

O Método dos Operadores de Fatorização em Sistemas Quânticos Tridimensionais

(The factorization method for tridimensional quantum systems)

Mario Goto

Departamento de Física/CCE - UEL

Caixa Postal 6001, 86055-900 Londrina, PR, Brasil

Recebido para publicação em 16 de Setembro de 1992; Aceito para publicação em 04 de Janeiro de 1993

Resumo

Mostra-se que o método dos operadores de fatorização pode ser utilizado com vantagem em alguns sistemas quânticos tridimensionais, sendo aplicado para a partícula livre, o oscilador harmônico isotrópico e o átomo de hidrogênio, através da fatorização da hamiltoniana radial. Estende-se o método para a equação angular, no caso representado pela equação de Legendre.

Abstract

We show that the factorization operators method can be used to solve advantageously some tridimensional quantum systems. We apply it to free particle system, isotropic harmonic oscillator and Hydrogen atom, factorising radial Hamiltonian. We extend the method applying it to solve the angular equation, represented here by the Legendre equation.

I. Introdução

O método dos operadores, em certos casos, tem-se tornado um método clássico e de fato insubstituível¹, transcendendo como simples técnica de resolução de equações diferenciais. É o que ocorre, por exemplo, na análise da quantização do momento angular em sistemas tridimensionais correspondentes a potenciais centrais, quando as propriedades dos operadores são abstraídas para abranger representações arbitrárias, inclusive spins. Outro exemplo típico é o oscilador harmônico simples unidimensional, em cujo modelo se baseia a quantização canônica dos campos, de importância indiscutível na evolução da teoria quântica dos campos².

Por muito tempo, a utilização do método dos operadores de fatorização tem-se restringido a estes casos e às suas evoluções, sendo que mais recentemente, mostrou-se a aplicabilidade do método na resolução da equação radial do átomo de Hidrogênio³, introduzindo operadores de fatorização da hamiltoniana que atuam sobre os

índices de quantização do momento angular da função radial, $R_{n,l}(r) \rightarrow R_{n,l \pm 1}(r)$.

A idéia tem sido retomada logo a seguir, dentro do contexto da chamada mecânica quântica supersimétrica⁴, onde a fatorização da hamiltoniana é crucial, pois os modelos supersimétricos devem ser fatorizáveis em tese, através das cargas supersimétricas. Os operadores ou cargas supersimétricas atuam sobre os índices de representação do momento angular intrínseco (spin), transformando representações de spin inteiro (bósons) em representações de spin semi-inteiro (férmions), $|s, m_s\rangle \rightarrow |s \pm 1/2, m_s\rangle$, e a sua importância está mais associada a modelos supersimétricos na teoria dos campos⁵.

Apesar de estarmos, no momento, mais interessados em discutir o método dos operadores como uma boa técnica de resolução de equações diferenciais de segunda ordem, as discussões acima mostram que o método deve possuir um alcance muito maior. Isto poderá, eventualmente, ser melhor compreendido após um estudo mais detalhado das implicações da estrutura algébrica

dos operadores envolvidos e das suas propriedades do ponto de vista de uma representação abstrata dos auto-estados do sistema quântico.

Do ponto de vista de técnica de resolução de equações diferenciais de segunda ordem, o grande poder do método é a redução destas equações diferenciais numa de primeira ordem, de integração imediata. Isto evita complicações associadas às expansões em série de potência, associadas ao método de Frobenius⁶, e a inevitável introdução das funções especiais. Na mecânica quântica, os operadores de criação e de aniquilação introduzem a ideia da quantização de uma maneira simples e elegante, os auto-estados surgindo naturalmente através da ação destes operadores.

Neste trabalho, analisamos de uma forma sucinta a aplicabilidade do método dos operadores de fatorização na resolução de sistemas quânticos tridimensionais (secção 4), mostrando que aceitam o método três casos tradicionais: (i) o sistema de uma partícula livre (secção 5), (ii) o oscilador harmónico isotrópico (secção 6) e (iii) o átomo de hidrogénio (secção 7). *En passant*, introduzimos a fatorização da equação do momento angular L^2 , ou seja, da equação de Legendre (secção 3).

2. Hamiltoniana quântica

Um sistema quântico pode ser definido pela equação de Schrödinger¹

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.1)$$

onde H é a hamiltoniana do sistema. Estamos interessados basicamente em sistemas conservativos, com potencial central, como ocorrem nos sistemas ligados, tais como o átomo de Hidrogénio e osciladores harmónicos isotrópicos, objetos principais do presente estudo, onde

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r). \quad (2.2)$$

Em coordenadas esféricas, a hamiltoniana pode ser escrita na forma

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r), \quad (2.3)$$

(μ é a massa reduzida do sistema), onde

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\text{sen}^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\text{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\text{sen} \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) \right]. \quad (2.4)$$

Nos sistemas ligados, a hamiltoniana define a equação de auto-estados de energia

$$H \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = E_{nlm} \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi), \quad (2.5)$$

onde estamos, desde já, usando a notação consagrada, embora sem conhecer, em princípio, as condições de quantização. Através da separação de variáveis,

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (2.6)$$

a equação (2.5) é desacoplada nas suas componentes radial,

$$H R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r), \quad (2.7)$$

e angulares,

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \lambda \hbar^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2.8)$$

e

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m \hbar Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (2.9)$$

com os operadores

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 \lambda}{2\mu r^2} + V(r), \quad (2.10)$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{-m^2}{(1-x^2)} + \frac{d}{dx} (1-x^2) \frac{d}{dx} \right] \quad (2.11)$$

e

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (2.12)$$

os auto-valores E_{nl} , $\lambda \hbar^2$ e $m \hbar$ sendo, em princípio, as constantes de separação das variáveis. Em (2.11) usou-se a variável auxiliar $x = \cos \theta$.

Para a componente radial normalmente utiliza-se a função auxiliar

$$u_{nl}(r) = r R_{nl}(r), \quad (2.13)$$

que, aliado às definições

$$H = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \mathcal{H} r, \quad \mathcal{E}_{nl} = \frac{2\mu}{\hbar^2} E_{nl} \quad \text{e} \quad \mathcal{V}(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r), \quad (2.14)$$

resulta

$$\mathcal{H} u_{nl}(r) = \mathcal{E}_{nl} u_{nl}(r), \quad (2.15)$$

para

$$\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\lambda}{r^2} + \mathcal{V}(r). \quad (2.16)$$

A definição (2.13) impõe a condição de contorno na origem $u_{nl}(r=0) = 0$, sendo que os auto-estados u_{nl} dependem da energia potencial do sistema.

3. Momento angular

As auto-funções do momento angular definidas pelas equações (2.8) e (2.9) são as bem conhecidas funções harmônicas esféricas $Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

É clássica a utilização do método dos operadores de fatorização para o estabelecimento dos auto-estados e auto-valores de L_z , através dos operadores de criação L_+ e de aniquilação L_- ,

$$L_{\pm} Y_{lm} \rightarrow Y_{l, m \pm 1}, \quad (3.1)$$

de modo que não iremos discutir sobre este assunto. Uma aplicação pouco conhecida do método dos operadores é na obtenção de auto-estados e auto-valores de L^2 , equação (2.8) e (2.11), que pode ser posta na forma

$$\left[\frac{d}{dx} (1-x^2) \frac{d}{dx} - \frac{m^2}{(1-x^2)} + \lambda \right] Y_{lm}(\theta, \varphi) = 0, \quad (3.2)$$

que corresponde à equação associada de Legendre. É suficiente resolver a equação acima para $m=0$, quando resulta na equação de Legendre

$$\left[\frac{d}{dx} (1-x^2) \frac{d}{dx} + \lambda \right] P_l(\theta) = 0, \quad (3.3)$$

uma equação diferencial de segunda ordem, relativamente fácil de se verificar que pode ser fatorizado através dos operadores diferenciais

$$Q_l^+ = \left[-(1-x^2) \frac{d}{dx} + lx \right] \quad (3.4.a)$$

$$Q_l = \left[(1-x^2) \frac{d}{dx} + lx \right], \quad (3.4.b)$$

onde estamos utilizando desde já o parâmetro de quantização do momento angular l , para evitar complicações desnecessárias. Estes operadores, que são conjugados hermitianos, obedecem às relações

$$Q_l^+ Q_l = (1-x^2) \left\{ \frac{L^2}{\hbar^2} - l(l+1) \right\} + l^2 + m^2 \quad (3.5.a)$$

e

$$Q_l Q_l^+ = (1-x^2) \left\{ \frac{L^2}{\hbar^2} - l(l-1) \right\} + l^2 + m^2, \quad (3.5.b)$$

ou seja, para $m=0$,

$$Q_l^+ Q_l P_l = l^2 P_l \quad (3.6.a)$$

e

$$Q_l Q_l^+ P_{l-1} = l^2 P_{l-1}, \quad (3.6.b)$$

que pode-se verificar comparando as equações (3.5.a) e (3.5.b) com (3.2), correspondentes a $\lambda = l(l+1)$ e $\lambda = l(l-1)$, respectivamente. Multiplicando as equações (3.6.a) e (3.6.b) acima, pelo lado esquerdo, por Q_l e Q_l^+ , respectivamente, e comparando entre si, verificamos que

$$P_l = \frac{1}{l} Q_l^+ P_{l-1} \quad (3.7.a)$$

e

$$P_{l-1} = \frac{1}{l} Q_l P_l, \quad (3.7.b)$$

o que caracteriza Q_l^+ e Q_l como operadores de criação e de aniquilação, ou de levantamento e abaixamento, respectivamente, dos índices $l : l \rightarrow l \pm 1$, relacionando os auto-estados $\dots, P_{l-1}, P_l, P_{l+1}, \dots$. Para $l=0$, temos, na equação (3.7.b),

$$Q_0 P_0 = (1-x^2) \frac{d}{dx} P_0 = 0, \quad (3.8)$$

cujas soluções são constantes, que podem ser normalizadas para

$$P_0 = 1. \quad (3.9)$$

Aplicando sucessivamente os operadores de criação Q_l^+ sobre este auto-estado mais baixo, pode-se obter os demais auto-estados, que correspondem aos polinômios de Legendre de grau arbitrário

$$P_l = \frac{1}{l!} Q_l^+ Q_l^+ \cdots Q_1^+ P_0 \quad (3.10)$$

Veja que o parâmetro de quantização do momento angular varia de $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ (inteiros positivos). Pode-se verificar, com algum esforço, que a equação (3.10) corresponde à fórmula de Rodrigues, que define os polinômios de Legendre. A equação (3.7.a), para $l = 0$, resulta

$$Q_0^+ P_{-1} = -(1-x^2) \frac{d}{dx} P_{-1} = 0, \quad (3.11)$$

similar à equação (3.8). No caso, podemos impor a solução ⁷

$$P_{-1} = \text{cte.} = 0 \quad (3.12)$$

4. Hamiltoniana radial

Consideremos a hamiltoniana radial, equação (2.16), que, após a substituição $\lambda = l(l+1)$, fica

$$\mathcal{H}_l = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \mathcal{V}(r), \quad (4.1)$$

para um potencial central arbitrário $\mathcal{V}(r)$. Para efeito de fatorização, vamos introduzir os operadores conjugados hermitianos

$$A_l = \left[\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} + f(r) \right] \quad (4.2.a)$$

e

$$A_l^+ = \left[-\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} + f(r) \right], \quad (4.2.b)$$

onde $f(r)$ é uma função real a ser determinada, dependendo do potencial $\mathcal{V}(r)$. Para estabelecer as relações entre as funções $f(r)$ e $\mathcal{V}(r)$, vamos considerar as seguintes combinações entre os operadores A_l e A_l^+ :

$$A_l A_l^+ = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l-1)}{r^2} + \frac{2l}{r} f + f' + f^2 \quad (4.3.a)$$

e

$$A_l^+ A_l = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2l}{r} f - f' + f^2, \quad (4.3.b)$$

onde definimos $f' = \frac{df}{dr}$.

Comparando com a expressão da hamiltoniana, equação (4.1), verificamos que

$$A_l A_l^+ = \mathcal{H}_{l-1} - \mathcal{V}(r) + \frac{2l}{r} f + f' + f^2 \quad (4.4.a)$$

e

$$A_l^+ A_l = \mathcal{H}_l - \mathcal{V}(r) + \frac{2l}{r} f - f' + f^2, \quad (4.4.b)$$

de onde pode-se concluir que

$$\frac{2l}{r} f + f' + f^2 = \mathcal{V}(r) + C_1 \quad (4.5.a)$$

e

$$\frac{2l}{r} f - f' + f^2 = \mathcal{V}(r) + C_2, \quad (4.5.b)$$

se realmente desejarmos que A_l e A_l^+ representem operadores de fatorização da hamiltoniana (C_1 e C_2 são duas constantes arbitrárias). Somando e subtraindo as equações (4.5.a) e (4.5.b), resultam

$$\frac{2l}{r} f + f^2 = \mathcal{V}(r) + C \quad (4.6.a)$$

e

$$f' = \frac{df}{dr} = C', \quad (4.6.b)$$

C e C' constantes arbitrárias. A (4.6.b) integrada resulta

$$f(r) = \alpha + \beta r, \quad (4.7)$$

α e β constantes. Substituindo esta função em (4.6.a), e após uma escolha adequada da constante C , resulta a possível expressão para a função potencial,

$$\mathcal{V}(r) = \beta^2 r^2 + 2\alpha\beta r + \frac{2l\alpha}{r}, \quad (4.8)$$

tal que a hamiltoniana seja fatorizável.

A rigor, as equações em $f(r)$ somente fazem sentido se não houver nenhuma dependência em relação a l . Observando as equações (4.5), verificamos que esta dependência pode ser eliminada se for possível a sua incorporação à constante aditiva. Isto torna-se possível

para as escolhas $\alpha = 0$ e β arbitrário ou $\alpha \sim 1/l$ e $\beta = 0$.

Há, portanto, três casos a considerar : (i) $\alpha = \beta = 0$, caso livre; (ii) $\alpha = 0, \beta \neq 0$, oscilador harmônico isotrópico, e (iii) $\alpha = -1/a_0 l, \beta = 0$, potencial coulombiano atrativo.

5 . Partícula livre

Este é um caso bastante ilustrativo da aplicação dos operadores de fatorização , que no caso reduzem-se a

$$A_l = \frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \tag{5.1.a}$$

e

$$A_l^+ = -\frac{d}{dr} + \frac{l}{r}, \tag{5.1.b}$$

resultando nos produtos

$$A_l^+ A_l = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} = \mathcal{H}_l \tag{5.2.a}$$

e

$$A_l A_l^+ = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l-1)}{r^2} = \mathcal{H}_{l-1}, \tag{5.2.b}$$

ou seja,

$$A_l^+ A_l u_{nl} = \mathcal{H}_l u_{nl} = \mathcal{E}_{nl} u_{nl} \tag{5.3.a}$$

e

$$A_l A_l^+ u_{n,l-1} = \mathcal{H}_{l-1} u_{n,l-1} = \mathcal{E}_{n,l-1} u_{n,l-1}. \tag{5.3.b}$$

Multiplicamos as equações (5.3.a) e (5.3.b) acima, pela esquerda, por A_l e A_l^+ , respectivamente, e usando a equação de auto-energia (2.15), obtemos

$$A_l A_l^+ A_l u_{nl} = A_l \mathcal{H}_l u_{nl} = \mathcal{E}_{nl} A_l u_{nl} \tag{5.4.a}$$

e

$$A_l^+ A_l A_l^+ u_{n,l-1} = A_l^+ \mathcal{H}_{l-1} u_{n,l-1} = \mathcal{E}_{n,l-1} A_l^+ u_{n,l-1}. \tag{5.4.b}$$

Comparando a equação (5.4.a) com (5.3.b) e (5.4.b) com (5.3.a), conclui-se que a energia da partícula livre é

independente do momento angular orbital definido pelo parâmetro l ,

$$\mathcal{E}_{n,l-1} = \mathcal{E}_{nl} = \mathcal{E}_n = k^2 \tag{5.5}$$

e os auto-estados estão relacionados por

$$u_{nl} = \frac{1}{k} A_l^+ u_{n,l-1} \tag{5.6.a}$$

e

$$u_{n,l-1} = \frac{1}{k} A_l u_{nl}. \tag{5.6.b}$$

Para $l = 0$, a equação de auto-energia fica

$$-\frac{d^2}{dr^2} u_k(r) = k^2 u_k(r), \tag{5.7}$$

onde estamos introduzindo a reparametrização dos auto-estados de energia, $\mathcal{E}_n = k^2$, equação (5.5), para indicar que a energia de uma partícula livre pode assumir qualquer valor positivo. As duas soluções independentes da equação (5.7) são

$$u_k(r) = \cos kr \quad \text{e} \quad u_k(r) = \text{sen } kr, \tag{5.8}$$

sendo que somente a solução $\text{sen } kr$ satisfaz à condição de contorno na origem, de modo que a parte radial da função de onda de uma partícula livre com momento angular nulo é,

$$R_{k0}(r) = \frac{1}{r} u_k(r) = C_0 \frac{\text{sen } kr}{kr}. \tag{5.9}$$

A solução geral, para momento angular arbitrário, pode ser obtida pela aplicação sucessiva dos operadores A_l^+ , conforme equação (5.6.a), de modo que, a menos de uma constante multiplicativa,

$$R_{kl} = \frac{1}{r} u_{kl}(r) = C_l \frac{1}{r} A_l^+ A_{l-1}^+ \cdots A_2^+ A_1^+ u_0(r). \tag{5.10}$$

Usando o fato de que

$$\frac{1}{r} A_1^+ r = A_0^+ = -\frac{d}{dr}, \tag{5.11}$$

e de forma geral

$$\frac{1}{r} A_l^+ r = A_{l-1}^+, \tag{5.12}$$

de modo que

$$\frac{1}{r} A_l^+ A_{l-1}^+ \cdots A_2^+ A_1^+ r = (-1)^l r^l \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l, \quad (5.13)$$

obtemos, para a equação (5.10) acima, a expressão

$$R_{kl} = C_l (-1)^l r^l \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\text{sen } kr}{kr}. \quad (5.14)$$

Esta é exatamente a expressão geral para as funções de Bessel esféricas $j_l(kr)$, geradas a partir da função de Bessel inicial

$$j_0(kr) = \frac{\text{sen } kr}{kr}. \quad (5.15)$$

6. Oscilador harmônico isotrópico^{8,9}

Corresponde ao caso $\alpha = 0$, $\beta \neq 0$, quando a energia potencial é definida por

$$f(r) = \beta r \quad \text{e} \quad \mathcal{V}(r) = \beta^2 r^2, \quad (\beta = \frac{\mu\omega}{\hbar}) \quad (6.1)$$

de modo que a hamiltoniana será

$$\mathcal{H}_l = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \beta^2 r^2 \quad (6.2)$$

Os operadores de fatorização são

$$A_l = \left[\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} + \beta r \right] \quad (6.3.a)$$

$$A_l^+ = \left[-\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} + \beta r \right], \quad (6.3.b)$$

que se relacionam com a hamiltoniana através de

$$A_l^+ A_l = \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \beta^2 r^2 - \beta(2l-1) \right] \quad (6.4.a)$$

$$A_l A_l^+ = \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l-1)}{r^2} + \beta^2 r^2 - \beta(2l+1) \right], \quad (6.4.b)$$

ou seja,

$$A_l^+ A_l = \mathcal{H}_l + \beta(2l-1) \quad (6.5.a)$$

$$A_l A_l^+ = \mathcal{H}_{l-1} + \beta(2l+1), \quad (6.5.b)$$

que aplicados sobre os auto-estados de energia u_{nl} e $u_{n,l-1}$, respectivamente, resultam

$$A_l^+ A_l u_{nl} = [\mathcal{E}_{nl} + \beta(2l-1)] u_{nl} \quad (6.6.a)$$

$$A_l A_l^+ u_{n,l-1} = [\mathcal{E}_{n,l-1} + \beta(2l+1)] u_{n,l-1}. \quad (6.6.b)$$

Multiplicando as equações (6.6.a) e (6.6.b), pela esquerda, por A_l e A_l^+ , respectivamente, obtemos

$$A_l A_l^+ A_l u_{nl} = [\mathcal{E}_{nl} + \beta(2l-1)] A_l u_{nl} \quad (6.7.a)$$

$$A_l^+ A_l A_l^+ u_{n,l-1} = [\mathcal{E}_{n,l-1} + \beta(2l+1)] A_l^+ u_{n,l-1}. \quad (6.7.b)$$

Finalmente, comparando as equações (6.7) e (6.6), estabelecemos as relações

$$u_{nl}(r) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_{nl} + \beta(2l-1)}} A_l^+ u_{n,l-1}(r) \quad (6.8.a)$$

$$u_{n,l-1}(r) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_{nl} + \beta(2l-1)}} A_l u_{nl}(r), \quad (6.8.b)$$

caracterizando A_l^+ como um operador de criação e A_l como um operador de aniquilação, subindo ou descendo o nível de excitação angular de $l \rightarrow l \pm 1$. A energia destes níveis devem satisfazer às relações

$$\mathcal{E}_{nl} = \mathcal{E}_{n,l-1} + 2\beta = \mathcal{E}_n + 2l\beta, \quad (6.9)$$

que, em termos de $E = \hbar^2/2\mu \mathcal{E}$, fica

$$E_{nl} = E_{n,l-1} + \hbar\omega = E_{n,0} + l\hbar\omega. \quad (6.10)$$

6.1 - Momento angular nulo, $l = 0$

Neste caso, a hamiltoniana e os operadores de fatorização são idênticos aos do caso unidimensional,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \beta^2 r^2 \right] \\ &= A^+ A + \beta \\ &= A A^+ - \beta; \end{aligned} \quad (6.11)$$

$$A = \frac{d}{dr} + \beta r, \quad A^+ = -\frac{d}{dr} - \beta r \quad (6.12)$$

definindo as relações de comutação

$$[A, A^+] = 2\beta, \quad [\mathcal{H}_0, A] = -2\beta A, \quad [\mathcal{H}_0, A^+] = 2\beta A^+ \quad (6.13)$$

Das relações acima resultam

$$\mathcal{H} A u_n = (\mathcal{E}_n - 2\beta) A u_n \quad (6.14.a)$$

$$\mathcal{H} A^+ u_n = (\mathcal{E}_n + 2\beta) A^+ u_n, \quad (6.14.b)$$

de modo que

$$A u_n = \sqrt{2n\beta} u_{n-1} \quad \text{e} \quad A^+ u_n = \sqrt{2(n+1)\beta} u_{n+1}, \quad (6.15)$$

a energia dos auto-estados consecutivos relacionados por

$$\mathcal{E}_{n+1} = \mathcal{E}_n + 2\beta, \quad (6.16)$$

os índices n representando os níveis de excitação radial. Se u_0 representar o nível de energia mais baixo possível, então devemos ter

$$A u_0 = 0 \quad (6.17)$$

$$\mathcal{H} u_0 = (A^+ A - \beta) u_0 = \mathcal{E}_0 u_0, \quad (6.18)$$

a energia deste estado devendo ser, portanto,

$$\mathcal{E}_0 = -\beta. \quad (6.19)$$

Em termos de operador diferencial, a equação (6.17) fica

$$A u_0(r) = \left[\frac{d}{dr} + \beta r \right] u_0(r) = 0 \quad (6.20)$$

cujas soluções, normalizadas, é

$$u_0(r) = C_0 e^{-\frac{1}{2}\beta r^2} = \left[\frac{4\beta}{\pi} \right]^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\beta r^2}. \quad (6.21)$$

Esta solução não se anula na origem, como requer a definição (2.13), e portanto não se trata de um estado acessível ao sistema; somente as soluções correspondentes a n ímpares anulam-se na origem, caracterizando-se portanto como auto-estados do sistema, como facilmente pode ser verificado. Assim, o estado fundamental do sistema será

$$u_1(r) = C_1 A^+ u_0(r) = C_1 C_0 \beta r e^{-\frac{1}{2}\beta r^2}, \quad (6.22)$$

caracterizado pela energia

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega \quad (\mathcal{E}_1 = 3\beta) \quad (6.23)$$

Os demais auto-estados serão representados pelas auto-funções ímpares

$$u_{2n+1}(r) = C_{2n+1} (A^+)^{2n+1} u_0(r), \quad (6.24)$$

ligadas à parte radial das funções de onda, $R_{nl}(r)$, por

$$r R_n(r) = u_{2n+1}(r) \quad \text{para} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (6.25)$$

e correspondentes às auto-energias

$$E_n = (2n + \frac{3}{2}) \hbar \omega \quad [\mathcal{E}_n = (2n + 1)\beta] \quad (6.26)$$

A parte radial da função de onda será, portanto,

$$R_n(r) = \frac{1}{\sqrt{(2\beta)^{2n+1} (2n+1)!}} \frac{1}{r} (A^+)^{2n+1} u_0(r). \quad (6.27)$$

Se considerarmos a igualdade

$$A^+ = \left[-\frac{d}{dr} + \beta r \right] = -e^{\frac{1}{2}\beta r^2} \frac{d}{dr} e^{-\frac{1}{2}\beta r^2}, \quad (6.28)$$

e conseqüentemente,

$$(A^+)^n = (-1)^n e^{\frac{1}{2}\beta r^2} \left(\frac{d}{dr} \right)^n e^{-\frac{1}{2}\beta r^2}, \quad (6.29)$$

chegamos à equação

$$(A^+)^n u_0(r) = (-1)^n u_0(r) e^{\beta r^2} \frac{d^n}{dr^n} e^{-\beta r^2} \quad (6.30)$$

que relaciona as funções $R_{nl}(r)$ com os polinômios de Hermite definidos por

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \quad (6.31)$$

resultando, finalmente,

$$\begin{aligned} R_n(r) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\beta)^{2n+1}(2n+1)!}} \frac{1}{r} u_0(r) e^{\beta r^2} \left(\frac{d}{dr}\right)^{2n+1} e^{-\beta r^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\beta)^{2n+1}(2n+1)!}} \frac{1}{r} u_0(r) H_{2n+1}(\sqrt{\beta}r) \end{aligned} \quad (6.32)$$

6.2 - Momento angular arbitrário, l

Uma vez estabelecidos os auto-estados de energia R_n para o caso $l = 0$, os demais auto-estados R_{nl} podem ser obtidos pela aplicação sucessiva dos operadores A_l^+ , conforme estabelecido pelas equações (6.8). Temos

$$\begin{aligned} r R_{nl}(r) &= u_{2n+1,l}(r) \\ &= \frac{1}{\sqrt{(4n+4l+2)}} A_l^+ u_{2n+1,l-1}(r) \\ &= C_{nl} A_l^+ A_{l-1}^+ \cdots A_2^+ A_1^+ r R_n(r), \end{aligned} \quad (6.33)$$

a auto-energia definida pela combinação das equações (6.10) e (6.26),

$$E_{nl} = (2n + l + \frac{3}{2}) \hbar\omega. \quad (6.34)$$

Usando a identidade

$$\frac{1}{r} A_l^+ r = A_{l-1}^+, \quad (6.35)$$

e consequentemente

$$\frac{1}{r} A_l^+ A_{l-1}^+ \cdots A_2^+ A_1^+ r = r^l \left(\frac{1}{r} A^+\right)^l, \quad (6.36)$$

a equação (6.33) fica

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) &= C_{nl} r^l \left(\frac{1}{r} A^+\right)^l R_n(r) \\ &= C_{nl} r^l e^{\frac{1}{2}\beta r^2} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^l e^{-\frac{1}{2}\beta r^2} R_n(r) \\ &= C_{nl} \frac{u_0(r)}{r} e^{\beta r^2} r^{l+1} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^{l+1} \left(\frac{d}{dr}\right)^{2n} e^{-\beta r^2}, \end{aligned} \quad (6.37)$$

a constante C_{nl} definida pelo coeficiente que aparece na equação (6.33),

$$C_{nl} = \frac{1}{\sqrt{4n+4l+2}} \frac{1}{\sqrt{4n+4(l-1)+2}} \cdots \frac{1}{\sqrt{4n+4+2}} \frac{1}{\sqrt{4n+2}}. \quad (6.38)$$

7 . Átomo de hidrogênio

Corresponde ao caso $\alpha = -1/a_0 l$, $\beta = 0$, quando

$$f(r) = -\frac{1}{a_0 l} \quad \text{e} \quad V(r) = -\frac{2}{a_0 r}, \quad (7.1)$$

que pode ser identificado com o potencial coulombiano atrativo do átomo de Hidrogênio para

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \quad (7.2)$$

a hamiltoniana sendo

$$\mathcal{H}_l = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{a_0 r}. \quad (7.3)$$

Este é o caso tratado primeiramente por Kimel (1982)³, mas vale a pena uma rápida revisão, usando a nomenclatura adotada aqui.

Os operadores de fatorização são

$$A_l = \left[\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{a_0 l} \right] \quad (7.4.a)$$

e

$$A_l^+ = \left[-\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{a_0 l} \right], \quad (7.4.b)$$

relacionados com a hamiltoniana através de

$$A_l^+ A_l = \mathcal{H}_l + \frac{1}{a_0^2 l^2} \quad (7.5.a)$$

e

$$A_l A_l^\dagger = \mathcal{H}_{l-1} + \frac{1}{a_0^2 l^2}, \quad (7.5.b)$$

que aplicados sobre os auto-estados de energia u_{nl} e $u_{n,l-1}$, respectivamente, resultam

$$A_l^\dagger A_l u_{nl} = [\mathcal{E}_{nl} + \frac{1}{a_0^2 l^2}] u_{nl} \quad (7.6.a)$$

e

$$A_l A_l^\dagger u_{n,l-1} = [\mathcal{E}_{n,l-1} + \frac{1}{a_0^2 l^2}] u_{n,l-1}. \quad (7.6.b)$$

Multiplicando estas equações, pela esquerda, por A_l e A_l^\dagger , respectivamente, obtemos

$$A_l A_l^\dagger A_l u_{nl} = [\mathcal{E}_{nl} + \frac{1}{a_0^2 l^2}] A_l u_{nl} \quad (7.7.a)$$

e

$$A_l^\dagger A_l A_l^\dagger u_{n,l-1} = [\mathcal{E}_{n,l-1} + \frac{1}{a_0^2 l^2}] A_l^\dagger u_{n,l-1}. \quad (7.7.b)$$

Da comparação das equações (7.7) e (7.6) resultam

$$u_{nl}(r) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_{nl} + \frac{1}{a_0^2 l^2}}} A_l^\dagger u_{n,l-1}(r) \quad (7.8.a)$$

e

$$u_{n,l-1}(r) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_{n,l-1} + \frac{1}{a_0^2 l^2}}} A_l u_{nl}(r), \quad (7.8.b)$$

caracterizando A_l^\dagger como um operador de criação e A_l como um operador de aniquilação, subindo ou descendo o nível de excitação angular de $l \rightarrow l \pm 1$. Observa-se também que a energia destes níveis é independente do estado de momento angular,

$$\mathcal{E}_{nl} = \mathcal{E}_{n,l-1} = \mathcal{E}_n. \quad (7.9)$$

O número quântico l varia de $0, 1, 2, 3, \dots$, mas neste caso não podemos construir as funções representativas do multipletto de momento angular devido à indefinição dos operadores A_l^\dagger e A_l quando $l = 0$, e que se reflete nas equações (7.5). Portanto, em vez de partir do estado mais baixo, vamos supor a existência de um estado superior tal que

$$A_{\lambda+1}^\dagger u_{n,\lambda} = 0, \quad (7.10)$$

para um certo valor máximo de l , $l_{max} = \lambda$.

A equação (7.6.b) mostra que, neste caso, devemos ter

$$\mathcal{E}_{n,l-1} + \frac{1}{a_0^2 l^2} = 0 \quad (7.11)$$

e desde que façamos a identificação

$$\lambda = l_{max} = n - 1, \quad (7.12)$$

a equação (7.10) fica

$$A_n^\dagger u_{n,n-1} = 0. \quad (7.13)$$

O índice n identifica o multipletto de energia, constituído pelos auto-estados

$$\{u_{n,n-1}, u_{n,n-2}, \dots, u_{n,l}, \dots, u_{n,1}, u_{n,0}\},$$

de energia

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (\mathcal{E}_n = -\frac{1}{a_0^2 n^2}). \quad (7.14)$$

Pode-se verificar que $n = 1, 2, 3, \dots$, e $0 \leq l \leq n - 1$.

A equação (7.13) fica

$$\left(-\frac{d}{dr} + \frac{n}{r} - \frac{1}{a_0 n}\right) u_{n,n-1}(r) = 0, \quad (7.15)$$

cujas soluções é

$$u_{n,n-1}(r) = C_n r^n e^{-(r/a_0 n)}. \quad (7.16)$$

A partir deste nível superior, pode-se obter os demais níveis, pela aplicação sucessiva dos operadores de aniquilação A_l , para todos os $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$,

$$\begin{aligned} u_{n,n-2} &= A_{n-1} u_{n,n-1} \\ u_{n,n-3} &= A_{n-2} u_{n,n-2} = A_{n-2} A_{n-1} u_{n,n-1} \\ u_{n,n-4} &= A_{n-3} u_{n,n-3} \\ &\vdots \\ u_{n,l} &= A_{l+1} u_{n,l+1} \\ &\vdots \\ u_{n,1} &= A_2 u_{n,2} \\ u_{n,0} &= A_1 u_{n,1}, \end{aligned} \quad (6.39)$$

a parte radial da função de onda dada por

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} u_{n,l}(r) = \frac{1}{r} A_{l+1} A_{l+2} \cdots A_{n-2} A_{n-1} u_{n,n-1}(r). \quad (6.40)$$

8. Conclusões

Vimos que a utilização do método dos operadores de fatorização é possível em alguns sistemas quânticos tradicionais, trazendo algumas vantagens como a simplicidade matemática e uma melhor visualização física do efeito da quantização. Do ponto de vista matemático, a sua grande vantagem é a redução de uma equação diferencial de segunda ordem numa de primeira ordem, de integração imediata, evitando as dificuldades inerentes ao método de expansão em série de potências e não requerendo nenhum conhecimento prévio das funções especiais.

Neste trabalho, estudamos as condições de aplicabilidade do método em sistemas quânticos tridimensionais, mostrando que basicamente apenas três sistemas aceitam a fatorização da hamiltoniana: a partícula livre, o oscilador harmônico isotrópico e o átomo de hidrogênio.

Apesar destas restrições, a importância do método está mais nas suas consequências indiretas, devido à introdução de operadores de fatorização que atuam sobre os índices de representação do momento angular orbital l . A existência de operadores que permitem a mudança de representações do momento angular orbital, associado ao conhecimento sobre a álgebra dos operadores supersimétricos que atuam sobre a representação de spin mostra a presença de uma estrutura algébrica muito rica envolvendo estes operadores, e que merece ser devidamente estudada. Ainda em termos da importância física destes operadores, lembremos que as excitações quânticas dos sistemas ligados são basicamente mudanças de níveis dentre os vários auto-estados do sistema causados por alguma interação externa. Se a interação for devido a um campo externo, este campo deve-se acoplar com os operadores de fatorização, pois são exatamente estes os responsáveis pela passagem de um auto-estado a outro.

Em resumo, a principal conclusão é que o método

dos operadores de fatorização transcende da sua caracterização como apenas uma boa técnica de resolução de equações diferenciais da física-matemática.

9. Bibliografia

- O leitor pode consultar qualquer livro texto de Mecânica Quântica. Citamos, por ex.
 - S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, John Wiley & Sons (1961).
 - A. Messiah e G. M. Temmer, *Quantum Mechanics*, North Holland (1961).
 - E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons (1961).
 - L. Infeld e T. E. Hull, *The factorization method*, Rev. Mod. Phys. **23**, (1951) 21.
 - J. D. Newmarch e R. M. Golding, *Ladder operators for some spherically symmetric potentials in quantum mechanics*, Am. J. Phys. **46**, (1978) 658.
- Teoria do campo é um assunto muito extenso. Indicamos apenas uma referência geral.
 - C. Itzykson e J. Zuber, *Quantum Field Theory*, McGraw-Hill (1980).
- I. Kimel, *A Simple Way of Solving the Hydrogen Atom Problem*, Rev. Bras. de Física, v.12,n.4, 729-737 (1982).
 - O. L. Lange e R. E. Raab, *An operator solution for the hydrogen atom with application to the momentum representation*, Am. J. Phys. **55**, (1978) 913.
 - J. B. Boyling, *Simplified ladder operators for the hydrogen atom*, Am. J. Phys. **56**, (1988) 943.
- N. A. Alves e E. Drigo Filho, *The Factorisation Method and Supersymmetry*, J. Phys. A: Math. Gen. **21** (1988) 3212-3225.
 - F. Cooper e B. Freedman, *Aspects of Supersymmetric Quantum Mechanics*, Ann. Phys. **146**, 262-288 (1983).
- O leitor não precisa se preocupar muito com esta questão, pois não afeta o desenvolvimento deste trabalho. Indicamos apenas uma referência geral sobre o assunto.
 - J. Wess e J. Bagger, *Supersymmetry and Su-*

pergravity, Princeton University Press (1983).

6. O leitor pode consultar qualquer livro texto de física-matemática, por ex.
 — G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press (1966).
7. A rigor, isto não é necessário. É fácil de se verificar que o sistema tem uma simetria $-l \leftrightarrow l-1$, com $P_{-l} = P_{-l-1}$ e $Q_{-l} = -Q_{-l-1}^+$, $Q_{-l}^+ = -Q_{-l-1}$. No entanto, os espaços definidos pelas auto-funções P_l e P_{-l} são desconexos.

8. P. L. Powell e B. Crasemann, *Quantum Mechanics*, Addison Wesley, (1961). — O oscilador harmônico isotrópico é resolvido pelo método convencional, em termos das funções especiais.
9. R. H. Dicke e J. P. Wittke, *Introduction to Quantum Mechanics*, Addison-Wesley (1960). — O oscilador harmônico isotrópico está resolvido de uma maneira muito elegante nesta obra.
 — C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Lalöë, *Mecanique Quantique*, Herman, Paris (1973).