

# Solução de um potencial exponencial via superálgebra

## Solution to an exponential potential via superalgebra

Leonan Augusto Massete Pera<sup>1</sup>, João Vitor Santos Perles<sup>\*1</sup>, Eder Juno Nicolau Terra<sup>1</sup>,  
Raimundo Pereira da Silva<sup>1</sup>, Elso Drigo Filho<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas,  
São José do Rio Preto, SP, Brasil.

Recebido em 26 de abril de 2022. Revisado em 23 de setembro de 2022. Aceito em 25 de setembro de 2022.

Esse artigo traz uma revisão do formalismo da Mecânica Quântica Supersimétrica e mostra sua aplicação para solucionar um potencial exponencial que, com uma escolha apropriada de parâmetros, é identificado como o potencial de Morse. A solução da equação de Schrödinger para esse potencial é encontrada via fatorização e construção de uma hierarquia de Hamiltonianos, e com o uso dessas ferramentas são encontrados os autovalores de energia e suas respectivas autofunções. A partir do resultado encontrado, fixamos valores de parâmetros com intuito de resgatar os resultados para estados ligados presentes na literatura.

**Palavras-chave:** Supersimetria, Mecânica Quântica, Operadores Bosônicos, Potencial de Morse.

This article provides a review of the Supersymmetric Quantum Mechanics formalism and shows its application to solve an exponential potential that, with an appropriate choice of parameters, is identified as the Morse potential. The solution of the Schrödinger equation for this potential is found via factorization and construction of a hierarchy of Hamiltonians, with the use of these tools the energy eigenvalues and their respective eigenfunctions are found. From the obtained result, we fixed parameter values in order to retrieve the results for bound states present in the literature.

**Keywords:** Supersymmetry, Quantum Mechanics, Bosonic operators, Morse Potential.

## 1. Introdução

Dentro do atual panorama da Mecânica Quântica, a equação de Schrödinger (ES) possui lugar de destaque [1–5], sendo uma equação de onda usada para descrever a natureza em um aspecto fundamental (atômico, subatômico e molecular).

Assim, determinar as soluções da ES é fundamental para a compreensão de sistemas quânticos. Nesse artigo, é estudado um potencial exponencial tal que usando um conjunto adequado dos parâmetros o potencial de Morse é obtido. Esse nome faz referência a Philip M. Morse, que introduziu esse potencial em 1929 no estudo de vibrações de moléculas diatômicas [6]. Desde então, há na literatura diversos trabalhos relacionados a esse tipo de potencial, tanto relativos à sua resolução por diferentes métodos matemáticos (analíticos e numéricos) [7–9] quanto às aplicações em problemas físicos [10, 11].

Diferente da abordagem convencional para resolução da ES [12–14], utiliza-se como metodologia a hierarquia de Hamiltonianos, que é descrita pela fatorização das equações diferenciais e construção das autofunções por

intermédio dos operadores bosônicos [15–18], como mostrado na próxima seção.

A metodologia apresentada permite fatorizar por meio dos chamados operadores supersimétricos o Hamiltoniano original que descreve o sistema estudado. A inversão da ordem desses operadores permite identificar o parceiro supersimétrico. Com o uso desse formalismo, constrói-se uma cadeia de Hamiltonianos ligados entre si, através dos operadores supersimétricos, denominada de hierarquia de Hamiltonianos [14, 17]. Além disso, é importante salientar que a abordagem utilizada nesse trabalho é focada em potenciais com soluções analíticas/exatas. Porém, nos casos em que a equação diferencial para o sistema sujeito ao potencial não pode ser resolvido dessa maneira, há a possibilidade de aplicar métodos aproximativos, como o método variacional [9, 19, 20].

O presente trabalho está organizado como se segue. Na seção 2, apresenta-se o formalismo da hierarquia de Hamiltonianos, descrito com algumas de suas características abordadas de forma detalhada. Na seção 3, o potencial exponencial proposto é resolvido via hierarquia de Hamiltonianos. Na seção 4 são apresentados os resultados e a restrição dos parâmetros que leva ao caso particular do potencial de Morse, conhecido na literatura. Por fim, na seção 5 são apresentadas as conclusões.

\* Endereço de correspondência: [vitor.perles@unesp.br](mailto:vitor.perles@unesp.br)

## 2. Formalismo

De acordo com o formalismo seguido, o ponto de partida é a equação de Schrödinger,

$$H_o\psi(x) = \left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x)\right)\psi(x) = E\psi(x), \quad (1)$$

sendo que consideramos  $\hbar = 2m = 1$  como uma simplificação. A solução com o uso do formalismo da Mecânica Quântica Supersimétrica (MQS) se baseia na fatorização do Hamiltoniano em dois operadores de primeira ordem [18],

$$H_o = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x) = A^+A^- + E_0^{(1)}, \quad (2)$$

em que  $E_0^{(1)}$  é o autovalor de energia do estado fundamental para o Hamiltoniano em questão – primeiro membro da hierarquia – e  $A^+$  e  $A^-$  são os operadores de primeira ordem que aqui serão chamados de operadores bosônicos.

Os operadores bosônicos são definidos como

$$A_m^+ = -\frac{d}{dx} + W(x, b_m) \quad (3)$$

e

$$A_m^- = \frac{d}{dx} + W(x, b_m), \quad (4)$$

onde  $W(x, b_m)$  é um superpotencial dependente da variável  $x$  e de um conjunto de parâmetros  $b_m$ .

A ordem de aplicação dos operadores determina os Hamiltonianos companheiros supersimétricos, sendo que essa definição pode levar à construção de uma hierarquia de Hamiltonianos relacionados entre si através da supersimetria [16, 18]. Dessa forma, o primeiro Hamiltoniano e seu companheiro supersimétrico são dados, respectivamente, por

$$H_{1,-} = H_o - E_0^{(1)} = A_1^+A_1^- = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x) \quad (5)$$

e

$$H_{1,+} = A_1^-A_1^+ = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x), \quad (6)$$

sendo que, quando há solução exata/analítica para o estado fundamental,  $V_0(x)$  difere do potencial original por uma constante que corresponde a energia do estado fundamental do problema,  $E_0^{(1)}$ .

Uma diferença entre os espectros dos companheiros supersimétricos, quando não há quebra de supersimetria, é o espectro de energia. Para  $H_{1,+}$  o nível mais baixo de energia corresponde ao primeiro estado excitado de  $H_{1,-}$ .

Com a substituição das equações (3) e (4) na equação (5) encontramos a equação de Ricatti [21],

$$W_1^2(x, b_1) - \frac{d}{dx}W_1(x, b_1) = V_0(x) - E_0^{(1)}, \quad (7)$$

de forma que, conhecendo um superpotencial que satisfaça a equação (7), é possível encontrar o estado fundamental do Hamiltoniano da equação (5). Assim, pela fatorização proposta, é encontrado o menor autovalor de energia para o problema estudado. Além disso, com as considerações feitas na equação (6), se define  $V_1(x)$  como:

$$V_1(x) = W_1^2(x) + \frac{d}{dx}W_1(x). \quad (8)$$

Para continuar com a construção da hierarquia, vamos construir  $H_{2,-}$  pela fatorização de  $H_{1,+}$ ,

$$H_{2,-} = H_{1,+} - E_0^{(2)} = A_2^+A_2^-, \quad (9)$$

sendo os operadores bosônicos  $A_2^+$  e  $A_2^-$  construídos com um superpotencial  $W_2(x)$  que é dependente da variável  $x$  e um novo conjunto de parâmetros  $b_2$ . Destarte, a solução da equação (9) também é obtida pela solução de uma equação de Ricatti que fornece  $E_0^{(2)}$ .

Além de encontrar  $H_{2,-}$ , também se contrói seu companheiro supersimétrico invertendo a ordem de aplicação dos operadores bosônicos,

$$H_{2,+} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) = A_2^-A_2^+, \quad (10)$$

em que  $V_2(x) = W_2^2 + \frac{d}{dx}W_2$ .

Os demais Hamiltonianos dessa hierarquia são construídos seguindo os mesmos passos, ou seja, identificando o superpotencial para cada membro. Deve-se ficar atento para o fato de que conforme a hierarquia aumenta, os espectros de energia dos Hamiltonianos são deslocados. Dessa forma, o nível mais baixo de energia de um membro da hierarquia corresponde ao primeiro estado excitado do Hamiltoniano do anterior. Para  $H_{1,-}$  e  $H_{2,-}$  a relação entre o espectro de energia é

$$E_0^{(2)} = E_1^{(1)}. \quad (11)$$

Generalizando esse caso para um espectro com  $n$  estados de energia em uma hierarquia de  $m$  Hamiltonianos, temos [16, 18]

$$E_n^{(m)} = E_{n+1}^{(m-1)} = \dots = E_{n+m-1}^{(1)}, \quad (12)$$

com  $n = 0, 1, 2, 3 \dots$  representando o nível de energia e  $m = 1, 2, 3 \dots$  os Hamiltonianos da hierarquia.

Por meio da utilização dos operadores bosônicos é possível obter também a autofunção para cada Hamiltoniano construído. Considerando que, por definição,  $A_1^+A_1^-$  tem autovalor nulo [18], é condição suficiente para que

$$A_1^- \psi_0^{(1)} = 0. \quad (13)$$

Dessa forma, a autofunção pode ser obtida pela equação diferencial de primeira ordem, vide a definição do operador  $A^+$  na equação (3). Temos então

$$\psi_0^{(1)} \propto \exp\left[-\int_x W_1(\bar{x})d\bar{x}\right]. \quad (14)$$

Para os demais Hamiltonianos a autofunção do estado fundamental é encontrada de forma análoga [22], o que leva a

$$\psi_0^{(m)} \propto \exp \left[ - \int_x W_m d\bar{x} \right]. \tag{15}$$

O estado fundamental de cada Hamiltoniano que compõe a hierarquia corresponde a um nível de energia do Hamiltoniano anterior, e por consequência também tem um correspondente em  $H_{1,-}$ . O mesmo se aplica às autofunções e, em potenciais exatamente ou parcialmente solúveis, é possível encontrar as autofunções de estados excitados, vide [18], pelas relações

$$\psi_n^{(m)} \propto A_{m-1}^- \dots A_1^- \psi_{n+m-1}^{(1)} \tag{16}$$

e

$$\psi_{n+m-1}^{(1)} \propto A_1^+ \dots A_{m-1}^+ \psi_n^{(m)}. \tag{17}$$

Aplicando este formalismo em problemas de potenciais exatamente ou parcialmente solúveis, conseguimos encontrar a solução para a ES via fatorização do Hamiltoniano, como no caso trabalhado a seguir, por exemplo.

### 3. Potencial Exponencial

O potencial de interesse, estudado nessa seção, é dado por

$$V(x) = \alpha e^{-2ax} + \beta e^{-ax} + \gamma, \tag{18}$$

sendo que  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  são constantes relacionadas com a profundidade do poço e  $a$  com a largura. Vamos discutir casos mais imediatos, em que  $\alpha \geq 0$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  são reais, e também restringimos  $a > 0$  e real. A ES a ser resolvida corresponde à equação (1) para o potencial acima. Seguindo o formalismo da MQS mostrado na seção anterior, para fatorizar o primeiro Hamiltoniano da hierarquia é necessário um superpotencial que satisfaça a equação de Ricatti (7) para o potencial trabalhado. Dessa forma, temos

$$W_1^2(x) - W_1'(x) + E_0^{(1)} = \alpha e^{-2ax} + \beta e^{-ax} + \gamma, \tag{19}$$

que é satisfeita por

$$W_1(x) = -\sqrt{\alpha} e^{-ax} + b_1. \tag{20}$$

O superpotencial acima satisfaz a equação (19) com o parâmetro  $b_1 = -(\frac{a}{2} + \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}})$ . A constante  $\sqrt{\alpha}$  também pode ser determinada considerando-a como um parâmetro adicional e fixado *a posteriori*. Entretanto, como esse parâmetro é sempre o mesmo ao longo da hierarquia, optou-se por fixá-lo de início, sem sobrecarregar a notação. Com isso, o autovalor de energia do estado fundamental é

$$E_0^{(1)} = \gamma - b_1^2. \tag{21}$$

A autofunção do primeiro Hamiltoniano pode ser obtida a partir da equação (15):

$$\psi_0^{(1)}(x) \propto \exp \left[ -\frac{\sqrt{\alpha}}{a} e^{-ax} - b_1 x \right]. \tag{22}$$

A construção do companheiro supersimétrico de  $H_{1,-}$  é feita como na equação (6) e  $H_{2,-}$  é construído como visto na equação (9). Sendo assim, temos:

$$\begin{aligned} W_2^2(x) - W_2'(x) + E_0^{(2)} \\ = \alpha e^{-2ax} + (\sqrt{\alpha}a - 2\sqrt{\alpha}b_1)e^{-ax} + \gamma. \end{aligned} \tag{23}$$

Pode ser observado que o potencial do companheiro supersimétrico tem a mesma forma funcional do potencial original (*shape invariant*) [23, 24]. Dessa maneira, o superpotencial que satisfaz a equação (23) é similar a  $W_1(x)$  [18, 23], sendo

$$W_2(x) = -\sqrt{\alpha} e^{-ax} + b_2. \tag{24}$$

A solução do estado fundamental para o segundo Hamiltoniano da hierarquia, de forma análoga ao primeiro, é exata para o parâmetro  $b_2 = -(\frac{3a}{2} + \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}})$ , com a energia valendo

$$E_0^{(2)} = \gamma - b_2^2. \tag{25}$$

A função de onda  $\psi_0^{(2)}(x)$ , assim como  $\psi_0^{(1)}(x)$ , é obtida pela equação (15):

$$\psi_0^{(2)}(x) \propto \exp \left[ -\frac{\sqrt{\alpha}}{a} e^{-ax} - b_2 x \right]. \tag{26}$$

Aplicando o operador  $A_1^+$  sobre  $\psi_0^{(2)}(x)$  obtém-se a função de onda para o primeiro estado excitado de  $H_{1,-}$ ,

$$\begin{aligned} \psi_1^{(1)}(x) \propto & -(\sqrt{\alpha}e^{-ax} - b_2) \exp \left[ -\frac{\sqrt{\alpha}}{a} e^{-ax} - b_2 x \right] \\ & - \sqrt{\alpha} \exp \left[ -(a + b_2)x - \frac{\sqrt{\alpha}}{a} e^{-ax} \right] \\ & + b_1 \exp \left[ -\frac{\sqrt{\alpha}}{a} e^{-ax} - b_2 x \right]. \end{aligned} \tag{27}$$

Para obter as próximas funções de onda e níveis de energia para os estados excitados é necessário a construção dos próximos membros da hierarquia de Hamiltonianos, como explicitado nas equações (16) e (17). Como já mencionado, há uma invariância na forma funcional, sendo assim os superpotenciais são generalizados da seguinte maneira:

$$W_m(x) = -\sqrt{\alpha} e^{-ax} + b_m. \tag{28}$$

Na equação (28) os membros da hierarquia são representados por  $m = 1, 2, 3 \dots$

Os autovalores de energia são escritos de acordo com a equação (12), por consequência a expressão geral para a energia do primeiro Hamiltoniano é

$$E_n^{(1)} = \gamma - b_m^2, \quad (29)$$

onde a representação dos níveis de energia é dada por  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ;  $m = 1, 2, 3, \dots$  está relacionado com a hierarquia. Na generalização conseguimos estabelecer o vínculo para um espectro de energia de forma que  $m = n + 1$ .

O parâmetro  $b$  é generalizado como

$$b_m = - \left[ \left( m - \frac{1}{2} \right) a + \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}} \right]. \quad (30)$$

A função de onda geral para o estado fundamental dos membros da hierarquia tem a seguinte forma:

$$\psi_0^{(m)} \propto \exp \left[ -\frac{\sqrt{\alpha}}{a} e^{-ax} - b_m x \right]. \quad (31)$$

Para construir os estados excitados, usamos as autofunções encontradas em (31) na relação (17), de modo que

$$\psi_n^{(1)} \propto A_1^+ \dots A_n^+ \left( \exp \left[ -\frac{\sqrt{\alpha}}{a} e^{-ax} - b_m x \right] \right). \quad (32)$$

Assim, a solução geral é dada pelos autovalores de energia apresentados na equação (29) e pelas autofunções associadas, descritas nas equações (31) e (32).

#### 4. Potencial de Morse Usual

A solução apresentada até aqui é válida para qualquer valor de  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $a$  para o potencial original. A fim de verificar essa solução, consideramos as constantes  $\alpha = D$ ,  $\beta = -2D$  e  $\gamma = 0$  para um caso particular do potencial de Morse [6]:

$$V_M(x) = D e^{-2ax} - 2D e^{-ax}. \quad (33)$$

O autovalor de energia do estado fundamental ( $n = 0$ ) para o primeiro Hamiltoniano do caso particular é dado também pela equação (29). Todavia, agora a energia estará relacionada com o parâmetro  $D$  de forma que

$$E_0^{(1)} = - \left( \frac{a}{2} - \sqrt{D} \right)^2. \quad (34)$$

A função de onda para esse estado, seguindo a indicação da equação (22), é dada pela expressão:

$$\psi_0^{(1)}(x) \propto \exp \left[ -\frac{\sqrt{D}}{a} e^{-ax} + \left( \frac{a}{2} - \sqrt{D} \right) x \right]. \quad (35)$$

Os demais níveis de energia são obtidos pela equação (29), com  $b_m$ , da equação (30), reescrito como

$$b_m = - \left[ \left( m - \frac{1}{2} \right) a - \sqrt{D} \right], \quad (36)$$

para  $m = 1, 2, 3, \dots$

Sendo assim, os autovalores são

$$E_n = -b_m^2, \quad (37)$$

com  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , e o vínculo  $m = n + 1$ .

De forma análoga às equações (31) e (32), as autofunções para o estado fundamental de cada Hamiltoniano neste caso são

$$\psi_0^{(m)} \propto \exp \left[ -\frac{\sqrt{D}}{a} e^{-ax} - b_m x \right], \quad (38)$$

e para os estados excitados temos

$$\psi_n^{(1)} \propto A_1^+ \dots A_n^+ \left( \exp \left[ -\frac{\sqrt{D}}{a} e^{-ax} - b_m x \right] \right). \quad (39)$$

Como esperado, os resultados encontrados para esse caso particular presentes na literatura [6, 25, 26] estão de acordo com a solução apresentada aqui.

#### 5. Conclusões

Neste trabalho, foi feita uma revisão do formalismo da MQS aplicado na fatorização e construção de uma hierarquia de Hamiltonianos. Com os resultados obtidos, encontramos a solução para um tipo de potencial exponencial generalizado. Partindo da solução geral, encontramos também a solução para um caso particular, atribuindo valores aos parâmetros  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  que restringe o caso mais geral para o potencial de Morse usual [6].

Assim, foi identificado uma classe de potenciais que correspondem a uma generalização do potencial de Morse. Na literatura encontramos alguns trabalhos que abordam essa generalização por outros formalismos [27, 28]. Entretanto, até onde vai o conhecimento dos autores, não se encontrou nenhuma discussão via Mecânica Quântica Supersimétrica do resultado aqui apresentado.

O formalismo discutido pode ser usado como um método alternativo de obtenção da solução da equação de Schrödinger, podendo ser usado em outros problemas. Também é possível ampliar sua aplicação para outros tipos de problemas, como potenciais parcialmente solúveis ou mesmo potenciais que exigem métodos aproximativos.

Em especial, para o potencial tratado aqui, o formalismo permite a construção analítica dos operadores supersimétricos. Com essa solução, também se pode aplicar a metodologia para sistemas com condições de contorno não usuais e obter soluções aproximadas. O caso particular do potencial de Morse confinado [29] é um exemplo.

## Agradecimentos

Os autores agradecem pelo suporte financeiro parcial da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), processos números 88887.641424/2021-00, 88887.606561/2021-00 e 88887.606562/2021-00; e do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo processo número 130527/2021-1.

## Referências

- [1] W. Jaskólski, *Physics Reports* **271**, 1 (1996).
- [2] Y.P. Kravchenko, M.A. Liberman e B. Johansson, *Physical Review A* **54**, 287 (1996).
- [3] S.W. Doescher e M.H. Rice, *American Journal of Physics* **37**, 1246 (1969).
- [4] A.I. Ahmadov, M. Naeem, M.V. Qocayeva e V.A. Tarverdiyeva, *Journal of Physics: Conference Series* **965**, 012001 (2018).
- [5] L.D. Landau e E.M. Lifshitz, *Quantum mechanics: non-relativistic theory* (Elsevier, Amsterdam, 2013).
- [6] P.M. Morse, *Physical Review* **34**, 57 (1929).
- [7] C. Berkdemir e J. Han, *Chemical Physics Letters* **409**, 203 (2005).
- [8] J. Yu, S. Dong e G. Sun, *Physics Letters A* **322**, 290 (2004).
- [9] A. Sharma e O.S.K. Sastri, *International Journal of Quantum Chemistry* **121**, e26682 (2021).
- [10] H. Taseli, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **31**, 779 (1998).
- [11] H. Ulrich e P. Hess, *Chemical Physics Letters* **61**, 380 (1979).
- [12] L.I. Schiff, *A Textbook of Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1949).
- [13] D.J. Griffiths e D.F. Schroeter, *Introduction to quantum mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2018).
- [14] A. Algozini Junior, *Diferentes métodos de resolução da equação de Schrödinger independente do tempo*, disponível em: <https://repositorio.unesp.br/handle/11449/183646>.
- [15] G. Junker, *Supersymmetric methods in quantum and statistical physics* (Springer Science & Business Media, Berlin, 2012).
- [16] F. Cooper, A. Khare e U. Sukhatme, *Physics Reports* **251**, 267 (1995).
- [17] J.M.C. Monteiro, A. Algozini Júnior e E. Drigo Filho, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **41**, e20180315 (2019).
- [18] E. Drigo Filho, *Supersimetria aplicada à mecânica quântica: estudo da equação de Schrödinger* (Editora Unesp, São Paulo, 2009).
- [19] J.C.B. Araujo, G.R.P. Borges e E. Drigo Filho, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **28** 41 (2006).
- [20] D.E. Ellis e G.S. Painter, *Physical Review B* **2**, 2887 (1970).
- [21] D.G. Zill e M.R. Cullen, *Equações diferenciais* (Pearson Makron Books, São Paulo, 2005), v. 1.
- [22] G.R.P. Borges, E. Drigo Filho e R.M. Ricotta, *Physica A* **389**, 3892 (2010).
- [23] E. Drigo Filho e R.M. Ricotta, *Physics Letters A* **269**, 269 (2000).
- [24] H.O. Batael, J.F. Silva, A.N. Silva, S.F.M. Santos e E. Drigo Filho, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **40**, e2305 (2018).
- [25] A. Del Sol Mesa, C. Quesne e Y.F. Smirnov, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **31**, 321 (1998).
- [26] S.H. Dong, R. Lemus e A. Frank, *International Journal Of Quantum Chemistry* **86**, 433 (2002).
- [27] P.H.F. Nogueira e A.S. Castro, *Journal of Mathematical Chemistry* **54**, 1783 (2016).
- [28] M.G. Garcia, A.S. Castro, P. Alberto e L.B. Castro, *Physics Letters A* **381**, 2050 (2017).
- [29] J.F. Silva, *Interações íon-dipolo e vibracional dentro de cavidades esféricas via método variacional*, disponível em: <https://repositorio.unesp.br/handle/11449/180802>.