

Supersimetria, método variacional e potencial de Lennard-Jones (12,6)

(*Supersymmetry, variational method and Lennard-Jones (12,6) potential*)

João Cesar Boreggio de Araujo, Gláucia R.P. Borges e Elso Drigo Filho¹

Departamento de Física, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista 'Júlio de Mesquita Filho', São José do Rio Preto, SP, Brasil

Recebido em 16/11/2005; Aceito em 6/1/2006

Neste artigo é feito uma revisão sobre o uso do formalismo da supersimetria em mecânica quântica aliado ao método variacional. Esta abordagem permite obter soluções numéricas dos autovalores de energia da equação de Schrödinger. Como exemplo, o potencial de Lennard-Jones (12,6) é estudado e determina-se autovalores para este potencial. Os resultados obtidos são comparados com os valores encontrados através de outros métodos aproximativos.

Palavras-chave: mecânica quântica, supersimetria, método variacional, potencial de Lennard-Jones.

In this work a review of the supersymmetric quantum mechanics formalism combined with the variational method is done. This approach is useful in order to obtain numerical values for the energy eigenvalues from Schrödinger equation. As an example, the energy eigenvalues from the Lennard-Jones (12,6) potential are determined and the results are compared with other ones obtained from different methods.

Keywords: quantum mechanics, supersymmetry, variational method, Lennard-Jones potential.

1. Introdução

O formalismo supersimétrico vem sendo amplamente utilizado no contexto da mecânica quântica [1-4], em particular, ele pode ser usado para solucionar a equação de Schrödinger. Neste sentido, a supersimetria pode ser entendida como uma generalização do método de fatorização [3-4]. Em problemas envolvendo potenciais exatamente solúveis as autofunções e autovalores podem ser determinados analiticamente através da superálgebra. Ela também pode ser útil em abordagens aproximativas, como, por exemplo, o método variacional. Pela sua simplicidade alguns autores tem sugerido a inclusão deste formalismo em livros textos e cursos de mecânica quântica [5].

Por outro lado, o método variacional⁽⁶⁾ constitui um tratamento bastante útil no estudo de sistemas em que os autovalores de energia não podem ser exatamente determinados. A escolha adequada de uma função de onda teste constitui ingrediente fundamental para a obtenção de bons resultados variacionais. Esta escolha é um ponto delicado da aplicação do método. A respeito deste assunto L.I. Schiff em seu livro escreve [6]: *Thus it is important to make use of any available information or physical intuition in choosing the trial function.*

A mecânica quântica supersimétrica fornece uma

¹E-mail: elso@df.ibilce.unesp.br.

abordagem matemática clara, permitindo uma análise de problemas via método variacional melhor que o tratamento usual, focado no estudo direto das funções de onda. A nova abordagem sugerida é baseada no uso do superpotencial e permite estudar o potencial efetivo que gera a função de onda teste, além da função de onda em si. A forma do potencial efetivo, comparada ao potencial original, fornece uma informação adicional sobre a aplicabilidade da função teste [7-10].

Como exemplo da abordagem sugerida são determinados autovalores para o potencial de Lennard-Jones. Este potencial é muito utilizado em vários ramos da Física, como, por exemplo, física molecular [11] e estado sólido [12]. Como a equação de Schrödinger não pode ser resolvida analiticamente para este potencial, métodos aproximativos são freqüentemente usados para analisá-lo [13-16]. Isto permite que os resultados encontrados via método variacional sejam comparados com valores obtidos por outros métodos.

A seção 2 apresenta sucintamente o formalismo da mecânica quântica supersimétrica. Na seção 3 o método variacional é revisado. Como um exemplo, na seção 4 o potencial de Lennard-Jones (12,6) é estudado através da associação da supersimetria com o método variacional. Finalmente, na seção 5 são colocadas as conclusões.

2. Formalismo da mecânica quântica supersimétrica

Uma introdução ao formalismo da mecânica quântica supersimétrica pode ser encontrada, por exemplo, na Ref. [17]. Em resumo o método de solução da equação de Schrödinger pode ser introduzido a partir de um Hamiltoniano da forma:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0(x). \quad (1)$$

Pode-se escrever este Hamiltoniano em termos dos operadores “bosônicos” a_1^+ e a_1^- , tendo a seguinte forma:

$$a_1^\pm = \mp \frac{d}{dx} + w_1(x), \quad (2)$$

onde $w_1(x)$ é chamado de superpotencial, por simplicidade adotou-se $\hbar = 2m = 1$. Esta escolha não afeta os resultados obtidos e não sobrecarrega a notação. Desta forma, H_1 pode ser escrito da forma:

$$H_1 = a_1^+ a_1^- + E_0^{(1)} = -\frac{d^2}{dx^2} + w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)}, \quad (3)$$

onde $E_0^{(1)}$ é o autovalor do nível mais baixo de energia (estado fundamental).

Para que o Hamiltoniano fatorizado (3) seja igual ao Hamiltoniano original (1), a seguinte condição tem que ser satisfeita:

$$w_1^2(x) - w_1'(x) + E_0^{(1)} = V_0(x). \quad (4)$$

Esta equação é conhecida como equação de Riccati e sua solução implica na determinação de $E_0^{(1)}$ e do superpotencial $w_1(x)$ que está ligado a autofunção do estado fundamental ($\psi_0(x)$). A relação entre $w_1(x)$ e $\psi_0(x)$ pode ser obtida aplicando o operador a_1^- na função de onda do estado fundamental, ou seja:

$$a_1^- \psi_0(x) = 0 \Rightarrow \psi_0(x) \propto \exp \left[-\int w_1(x) dx \right]. \quad (5)$$

O processo de determinação dos autovalores e autofunções pode ser continuado até o problema ser completamente resolvido, como indicado na Ref. [18], através da chamada hierarquia de Hamiltonianos. Entretanto, apenas uma classe restrita de potenciais permite a determinação exata/analítica do problema. Quando isto não for possível o formalismo permite pesquisar uma forma aproximada para o superpotencial ($w_{ef}(x)$) [7]. Este tipo de abordagem permite encontrar funções analíticas aproximadas para as autofunções do problema original. Isso é feito seguindo a Eq. (5), substituindo o superpotencial exato pelo aproximado, isto é:

$$\psi_{ef}(x) = \exp \left[-\int w_{ef}(x) dx \right]. \quad (6)$$

Além disto, pode-se conhecer a expressão analítica, a menos de constante aditiva, dos potenciais efetivos usando a Eq. (4):

$$V_{ef}(x) = w_{ef}^2(x) - w_{ef}'(x). \quad (7)$$

Esta expressão pode ser usada para a comparação gráfica com o potencial original, testando assim a forma escolhida para o superpotencial [10]. Por outro lado, as autofunções efetivas (6) podem ser usadas no método variacional para a obtenção aproximada dos níveis de energia.

3. O método variacional

A fim de desenvolver o método variacional [6] vamos considerar uma função de onda $\bar{\psi}$ normalizada, ou seja, $\int |\bar{\psi}|^2 dx = 1$. Podemos expandir essa função em uma série de autofunções de energia, ou seja:

$$\bar{\psi} = \sum_n A_n \psi_n. \quad (8)$$

Lembrando que ψ_n é uma autofunção, ela deve satisfazer a equação de Schrödinger:

$$H \psi_n = E_n \psi_n. \quad (9)$$

Nestas condições, o valor esperado de H para a função $\bar{\psi}$ é dado por:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int \bar{\psi}^* H \bar{\psi} dx = \\ &= \sum_n \sum_m A_n^* \left(\int \psi_n H \psi_m dx \right) A_m = \\ &= \sum_n \sum_m A_n^* A_m E_m \int \psi_n \psi_m. \end{aligned} \quad (10)$$

A condição de ortonormalidade indica que para $n \neq m$ temos $\int \psi_n \psi_m = 0$ e para $n = m$ temos $\int \psi_n \psi_m = 1$, então, a Eq. (10) fica reduzida a:

$$\langle H \rangle = \sum_n E_n |A_n|^2. \quad (11)$$

Na seqüência substitui-se cada autovalor E_n em (11) pelo autovalor de mais baixa energia, E_0 , obtendo assim a seguinte desigualdade:

$$\langle H \rangle \geq \sum_n E_0 |A_n|^2 = E_0 \sum_n |A_n|^2. \quad (12)$$

Uma vez que $\sum_n |A_n|^2 = 1$, pois a função de onda é normalizada, chega-se a seguinte expressão:

$$E_0 \leq \langle H \rangle = \int \bar{\psi}^* H \bar{\psi} dx. \quad (13)$$

No caso em que $\bar{\psi}$ não é normalizada, pode-se reescrever (13) como:

$$E_0 \leq \frac{\int \bar{\psi}^* H \bar{\psi} dx}{\int |\bar{\psi}|^2 dx}. \quad (14)$$

Este método é usado para calcular um limite superior para o autovalor de energia do estado fundamental. Neste contexto a função $\bar{\psi}$ é construída como sendo dependente de um certo número de parâmetros, a minimização da integral em (14) em relação a esses parâmetros fornece uma estimativa para E . Assim, quanto mais próxima a função estiver do que seria a função de onda real melhor será o resultado obtido.

O método variacional geralmente é aplicado ao estado fundamental, embora não haja restrição formal ao seu uso para estados excitados.

Na abordagem sugerida aqui, usa-se as funções de onda efetivas obtidas através da supersimetria, ou seja, primeiro determina-se um superpotencial efetivo baseado na equação de Ricatti (4) e posteriormente a função teste é encontrada através da relação (6).

4. O potencial de Lennard-Jones (12,6)

Uma boa ilustração da aplicabilidade do formalismo supersimétrico aliado ao método variacional é obtida do estudo do potencial de Lennard-Jones (12,6). Este potencial é dado por:

$$V(r) = D_e \left[\left(\frac{r_e}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_e}{r} \right)^6 \right], \quad (15)$$

onde D_e é a energia de dissociação e r_e é a distância internuclear de equilíbrio. Um bom texto sobre o potencial de Lennard-Jones, sua origem e aplicações no estudo de Moléculas Diatómicas pode ser encontrado na Ref. [19].

Com um pouco da manipulação algébrica é possível perceber que a equação de Schrödinger radial para o potencial (15) pode ser escrita na seguinte forma:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + \lambda \left[\frac{1}{x^{12}} - \frac{2}{x^6} \right] \right\} \psi = \varepsilon \psi, \quad (16)$$

onde $\frac{l(l+1)}{x^2}$ corresponde ao termo de barreira de potencial, $x = \frac{r}{r_e}$, $\lambda = \frac{2mr_e^2 D_e}{\hbar^2}$ e $\varepsilon = \frac{2mr_e^2 E}{\hbar^2}$. Portanto, o Hamiltoniano para o potencial de Lennard-Jones (12,6) é dado por:

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + \lambda \left[\frac{1}{x^{12}} - \frac{2}{x^6} \right]. \quad (17)$$

A solução exata analítica para a equação de Schrödinger para este tipo de potencial não pode ser determinada. Entretanto, pode-se procurar um superpotencial que forneça um potencial efetivo similar ao

original e uma autofunção apropriada para o método variacional. O superpotencial sugerido neste caso [10] tem a forma:

$$W(x) = -\frac{B}{x^6} + A - \frac{h}{x}. \quad (18)$$

Esta sugestão pode ser entendida olhando o potencial gerado pelo superpotencial (18), com esta estrutura garante-se que os termos proporcionais a x^{-12} , x^{-6} e x^{-2} apareçam no potencial efetivo. Com efeito, este superpotencial gera o seguinte potencial efetivo através da expressão dada em (7):

$$V_{ef}(x) = \frac{B^2}{x^{12}} + \frac{2B}{x^7}(h-3) - \frac{2AB}{x^6} + \frac{h}{x^2}(h-1) - \frac{2Ah}{x} + A^2. \quad (19)$$

A autofunção é obtida através da Eq. (6) e pode ser escrita como:

$$\psi_h(x) = \exp\left[-\frac{B}{5x^5} - Ax\right] \cdot x^h, \quad (20)$$

onde h faz o papel de parâmetro variacional.

Comparando os termos proporcionais a $1/x^{12}$ e $1/x^6$ na Eq. (19) com aqueles do potencial original, contido no Hamiltoniano da Eq. (17), é possível fixar os valores para as constantes A e B. Neste caso, tem-se que $A = B = \sqrt{\lambda}$. O autovalor de energia é obtido através da minimização da Eq. (14) em relação ao parâmetro variacional h . Explicitamente, a equação a ser minimizada é dada por:

$$E_\nu = \frac{\int_0^\infty \psi_h(x) \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{\lambda}{x^{12}} - \frac{2\lambda}{x^6} \right] \psi_h(x) dx}{\int_0^\infty \psi_h^2(x) dx}. \quad (21)$$

Os resultados da minimização da energia são mostrados nas Tabelas 1 e 2. Na Tabela 1 estão apresentados os resultados para $l = 0$ com diferentes valores de λ , enquanto na Tabela 2 estão mostrados os valores obtidos para λ fixo (10000), variando os valores de l . Os resultados são comparados com os valores encontrados na literatura.

Tabela 1 - Resultados numéricos para a energia do estado fundamental do potencial de Lennard-Jones (12,6) para diferentes valores de λ e para $l = 0$ (fixo). E_ν representa o valores obtidos pelo método variacional aliado à supersimetria e E_{WKB} são os valores encontrados através do método WKB⁽¹⁵⁾.

λ	h	$A = B$	E_ν	E_{WKB}
100	3,61	10	-0,500554	-0,500973
900	3,52	30	-0,811508	-0,811519
2500	3,51	50	-0,884164	-0,884168
10000	3,51	100	-0,941046	-0,941046

Tabela 2 - Resultados numéricos para o potencial de Lennard-Jones (12,6) para diferentes valores de l e para $\lambda = 10000$ (fixo). E_v representa o valores obtidos pelo método variacional aliado à supersimetria e E_{WKB} são os valores encontrados através do método WKB⁽¹⁴⁾.

l	h	$A = B$	E_v	E_{WKB}
5	3,56	100	-0,938091	-0,93809
10	3,70	100	-0,930215	-0,93022
15	3,92	100	-0,917425	-0,91743
20	4,24	100	-0,899732	-0,89973
25	4,64	100	-0,877151	-0,87715

Os resultados apresentados nas tabelas mostram que os valores variacionais encontrados são equivalentes aos obtidos por WKB. Na Tabela 1 observa-se que, com exceção do primeiro resultado, os resultados coincidem até a 5ª casa decimal. Todos os valores da Tabela 2 praticamente coincidem.

A comparação gráfica entre os potenciais original de Lennard-Jones (12,6) mais o termo de barreira de potencial e efetivo (Eq. (19)) mostra a semelhança entre as duas curvas. Um exemplo desta comparação é mostrado na Fig. 1.

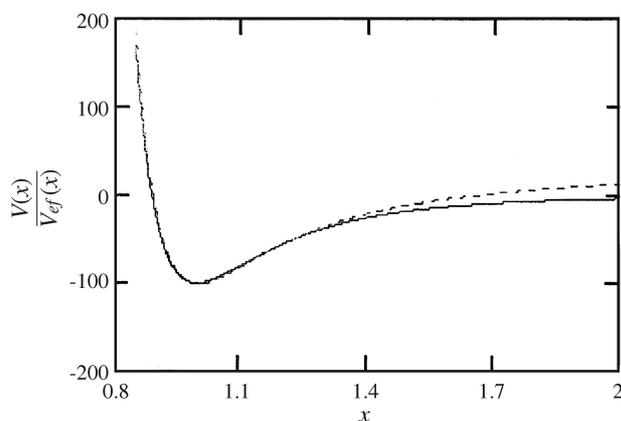


Figura 1 - Comparação entre a curva do potencial original de Lennard-Jones (12,6), $V(x)$ e o potencial efetivo sugerido $V_{ef}(x)$ (Eq. (19)). Os parâmetros usados são $\lambda = 100$, $A = 10$, $B = 10$ e $h = 3,61$.

Esta semelhança indica que o superpotencial sugerido é adequado para ser usado, justificando a qualidade dos autovalores encontrados (Tabelas 1 e 2).

5. Conclusão

O formalismo da mecânica quântica supersimétrica, aliado ao método variacional, se mostra útil para estudar potenciais que não possuem uma solução analítica, como é o caso do potencial de Lennard-Jones (12,6). A superálgebra fornece elementos para se obter uma boa função de onda para ser usada na minimização da energia no método variacional.

A comparação dos resultados encontrados para o potencial de Lennard-Jones com os valores obtidos via WKB mostra a confiabilidade dos resultados (Tabelas 1 e 2). Um teste adicional é a comparação gráfica dos potenciais original e efetivo (Fig. 1) que confirma a semelhança entre eles.

A simplicidade e versatilidade do formalismo proposto permite estender a aplicação do método variacional para várias classes de problema. Uso deste tratamento para outros potenciais pode ser encontrado na literatura, destaca-se os potenciais de Morse [8], Yukawa e Hulthén [7].

Recentemente, o procedimento apresentado tem sido usado com sucesso no estudo de sistemas confinados [20-21] e obtenção de autovalores para estados excitados [9].

Referências

- [1] F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, *Supersymmetry in Quantum Mechanics* (World Scientific, Singapore, 2001).
- [2] G. Junker, *Supersymmetric Methods in Quantum and Statistical Physics* (Springer, Berlin, 1996).
- [3] R. de Lima Rodrigues, e-print hep-th/0205017.
- [4] B. Mieliuk and O. Rosas-Ortiz, J. Phys. A; Math. Gen **37**, 10007 (2004).
- [5] O.L. de Lange and A. Welter, Am. J. Phys. **60**, 254 (1992).
- [6] L.I. Schiff, *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1968), 3ª ed.
- [7] E. Drigo Filho and R.M. Ricotta, Mod. Phys. Lett. **A10**, 1613 (1995).
- [8] E. Drigo Filho and R.M. Ricotta, Phys. Lett. **A269**, 269 (2000).
- [9] G.R.P. Borges, A. de Souza Dutra, E. Drigo and J.R. Ruggiero, Can. J. Phys. **81**, 1283, (2003).
- [10] G.R.P. Borges and E. Drigo Filho Int. J. Mod. Phys. **A16**, 4401, (2001).
- [11] A.N. Matveev, *Molecular Physics* (Ed. Mir, Moscow, 1985).
- [12] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons, New York, 1971), 4ª ed.
- [13] R. Dutt and Y.P. Varshni, J. Phys. B.: At. Mol. Phys. **20**, 2434 (1987).
- [14] H. Harisson and R.B. Bernstein, J. Chem. Phys. **38**, 2135 (1963).
- [15] R.N. Kesarwani and Y.P. Varshni, Can. J. Phys. **58**, 363 (1980).
- [16] S.M. Kirschner and R.L. LeRoy, J. Chem. Phys. **68**, 3139 (1978).
- [17] E. Drigo Filho, Rev. Bras. Ens. Fis. **19**, 152 (1997).
- [18] G.R.P. Borges e E. Drigo Filho, Rev. Bras. Ens. Fis. **21**, 233 (1999).
- [19] A.J. Chiquito e N.G. de Almeida, Rev. Bras. Ens. Fis. **21**, 242 (1999).
- [20] E. Drigo Filho and R.M. Ricotta, Phys. Lett. **A299**, 137 (2002).
- [21] E. Drigo Filho and R.M. Ricotta, Phys Lett. **A320**, 95 (2003).