(4.7) \quad \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \operatorname{sech}^2 \rho \left(m^2 - 1/4 \right) \right] \mu_m^k(\rho) = \kappa^2 \mu_m^k(\rho).$$

Agora para se obter os coeficientes de transmissão e reflexão ou equivalentemente a matriz S , procedemos como segue:

Usando (4.1) em coordenadas hiperbólicas, definimos os operadores de criação e aniquilação

$$(4.8a) \quad J_+ = iJ_x - J_y = i \exp[i\vartheta] \left[-\frac{\partial}{\partial \rho} + \tanh[\rho] \left(1/2 - i\frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \right]$$

$$(4.8b) \quad J_- = iJ_x + J_y = i \exp[-i\vartheta] \left[\frac{\partial}{\partial \rho} + \tanh[\rho] \left(-1/2 + i\frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \right]$$

assim

$$(4.9) \quad J_{\pm} |K, m\rangle = [(1/2 \pm m - i\kappa)(-1/2 \mp m - i\kappa)]^{1/2} |K, m \pm 1\rangle$$

notando que no $\lim_{\rho \rightarrow \pm\infty} \tanh[\rho] = \pm 1$, definimos os operadores assintóticos:

$$(4.10) \quad J_{\pm}^{\pm\infty} = \lim_{\rho \rightarrow \pm\infty} J_{\pm} = i \exp[\pm i\vartheta] \left[-\frac{\partial}{\partial \rho} \pm \frac{1}{2} \mp i\frac{\partial}{\partial \vartheta} \right]$$

Agora escrevemos as funções bases assintóticas de $so(2,1)$ como segue:

Por (4.5) temos

$$|\bar{\Psi}\rangle = \lim_{\rho \rightarrow -\infty} |Km\rangle = \lim_{\rho \rightarrow -\infty} \mu_m^K(\rho) \exp[i m \vartheta]$$

logo

$$(4.11a) \quad |\bar{\Psi}\rangle = a_m \exp[i m \vartheta] \exp[i k \rho] + c_m \exp[i m \vartheta] \exp[-i k \rho]$$

da mesma forma

$$(4.11b) \quad |\Psi^+\rangle = \lim_{\rho \rightarrow +\infty} |Km\rangle = \mathfrak{L}_m \exp[i m \vartheta] \exp[i k \rho]$$

Por outro lado de (4.10) e (4.11) temos

$$(4.12) \quad \lim_{\rho \rightarrow \pm\infty} (J_+ |Km\rangle) = J_+^{\pm\infty} |Km\rangle = J_+^{\pm\infty} |\Psi^+\rangle$$

e usando (4.9) obtemos

$$(4.13a) \quad \begin{aligned} \lim_{\rho \rightarrow +\infty} (J_+ |Km\rangle) &= \\ &= \lim_{\rho \rightarrow +\infty} [((1/2 + m - ik)(-1/2 - m - ik))^{1/2} |Km+1\rangle] \\ &= [((1/2 + m - ik)(-1/2 - m - ik))^{1/2}] \lim_{\rho \rightarrow +\infty} \mu_{m+1}^K(\rho) \exp[i(m+1)\vartheta] \\ &= [((1/2 + m - ik)(-1/2 - m - ik))^{1/2}] \mathfrak{L}_{m+1} \exp[i k \rho + i(m+1)\vartheta] \end{aligned}$$

$$(4.13b) \quad \begin{aligned} J_+^{(+\infty)} |\Psi^+\rangle &= \\ &= i \exp[i\vartheta] \left[-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2} - i\frac{\partial}{\partial \vartheta} \right] | \mathfrak{L}_m \exp[i(m+1)\vartheta + i k \rho] \rangle \\ &= i[1/2 + m - ik] \mathfrak{L}_m \exp[i(m+1)\vartheta + i k \rho] \end{aligned}$$

logo por (4.13a,b) e a relação (4.12) temos

$$\begin{aligned} [((1/2 + m - ik)(-1/2 - m - ik))^{1/2}] \mathfrak{L}_{m+1} \exp[i k \rho] \exp[i(m+1)\vartheta] &= \\ = i[1/2 + m - ik] \mathfrak{L}_m \exp[i(m+1)\vartheta] \exp[i k \rho] \end{aligned}$$

assim

$$(4.14a) \quad \mathfrak{L}_{m+1} = i \left[\frac{1/2 + m - ik}{-1/2 - m - ik} \right]^{1/2} \mathfrak{L}_m$$

agora da igualdade

$$\lim J_+ | Km \rangle = J_+^{(-\infty)} | \Psi^- \rangle$$

obtemos da mesma forma que obtivemos b_{m+1}

$$(4.14b) \quad a_{m+1} = i \left[\frac{-1/2 - m - i\kappa}{1/2 + m - i\kappa} \right]^{1/2} a_m$$

$$(4.14c) \quad c_{m+1} = -i \left[\frac{1/2 + m - i\kappa}{-1/2 - m - i\kappa} \right]^{1/2} c_m$$

Finalmente, já que o potencial Pöschl-Teller com $m = 1/2$ em (4.6) corresponde ao sistema de onda livre, vemos que $a_{1/2} = b_{1/2}$, $c_{1/2} = 0$.

As equações (4.14) podem ser resolvidas para achar os coeficientes de transmissão e reflexão.

$$T_m = \frac{b_m}{a_m} = \frac{\Gamma(1/2 + m - i\kappa)\Gamma(1/2 - m - i\kappa)}{\Gamma(1 - i\kappa)\Gamma(-i\kappa)}$$

$$R_m = \frac{c_m}{a_m} = 0 \quad \text{para } m \text{ semi inteiro}$$

e a matriz S sendo

$$S_m = \begin{bmatrix} R_m & T_m \\ T_m & R_m \end{bmatrix}$$

CONCLUSÕES

No presente trabalho construímos potenciais unidimensionais, independentes da velocidade, para os quais a equação de Schrödinger pode ser resolvida em termos de funções hipergeométricas ou hipergeométricas confluentes.

Para tal construção utilizamos dois processos, a saber: Transformações funcionais e técnicas de álgebras de Lie. Mostramos que os resultados obtidos em mecânica quântica com uso da álgebra dinâmica nos leva às equações de Schrödinger as quais são reduzidas às equações hipergeométricas ou hipergeométricas confluentes.

Mostramos que, uma vez construída a forma mais geral para o potencial com o qual a equação de Schrödinger pode ser resolvida em termos de funções hipergeométricas, não é preciso fazer uma nova transformação funcional ou mesmo obter uma nova representação para se obter a forma mais geral para o potencial com o qual a equação é reduzida a uma equação hipergeométrica confluyente, isto é : Através de um processo de limite obtivemos a forma mais geral para o potencial com o qual a equação de Schrödinger pode ser resolvida em termos de funções hipergeométricas confluentes.

Então, se temos uma equação de Schrödinger e queremos saber se esta tem solução em termos de funções hipergeométricas ou hipergeométricas confluentes, basta encontrar uma função particular que, quando substituída na expressão que dá o potencial coincida com a equação em questão, logo se existe tal função temos a certeza que a equação a ser resolvida tem solução dada por funções hipergeométricas ou hipergeométricas confluentes. Para tais equações utilizamos: o método de fatoração tipo A, para hipergeométricas e tipo B para hipergeométricas confluentes.

Finalizando discutimos técnicas de álgebra de Lie para obter a matriz de espalhamento (matriz S) as quais possuem duas importantes vantagens : Primeiro, ambos os estados, ligado e de espalhamento (contínuo e discreto) pertencem ao mesmo grupo e segundo, a matriz de espalhamento pode ser determinada somente por manipulação algébrica ou

seja, não precisamos da forma explícita das funções de onda associadas ao potencial em questão.

APÊNDICE A

Definimos aqui o conceito de álgebra de Lie e as álgebra de Lie que precisamos para o presente trabalho.

Uma álgebra de Lie \mathcal{L} sobre um corpo F , é um espaço vetorial sobre F junto com o produto $[A,B] \in \mathcal{L}$ definido para todo $A,B \in \mathcal{L}$ tal que, para todo $A,B,C \in \mathcal{L}$ e $a,b \in F$

- i) $[A,B] = -[B,A]$
- ii) $[aA + bB,C] = a[A,C] + b[B,C]$
- iii) $[[A,B],C] + [[C,A],B] + [[B,C],A] = 0$ (identidade de Jacobi)

Denotemos por \mathcal{T} uma subálgebra da álgebra de Lie \mathcal{L} , isto é, \mathcal{T} é um conjunto de elementos de \mathcal{L} , tal que, $[x,y] \in \mathcal{T}$ se $x,y \in \mathcal{T}$. \mathcal{T} diz-se uma subálgebra invariante se, $[x,y] \in \mathcal{T}$ para qualquer $y \in \mathcal{T}$, $x \in \mathcal{L}$. Mais ainda, se $[x,y] = 0$ para qualquer $x,y \in \mathcal{T}$, a subálgebra invariante é chamada abeliana.

Um álgebra é chamada simples, se não possui subálgebra invariante, exceto \mathcal{L} , ela mesma e zero; E esta é chamada semi-simples se não possui subálgebras invariantes abeliana.

As propriedades de um álgebra abeliana ou que possua uma subálgebra invariante abeliana são fáceis de se expressar em termos da constante de estrutura C_{ik}^h . De fato, se a álgebra é abeliana, $[x,y] = 0$ para todo $x,y \in \mathcal{L}$, isto é toda constante de estrutura é zero, $C_{ik}^h = 0$ ($i,k,h = 1,2,\dots,n$), onde

$$[x_i, x_k] = C_{ik}^h x_h$$

Se \mathcal{L} tem uma subálgebra invariante \mathcal{T} , denotamos por $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ ($p < n$, $n = \dim \mathcal{L}$) os elementos bases de \mathcal{T} , então obtemos que

$$[\lambda_k, \lambda_j] = \sum_{i=1}^p C_{kj}^i \lambda_i \quad (k \leq p, j \text{ arbitrário})$$

assim que $C_{kj}^i = 0$ para $k \leq p$; $i > p$

Se a subálgebra invariante \mathcal{I} é abeliana, então $C_{kj}^l = 0$ para $k, j \neq p$, l arbitrário.

Definamos também o posto de um álgebra de Lie, este é o máximo número de elementos independentes da álgebra que comuta.

Passemos, agora, a enunciar o teorema de Cartan.

Consideremos a matriz $n \times n$

$$g_{ij} = \sum_{k,l} C_{ik}^l C_{jl}^k$$

O teorema afirma que uma condição necessária e suficiente para que uma álgebra seja semi-simples é que

$$\text{DET} | g_{ij} | \neq 0$$

Mais ainda, se a equação acima é satisfeita, a condição necessária e suficiente para que o correspondente grupo seja compacto é que g_{ij} seja uma matriz negativa definida⁽¹⁸⁾.

REPRESENTAÇÕES DE ÁLGEBRAS DE LIE

Definimos uma representação de uma álgebra de Lie, como uma função de elementos da álgebra sobre operadores lineares de um espaço vetorial linear L

$$\begin{aligned} x &\text{ — } T(x) \text{ tal que} \\ T(\alpha x + \beta y) &= \alpha T(x) + \beta T(y) \\ T([x, y]) &= [T(x), T(y)] \end{aligned}$$

a expressão $[T(x), T(y)]$ é o comutador dos dois operadores $T(x)$, $T(y)$.

A representação $T(x)$ de \mathcal{L} em L diz-se redutível se existe em L ao menos um subespaço não trivial L_1 de L que é invariante à esquerda por todos os operadores $T(x)$, isto é, $yT(x)$ pertence a L_1 . Se não existe subespaço invariante para todo $T(x)$ diz-se irredutível. Diz-se que a representação T é equivelente com a representação S se existe uma matriz invertível U tal que $T = USU^{-1}$.

O OPERADOR DE CASIMIR

Consideremos a álgebra de Lie associada a um certo grupo

$$[\lambda_i, \lambda_j] = \sum_k C_{ij}^k \lambda_k$$

chamamos operador de Casimir para a álgebra considerada (ou para o correspondente grupo) toda expressão C nos λ_i 's que comutem com todos os elementos da base da álgebra, isto é, $[C, \lambda_k] = 0$.

Note que C , em geral, não pertence à álgebra, já que este é não linear nos λ_i 's.

A partir disto podemos deduzir que em qualquer representação da álgebra ou do correspondente grupo, C é um operador expresso em termo dos geradores da representação considerada, que commuta com todos os operadores elementares da representação do grupo.

Se a representação considerada é irredutível, C deve então ser um múltiplo constante da identidade no espaço vetorial linear levando a representação. A representação irredutível pode então ser rotulada pelos autovalores de um número suficientemente grande de operadores de Casimir.

Se a álgebra de Lie é semi-simples, podemos obter um operador de Casimir na seguinte forma. Já que \mathcal{L} é semi-simples, o teorema de Cartan garante que a matriz g_{ij} (tensor metrico) é não singular. Podemos, então, definir g^{ij} pela equação

$$\sum g^{ij} g_{jk} = \delta_{ik}$$

e agora pondo

$$C = \sum_{i,j} g^{ij} \lambda_i \lambda_j$$

calculando $[C, \lambda_k]$ mostra-se que C comuta com todos os λ_k , assim C é um operador de Casimir, também chamado operador de Casimir quadrático.

Pode-se provar que o número mínimo de operadores de Casimir necessários para se ter um conjunto completo, isto é, para especificar

completamente as representações irredutíveis é o posto da álgebra⁽¹⁸⁾. Para determinar outros operadores de Casimir, devemos especificar a álgebra de Lie.

Definamos agora algumas álgebras de Lie específicas e suas respectivas dimensões.

$$\mathfrak{gl}(n, k) = \{ A \in M_{n \times n}(k) ; k \text{ real ou complexo} \}$$

$$\mathfrak{sl}(n, \mathbb{C}) = \{ A \in \mathfrak{gl}(n, \mathbb{C}) : \text{tr}(A) = 0 \}$$

$$\mathfrak{so}(n) = \{ A \in \mathfrak{gl}(n, \mathbb{R}) : A^t = -A \}, \dim \mathfrak{so}(n) = n(n-1)/2$$

$$\mathfrak{so}(p, q) = \{ A \in \mathfrak{gl}(n, \mathbb{R}) : A^t I_{p, q}^{-1} = -A \}, \text{ com } p+q = n \text{ e}$$

$$I_{p, q} = \begin{bmatrix} -I_p & 0 \\ 0 & I_q \end{bmatrix}$$

onde I_p , I_q são matrizes identidades de dimensão $p \times p$ e $q \times q$ respectivamente.

e a dimensão de $\mathfrak{so}(p, q) = p(p-1)/2 + q(q-1)/2 + p \cdot q = n(n-1)/2$

$$\mathfrak{u}(n) = \{ A \in \mathfrak{gl}(n, \mathbb{C}) : A^{-t} = -A \}$$

$$\mathfrak{su}(n) = \mathfrak{u}(n) \cap \mathfrak{sl}(n, \mathbb{C}) \text{ e } \dim \mathfrak{su}(n) = n^2 - 1$$

APÊNDICE B

Neste apêndice consideramos a teoria formal de espalhamento na forma clássica.

Consideremos a equação de movimento

$$(B.1) \quad i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(r,t) = H\Psi(r,t)$$

onde $\Psi(r,t) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

e o hamiltoniano H é dado por

$$H = H_0 + V = \frac{p^2}{2\mu} + V$$

onde H_0 descreve o sistema independente do tempo não perturbado e V é a perturbação.

A solução da equação (B.1) pode ser escrita em termos dos autovalores de H_0 como

$$(B.2) \quad \Psi(t) = \sum_n C_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \Psi_n$$

onde $H_0 \Psi_n = E_n \Psi_n$ e $C_n(t) = (\Psi_n, \Psi(t)) \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$

é a amplitude de probabilidade para encontrar o sistema no n -ésimo estado não perturbado, e assumimos aqui que H_0 é simplesmente o operador energia cinética.

Agora substituindo a função (B.2) na equação (B.1) e usando o fato que

$$H_0 \Psi_n = E_n \Psi_n$$

obtemos

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_r(t) = \sum_n (\Psi_r)^{-1} V C_n(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} (E_r - E_n) t\right) \Psi_n$$

ou ainda

$$(B.3) \quad ih \frac{d}{dt} C_r(t) = \sum_n V_{rn} C_n \exp(iW_{rn} t)$$

onde $C_n(t) = C_n$; $W_{rn} = (E_r - E_n)/h$

$$e \quad V_{rn} = (\Psi_r)^{-1} V \Psi_n = (\Psi_r, V \Psi_n) .$$

Assim, V_{kn} são os elementos de matriz de perturbação entre os autoestados não perturbados.

Em notação matricial podemos escrever o sistema de equações diferenciais lineares homogêneo (B.3) como:

$$ih \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} e^{iW_{12} t} & \dots \\ V_{21} e^{-W_{12} t} & V_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Também temos assumido que os autovalores não perturbados são normalizados para a unidade; ou seja: $(\Psi_r, \Psi_n) = \delta_{rn}$

$$(\Psi_r, \Psi_n) = \delta_{rn}$$

e as condições iniciais do problema sendo:

$$C_s(-\infty) = 1 \quad , \quad C_r(-\infty) = 0 \quad \text{para } r \neq s$$

Agora integrando a equação (B.3) e usando o fato que V é constante obtemos:

$$(B.4) \quad C_r(t) = -\frac{i}{h} V_{rn} \int_{-\infty}^t \exp[iW_{rn} t'] dt' + \delta_{rn}$$

Mas a integral (B.4) não existe, então devemos alterála para ter

convergência. Introduzindo um fator $\exp[\alpha t]$ na integral (B.4) e escrevendo

$$(B.5) \quad C_r(t) = -\frac{i}{\hbar} T_{rs} \int_{t_0}^t \exp[iW_{rs} t' + \alpha t'] dt' + \delta_{rs}$$

onde α é positivo e limite $\alpha \rightarrow 0$ deve ser tomado depois do limite $t_0 \rightarrow -\infty$.

A equação (B.5) será assumida para dar $C_k(t)$ corretamente só para tempos t tais que satisfazam a relação

$$(B.6) \quad |t| \ll (1/\alpha).$$

Notemos que a matriz V_{rs} foi trocada por uma matriz não conhecida T_{rs} na equação (B.5), nós esperamos agora evitar a perturvação aproximada sobre a qual (B.4) está baseada. Supomos⁽²⁾ agora que a matriz T_{rs} pode ser determinada tal que (B.5) seja solução de (B.3). Integrando (B.5) obtemos

$$(B.7) \quad C_r(t) = \frac{T_{rs} \exp iW_{rs} t + \alpha t}{(W_{rs}^2 + \alpha^2)}$$

pois $\lim_{\substack{\alpha \rightarrow 0 \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \exp \alpha t_0 = 0$

assim para estados $r \neq s$ temos

$$|C_r(t)|^2 = \frac{|T_{rs}|^2 \exp[2\alpha t]}{(W_{rs}^2 + \alpha^2)}$$

Por tanto, para a velocidade de transição no estado r :

$$(B.8) \quad \frac{d}{dt} |C_r(t)|^2 = \frac{2\alpha}{W_{rs}^2 + \alpha^2} \exp[2\alpha t] \frac{1}{2} |T_{rs}|^2$$

No limite $\alpha \rightarrow 0$, que deve ser tomado, mas para valores finitos de t e usando que

$$\delta = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2}$$

obtemos de (B.7)

$$(B.9) \quad \frac{d}{dt} |C_r(t)|^2 = \delta(W_{rs}) |T_{rs}| = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_r - E_s) |T_{rs}|$$

Onde supõe-se $r \neq s$ e que T_{rs} não tem singularidade como uma função de energia em $E_r - E_s$. Portanto, a solução (B.8) implica uma velocidade de transição constante, esperada para ser o efeito de espalhamento causando transições desde o estado s para o estado r . Por este fato T_{rs} é chamado a matriz de transição.

Agora substituindo $C_r(t)$ de (B.7) na equação (b.3)) obtemos

$$(B.10) \quad T_{rs} = \frac{1}{i} \sum_n \frac{V_{rn} T_{ns}}{i\alpha - W_{ns}} + V_{rs}$$

se $\alpha \rightarrow 0$ de acordo com a restrição (B.6).

Para conectar a teoria formal de espalhamento com a descrição mais simples de espalhamento, é conveniente definir um conjunto de vetores $\psi_s^{(+)}$ pelas equações lineares

$$(B.11) \quad T_{rs} = \sum_j (\psi_r, V\psi_j) (\psi_j, \psi_s^{(+)}) = (\psi_r, V\psi_s^{(+)})$$

substituindo este produto escalar em (B.10) obtemos

$$(\psi_r, V\psi_s^{(+)}) = \sum_n (\psi_r, V\psi_n) \frac{(\psi_n, V\psi_s^{(+)})}{E_s - E_n + i\alpha} + (\psi_r, V\psi_s)$$

ou, já que isto deve ser verdade para todo r

$$\begin{aligned}
 \text{B.12)} \quad \psi_s^{(+)} &= \psi_s + \sum_n \psi_n \frac{(\psi_n, V\psi_s^{(+)})}{E_s - E_n + i\alpha} \\
 &= \psi_s + \sum_n \frac{1}{E_s - H_0 + i\alpha} \psi_n (\psi_n, V\psi_s^{(+)})
 \end{aligned}$$

mas pela relação de completeza

$$\text{B.13)} \quad \sum_n \psi_n (\psi_n, V\psi_s^{(+)}) = V\psi_s^{(+)}$$

obtemos, como resultado final, a equação implícita

$$\text{B.14)} \quad \psi_s^{(+)} = \psi_s + \frac{1}{E_s - H_0 + i\alpha} V\psi_s^{(+)} .$$

Esta é a equação fundamental da teoria formal de espalhamento. Então o problema de obter a matriz de transição foi reduzido a resolver a equação (B.14), conhecida como a equação de Lippmann - Schwinger⁽²⁾.

Agora aplicando o operador $H_0 - E_s + i\alpha$ para a equação (B.14) e fazendo $\alpha \rightarrow 0$ obtemos

$$\text{B.15)} \quad (H_0 - E_s) \psi_s^{(+)} = -V\psi_s^{(+)}$$

ou seja $\psi_s^{(+)}$ é um autovetor de $H = H_0 + V$ e E_s o correspondente autovalor.

Formalmente podemos resolver (B.14) multiplicado por $E_s - H_0 + i\alpha$ e somando e subtraindo $-V\psi_s$ do lado direito da equação, assim obtemos

$$(E_s - H + i\alpha) \psi_s^{(+)} = (E_s - H + i\alpha) \psi_s + V\psi_s$$

ou

$$(B.16) \quad \psi_s^{(+)} = \psi_s + \frac{1}{E_s - H + i\alpha} V\psi_s$$

Nesta última equação aparece no denominador H em vez de H_0 . Agora se a solução (B.16) é substituída em (B.11) para a matriz de transição obtemos

$$(B.17) \quad T_{rs} = \left(\psi_r, V\psi_s \right) + \left(\psi_r, V \frac{1}{E_s - H + i\alpha} V\psi_s \right)$$

mas, para propósito prático não ganhamos muito, pois o efeito do operador $(E_s - H + i\alpha)^{-1}$ é não conhecido a menos que os autovalores de H o sejam. Portanto usualmente é necesario obter relações de recorrência por métodos de aproximação para resolver (B.17)⁽²⁾.

A solução formal (B.17) pode ser usada para demonstrar a ortonormalidade dos autovetores $\psi^{(+)}$, de fato.

$$\begin{aligned} \left(\psi_r^{(+)}, \psi_s^{(+)} \right) &= \left(\psi_r + \frac{1}{E_r - H + i\alpha} V\psi_r, \psi_s^{(+)} \right) \\ &= \left(\psi_r, \psi_s^{(+)} + V \frac{1}{E_r - H - i\alpha} \psi_s^{(+)} \right) \\ &= \left(\psi_r, \psi_s^{(+)} + V \frac{1}{E_r - E_s - i\alpha} \psi_s^{(+)} \right) \\ &= \left(\psi_r, \psi_s^{(+)} - \frac{1}{E_s - H_0 + i\alpha} V\psi_s^{(+)} \right) \end{aligned}$$

logo usando (B.14) obtemos

$$\left(\psi_r^{(+)}, \psi_s^{(+)} \right) = \left(\psi_r, \psi_s \right) = \delta_{rs}$$

da mesma forma obtemos

$$(\psi_r^{(-)}, \psi_s^{(-)}) = \delta_{rs}$$

onde

$$(B.18) \quad \psi_s^{(-)} = \psi_s + \frac{1}{E_s - H - i\alpha} V\psi_s$$

correspondente a um conjunto ortonormal de ψ_s , assim obtemos dois conjuntos, $\psi_s^{(+)}$ e $\psi_s^{(-)}$, de autovetores ortonormais do hamiltoniano total H. A questão é agora se estes conjuntos são completos. Parece que cada conjunto por si mesmo é um conjunto completo, pois os vetores ψ_s formam um conjunto completo, e $\psi_s^{(+)}$ (ou $\psi_s^{(-)}$) estão sobre ψ_s quando $V \neq 0$. Mas, H pode ter autovalores, energia, discretos correspondentes a estados ligados produzidos pela interação V. Estes estados discretos, os quais não têm contrapartida no espectro de H_0 e não são encontrados entre as soluções de (B.16), são ortogonais para os estados de espalhamentos e devem ser somados a todos os $\psi_s^{(+)}$ (ou $\psi_s^{(-)}$) para completar o conjunto de autovetores.

A partir do acima exposto segue que os autoestados contínuos $\psi^{(+)}$ devem ser expressos como combinações lineares dos $\psi^{(-)}$:

$$(B.19) \quad \psi_q^{(+)} = \sum_r \psi_r^{(-)} S_{rq}$$

A partir da ortogonalidade dos estados de espalhamento obtemos

$$(B.20) \quad S_{rq} = (\psi_r^{(-)}, \psi_q^{(+)})$$

esta matriz é chamada a matriz de espalhamento ou simplesmente matriz-S.

Já que dois autovetores de H pertencentes a autovalores de energia diferentes são ortogonais, qualquer matriz de espalhamento é sempre diagonal com respeito à energia. Assim, se no limite $L \rightarrow \infty$ a energia é vista como uma variável contínua, a transformação matricial deve ser da forma

$$(B.21) \quad S_{rq} = \delta_{rq} + \delta(E_r - E_q) U_{rq}$$

onde U_{rq} é não singular para $E_r = E_q$.

Usando a identidade

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right]$$

podemos escrever

$$(B.22) \quad S_{rq} = \delta_{rq} + \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{E_r - E_q - i\alpha} - \frac{1}{E_r - E_q + i\alpha} \right] U_{rq}.$$

Para relacionar U_{rq} com a matriz de transição T_{rq} substituímos (B.14), (B.18) e (B.22) em (B.19) e usando a definição (B.11) obtemos

$$(B.23) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{E_q - H_0 + i\alpha} \sum_r \psi_r T_{rq} = \\ & = \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{E_q - H_0 - i\alpha} - \frac{1}{E_q - H_0 + i\alpha} \right] \sum_r \psi_r U_{rq} + \\ & + \sum_r \frac{1}{E_r - H_0 - i\alpha} V \psi_r^{(-)} S_{rq} \end{aligned}$$

desde a comparação dos termos proporcionais a $(E - H_0 + i\alpha)^{-1}$ obtemos

$$U_{rq} = -2\pi i T_{rq}$$

assim por (B.21)

$$(B.24) \quad S_{rq} = \delta_{rq} - 2\pi i \delta(E_r - E_q) T_{rq}$$

Agora comparando os termos proporcionais a $(E - H_0 - i\alpha)^{-1}$ em (B.23), obtemos

$$(B.26) \quad T_{jq} = \sum_r \left(\psi_j, V\psi_r^{(-)} \right) S_{rq}$$

e da definição (B.11) podemos escrever

$$(B.26) \quad T_{jq} = \sum_r T_{rj}^* S_{rq} .$$

A importância central da matriz de espalhamento é que ela é unitária⁽²⁾.

Por último, uma relação muito importante é mostrada se analisamos de novo a equação (B.5). No limite $t_0 \rightarrow -\infty$ e $\alpha \rightarrow 0$ e $t \rightarrow +\infty$ esta equação se reduz a

$$(B.27) \quad C_r^{(+\infty)} = -\frac{2\pi i}{\hbar} T_{rq} \delta(W_{rq}) + \delta_{rq}$$

se o estado inicial é denotado por q . Comparando esta com (B.24) obtemos o resultado

$$C_r^{(+\infty)} = S_{rq}$$

REFERÊNCIAS

1. FOCK, V. A. Princípios de Mecânica Quântica, Editora MIR moscovo (1986).
2. MERZBACHER, E. Quantum Mechanics, Second Edition, Wiley international Edition (1970).
3. BARGMANN, V. On de convection Between Phase Shifts and Scattering Potential, Rev. Mod. Phys. 21, 488-493 (1947).
4. BHATTACHARJIE, A. and SUDARSHAN, E. C. G., A Class of Solvable Potentials, Nuov. Cim. 25, 468-879 (1962).
5. BARUT, A. O; INOMATA, A. and WILSON, R., A New Realization of Dynamical Groups and Factorisation Method, J. Phys. A: Math. Gen. 20, 4075-4082 (1987).
6. BARUT, A. O; INOMATA, A. and WILSON, R., Algebraic Treatment of Second Pöschl-Teller, Morse-Rosen and Eckart Equations, J. Phys. A: Math. Gen. 20, 4083-4096 (1987).
7. DONGPEI, Z., A New Potential with the Spectrum of An Isotonic Oscillator, J. Phys. A: Math. Gen. 20, 4331-4336 (1987).
8. BUDINI, P., Non Compact Extensions of Symetric Groups, Nuov. Cim. 44A, 363-372 (1966).
9. CORDERO, P.; HOJMAN, S.; FURLAN, P. and GHIRARDI, G.C., Algebraic Treatment of Non Relativistic and Relativistic Quantum Equation and its Relations to the Theory of Differential Equations, Nov. Cim. 3A, 807-821, (1971).

10. INFELD, L. and HULL, T.E., The Factorisation Method, *Rev. Mod. Phys.* 23, 21-68 (1951).
11. CORDERO, P. and GHIRARDI, G.C., Realization of Lie Algebras and Algebraic Treatment of Quantum Problems, *Forts. Phys.* 20, 105-133 (1972).
12. CAPELAS DE OLIVEIRA, E., Dissertação de Mestrado, IFGW-UNICAMP (1979).
13. BARUT, A. O., Dynamical Symmetry Group Based on Dirac Equation and Its Generalization to Elementary Particles, *Phys. Rev.* 135B, 839-842 (1964).
14. MAKUNDA, N.; O'RAIFEARTAIGH, L. and SUDARSHAN, E.C.G., Characteristic Noninvariance Groups Dynamical Systems, *Phys. Lett.* 15, 1041-1044 (1965).
15. BARUT, A.O.; "Coral Gables Conference on Symmetry Principles of High Energy" W.H. Freeman, San Francisco USA (1964).
16. BUDINI, P.; Green Function From Lie Algebra, *Il Nov. Cim.* 41, 399-401 (1966).
17. PÖSCHL, G. and TELLER, E.; Bemerkungen Zur Quantenmechanik Des Anharmonischen Oszillators, *Z.Phys.* 83, 143 (1933).
18. WYBOURNE, B.G.; Classical Groups for Physicists, Wiley New York, (1974).
19. FRNK, A. and WOLF, K.B.; Lie Algebras For Potential Scattering, *Phys. Rev. Lett.*, 20, 1737-1739 (1984).

20.MORSE, M.P.; Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics II
Vibrational Levels, Phys. Rev. 34, 57 (1929).