

# Uma breve discussão sobre os possíveis estados ligados para uma classe de potenciais singulares

(A brief discussion on the possible bound states for a class of singular potentials)

Douglas R.M. Pimentel, Antonio S. de Castro<sup>1</sup>

Departamento de Física e Química, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Guaratinguetá, SP, Brasil  
Recebido em 23/5/2013; Aceito em 19/7/2013; Publicado em 6/2/2014

Investiga-se a equação de Schrödinger unidimensional com uma classe de potenciais  $V(|x|)$  que se anulam no infinito e apresentam singularidade dominante na origem na forma  $\alpha/|x|^\beta$  ( $0 < \beta \leq 2$ ). A hermiticidade dos operadores associados com quantidades físicas observáveis é usada para determinar as condições de contorno apropriadas. Dupla degenerescência e exclusão de soluções simétricas, consoante o valor de  $\beta$ , são discutidas. Soluções explícitas para o átomo de hidrogênio e o potencial de Kratzer são apresentadas.

**Palavras-chave:** potencial singular, degenerescência, átomo de hidrogênio unidimensional, potencial de Kratzer, colapso para o centro.

The one-dimensional Schrodinger equation for a class of potentials  $V(|x|)$  which vanish at infinity and present dominant singularity at the origin in the form  $\alpha/|x|^\beta$  ( $0 < \beta \leq 2$ ) is investigated. The hermiticity of the operators related to observable physical quantities is used to determinate the proper boundary conditions. Double degeneracy and exclusion of symmetric solutions, depending on the value of  $\beta$ , are discussed. Explicit solutions for the hydrogen atom and the Kratzer potential are presented.

**Keywords:** singular potential, degeneracy, one-dimensional hydrogen atom, Kratzer potential, collapse to the center.

## 1. Introdução

O problema geral de espalhamento e estados ligados em potenciais singulares é um tema antigo e recorrente em mecânica quântica (veja, *e.g.*, a Ref. [1]). Recentemente, o oscilador harmônico singular foi esmiuçado nesta revista [2], e revelou-se uma opulência de conceitos e técnicas que são da maior importância para os estudantes e instrutores de mecânica quântica e física matemática.

O problema com o potencial  $V(|x|) = -|\alpha|/|x|$ , conhecido como átomo de hidrogênio unidimensional, tem recebido considerável atenção na literatura por mais de cinquenta anos (para uma ampla lista de referências relacionadas com celeumas e aplicações em física atômica, física molecular e em física da matéria condensada veja, *e.g.*, Refs. [3,4]). O problema também tem sido objeto de investigação em diversos contextos relativísticos [5-8]. O potencial da forma  $\alpha_1/|x| + \alpha_2/x^2$ , com  $x \in [0, \infty)$  e  $\alpha_1 < 0$  e  $\alpha_2 > 0$ , conhecido como potencial de Kratzer, tem sido usado na descrição do espectro molecular [9], e também no estudo de transferência de energia vibracional de moléculas poliatômicas [10]. O pro-

blema de estados ligados da equação de Schrödinger com o potencial de Kratzer é um problema analiticamente solúvel, e sua solução pode ser encontrada em livros-texto (Refs. [11,12], por exemplo). O caso unidimensional, com parâmetros  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  arbitrários, também é um problema analiticamente solúvel, e tem sido investigado no âmbito de equações relativísticas [6,13].

Na esteira pedagógica da Ref. [2], abordamos neste trabalho o problema de estados ligados no âmbito da equação de Schrödinger unidimensional para uma classe de potenciais  $V(|x|)$  que se anulam no infinito e apresentam singularidade dominante na origem na forma  $\alpha/|x|^\beta$  ( $0 < \beta \leq 2$ ). Visto que  $x = 0$  é um ponto singular da equação de Schrödinger, a determinação de suas soluções requer uma análise cuidadosa na vizinhança da origem. A hermiticidade dos operadores associados com quantidades físicas observáveis põe à mostra as condições de contorno apropriadas. Demonstramos que o espectro do problema definido no semi-eixo é não-degenerado e que não há estados ligados se o potencial com comportamento dominante na origem do tipo inversamente quadrático for fortemente atrativo. A extensão do problema para todo o eixo re-

<sup>1</sup>E-mail: castro@pq.cnpq.br.

vela um espectro não-degenerado se  $\beta < 2$ , e degenerado se  $\beta = 2$ . Revela-se também que somente autofunções antissimétricas ocorrem no caso  $1 \leq \beta < 2$ , e que autofunções simétricas e antissimétricas ocorrem no caso  $\beta < 1$ . A seguir investigamos as soluções para  $V(|x|)$  com formas bem definidas. Começamos com o problema definido no semieixo, e depois de fatorar o comportamento da autofunção na origem e no infinito, a equação de Schrödinger se transmuta em uma equação diferencial hipergeométrica confluyente para a classe de potências de interesse. Demonstramos que um conjunto infinito de estados ligados tem presença no caso do potencial singular atrativo do tipo  $1/|x|$ , ainda que o potencial seja fortemente atrativo. Também mostramos que no caso da adição de um termo singular fracamente atrativo do tipo  $1/x^2$  não há cabimento em se falar em colapso para a origem (como afirmado na Ref. [11]) ou inexistência de estado fundamental, e que há um conjunto infinito de estados ligados. Dentro da classe de potenciais investigados neste trabalho, demonstramos a inexistência de estados ligados com o potencial  $V(|x|) = \alpha/x^2$ , e apresentamos a solução explícita dos estados ligados com o potencial  $V(|x|) = \alpha_1/|x| + \alpha_2/x^2$ , com  $\alpha_1 \neq 0$ .

## 2. Potenciais singulares na origem

A equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo para uma partícula de massa  $m$  sujeita a um potencial externo  $V(x)$  é dada por

$$H\psi = E\psi, \quad (1)$$

onde  $H$  é o operador hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V. \quad (2)$$

Aqui,  $\psi(x)$  é a autofunção que descreve o estado estacionário,  $E$  é a autoenergia, e  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida ( $\hbar = h/(2\pi)$ ). A equação de Schrödinger também pode ser escrita na forma

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \left(k^2 + \frac{2mV}{\hbar^2}\right)\psi = 0, \quad (3)$$

com

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (4)$$

A quantidade

$$\rho = |\psi|^2 \quad (5)$$

é interpretada como sendo a densidade de probabilidade. Com condições de contorno apropriadas, o problema se reduz à determinação do par característico  $(E, \psi)$  de uma equação do tipo Sturm-Liouville (veja,

*e.g.*, Ref. [14]). Todas as quantidades físicas observáveis correspondem a operadores hermitianos. Para autofunções definidas no intervalo  $[x_1, x_2]$ , o operador  $\mathcal{O}$  é dito ser hermitiano se

$$\int_{x_1}^{x_2} dx (\mathcal{O}\psi_1)^* \psi_2 = \int_{x_1}^{x_2} dx \psi_1^* (\mathcal{O}\psi_2), \quad (6)$$

onde  $\psi_1$  e  $\psi_2$  são duas autofunções quaisquer que fazem  $\int_{x_1}^{x_2} dx \psi_1^* (\mathcal{O}\psi_2) < \infty$ . Em particular, as autofunções devem ser quadrado-integráveis, *viz.*  $\int_{x_1}^{x_2} dx |\psi|^2 < \infty$ .

Neste trabalho focalizamos nossa atenção nos estados ligados com potenciais que têm o comportamento

$$V(|x|) \sim \begin{cases} \frac{\alpha}{|x|^\beta}, & |x| \rightarrow 0 \\ 0, & |x| \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (7)$$

com  $0 < \beta \leq 2$ , e consideramos autofunções definidas no intervalo  $[0, \infty)$ . Neste caso, a equação de Schrödinger é uma equação diferencial singular e a autofunção pode manifestar algum comportamento patológico. Tal sequela poderia comprometer a existência de integrais do tipo  $\int_0^\infty dx \psi_1^* (\mathcal{O}\psi_2)$ , e assim comprometer a hermiticidade dos operadores associados com as quantidades físicas observáveis. Por isto, o comportamento das soluções da Eq. (3) na vizinhança da origem exige muita atenção. Visto que os estados ligados constituem uma classe de soluções da equação de Schrödinger que representam um sistema localizado numa região finita do espaço, devemos procurar autofunções que se anulam à medida que  $|x| \rightarrow \infty$ . Também, neste caso podemos normalizar  $\psi$  fazendo  $\int_0^\infty dx |\psi|^2 = 1$ .

Na vizinhança da origem a Eq. (3) passa a ter a forma

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m\alpha}{\hbar^2|x|^\beta} \psi \simeq 0, \quad (8)$$

e no semieixo positivo podemos escrever a solução geral da Eq. (8) como

$$\psi \simeq \begin{cases} A|x|^{s_+} + B|x|^{s_-}, & \text{para } s_+ \neq s_- \\ C|x|^{1/2} + D|x|^{1/2} \log|x|, & \text{para } s_+ = s_-, \end{cases} \quad (9)$$

onde  $A, B, C$  e  $D$  são constantes arbitrárias, e  $s_\pm$  é solução da equação indicial

$$s_\pm(s_\pm - 1) - \frac{2m\alpha}{\hbar^2|x|^{\beta-2}} \simeq 0. \quad (10)$$

A equação indicial resulta da consideração dos termos de mais baixa ordem da expansão em séries de potências. Note que esta equação faz sentido somente

<sup>2</sup>A origem é uma singularidade não-essencial (ou regular) se  $x^2V(|x|)$  for finita no limite  $|x| \rightarrow 0$ . Caso contrário, a origem é uma singularidade essencial (ou irregular). No caso de singularidade não-essencial, o teorema de Fuchs (veja, *e.g.* Ref. [14]) garante que a solução geral da equação diferencial é a combinação linear de duas soluções linearmente independentes  $c_1S_1(x) + c_2S_2(x)$ , onde  $S_1(x)$  e  $S_2(x)$  são expressíveis como séries de potências em torno da origem, ou  $c_1S_1(x) + c_2(S_1(x) \log|x| + S_2(x))$ .

se  $\beta \leq 2$ , *i.e.*, se a origem for uma singularidade não-essencial.<sup>2</sup> Assim sendo, os estados ligados em potenciais com singularidade mais forte que  $1/x^2$  estão excluídos de nossa consideração. A equação indicial tem as soluções

$$s_{\pm} = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \sqrt{1 + \frac{8m\alpha}{\hbar^2}} \right), \quad \text{para } \beta = 2, \quad (11)$$

e

$$s_+ = 1 \text{ e } s_- = 0, \quad \text{para } \beta < 2. \quad (12)$$

Na vizinhança da origem, o comportamento do termo

$$V_{\bar{n}n} = \psi_{\bar{n}}^* \frac{\alpha}{|x|^\beta} \psi_n$$

ameaça a hermiticidade do operador associado com a energia potencial. Para  $\beta = 2$  e  $s_+ \neq s_-$ , podemos escrever

$$V_{\bar{n}n} \simeq \frac{\alpha}{|x|^\beta} \left[ A_{\bar{n}}^* A_n |x|^{2\text{Re}s_+} + B_{\bar{n}}^* B_n |x|^{2\text{Re}s_-} + A_{\bar{n}}^* B_n |x|^{s_+ + s_-} + B_{\bar{n}}^* A_n |x|^{s_+ + s_-} \right], \quad (13)$$

e para  $\beta = 2$  e  $s_+ = s_-$

$$V_{\bar{n}n} \simeq \frac{\alpha}{|x|^\beta} \left[ C_{\bar{n}}^* C_n + D_{\bar{n}}^* D_n \log^2 |x| + (C_{\bar{n}}^* D_n + D_{\bar{n}}^* C_n) \log |x| \right]. \quad (14)$$

Vemos destas últimas relações que a hermiticidade do operador associado com a energia potencial é verificada somente se  $\text{Re } s_{\pm} > 1/2$ , o que equivale a dizer que o sinal negativo defronte do radical da Eq. (11) deve ser descartado e  $\alpha$  deve ser maior que  $\alpha_c$ , com

$$\alpha_c = -\frac{\hbar^2}{8m}. \quad (15)$$

Note que a solução expressa pela segunda linha da Eq. (9), correspondente à raiz dupla da equação indicial, perde sua serventia. Para  $\beta < 2$  temos que  $V_{\bar{n}n}$  é integrável somente se  $\psi$  na primeira linha da Eq. (9) tiver  $B = 0$  para  $1 \leq \beta < 2$ . Porque a equação de Schrödinger é linear e sua solução pode envolver apenas uma constante de integração multiplicativa, a ser determinada por intermédio da condição de normalização, devemos ter  $A = 0$  ou  $B = 0$  para  $\beta < 1$ .

Diante do exposto, podemos afirmar que  $\psi$  se comporta na vizinhança da origem como

$$F|x|^s, \quad (16)$$

onde  $F$  é uma constante arbitrária, e  $s$  é uma quantidade real com os valores possíveis segregados como

segue:

$$s = \begin{cases} \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{8m\alpha}{\hbar^2}} \right), & \text{para } \beta = 2 \text{ e } \alpha > \alpha_c \\ 1, & \text{para } 1 \leq \beta < 2 \\ 0 \text{ ou } 1, & \text{para } \beta < 1. \end{cases} \quad (17)$$

O critério de hermiticidade do operador associado com a energia potencial é lícito e suficiente para descartar soluções espúrias. A ortonormalizabilidade das autofunções (relacionada com a hermiticidade do operador hamiltoniano) e a hermiticidade do operador momento são critérios mais frágeis porque envolvem o comportamento de  $\psi_{\bar{n}}^* \psi_n$  e  $\psi_{\bar{n}}^* d\psi_n/dx$  na vizinhança da origem, respectivamente. O requerimento da hermiticidade do operador energia cinética é tão rígido quanto o requerimento da hermiticidade do operador energia potencial para  $\beta = 2$ , porém é mais frágil para  $\beta < 2$ . A bem da verdade, a hermiticidade do hamiltoniano tem sido usada com sucesso na descrição do espectro do átomo de hidrogênio unidimensional [3] tanto quanto para desmascarar o hidrino (estado estrambótico do hidrogênio com energia mais baixa que aquela de seu estado fundamental normal) [7]. É instrutivo notar que o comportamento da autofunção na vizinhança da origem independe da intensidade do potencial, caracterizada pelo parâmetro  $\alpha$ , no caso em que o potencial é menos singular que  $1/x^2$ , e que a condição de Dirichlet homogênea ( $\psi(0_+) = 0$ ) é essencial sempre que  $1 \leq \beta \leq 2$  ( $s > 1/2$ ), contudo ela também ocorre para  $\beta < 1$  quando  $s = 1$  mas não para  $s = 0$ . Estes resultados estão sumarizados na Tabela 1.

Tabela 1 - Autofunção e sua primeira derivada na vizinhança da origem em função dos parâmetros do potencial.

	$\psi _{x=0_+}$	$\frac{d\psi}{dx} _{x=0_+}$
$\beta = 2$ e $\alpha > 0$	0	0
$\beta = 2$ e $\alpha < 0$	0	$\infty$
$1 \leq \beta < 2$	0	$< \infty$
$\beta < 1$ e $s = 0$	$< \infty$	0
$\beta < 1$ e $s = 1$	0	$< \infty$

A equação de Schrödinger independente do tempo para o nosso problema, Eq. (3), tem o comportamento para grandes valores de  $|x|$  dado por  $d^2\psi/dx^2 - k^2\psi \simeq 0$ , e daí sucede que a forma assintótica da solução quadrado-integrável é dada por

$$\psi \simeq e^{-k|x|}, \quad k \in \mathbb{R}, \quad (18)$$

onde  $k$  está definido pela Eq. (4). Portanto, podemos afirmar que os possíveis estados ligados têm espectro negativo.

### 3. Solução no semieixo

As condições de contorno impostas sobre a autofunção nos extremos do intervalo nos permite tirar conclusões

acerca da degenerescência. Com esta finalidade, seguimos os passos da Ref. [12]. Sejam  $\psi_1$  e  $\psi_2$  duas autofunções correspondentes à mesma energia. A equação de Schrödinger (3) implica que

$$\psi_1 \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} - \psi_2 \frac{d^2 \psi_1}{dx^2} = 0. \quad (19)$$

Nesta circunstância, a integral da Eq. (19) resulta em

$$\psi_1 \frac{d\psi_2}{dx} - \psi_2 \frac{d\psi_1}{dx} = W(\psi_1, \psi_2) = W_0 = \text{constante}, \quad (20)$$

onde  $W(\psi_1, \psi_2)$  designa o wronskiano de  $\psi_1$  e  $\psi_2$ . O comportamento assintótico de  $\psi_1$  e  $\psi_2$  faz  $W_0 = 0$ , e assim o wronskiano é nulo em todo o semieixo, tendo como consequência imediata a dependência linear entre  $\psi_1$  e  $\psi_2$ . Conclui-se, então, que o espectro é não-degenerado. No entanto, tal conclusão é fidedigna somente se a Eq. (19) for integrável. Na vizinhança da origem, cada parcela do lado esquerdo de (19) é proporcional a  $s(s-1)|x|^{2s-2}$ , sendo integrável somente se  $s = 0$  ou  $s > 1/2$ . Destarte, a adoção do bem-afortunado critério de hermiticidade do operador associado com a energia potencial garante a inexistência de degenerescência ainda que os potenciais sejam singulares.

Note que para o problema definido no semieixo mas limitado por uma barreira infinita no semieixo complementar, a solução com  $s = 0$  deve ser banida por causa da continuidade da autofunção em  $x = 0$ .

#### 4. Solução em todo o eixo

Com potenciais pares sob a troca de  $x$  por  $-x$ , as autofunções em todo o eixo, com paridades bem definidas, podem ser obtidas das autofunções definidas no semi-eixo por meio de extensões simétricas e antissimétricas. A autofunção definida para todo o eixo  $X$  pode ser escrita como

$$\psi^{(p)}(x) = [\theta(x) + p\theta(-x)]\psi(|x|), \quad (21)$$

onde  $p = \pm 1$  e  $\theta(x)$  é a função degrau de Heaviside (1 para  $x > 0$ , e 0 para  $x < 0$ ). Estas duas autofunções linearmente independentes possuem a mesma energia, então, em princípio, existe uma dupla degenerescência. Observe que, apesar da nulidade do wronskiano de  $\psi^{(+)}$  e  $\psi^{(-)}$ , como pode ser inferido pelo comportamento assintótico, está claro que  $\psi^{(+)}$  não pode ser expressa em termos de  $\psi^{(-)}$ , e vice-versa. Entretanto, temos de considerar as condições de conexão entre a autofunção, e também sua derivada primeira, à direita e à esquerda da origem.

<sup>3</sup>Para  $f(x)$  singular na origem, pode-se atribuir um sentido proveitoso à representação integral  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x)$  por meio da receita que se segue:

$$P \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left( \int_{-\infty}^{-\delta} dx f(x) + \int_{+\delta}^{+\infty} dx f(x) \right). \quad (25)$$

Tal prescrição é conhecida como valor principal de Cauchy de  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x)$ .

A autofunção deve ser contínua na origem, do contrário o valor esperado da energia cinética não seria finito. É assim porque

$$\psi^* \frac{d^2 \psi}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left( \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) - \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx}, \quad (22)$$

e uma descontinuidade de salto de  $\psi$  em  $x = 0$  faria  $d\psi/dx$  ser proporcional à função delta de Dirac  $\delta(x)$ . Portanto, a última parcela do lado direito da Eq. (22) contribuiria para o valor esperado da energia cinética com uma parcela proporcional à

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \delta^2(x) = \infty. \quad (23)$$

Note que a demanda por continuidade da autofunção em  $x = 0$  exclui a possibilidade de uma extensão antissimétrica no caso de  $\beta < 1$  e  $s = 0$ .

A conexão entre  $d\psi/dx$  à direita e  $d\psi/dx$  à esquerda da origem pode ser avaliada pela integração da Eq. (3) numa pequena região em redor da origem, e para um potencial com o comportamento ditado pela Eq. (7) pode ser sumarizada por

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=-\varepsilon}^{x=+\varepsilon} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \frac{\psi}{|x|^\beta}. \quad (24)$$

Adotando o valor principal de Cauchy<sup>3</sup> como prescrição lícita para atribuir significado à representação integral cujo integrando é singular no interior da região de integração, pode-se concluir que a derivada primeira de uma autofunção ímpar é sempre contínua. Entretanto, a autofunção par requer atenção. Nesta última circunstância, temos

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=0_+} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=0_-} = \begin{cases} 0, & \text{para } \beta = 2 \text{ e } \alpha > 0, \text{ ou } \beta < 2 \\ \infty, & \text{para } \beta = 2 \text{ e } \alpha < 0, \end{cases} \quad (26)$$

resultando na exclusão das extensões simétricas dos casos  $1 \leq \beta < 2$ , e  $\beta < 1$  com  $s = 1$ .

Um resumo das extensões possíveis está transcrito na Tabela 2.

Tabela 2 - Possíveis extensões simétricas e antissimétricas em função dos parâmetros do potencial.

	Extensões possíveis
$\beta = 2$	par e ímpar
$1 \leq \beta < 2$	ímpar
$\beta < 1$ e $s = 0$	par
$\beta < 1$ e $s = 1$	ímpar

A hermiticidade do operador associado com a energia potencial, por causa da singularidade em  $x = 0$ , depende da existência do valor principal de Cauchy da integral  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx V_{\tilde{n}\tilde{n}}^{(\tilde{p}p)}$ . Obviamente, o valor principal de Cauchy poderia consentir um afrouxamento das condições de contorno impostas sobre as autofunções. Autofunções mais singulares que essas anteriormente definidas no semieixo seriam toleradas se na vizinhança da origem os sinais de  $V_{\tilde{n}\tilde{n}}^{(\tilde{p}p)}$  à direita e à esquerda da origem fossem diferentes para quaisquer  $p$  e  $\tilde{p}$ . Porém, temos  $V_{\tilde{n}\tilde{n}}^{(\tilde{p}p)}(x < 0) = \tilde{p}p V_{\tilde{n}\tilde{n}}(x > 0)$ , de modo que a integral de  $V_{\tilde{n}\tilde{n}}^{(\tilde{p}p)}$  não seria finita ao se considerar duas autofunções com a mesma paridade. Somos assim conduzidos a preservar a rigidez do critério de hermiticidade já estabelecido no problema definido no semieixo.

O critério de não-degenerescência estabelecido na Seção 3 para o problema definido no semieixo torna-se um fiasco para o problema definido em todo o eixo no caso em que  $\beta = 2$ . Por causa das condições de conexão entre a autofunção e sua derivada primeira à direita e à esquerda da origem, e também por causa da hermiticidade do operador associado com a energia potencial, os estados ligados da equação de Schrödinger com um potencial que se comporta como a Eq. (7) apresentam um espectro degenerado se  $\beta = 2$ , não-degenerado e somente com autofunções ímpares se  $1 \leq \beta < 2$ , e não-degenerado com autofunções pares ( $s = 0$ ) e ímpares ( $s = 1$ ) se  $\beta < 1$ . O espectro não-degenerado no caso em que o potencial dominante na origem tem singularidade  $1/|x|^\beta$  com  $\beta < 1$  é habitual para sistemas unidimensionais. É curioso a ausência de autofunções pares no caso em que o potencial dominante na origem possui singularidade  $1/|x|^\beta$  com  $1 \leq \beta < 2$ . Outrossim, é surpreendente que a degenerescência só apresente sua assinatura no caso em que o potencial dominante na origem tem singularidade  $1/x^2$ .

### 5. Dois modelos exemplares

Até o momento, temos excluído classes de potenciais e classes de soluções, contudo, as classes de potenciais e classes de soluções que sobejam carecem de modelos específicos para a verificação da concretização de suas possibilidades. Nesta Seção, investigaremos as soluções para  $V(|x|)$  com formas bem definidas.

Para potenciais com os comportamentos ditados pela Eq. (7), o comportamento assintótico de  $\psi$  expresso pela Eq. (18) convida-nos a definir  $y = 2k|x|$  de forma que a autofunção para todo  $y \in [0, \infty)$  pode ser escrita como

$$\psi(y) = y^s e^{-y/2} w(y). \tag{27}$$

Por causa do comportamento já prescrito para  $\psi$ , a função  $w$  deve convergir para uma constante não-nula quando  $y \rightarrow 0$ , e não deve crescer mais rapidamente do que  $\exp(c_1 y^{c_2})$ , onde  $c_1$  é uma constante arbitrária

e  $c_2 < 1$ , quando  $y \rightarrow \infty$ . Isto é necessário para garantir que o expoente da exponencial na Eq. (27), *viz.*  $-y/2 + c_1 y^{c_2}$ , se comporte como  $-y/2$  quando  $y \rightarrow \infty$ .

Veremos mais adiante que as equações obedecidas por  $w$  para os problemas passíveis de soluções analíticas recaem em equações diferenciais hipergeométricas confluentes (também chamada de equação de Kummer) [15]

$$y \frac{d^2 w(y)}{dy^2} + (b - y) \frac{dw(y)}{dy} - a w(y) = 0. \tag{28}$$

Buscaremos soluções particulares da Eq. (28) que satisfaçam as condições de contorno apropriadas, estabelecidas no final do parágrafo anterior. Afortunadamente, veremos também que tais soluções particulares requerem  $b > 1$ . A solução geral da Eq. (28) é dada por [15]

$$w(y) = C_1 M(a, b, y) + C_2 y^{1-b} M(a - b + 1, 2 - b, y), \tag{29}$$

onde  $C_1$  e  $C_2$  são constantes arbitrárias, e  $M(a, b, y)$ , também denotada por  ${}_1F_1(a, b, y)$ , é a função hipergeométrica confluyente (também chamada de função de Kummer) expressa pela série [15]

$$M(a, b, y) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a + j)}{\Gamma(b + j)} \frac{y^j}{j!}, \tag{30}$$

onde  $\Gamma(z)$  é a função gama. A função gama não tem raízes e seus polos são dados por  $z = -n$ , onde  $n$  é um inteiro não-negativo [15]. A função de Kummer converge para todo  $y$ , é regular na origem ( $M(a, b, 0) = 1$ ) e tem o comportamento assintótico prescrito por [15]

$$M(a, b, y) \simeq \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b - a)} e^{-i\pi a} y^{-a} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^y y^{a-b}. \tag{31}$$

Haja vista que  $b > 1$ , e estamos em busca de solução regular na origem, devemos tomar  $C_2 = 0$  na Eq. (29). A presença de  $e^y$  na Eq. (31) estraga o bom comportamento assintótico da autofunção já ditado pela Eq. (18). Esta situação pode ser remediada pela consideração dos polos de  $\Gamma(a)$ , e assim preceituar que um comportamento aceitável para  $M(a, b, y)$  ocorre somente se  $a = -n$ , com  $n \in \mathbb{N}$ . Neste caso,  $M(-n, b, y)$  exhibe o comportamento assintótico  $M(-n, b, y) \sim y^n$ , e a série (30) é truncada em  $j = n$  de tal forma que o polinômio de grau  $n$  resultante é proporcional ao polinômio de Laguerre generalizado  $L_n^{(b-1)}(y)$  [15]. O polinômio de Laguerre generalizado é definido pela

fórmula

$$L_n^{(b-1)}(y) = y^{-(b+1)} e^y \frac{d^n}{dy^n} (y^{b+n-1} e^{-y}), \quad b > 0, \tag{32}$$

e possui  $n$  zeros distintos. Quando  $b = 1$  o polinômio de Laguerre generalizado é denotado por  $L_n(y)$ , e é chamado simplesmente de polinômio de Laguerre. Haja vista que nosso interesse recairá nos casos com  $b > 1$ ,

podemos assegurar que a autofunção do problema terá a forma

$$\psi(y) = N_n y^s e^{-y/2} L_n^{(b-1)}(y), \quad (33)$$

com  $n$  nodos no intervalo  $(0, \infty)$ .  $N_n$  é uma constante de normalização.

Vale a pena observar que o comportamento de  $w(y)$  nos extremos do intervalo, consoante o que foi exposto no final do parágrafo que envolve a Eq.(27), garante a existência de sua transformada de Laplace (veja, e.g., Ref. [14])

$$F(\sigma) = \int_0^\infty dy e^{-\sigma y} w(y), \quad (34)$$

e assim a solução particular da Eq. (28) poderia ter sido obtida pelo método da transformada de Laplace de  $w(y)$ , em concordância com o que foi apregoado na Ref. [16].

**5.1.**  $V(x) = \alpha/|x|^\beta$

Neste caso, a substituição de  $\psi(y)$  dado pela Eq. (27) na Eq. (3) resulta que  $w(y)$  é solução da equação

$$y \frac{d^2 w(y)}{dy^2} + (2s - y) \frac{dw(y)}{dy} - \left[ s - s(s-1)y^{-1} + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} (2k)^{\beta-2} y^{1-\beta} \right] w(y) = 0. \quad (35)$$

Nota-se que a Eq. (35) se reduz a equações hipergeométricas caso  $\beta$  seja igual a 2 ou 1:

$$y \frac{d^2 w(y)}{dy^2} + (2s - y) \frac{dw(y)}{dy} - s w(y) = 0, \quad \text{para } \beta = 2, \quad (36)$$

e

$$y \frac{d^2 w(y)}{dy^2} + (2 - y) \frac{dw(y)}{dy} - \left( 1 + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \right) w(y) = 0, \quad \text{para } \beta = 1. \quad (37)$$

Encontramos que soluções bem comportadas requerem

$$-n = \begin{cases} s, & \text{para } \beta = 2 \\ 1 + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}, & \text{para } \beta = 1. \end{cases} \quad (38)$$

Daí podemos concluir que não há solução se  $\beta = 2$ , pois  $s > 1/2$ . Entretanto, se  $\beta = 1$  há soluções somente no caso em que  $\alpha < 0$ , como esperado. Tais soluções, com  $b = 2$ , são expressas em termos de  $L_n^{(1)}(y)$  por

$$E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(n+1)^2} \quad (39)$$

$$\psi_n(|x|) = N_n |x| \exp\left(-\frac{m|\alpha|}{\hbar^2(n+1)}|x|\right) \times L_n^{(1)}\left(\frac{2m|\alpha|}{\hbar^2(n+1)}|x|\right).$$

Para  $V(x) = -|\alpha|/|x|$ , encontramos um conjunto infinito de estados ligados. Não há limite inferior imposto sobre  $\alpha$ , basta que  $\alpha$  seja negativo.

**5.2.**  $V(x) = \alpha_1/|x| + \alpha_2/x^2, \quad \alpha_1 \neq 0$

Neste caso,

$$y \frac{d^2 w(y)}{dy^2} + (2s - y) \frac{dw(y)}{dy} - \left( s + \frac{m\alpha_1}{\hbar^2 k} \right) w(y) = 0, \quad (40)$$

e as soluções bem comportadas demandam

$$-n = s + \frac{m\alpha_1}{\hbar^2 k}. \quad (41)$$

Necessariamente com  $\alpha_1 < 0$ , as soluções com  $s > 1/2$  ( $b > 1$ ) são expressas em termos de  $L_n^{(2s-1)}(y)$  por:

$$E_n = -\frac{m\alpha_1^2}{2\hbar^2(n+s)^2} \quad (42)$$

$$\psi_n(|x|) = N_n |x|^s \exp\left(-\frac{m|\alpha_1|}{\hbar^2(n+s)}|x|\right) \times L_n^{(2s-1)}\left(\frac{2m|\alpha_1|}{\hbar^2(n+s)}|x|\right).$$

Aqui,

$$s = \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{8m\alpha_2}{\hbar^2}} \right), \quad \alpha_2 > \alpha_c. \quad (43)$$

Para  $V(x) = -|\alpha_1|/|x| + \alpha_2/x^2$ , com  $\alpha_1 \neq 0$ , encontramos um conjunto infinito de estados ligados com nenhum limite inferior imposto sobre  $\alpha_1$ , basta que  $\alpha_1 < 0$ . Para  $\alpha_2 = 0$ , os resultados coincidem com aqueles encontrados na subseção anterior, como deveria acontecer. Qualquer que seja  $\alpha_2 > \alpha_c$ , as soluções são fisicamente aceitáveis, ainda que no intervalo  $\alpha_c < \alpha_2 < 0$  as autofunções possuam derivadas primeiras singulares na origem. É mesmo assim, contanto que o parâmetro  $\alpha_2$  seja maior que  $\alpha_c$ , o par característico  $(E_n, \psi_n)$  constitui uma solução permissível do problema proposto. Visto como função de  $\alpha_2$ , ao passar por  $\alpha_2 = 0$ , a forma do potencial sofre uma mudança drástica: passa de um poço sem fundo com singularidade negativa na origem quando  $\alpha_c < \alpha_2 \leq 0$  para um poço com fundo com singularidade positiva na origem quando  $\alpha_2 > 0$ . As autofunções sempre satisfazem à condição homogênea de Dirichlet na origem. As derivadas primeiras das autofunções são infinitas na origem se  $\alpha_c < \alpha_2 < 0$ . Para  $\alpha_2 \geq 0$ , contudo, as derivadas primeiras são finitas, sendo nulas caso  $\alpha_2 > 0$ . É instrutivo observar que esta transição de fase não se manifesta no espectro.

Nas Figs. 1 e 2 ilustramos o comportamento da autofunção ( $\Psi = \sqrt{\lambda} \psi$ ) para o estado fundamental em função de  $\zeta = |x|/\lambda$ , onde

$$\lambda = \frac{\hbar}{mc} \quad (44)$$

é o comprimento de onda Compton da partícula ( $c$  é a velocidade da luz). A normalização foi realizada por métodos numéricos mas poderia ter sido obtida por meio de fórmulas envolvendo os polinômios de Laguerre generalizados constantes na Ref. [15]. Na Fig. 1, fixamos  $\alpha_1$  e consideramos cinco valores ilustrativos de  $\alpha_2$ . Na Fig. 2, fixamos  $\alpha_2$  na vizinhança do valor crítico  $\alpha_c$  e consideramos dois valores ilustrativos de  $\alpha_1$ .

A comparação entre as cinco curvas da Fig. 1 mostra que a partícula tende a evitar a origem mais e mais à medida que  $\alpha_2$  aumenta. A partícula nunca colapsa para o ponto  $x = 0$  (em contradição com a afirmação patente na Ref. [11]), e certamente há um estado fundamental com energia igual a  $E_0 = -2m\alpha_1^2 / (2\hbar s)^2$ .

A comparação entre as duas curvas da Fig. 2, para  $\alpha_2 \gtrsim \alpha_c$ , mostra que a partícula tende a evitar a origem mais e mais à medida que  $\alpha_1$  aumenta.

No caso das extensões para todo o eixo, a forma do potencial  $V(x) = -|\alpha_1|/|x| + \alpha_2/x^2$  (com  $\alpha_1 \neq 0$ ), ao passar por  $\alpha_2 = 0$ , troca de um poço sem fundo com singularidade negativa em  $x = 0$  quando  $\alpha_c < \alpha_2 \leq 0$  para um poço duplo com singularidade positiva em  $x = 0$  quando  $\alpha_2 > 0$ . Autofunções possuem derivadas primeiras finitas na origem se  $\alpha_2 \geq 0$ . Para  $\alpha_c < \alpha_2 < 0$ , contudo, as derivadas primeiras são infinitas na origem. Esta transição de fase em  $\alpha_2 = 0$  também se manifesta no grau de degenerescência do espectro.

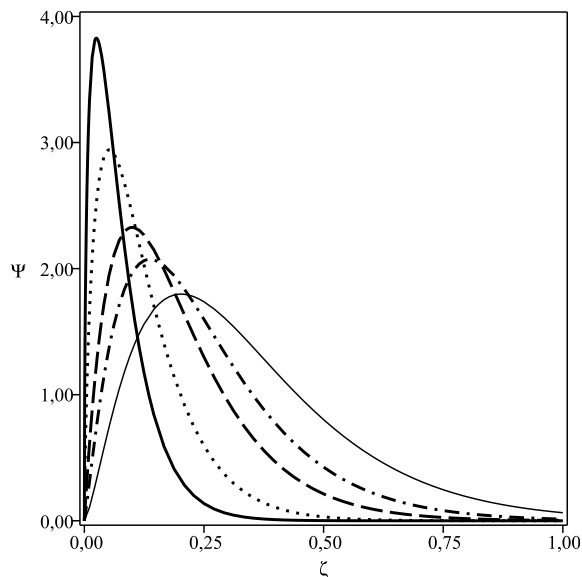


Figura 1 - Autofunção normalizada do estado fundamental definido no semieixo em função de  $\zeta = |x|/\lambda$ , para  $\alpha_1/(\hbar c) = -10$ . As linhas contínua espessa, pontilhada, tracejada, ponto-tracejada e contínua delgada para os casos com  $m\alpha_2/\hbar^2$  igual a  $-0,124999$ ,  $-0,1$ ,  $0$ ,  $+0,1$  e  $0,3$ , respectivamente.

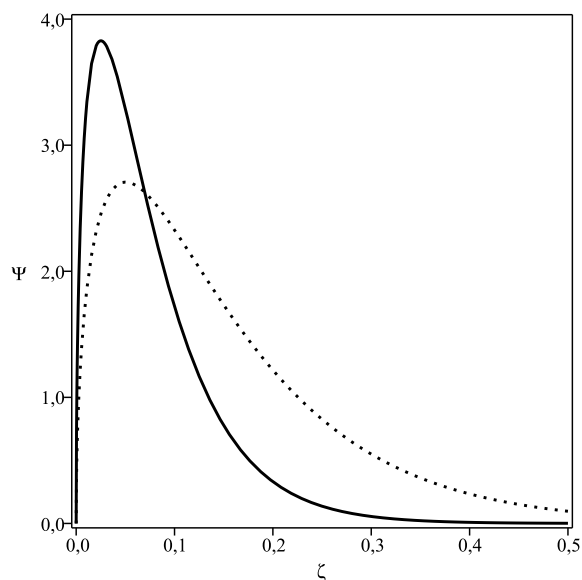


Figura 2 - Autofunção normalizada do estado fundamental definido no semieixo em função de  $\zeta = |x|/\lambda$ , para  $m\alpha_2/\hbar^2 = -0,124999$ . As linhas contínua e pontilhada para os casos com  $\alpha_1/(\hbar c)$  igual a  $-10$  e  $-5$ , respectivamente.

## 6. Comentários finais

Dissertamos sobre o problema de estados ligados no âmbito da equação de Schrödinger unidimensional para uma classe de potenciais  $V(|x|)$  que se anulam no infinito e apresentam singularidade dominante na origem na forma  $\alpha/|x|^\beta$  ( $0 < \beta \leq 2$ ) por meio dos comportamentos das autofunções na vizinhança da origem e seus comportamentos assintóticos. Armados com o critério de hermiticidade dos operadores associados com quantidades físicas observáveis, e com o valor principal de Cauchy para atribuir significado à representação integral cujo integrando é singular no interior da região de integração, concluímos que:

- o espectro é negativo;
- não há estados ligados se o potencial com comportamento dominante na origem do tipo inversamente quadrático for fortemente atrativo ( $\alpha/x^2$  com  $\alpha \leq \alpha_c$ );
- o espectro do problema definido no semieixo é não-degenerado;
- o espectro do problema definido em todo o eixo é não-degenerado se  $\beta < 2$ , e duplamente degenerado se  $\beta = 2$ ;
- somente autofunções antissimétricas ocorrem no caso  $1 \leq \beta < 2$ ;
- autofunções simétricas e antissimétricas ocorrem no caso  $\beta < 1$ .

Em seguida, tratamos de modelos exatamente solúveis. Consideramos potenciais da forma  $V(|x|) = \alpha_1/|x| + \alpha_2/x^2$ , e recorrendo ao conhecimento de soluções de equações diferenciais hipergeométricas confluentes, demonstramos que inexistem soluções no caso em que  $\alpha_1 = 0$ , e que há um número infinito de estados ligados no caso em que  $\alpha_1 < 0$  e  $\alpha_2 > -\hbar^2/(8m)$ . Em particular, reafirmamos as conclusões obtidas na Ref. [3] referentes ao átomo de hidrogênio unidimensional definido em todo o eixo: todo o espectro tem energia finita e autofunções antissimétricas.

Nossos resultados para o problema definido no semi-eixo podem ser generalizados para o problema tridimensional por meio do acréscimo de  $l(l+1)\hbar^2/(2mx^2)$  ao potencial e pela substituição de  $\psi(|x|)$  por  $|x|R(|x|)$ , onde  $l$  é o número quântico orbital e  $R(|x|)$  é a função radial. Desta forma,  $\alpha$  deve ser substituído por  $\alpha + l(l+1)\hbar^2/(2m)$  se  $\beta = 2$ , e  $\alpha_2$  por  $\alpha_2 + l(l+1)\hbar^2/(2m)$  na Seção 5.1. Entretanto, deve-se observar que a parcela  $l(l+1)\hbar^2/(2mx^2)$  representará a singularidade dominante na origem se  $\beta < 2$  e  $l \neq 0$ , em vez de  $\alpha/|x|^\beta$ . Além disto, a solução que não satisfaz à condição de Dirichlet homogênea na origem, essa com  $s = 0$  para  $\beta < 1$ , torna-se uma solução espúria para o caso tridimensional. Isto se dá porque a existência de uma função radial com o comportamento na vizinhança da origem ditado por  $1/|x|$  requeriria a presença de uma função delta de Dirac no potencial [17].

## Agradecimentos

Os autores são gratos à CAPES, ao CNPq e à FAPESP pelo apoio financeiro.

## Referências

- [1] K.M. Case, Phys. Rev. **80**, 797 (1950); F.L. Scarf, Phys. Rev. **109**, 2170 (1958); A. Pais and T.T. Wu, Phys. Rev. **134**, B1303 (1964); E. Ferreira, J. Sesma and P.L. Torres, Prog. Theor. Phys. **43**, 1 (1970); W.M. Frank, D.J. Land and R.M. Spector, Rev. Mod. Phys. **43**, 36 (1971); H.G. Miller, J. Math. Phys. **35**, 2229 (1994); V.C. Aguilera-Navarro and A.L. Coelho, Phys. Rev. A **49**, 1477 (1994); G. Esposito, J. Phys. A **31**, 9493 (1998); A. Das and S.A. Pernice, Nucl. Phys. B **561**, 357 (1999); A.M. Essin and J.D. Griffiths, Am. J. Phys. **74**, 109 (2006).
- [2] D.R.M. Pimentel and A.S. de Castro, Revista Brasileira de Ensino de Física **35**, 3303 (2013).
- [3] D. Xianxi, J. Dai and J. Dai, Phys. Rev. A **55**, 2617 (1997).
- [4] H.N. Núñez-Yépes, A.L. Salas-Brito and D.A. Solis, Phys. Rev. A **83**, 064101 (2011); C.R. de Oliveira and A.A. Verri, J. Math. Phys. **53** (2012) 052104.
- [5] H.N. Spector and J. Lee, Am. J. Phys. **53**, 248 (1985); R.E. Moss, Am. J. Phys. **55**, 397 (1987); C.-L. Ho and V.R. Khalilov, Phys. Rev. D **63**, 027701 (2001).
- [6] A.S. de Castro, Phys. Lett. A **338**, 81 (2005); A.S. de Castro, Ann. Phys. (N.Y.) **316**, 414 (2005).
- [7] N. Dombey, Phys. Lett. A **360**, 62 (2006); A.S. de Castro, Phys. Lett. A **369**, 380 (2007).
- [8] G. Barton, J. Phys. A **40**, 1011 (2007).
- [9] A. Kratzer, Z. Phys. **3**, 289 (1920); G. Van Hooydonk, J. Mol. Struct. Theochem **109**, 87 (1984); G. Van Hooydonk, Eur. J. Inorg. Chem. **1999**, 1617 (1999).
- [10] H. Ulrich and P. Hess, Chem. Phys. **47**, 481 (1980).
- [11] V.G. Bagrov and D.M. Gitman, *Exact Solutions of Relativistic Wave Equations* (Kluwer, Dordrecht, 1990).
- [12] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon, New York, 1958); I.I. Gol'dman and V.D. Krivchenkov, *Problems in Quantum Mechanics* (Pergamon, Londres, 1961); F. Constantinescu and E. Magyari, *Problems in Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1971); D. ter Haar, *Problems in Quantum Mechanics* (Pion, Londres, 1975); S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Berlin, 1999).
- [13] A.S. de Castro, Phys. Lett. A **328**, 289 (2004); L.K. Sharma and J. Fiase, Chin. Phys. Lett. **21**, 1893 (2004); A.S. de Castro, Int. J. Mod. Phys. A **21**, 2321 (2006); A.S. de Castro, J. Math. Phys. **51**, 102302 (2010).
- [14] E. Butkov, *Física Matemática* (LTC, Rio de Janeiro, 1988).
- [15] M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, Toronto, 1965).
- [16] D.R.M. Pimentel and A.S. de Castro, Eur. J. Phys. **34**, 199 (2013).
- [17] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics* (Plenum Press, New York, 1994).