aação: Dr. John Gaffney Jr.
Cr$ 200,00

FT 03.65 (Pag)

SERVIÇO PUBLICO FEDERAL

D E C L A R A Ç Ã O

A Comissão Examinadora que abaixo assina este documento, reunida em data de 28 / 01 / 76**, no Departamento de Física da Universidade Federal da Paraíba, aprovou o senhor** JOÃO GOEDERT **na defesa de sua tese de mestrado intitulada** SOLUBILIDADE DE MODELOS DELTIFORMES EM MECÂNICA QUÂNTICA.

João Pessoa, 28 **de** Janeiro **de** 1976 **.**

1º Examinador

Victoria Elnecavé Herscovitz

Dra. Victoria Elnecavé Herscovitz
Instituto de Física - Universidade Fed. do Rio Grande do Sul - Porto Alegre

2º Examinador

Dr. Hélio Vasconcelos Fagundes
Instituto de Física Teórica - São Paulo

Presidente
(Orientador)

Nelson Teixeira

Dr. Nelson Lima Teixeira -
Departamento de Física - Universidade Federal da Paraíba - João Pessoa.

TESE DE MESTRADO APRESENTADA À UFPB

SOLUBILIDADE DE MODELOS DELTIFORMES EM MECÂNICA QUÂNTICA

João Goedert

João Pessoa - 1976.

A G R A D E C I M E N T O S

Ao meu orientador
pelo tema, estímulo constante
e valiosa orientação;

Aos colegas de trabalho
pelo convívio proporcionado

Ao Depto. de Física da UFPb
pelas condições de trabalho.

ÍNDICE

R E S U M O

O presente trabalho estuda uma série de modelos de interação deltiforme em Mecânica Quântica, apresentando, sob condições bastante gerais, soluções exatas para problemas usuais e algumas de suas generalizações.

A introdução e o capítulo I são dedicados à evolução histórica das aplicações da teoria das distribuições em Física. Modelos correntes são aí apresentados e analisados. Suas generalizações, quando possíveis, discutidas.

Reservamos o capítulo II a um apanhado geral da teoria das distribuições, dando maior ênfase ao estudo de equações diferenciais neste contexto funcional.

No capítulo III são estudados os modelos de interação deltiforme localizada para sistemas de muitos corpos. Embora este campo - em se tratando de modelos conhecidos - esteja bastante esclarecido, no tacante a problemas de base, pudemos enriquê-lo com toda uma classe de modelos de interação semiclássica, deltiforme e pseudo binária, todos exatamente solúveis.

Já o capítulo IV, dedicado aos problemas de interação deltiforme propriamente binária, é talvez o mais fértil em contribuições. Nele propomos uma série de modelos - lá denominados para-quânticos - todos exatamente solúveis e

a partir dos quais pudemos determinar - em várias formas alternativas - soluções para um modelo totalmente geral. Paralelamente, são estudadas condições adicionais para a existência de soluções simétricas (de paridade par) frente permutação de partículas.

No capítulo V, reservado aos problemas de interação delta superficial, estabelecemos uma formulação geral que pode ser tratada pelos mesmos métodos adotados em sistemas de muitos corpos. Em consequência, pudemos levar adiante um paralelismo com a abordagem do capítulo IV no tocante à determinação de soluções do problema geral.

Nas conclusões tecemos comentários sobre peculiaridades de técnicas de aproximação adequadas aos modelos deltiformes e mencionamos alguns problemas abertos por este trabalho.

Casos em que o potencial é constituido por uma só interação deltiforme são comuns na literatura e apresentam ainda problemas abertos; estão ausentes, explicitamente, deste trabalho posto que se constituem aplicações imediatas das técnicas do capítulo II e/ou casos particulares dos modelos resolvidos nos capítulos subsequêntes.

I N T R O D U Ç Ã O

DISTRIBUIÇÕES EM FÍSICA

A dualidade é característica não apenas de certos objetos da Física como, certamente, da própria Física se olhada de um ponto de vista puramente epistemológico. Com excessão de uns poucos campos mais ou menos restritos, de sucesso limitado se tem revelado a proposição de teorias unificadoras. Seja por força destes insucessos, seja por imposição da filosofia, todos convivemos com contraposições como "Física Clássica" versus "Física Quântica", "Teoria de Partículas" versus "Teoria de Campos", "Newtoniano" versus "Relativístico" e outras.

Até o presente não podemos, nem seria conveniente, abrir mão destas duplas personalidades próprias de uma ciência tão fundamental; convivemos com elas, sabemos qual utilizar na maioria dos problemas práticos, tiramos proveito desta duplicidade de pontos de vista que desfrutamos em relação à natureza.

A origem destas subdivisões remonta, na maioria dos casos, à necessidade de explicar fenômenos não previstos nalgum estágio prévio do desenvolvimento científico. Casos há, contudo, em que uma nova teoria é preparada apenas para dar foro legítimo à entidades, processos ou técnicas então correntes em Física. Mais ou menos nesta linha poder-se-iam citar as origens das teorias de Maxwell, Einstein, Schroedinger, Heisenberg e Dirac.

Não exatamente em Física, mas, no campo dos métodos matemáticos da Física, e mais recentemente[1], Laurent Schwartz, com um trabalho sobre formalismo matemático, veio legitimar técnicas correntes em Física desde, no mínimo, o advento da mecânica quântica. Refletindo a ansiedade dos físicos em justificar certos processos, imediatamente depois (1953) Werner Güttinger publica os primeiros trabalhos onde apresenta aplicações valiosas daquele formalismo em Física.

Por mais de meio século vieram os físicos utilizando entidades então obscuras como deltas de Dirac ou, de forma ainda mais peculiar, "derivadas" de funções não deriváveis - como no caso das funções de Heaviside - sem que, para elas, se dispusesse de uma teoria realmente correta ou satisfatória que fosse. Em 1950/51, L.Schwartz propôs então a Teoria das Distribuições com o objetivo primordial de dar foro legítimo àquelas falsas funções utilizadas - de forma correta, mas - ingenuamente pelos físicos. Em menos de tres anos apareceram os primeiros trabalhos especificamente voltados para as suas aplicações em Física[2]. Tal foi o sucesso da nova estrutura que hoje já se costuma afirmar[3-4] que a Física é essencialmente uma teoria de funcionais, enriquecendo assim, com um novo, o antigo esquema de Física como uma Teoria de funções.

Para exclarecer a perfeita conveniência deste ponto de vista, vamos encarar a Física como uma teoria de "caixa preta": um estímulo e uma resposta, um imput e um output. Do ponto de vista físico, conhecemos a caixa preta, i.é conhecemos o sistema, sempre que, dado um estímulo podemos determinar a resposta. Este é um ponto de vista bem clássico e até galileano em sua essência.

O problema da caixa preta, dentro do contexto da Física como teoria de funções, poderia ser formalizado pela equação:

$$\Lambda y(x) = f(x) \quad ; \qquad (I)$$

onde f é o estímulo e y a resposta sendo Λ um operador. No caso de Λ operador diferencial linear - aproximação satisfatória para a grande maioria dos problemas da Física - podemos invertê-lo, ficando a (I) na forma

$$y(x) = \int G(x;x')f(x')dx' \qquad (II)$$

mantendo os mesmos significados para y e f que em (I) e sendo $G(x;x')$ função de Green do operador Λ.

Daqui é imediato concluir que estes problemas da

Física podem ser encarados num contexto de teoria de funcionais: em cada ponto p a y(p) é um funcional de f(x). Até aqui está evidente que tanto uma teoria de funções como uma teoria de funcionais seriam perfeitamente equivalentes quando nos restringimos àquela classe de problemas. As opções por uma ou outra seriam condicionadas apenas às razões de ordem práticas e imediatas.

Entretanto, nem todos os funcionais podem ser escritos na forma (II) (regulares[5]) e portanto, nem todas as equações do tipo (II) são equivalentes à alguma equação do tipo (I). Podemos definir funcionais que não são regulares, e podemos conjeturar a possibilidade de dado um estímulo f(x) obter uma resposta y através de uma "caixa preta" F que não é um funcional regular:

$$y = F\{f(x)\}$$

Um exemplo disto seria o vácuo num problema de espalhamento: para cada estímulo f(x) teríamos a mesma resposta y, ou seja

$$y = I\{f(x)\} = f(x)$$

Concluimos então, que do ponto de vista epistemológico, é possível estabelecer mais outra dualidade para a Física: "Física como teoria de funções" versus "Física como teoria de funcionais".

Por outro lado, considerando o maior alcance do segundo ponto de vista, devemos, sempre que possível, optar por ele. Como se verá a seguir, a análise funcional, além de englobar toda a análise clássica, vai adiante, apresentando-se como extrutura suficientemente ampla para abrigar entidades antes estranhas como deltas de Dirac, suas derivadas, pseudo-funções, partes finitas de integrais divergentes e toda uma clãsse de outros funcionais, regulares ou não.

C A P Í T U L O   I

BREVE REVISÃO HISTÓRICA

Neste capítulo inicial pretendemos considerar rapidamente os pontos mais importantes da formação da Teoria da Distribuições e sua adaptação à Física, ressaltando os acertos, que foram muitos, e apontando, no que tange a algumas aplicações, deficiências ou até falhas eventualmente encontradas.

Historicamente, o envolvimento dos físicos com funções de comportamento peculiar, pode-se dizer, aconteceu junto com a própria criação da Física: tanto na teoria da gravitação de Newton como no eletromagnetismo de Maxwell, sempre existiram, em forma de modelos ao menos, distribuições de massa ou carga tidas como matematicamente puntiformes. De um ponto de vista ingênuo, como densidades, estas distribuições só poderiam ser descritas por funções de valor nulo em todo o espaço, a excessão do ponto onde se encontrava a massa (ou carga) no qual elas divergiriam. Esta é exatamente a "definição" que alguns textos apresentam em seu parágrafo introdutório quando pretendem dar ao estudante uma idéia mais ou menos concreta do que seria uma distribuição delta de Dirac.

Trabalhando com teorias quantizadas habituara-se o físico , desde o início do século, ao manejo de funcionais - em geral lineares - em prejuízo do emprego de simples funções, para descrever a realidade física. Isto como que abriu a possibilidade de se aplicar a teoria de funcionais em domínios mais amplos, necessidade que outrora não se punha com tanta imperiosidade.

Paralelamente, o desenvolvimento do cálculo operacional a partir de Hadamard, Heaviside e outros, começou a se deparar com dificuldades antes não imaginadas e que não encontravam respaldo no contexto da análise convencional. Criaram-se entidades, na época mais ou menos estranhas, que intervinham nas operações matemáticas mas que, aparentemente não faziam parte de nenhuma teoria então corrente. Exemplos não faltavam como era o caso das derivadas das funções de Heaviside, partes finitas de integrais divergentes e as próprias deltas de Dirac com suas derivadas sucessivas.

Como que vindo em socorro a físicos e matemáticos aplicados, L.Schwartz, a partir de 1944/45, iniciou a publicação de uma sequência de trabalhos[6] que culminaram, em 1950/51, com a apresentação de um corpo completo da sua Teoria das Distribuições[1] que nada mais era do que uma extensão da teoria de funcionais lineares, já bastante conhecida dos matemáticos. A nova teoria deu foro legítimo às entidades mal definidas do cálculo operacional e ampliou grandemente os domínios da análise funcional, também naqueles setores em que os físicos mais se ressentiam.

Como ramo da matemática, a Teoria das Distribuições de L.Schwartz teve, a partir de então, um desenvolvimento brilhante suscitando problemas antes não imaginados e motivando inclusive a formulação de outras teorias de distribuições, estas, até agora, pouco exploradas no que diz respeito às suas possibilidades de aplicação em Física.

Refletindo nitidamente o anseio dos físicos de verem os domínios da análise funcional ampliados, já em 1952 W.Güttinger defendia uma tese de doutoramento onde explorava aplicações da nova teoria em Física[2]. Completando, por assim dizer, este trabalho de implantação, seguiram-se outros do mesmo autor[7] e de outros[8] que rapidamente aderiram ao novo ponto de vista.

A partir deste corpo básico de aplicações vários ramos da Física receberam contribuições relevantes. Dentre eles cabe citar a Teoria Quântica de Campos que, com sua necessidade de recursos matemáticos mais elaborados, realimentou a própria Teoria das Distribuições sugerindo e solicitando maiores desenvolvimentos, sobretudo no campo das transformadas integrais e no dos espaços de funções de provas[9] cada vez mais apropriadas às suas necessidades. Dada a importância do tema para o desenvolvimento da Física atual relacio -

namos[10], nos comentários e referências, uma série de trabalhos que de uma ou de outra forma representam contribuições diretas a Teoria Quântica de Campos. Esperamos que ela venha no futuro, a se constituir nas bases de um guia mais completo à literatura sobre aplicações da Teoria das Distribuições na Teoria Quântica de Campos, salientando, contudo, que certamente a lista não é completa e nem mesmo é objetivo deste trabalho tratar de problemas situados nesta área da Física.

Outro ramo da Física gratificado com importantes contribuições, em se tratando de aplicações da Teoria da Distribuições, foi a mecânica quântica. Estas apresentaremos com mais detalhes uma vez que são elas o objetivo maior deste trabalho. A bem da clareza e ordenação agruparemos os problemas em quatro setores distintos:

i) Deltas como potenciais em equações de Schroedinger.

ii) Problemas de muitos corpos com interação delta localizada.

iii) Problemas de muitos corpos com interação deltiforme binária.

iv) Problemas de interação delta superficial.

i) Deltas como potenciais em equações de Schroedinger.

Potenciais deltiformes em equações de Schroedinger podem aparecer por razões as mais diversas, dependendo do sitema em estudo. Em modelos que pretendem descrever interações de curtíssimo alcance eles são adotados de forma direta[11,12] numa tentativa de incorporar ao sistema - de maneira acentuada talvez - a característica típica do alcance curto. Na física nuclear, por exemplo, potenciais deltiformes são usados para aproximar os potenciais de troca tidos como de curto alcance. Sempre que o sistema em estudo aceita um modelo de interação deltiforme fraca métodos perturbativos tem sido adotados. No entanto, quando interações fracas não são modelos satisfatórios, torna-se necessário ir em busca de soluções exatas. Veremos, mais abaixo, que em condições muito gerais estas sempre serão possíveis[13] para as interações deltiformes.

Outra forma corrente de introduzir potenciais deltiformes na equação de Schroedinger é decorrência da adoção de pseudofunções para descrever interações. Em outros termos: uma idéia muito atraente e que permitiria levantar certas divergências[14], em equações de Schroedinger, fundamenta-se na possibilidade de substituir potenciais de comportamento impróprio por partes finitas deles. Güttinger, num de seus trabalhos[15], explorou a idéia não levando, contudo, a possibilidade até as últimas consequências, permanecendo assim vários problemas em aberto.

Basicamente o parecimento de deltas se deve ao seguinte: cada vez que se pretende resolver um problema do tipo

$$\Lambda\psi(x) + \mathrm{pf}\{V(x)\}\psi(x) = 0$$

onde $\mathrm{pf}\{V(x)\}$ é um funcional do tipo parte finita, convenientemente definido[16] - a técnica conhecida é substituir

$$\mathrm{pf}\{V(x)\} = V(x) + F\{\delta\}$$

onde $F\{\delta\}$ representa alguma combinação apropriada de deltas e/ou suas derivadas. Isto leva, como se vê, a uma segunda possibilidade de introduzir, naturalmente, deltas em equações de Schroedinger.

Ainda uma terceira possibilidade decorre de uma eventual equivalência entre problemas com distintas condições de contorno para descrever um mesmo sistema físico[17,18]. Nestes casos pretende-se estabelecer que problemas como

$$(H - E)\psi(x) = 0$$

mais condições de contorno

$$\psi(a) = \psi(b) = 0$$

seriam equivalentes a problemas do tipo

$$\{ H - E + F\{\delta(x)\}\}\phi(x) = 0$$

com nova condições

$$\phi(a') = \phi(b') = 0$$

a' e b' escolhidos apropriadamente com F alguma combinação de deltas e eventualmente de suas derivadas.

Vale observar que esta forma de introduzir potenciais deltiformes não tem conduzido a resultados satisfatórios: Moshinski[17] escolhe um potencial particular - do tipo oscilador harmônico - e o resolve com uso de teoria de perturbação até segunda ordem, desconhecendo técnica de solução exata. Outros autores[18] adotam termos em derivadas de delta mas são infelizes na determinação da solução exata chegando ao final com uma função de onda que certamente não satisfaz à equação proposta.

Qualquer que seja o modo de introduzir potenciais deltiformes, a equação de Schroedinger para uma partícula assumirá a forma geral:

$$\{ \Lambda + \textstyle\sum_i a_i \delta^{(i)}(x-s_i)\}\psi(x) = 0 \qquad (1)$$

mais alguma(s) condição(ões) de contorno. Na (I.1) o operador Λ, em geral, será da forma $H - E$ não dependendo nunca de outros termos em deltas e onde H é operador diferencial autoadjunto de segunda ordem. Conforme veremos nos caps II e III, equações como ela sempre admitem soluções exatas quando se souber resolver a associada

$$\Lambda\psi(x) = 0 \tag{2}$$

A técnica geral foi desenvolvida por N.L.Teixeira[13] e se baséia na inversão de Λ - que nos casos em questão é linear - e no cálculo das várias $\psi(s_i)$ o que será feito transformando a equação original num sitema algébrico linear não singular.

Mais recentemente D.A.Atkinson et al[19] propuseram uma técnica semelhante mas de validade bem mais restrita que conduz à soluções exatas quando aplicada a problemas semelhantes, em uma dimensão, e do qual se conheça o problema de autovalores do operador Λ no caso. Esta última técnica recai na anterior sempre que Λ for a uma dimensão e gerar um conjunto completo de autofunções e o somatório da (I.1) contiver apenas um termo. Mesmo assim a solução final dificilmente será exata pois sempre será na forma de uma série infinita.

Problemas menos gerais, no sentido de que Λ é operador de partícula livre, inexistindo interação adicional de campo externo são tratados[11,12,17] mediante uso de técnicas como a segunda ou outras distintas mas que nos pareceram pouco apropriadas, sobretudo porque não se adaptam a situações mais gerais.

No cap.II discutiremos detalhadamente a primeira das técnicas que por serem de validade mais geral serão as únicas a empregarmos, em problemas deste tipo, neste trabalho.

Adiantamos que estas mesmas técnicas se aplicam a problemas de muitos corpos com interação deltiforme localizada e se revelam (caps.IV e V) ferramenta auxiliar de grande valia na pesquisa de soluções exatas tanto de problemas de interação deltiforme binária como de interação delta superficial.

ii) Problemas de muitos corpos com interação delta localizada

Objetivando informação sobre o comportamento de gases de eletrons em condutores com centros de impurezas ou mesmo de um gás qualquer com centros espalhadores localizados é frequente a adoção de modelos com interação deltiforme dos componentes do gás com os pontos - espalhadores - fixos. Mais ou menos nesta linha classificam-se alguns trabalhos[20, 21] quase todos dirigidos no sentido de extrair informação termodinâmica do sistema em estudo.

De forma muito geral, poderíamos equacionar tais modelos como

$$\sum_i\{\partial^2/\partial x_i^2 + \sum_j a_{ij}\delta(x_i-b_j)\}\psi(r) = E\psi(r) \qquad (3)$$

onde os a_{ij} (com $a_{ii}= 0$) seriam as amplitudes de interação e b_j as posições dos centros espalhadores, sendo $r = (x_1, x_2, x_3, \ldots x_N)$ e N o número de termos em cada somatório. O modelo acima é unidimensional, o que não impede, por outro lado, que forneça informações relevantes para os sistemas termodinâmicos usualmente tratados. O mais frequente inclusive são trabalhos[21] em que o modelo admite apenas $a_{ij} = \lambda$.

Problemas como estes são abordados nos caps. II e III onde veremos a possibilidade de se determinar soluções exatas para os mesmos sempre que se conhecer a solução do problema sem a parte em deltas. A técnica é ainda aquela citada em[13] e permite até mesmo a solução exata de problemas bi e tridimensionais sempre que as hipóteses de solução do modelo sem interação delta forem atendidas.

iii) Problemas de muitos corpos com interação deltiforme binária.

Nos últimos anos grande número de trabalhos[22] se voltam para o estudo do problema quanto-mecânico de um gás ou líquido composto de partículas que interagem entre si, via potenciais binários. (Casos há em que se analisou modelos com interação ternária[23] e no cap.V propomos alguns modelos de interação n-ária.) Até recentemente, a única ferramenta disponível era um arsenal de métodos de aproximação - nem sempre devidamente justificados - a partir dos quais se procurou obter o máximo de informação.

Uma única excessão encontrada é o trabalho de F. Calogero[24] que resolve exatamente o problema de N-corpos interagindo via potenciais proporcionais e/ou inversamente pro porcionais ao quadrado das distâncias entre as partículas.

Dada a aparente inviabilidade de solucionar outros problemas de interação binária realísticos, restou aos físicos sair em busca de uma interação - por pouco realística que fosse - para a qual se tivessem soluções exatas.

As primeiras tentativas nesta linha seriam os modelos de esferas rígidas[25,26,27] para os quais M.Girardeau[25] determinou soluções exatas. Infelizmente, dada a impossibilidade de as partículas assim representadas, se interpenetrarem, o modelo se mostrou de valia apenas aos gases de alta densidade, não se prestando - suas soluções - para testar a validade das soluções perturbativas conhecidas, objetivo maior destas descrições mais ou menos simplistas. Acresce-se ainda que as soluções obtidas apresentaram características estranhas como uma clara independência do espectro de energias frente variações da densidade do gás e do raio das esferas rígidas componentes.

Embora de pouco sucesso, a tentativa teve ao menos o mérito de sugerir a outros o rumo mais acertado: de esferas rígidas passou-se a potenciais deltiformes! Pioneiro neste setor foram os trabalhos de E.H.Lieb[28] que propõe um modelo do tipo

$$\sum_i \{\partial^2/\partial x_i^2 + 2c\sum_j \delta(x_i - x_j)\}\psi(r) = E\psi(r) \qquad (4)$$

onde $r = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$; n, o número de partículas, e o resolve usando uma equivalência entre a equação com deltas e uma equação sem deltas com condições de contorno apropriadas. Basicamente propõe o autor que a equação acima seja equivalente à

$$\sum_i \partial^2/\partial x_i^2 \psi(r) = E\psi(r) \tag{5}$$

mais condições de contorno do tipo

$$(\partial/\partial x_j - \partial/\partial x_k)\psi(r)\big|_{x_j = x_k^+} - (\partial/\partial x_j - \partial/\partial x_k)\psi(r)\big|_{x_j = x_k^-} =$$
$$= 2c\psi(r)\big|_{x_j = x_k}$$

Por este caminho obtem autofunções em forma explícita bem como a energia do estado fundamental do sistema, sendo que nenhuma das dificuldades inerentes ao modelo de esferas rígidas se fizeram aí presentes. Em adição o autor faz um detalhado exame das propriedades termodinâmicas do sistema assim descrito.

Seguindo de perto, no tempo e na forma, o trabalho de E.H.Lieb vieram os de J.B.McGuire[29] que examinam, à luz de modelos semelhantes, o comportamento de gases de Fermions e Bosons unidimensionais, determinando soluções exatas e propriedades termodinâmicas. Como consequência vamos encontrar trabalhos complementares esclarecendo questões de existência[30], ortogonalidade e completeza do conjunto de soluções determinadas[31].

O movimento, que parecia promissor, logo esmorec ceu, seguindo-se um período com total ausência de novas aplicações e extensões do problema. A razão deste arrefecimento parece residir no tipo de técnica escolhida, a qual se mostrou refratária a qualquer problema levemente distinto e nada afeita a posteriores melhorias.

O objetivo maior ao atacar um problema, não se reduz, em geral, a simples exibição das soluções, mas, preferentemente a atingi-las mediante uma técnica que facilmente se adapte a situações tidas como formalmente idênticas e também àquelas que, não sendo essencialmente idênticas, sejam formalmente comparáveis. Este objetivo, na nossa opinião, não foi inteiramente atingido pelos autores acima referidos e esta, talvez, a razão do seu pequeno número de seguidores.

Por outro lado, embora a teoria das distribuições tenha sido uma das teorias a nascer praticamente completa no que tange às suas aplicações, e há muito tenha atingido a maioridade, não é raro encontrar situações cujo emprego seja, se não embaraçoso, ao menos pouco conhecido, principalmente quando se tratam de situações típicas da matemática aplicada e física matemática.

Esta realidade nos faz crer que a pouca ocorrência de ulteriores desenvolvimentos das idéias básicas de Lieb e McGuire são decorrência direta do tipo de técnica escolhida. Partindo desta crença, fomos buscar alternativas que além de prestarem a modelos menos acadêmicos apresentassem feitio mais talhado a futuras melhorias, que fossem mais remanejáveis enfim. Resultados que seguramente apresentarão estas qualidades, que julgamos essenciais, serão expostos nos caps. II, III e IV.

Os modelos até agora correntes embora de grande importância tanto histórica quanto física, podem ser qualificados como pobres dado a sua inabilidade de prever interações usuais com campos externos e/ou sua limitação a amplitudes de interações deltiformes iguais, e/ou a restrição a modelos unidimensionais. Modelos mais realistas, além das características acima, deveria funcionar a duas ou tres dimensões e com partículas de massas não necessariamente iguais. Todas estas características ficam incorporadas num modelo geral como:

$$\{ H - E - \textstyle\sum_{ij} a_{ij}\delta(r_i - r_j)\}\psi(R) = 0 \tag{6}$$

com

$$H = -\textstyle\sum_i \hbar/2m_i \nabla_i^2 + V(R) \tag{7}$$

e

$$r_i = (x_i, y_i, z_i) \quad , \quad R = (r_1, r_2, \ldots, r_N) \quad \text{e} \quad a_{ii} = 0$$

ou, numa forma mais compacta e sugestiva

$$\Lambda\psi(R) = \textstyle\sum_{ij} a_{ij}\delta(r_i - r_j)\psi(R) \tag{8}$$

Com $\Lambda = H - E$ um operador diferencial, autoadjunto, de segunda ordem e linear. No cap.IV abordaremos este modelo determinando técnicas que se lhe aplicam em condições bastante gerais.

<u>iv) Interações delta superficial.</u>

Há fortes razões para acreditar na existência de interação superficial nuclear: a interação quadripolar sabidamente é mais intensa para núcleons que se encontram na superfície do núcleo, e as interações de paridade[32], que em geral são tratadas como um efeito de volume, apresentam contribuições extremamente mais significativas quando sobre a superfície[33].

É assim plausível supor que grande parte dos efeitos não previstos ou explicados nos modelos de partícula independente poderiam advir da adoção de um termo adicional que descrevesse interação superficial. Em modelos mais simplificados imagina-se o núcleo como um sistema de N-corpos movendo-se livremente em seu interior e sofrendo colisões somente sobre a camada superficial. Modelos como estes foram usados em estudos de reações nucleares levando, aparentemente a resultados coerentes com a realidade experimental[33].

Também aqui torna-se vital dispor de algum tipo de interação - por simples que seja - que conduza a soluções exatas, permitindo assim, comparar resultados obtidos através de métodos perturbativos e testar seu poder e validade.

O tipo de interação superficial que atende, no momento, estes quesitos é novamente a deltiforme, embora nenhuma convenção única exista que determine exatamente a forma mais apropriada de introduzi-las. A maioria dos autores[34] entende que é suficiente, para se obter uma interação delta superficial, que a função de onda seja separável na parte radial, impondo-se, para levar em conta o efeito deltiforme superficial, que as integrais radiais que aparecem na expansão de Slater assumam valores iguais sobre a superfície.

Acreditamos que, como modelo, esta é uma boa forma desde que o núcleo seja imagidado como um volume esférico caso em que a interação poderia ser computada a partir da inserção de termos do tipo

$$A_{ij}\,\delta(r_i - r_j)\,\delta(r_i - a)$$

na equação de Schroedinger. (Aqui r_i seria o módulo do vetor posição da partícula i e a o raio do núcleo).

No cap. V apresentaremos uma formulação geral chegando a modelos de interação delta superficial nos quais o núcleo poderá assumir formas bastante livres. Nosso modelo não supõe que necessariamente as partículas não interajam no interior do núcleo: apenas permitimos que além das interações usuais seja acrescentada uma interação delta superficial do tipo geral

$$\sum_{k=1}^{m}\sum_{ij}^{N} a_{ij}^{k}\,\delta(x_i-x_j)\,\delta(y_i-y_j)\,\delta(z_i-z_j)\,\delta\{z_i-f_k(x_i,y_j)\} \qquad (9)$$

onde as $f_k(x_i,y_i) = z_i$ representam as m superfícies de interação.

Acreditamos ainda que maior impulso poderia ser dado ao tratamento de problemas nucleares como estes, caso fosse disponível técnica de solução realmente apropriada. Este o objetivo perseguido no cap.V onde uma sequência de modelos - pouco realistas mas - exatamente solúveis, sugerem facilmente, senão a forma da solução explícita do problema, ao menos uma técnica direta de iteração fácil. Numa segunda parte determinamos também condições bastante gerais em tais modelos admitem soluções exatas.

C A P Í T U L O   II

FUNÇÕES GENERALIZADAS

Neste capítulo introduziremos os conceitos básicos de espaços de funções generalizadas bem como analisaremos algumas de suas propriedades mais importantes do ponto de vista de suas aplicações em Física.

Seguindo o uso corrente, denominaremos "função generalizada" a todo funcional linear e contínuo definido sobre um espaço arbitrário de "funções de prova". O conceito de função de prova apresentado abaixo será suficientemente elástico para admitir várias classes alternativas de acordo com o contexto em estudo.

II-1) Funções de prova:

Reservamos a denominação de função de prova a toda função infinitamente derivável e que juntamente com todas as suas derivadas, tenda a zero suficientemente rápido, a medida que $|x| \to \infty$.

O modo como elas e suas derivadas tenderão a zero no infinito - ou como elas poderão ou não ser estendidas ao plano complexo - fornecerá subsídios para a classificação delas dentro de espaços de características mais particulares.

Um espaço de funções de prova será em espaço topológico linear Φ formado por funções de valores reais ou complexos $\phi(x)$, as funções de prova, definidas sobre o conjunto dos pontos x. Diremos que Φ é um espaço de funções de prova sempre que:

i) Ou Φ é um espaço normado completo contável, ou espaço união contável de espaços normados completos contáveis.

ii) Se a sequência $\phi_n(x)$ convergir dentro da topologia de Φ então a sequência de números $\phi_n(x_o)$ convergirá para x_o, $\forall x_o \in R$.

Define-se ainda <u>suporte</u> de uma função de prova $\phi(x)$ como o fecho do conjunto sobre o qual ela difere de zero.

Exemplos de espaços de funções de prova:

i) O espaço D de todas as funções "finitas". À D pertencem todas as funções de valores complexos $\phi(x)$ com derivadas contínuas de todas as ordens e com suporte limitado. Em outros termos D é o espaço de todas as funções $\phi(x)$ infinitamente deriváveis e que se anulam fora de uma região finita (podendo a região ser distinta para cada $\phi(x) \in D$).

Diremos que a sequência $\phi_n(x)$ de funções de prova, converge para zero em D se todas estas funções se anulam fora de algum intervalo finito comum, e, elas próprias, junto com todas as suas derivadas, convergem uniformemente para zero.

ii) O espaço S das funções de prova rapidamente decrescentes. S é o espaço de todas as funções $\psi(x)$ infinitamente deriváveis e que juntamente com suas derivadas tenda para zero, no infinito, mais rapidamente que qualquer potência de $1/|x|$ - um exemplo: $\psi(x) = \exp(-x^2)$ -. Assim sendo, toda $\psi \in S$ satisfaz desigualdades do tipo

$$|x^n \psi^{(m)}(x)| \leq c_{nm} \qquad (1)$$

ou, em decorrência:

$$\lim_{|x| \to \infty} |x^n \psi^{(m)}(x)| = 0 \ , \ n,m = 1, 2, 3 \ldots$$

A convergência em S é definida como se segue: Diremos que a sequência ψ_ν converge em S para ψ se em toda região limitada as derivadas $\psi_\nu^{(m)}$ ($m = 0, 1, 2, \ldots$) convergem para as correspondentes derivadas $\psi^{(m)}$, e as constantes $c_{\nu m}$ das condições (II.1) acima, podem ser escolhidas independentemente de ν.

Estes são os dois exemplo de maior importância para as aplicações em Física a que nos propomos. Poder-se-ia contudo, arrolar uma série de outros (espaços "tipo S", espaços Z das funções inteiras lentamente decrescentes, ...) os quais, porém, não teriam maior importância dentro do que nos propomos neste trabalho.

II-2) Funções generalizadas:

Seja um espaço linear topológico Φ de funções de provas. Suponhamos que mediante alguma lei possamos associar a cada $\phi(x)$ um número complexo $f(\phi) = (f,\phi)$ - ou seja, um funcional - tal que:

i) o funcional é linear

ii) O funcional é contínuo; i.é: se a sequência $\phi_n(x)$ - $n = 1, 2, 3, \ldots$ - converge para zero em Φ então a sequência $f(\phi_n)$ converge para zero.

Nestas condições, funcional linear e contínuo, diremos que $f(\phi)$ é uma função generalizada ou, em casos mais particulares, uma distribuição.

Exemplos de funções generalizadas:

i) Seja $f(x)$ uma função localmente somável e seja $\Phi = D$. Mediante o emprego desta função $f(x)$ poderemos associar a cada $\phi(x) \in D$ um número $f(\phi)$ tal que

$$f(\phi) = (f,\phi) = \int f(x)\phi(x)dx \qquad (2)$$

As condições i) e ii) da definição acima ficam satisfeitas e $f(\phi)$ é uma distribuição.

Distribuições deste tipo são ditas regulares, e qualquer outro funcional linear e contínuo que não possa ser posto na forma (II.2) será dito singular.

ii) A delta de Dirac $\delta(x-a)$ é o mais conhecido dos funcionais singulares; aplicada a qualquer função de prova $\phi(x)$ associa, por definição, a esta $\phi(x)$ o seu valor $\phi(a)$:

$$\delta(x-a)\{\phi(x)\} = (\delta,\phi) = \phi(a) \tag{3}$$

É comum "regularizar" o funcional delta definido pela (II.3) reescrevendo seu primeiro membro na forma (II.2) ficando então

$$\delta(x-a)\{\phi(x)\} = \int\delta(x-a)\phi(x)dx$$

donde sai a expressão

$$\int\delta(x-a)\phi(x)dx = \phi(a) \tag{3'}$$

tão corrente na literatura e que, às vezes, é confundida com a definição deste funcional. A (II.3') só tem sentido quando entendida como uma forma diferente - e em certas situações apropriada - de escrever a (II.3).

iii) Funções generalizadas, quando definidas sobre S, são usualmente denominadas distribuições temperadas podendo, da mesma forma que aquelas definidas em D ser regulares ou singulares. Para formar funções generalizadas regulares em outros espaços Φ será necessário impor mais condições sobre a $f(x)$ quando $|x|\to\infty$, a fim de assegurar a convergência da integral para todas as $\phi(x)$. Para qualquer $\phi\in S$, por exemplo, será suficiente, embora não necessário, que f(x) cresça, no infinito, não mais rapidamente do que alguma potência de $|x|$:

$$f(x) \leq C(1 + |x|^2)^m \quad \text{quando} \quad |x| \to \infty.$$

II-3 Operações com distribuições.

Como regra geral, para definir uma operação sobre uma distribuição qualquer, define-se a operação sobre as distribuições regulares, e, em seguida, estende-se, operacionalmente, a definição, ao conjunto dos funcionais singulares.

1) Adição e multiplicação por números complexos:

Sejam f e g funções generalizadas em Φ' (Φ', o dual de Φ, é formado por todas as funções f(x) tal que (f,ϕ) é funcional linear e contínuo em Φ). Se f e g são regulares então

$$f(\phi) = \int f(x)\phi(x)dx \qquad e \qquad g(\phi) = \int g(x)\phi(x)dx$$

Aqui é natural definir

$$(f + g)(\phi) = \int\{f(x) + g(x)\}\phi(x)dx$$

$$= \int f(x)\phi(x)dx + \int g(x)\phi(x)dx$$

o que implica

$$(f + g)(\phi) = f(\phi) + g(\phi)$$

Generaliza-se o resultado para qualquer funcional linear (regular ou não):

$$(f + g)(\phi) \equiv f(\phi) + g(\phi) \tag{4}$$

De modo semelhante a multiplicação de funcionais por números complexos α é facilmente definida

$$(\alpha.f)(\phi) \equiv \alpha f(\phi)$$

Com as definições acima é imediato verificar que Φ' - o dual de Φ - é também espaço linear. O produto de f e g não é, em geral, um elemento de Φ' o que impede que o mesmo possa ser tratado como uma álgebra.

2) Multiplicação por funções $a(x)$: Sempre que $a(x)$ atender à algumas condições, em geral diferentes para cada espaço Φ, será possível definir o funcional produto $a(x).f(x)$. Para funcionais lineares contínuos regulares teríamos:

$$(a.f)(\phi) = \int a(x)f(x)\phi(x)dx =$$

$$= \int f(x)\{a(x)\phi(x)\}dx = f(a.\phi)$$

sempre que:

i) Em D, $a(x)$ for infinitamente derivável;

ii) Em S, $a(x)$ for função lentamente crescente.

Generalizando, definimos o funcional produto de f e $a(x)$ - $a(x)$ satisfazendo i) ou ii) acima - pela re lação:

$$(a.f)(\phi) \equiv f(a.\phi) \tag{5}$$

sendo f funcional regular ou não.

Um exemplo importante é fornecido pelo produto de $a(x)$ e $\delta(x)$:

$$\{a(x).\delta(x)\}(\phi) \equiv \delta(x)\{a(x)\phi(x)\} =$$

$$a(x)\phi(x)\Big|_{x=o} = a(0)\phi(0) = a(0)\delta(x)\{\phi(x)\}$$

ou seja

$$a(x)\delta(x) = a(0)\delta(x) \tag{6}$$

A multiplicação por funções de mais de uma variável é facilmente definida, com extensões óbvias de resultados como o (II.6).

3) Diferenciação de funcionais lineares contínuos: Seja $f(x)$ contínua e com derivada contínua $f'(x)$. Podemos então formar o funcional linear e regular, em D:

$$f'(\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} f'(x)\phi(x)dx$$

de onde, mediante uma integração por partes, obtemos

$$f'(\phi) = \Big[f(x)\phi(x)\Big]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\phi'(x)dx =$$

$$= - \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\phi'(x)dx = - f(\phi')$$

O primeiro termo da integração por partes se anula pois $\phi(x) \to 0$ quando $x \to \pm\infty$, em D. Usando o resultado acima de va lidade indiscutível em D, estabelecemos a definição:

Seja Φ um espaço de funções de prova em R_1. Então, para qualquer $f \in \Phi'$ definimos sua derivada $f' = f'(\phi)$ pela fórmula

$$f'(\phi) \equiv -f(\phi') \tag{7}$$

Similarmente, é possível definir derivadas parciais através de fórmulas do tipo:

$$(\partial f/\partial x_i)(\phi) \equiv -f(\partial\phi/\partial x_i) \tag{8}$$

e derivadas de ordens superiores através de:

$$f^{(n)}(\phi) \equiv (-1)^n f(\phi^{(n)}) \tag{9}$$

ou

$$\partial^m f/\partial x_1^{m_1}\partial x_2^{m_2}\ldots\partial x_n^{m_n}(\phi) \equiv (-1)^m f(\partial^m\phi/\partial x_1^{m_1}\partial x_2^{m_2}\ldots\partial x_n^{m_n}) \tag{10}$$

sendo $m_1 + m_2 + m_3 + \ldots + m_n = m$.

Exemplos: De grande importância neste trabalho é o relacionamento das funções de Heaviside com as deltas de Dirac e suas derivadas.

i) A função de Heaviside $H(x)$, ela própria não possue derivadas em torno do ponto zero. Podemos, no entanto definir o funcional de Heaviside:

$$H(\phi) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} H(x)\phi(x)\,dx = \int_0^{\infty}\phi(x)\,dx$$

Este funcional, por definição, terá derivadas, independentemente dos valores assumidos por x:

$$H'(\phi) \equiv H(\phi') = -\int_0^\infty \phi'(x)dx =$$

$$= \phi(0) - \phi(\infty) = \phi(0) = \delta(\phi)$$

logo concluimos que, como funcionais (ou como distribuições)

$$H'(x) = \delta(x) \tag{11}$$

justificando um procedimento usual que entendia a delta como a derivada da função de Heaviside.

ii) De forma semelhante

$$\delta'(\phi) \equiv -H'(\phi') = H(\phi'') = \int_0^\infty \phi''(x)dx =$$

$$= -\phi'(0) + \phi'(\infty) = -\phi'(0) = -\delta(\phi')$$

iii) Em geral

$$\delta^{(n)}(\phi) = (-1)^n \delta(\phi^{(n)}) = (-1)^n \phi^{(n)}(0) \tag{12}$$

Embora fora dos objetivos deste trabalho, é possível definir várias outras operações com funcionais lineares contínuos. Em particular são importantes, num contexto mais geral, e do ponto de vista da Física, a integração, a convolução, as transformadas de Fourier ou as transformadas integrais em geral e o produto generalizado de funções generalizadas[35].

II-4) Distribuições e equações diferenciais:

Salvo especificação em contrário, na sequência deste trabalho estaremos lidando apenas com funcionais definidos no espaço D das funções de prova "finitas".

Para os físicos, o interesse maior da teoria das distribuições reside precisamente nas suas possibilidades de aplicação. Muitos foram os estudos apresentados nestes últimos vinte anos visando a aplicação da teoria em Física. Os primeiros trabalhos, como já citado, foram publicados por W. Güttinger em 1953.

Os problemas até hoje abordados tratam de aplicações tanto no campo da Física clássica[36] (menos frequentes) passando, com maior presença, pelos domínios da mecânica[37] quântica e teorias de campo[10] sendo encontradas até, ocasionalmente, em teorias de gravitação[38].

No presente trabalho confinar-nos-emos à aplicações em mecânica quântica e, mais particularmente, ao estudo de equações de Schroedinger com coeficientes (potenciais) deltiformes.

Deste modo, neste capítulo, apresentaremos, em linhas gerais, algumas técnicas - todas já conhecidas[13], embora em forma levemente diferente - para o tratamento de equações diferenciais com coeficientes deltiformes. A restrição do estudo à equações com coeficientes deltiformes não é por demais limitadora pois está demonstrado [3,4] que toda distribuição de suporte compacto pode ser expandida numa série finita de termos em deltas e derivadas de deltas, casos que serão objeto de nosso estudo.

Dado porém que nosso objetivo será a mecânica quântica, é natural a restrição adicional ao estudo de equações diferenciais lineares - ordinárias ou parciais. Mais particularmente, para o caso, seria suficiente limitar o estudo às equações diferenciais lineares de segunda ordem, que é a forma geral da equação de Schroedinger. No entanto, em muitos pontos, a teoria pode ser mais ampla sem que isto represente um acréscimo real ao trabalho de formulá-la. Somente esta a razão de uma que outra incursão em domínios menos restritos que os acima delimitados.

1) Funções de Green:

Seja $P(x,\partial/\partial x)$ um operador diferencial linear e seja a equação

$$P(x,\partial/\partial x)\, u(x) = f(x) \qquad , (13)$$

onde $x = (x_1,x_2, x_3,\ldots,x_n)$ para o caso de várias variáveis e sendo $f(x)$ uma função generalizada pertencente a D'. Define-se, como função de Green do operador P, toda solução $G(x;x')$ da equação

$$P(x,\partial/\partial x) G(x;x') = \delta(x-x') \qquad (14)$$

onde $\delta(x-x') = \prod_{i=1}^{n} \delta(x_i-x_i')$ nos casos de mais de uma variável. Se P for operador de coeficientes constantes então, demonstra-se, $G(x;x') = G(x-x')$.

Teorema: A solução geral de (II.13) é dada por

$$u(x) = \int_{\infty}^{\infty} dx' G(x;x') f(x') \tag{15}$$

onde $G(x;x')$ é a solução geral de (II.14). Se $u(x)$ satisfizer condições de contorno lineares homogêneas $B_i(u)=0$, $i = 1,2,\ldots,n$, a solução ainda será a dada acima com G satisfazendo as mesmas condições de contorno para todos os x', o mesmo valendo também nos casos em que as condições impostas são do tipo iniciais. Se, por outro lado, $u(x)$ satisfizer condições de contorno não homogêneas $B_i(u) = A_i$ então primeiro se resolve o correspondente problema homogêneo e, em seguida, acrescenta-se à solução obtida uma solução particular u_o da equação $Pu_o = 0$ que satisfaça às condições não homogêneas $B_i(u_o) = A_i$. Para demonstrar o teorema basta aplicar P a ambos os membros de (II.15).

Um outro teorema demonstrado[3] é o que garante a existência de função de Green para todo operador diferencial linear a coeficientes constantes. A demonstração deste importante teorema é feita mediante exibição direta da $G(x-x')$:

$$G(x) = (1/2\pi)\,pv.\int_{\infty}^{\infty} dk \exp(ikx)/P(-ik) + \\ + G_o(x) \quad \text{em } D' \tag{16}$$

com $P(\partial/\partial x)$ o operador a coeficientes constantes e pv. o valor principal da integral.

Para ilustrar outro método, de aplicação talvez mais frequente, e que resolve casos onde P não é necessariamente de coeficientes constantes, vamos apresentar abaixo uma técnica que conduz à funções de Green para operadores lineares unidimensionais de grau n.

Seja L um operador da forma:

$$L = a_n d^n/dx^n + a_{n-1} d^{n-1}/dx^{n-1} + \ldots + a_1 d/dx + a \qquad (17)$$

e escolhamos uma solução particular $y_o(x)$ da equação:

$$Ly(x) = 0 .$$

Determinaremos, no que se segue, condições para que esta $y_o(x)$ seja tal que o produto $H(x-t)y_o(x)$ tenha propriedades de função de Green de L. $H(x-t)$ é a função de Heaviside. Atingiremos o resultado impondo n condições sobre $y_o(t)$ calculando $LG(x;t)$ para $Gx;t) = H(x-t)y_o(x)$:

$$(d/dx)G(x;t) = H(x-t)y_o'(x) + \delta(x-t)y_o(x)$$

$$= H(x-t)y_o'(x) + \delta(x-t)y_o(t)$$

pelo uso dos resultados (II.6) e (II.11). Impomos então como primeira condição:

$$y_o(t) = 0 \qquad (18)$$

Continuando o cálculo de $LG(x;t)$ teremos

$$(d^2/dx^2)G(x;t) = H(x-t)y_o''(x) + \delta(x-t)y_o'(t)$$

impondo agora a condição

$$y_o'(t) = 0 \qquad (19)$$

prosseguindo teremos

$$(d^{n-1}/dx^{n-1})G(x;t) = H(x-t)y_o^{(n-1)} + \delta(x-t)y_o^{(n-2)}(t)$$

ficando a (n-1)ésima condição dada por

$$y_o^{(n-2)}(t) = 0 \tag{20}$$

Finalmente

$$(d^n/dx^n)Gx;t) = H(x-t)y_o^{(n)}(x) + \delta(x-t)y_o^{(n-1)}(t)$$

da qual extraimos a n-ésima condição

$$y_o^{(n-1)}(t) = 1/a_n \tag{21}$$

Mostraremos que, impostas as condições acima, teremos

$$L\ H(x-t)y_o(x) = \delta(x-t)$$

sendo então função de Green. De fato

$$\begin{aligned} L\{H(x-t)y_o(x)\} &= H(x-t)\{a_n y_o^{(n)}(x) + a_{n-1}y_o^{(n-1)}(x) + \\ &+ \dots + a_o y_o(x)\} + a_n y_o^{(n-1)}(x)\delta(x-t) = \\ &= a_n y_o^{(n-1)}(x)\delta(x-t) = \\ &= a_n y_o^{(n-1)}(t)\delta(x-t) = \\ &= \delta(x-t) \end{aligned}$$

Portanto

$$G(x;t) = H(x-t)y_o(x)$$

ou, mais geralmente,

$$G(x;t) = y(x) + H(x-t)y_o(x) \tag{21}$$

com $y(x)$ solução do problema homogêneo $Ly(x) = 0$, é uma função de Green do operador L dado.

Dispomos então de um processo direto para determinar funções de Green para qualquer operador L linear, ordinário e de ordem n.

2) Equações com coeficientes distribuições:

Apresentaremos, em seguida, mediante o estudo de vários casos de maior ou menor interesse em Física[39], uma técnica para resolução de equações diferenciais com coeficientes distribuições. Embora apresentada para tratamento de equações diferenciais ordinária apenas, a técnica, como veremos nos caps. IV e V, aplica-se também a certos tipos de equações diferenciais parciais.

i) Equação diferencial ordinária com parte não homogênea deltiforme.

Seja a equação

$$Ly(x) = \sum_i^N A_i \delta(x-t_i) \tag{22}$$

com L operador diferencial linear de ordem n dado em (II.17). Poderemos determinar um conjunto de funções de Green satisfazendo

$$LG_i(x;t_i) = \delta(x-t_i)$$

Desta forma poderemos substituir a delta da equação (II.22) obtendo

$$Ly(x) = \sum_i^N A_i LG_i(x;t_i)$$

e por ser L linear

$$L\{y(x) - \sum_i^N A_i G_i(x;t_i)\} = 0$$

Desta última expressão concluimos que é suficiente escolher $y(x)$ tal que

$$y(x) - \sum_i^N A_i G_i(x;t_i) = y_o(x),$$

com $y_o(x)$ satisfazendo $Ly_o(x) = 0$, para que se tenha uma solução da equação proposta. Em outra forma, uma solução da equação (II.22) será

$$y(x) = y_o(x) + \sum_i^N A_i G_i(x;t_i) \qquad (22')$$

Observado que $y_o(x)$ é solução da parte homogênea de (II.22) e $\sum_i^N A_i G_i(x;t_i)$ é solução da parte não homogênea - solução particular - então a (II.22') é uma solução geral da equação inicialmente proposta.

ii) Equação diferencial ordinária com coeficientes deltiformes.

Seja a equação

$$Ly(x) = \sum_i^N A_i \delta(x-t_i) y(x) \qquad (23)$$

Dada a propriedade (II.6) da delta de Dirac, podemos reescrevê-la na forma

$$Ly(x) = \sum_i^N A_i \delta(x-t_i) y(t_i)$$

Em seguida escolheremos um conjunto de funções $G_i(x;t_i)$ tal que

$$LG(x;t_i) = \delta(x-t_i)$$

para cada cada uma delas. Efetuando esta substituição das deltas em (II.23) ficaremos com

$$Ly(x) = \sum_i^N A_i LG_i(x;t_i)y(t_i)$$

ou

$$L\{y(x) - \sum_i^N A_i G_i(x;t_i)y(t_i)\} = 0$$

donde certamente

$$y(x) - \sum_i^N A_i G_i(x;t_i)y(t_i) = y_o(x) \qquad (23')$$

para toda $y_o(x)$ satisfazendo $Ly_o(x) = 0$. Resta-nos então determinar as N quantidades $y(t_i)$. Conseguiremos isto substituindo, sucessivamente, x por cada um dos números t_i o que nos conduzirá ao sistema linear algébrico:

$$y(t_k) - \sum_i^N A_i y(t_i)G_i(t_k;t_i) = y_o(t_k) \qquad (23'')$$

que sempre será compatível (por construção) e nos permitirá a determinação de todas as $y(t_i)$ que, substituídas na equação (II.23'), fornecerão diretamente a solução de (II.23).

iii) Equações diferenciais ordinárias com parte não homogênea dependente de deltas e suas derivadas.(I)

Seja a equação

$$L\,y(x) = \sum_i^N A_i \delta^{(i)}(x-t) \qquad (24)$$

Também equações como estas, cujas soluções, por outros métodos já foram propostas podem ser abordadas pela presente técnica que nada mais é do que uma forma diferente de encarar aquela. Ponhamos, inicialmente, a (II.24) na forma

$$Ly(x) = \sum_{o}^{N} {}_i A_i (d^i/dx^i)\delta(x-t)$$

ou então

$$Ly(x) = \sum_{o}^{N} {}_i A_i (d^i/dx^i) LG(x;t)$$

pelo uso da mesma sistemática já empregada nos dois casos anteriores. Dada a forma particular do operador L certamente se tem

$$(d^i/dx^i).L = L.(d^i/dx^i)$$

e, como L também é linear, podemos reescrever a equação original na forma

$$L\{y(x) - \sum_{o}^{N} {}_i A_i (d^i/dx^i) G(x;t)\} = 0$$

Observemos que pela própria técnica de cálculo da $G(x;t)$ para L , nos são perfeitamente conhecidas todas as (d^i/dx^i) $G(x;t)$; literalmente teremos

$$(d^i/dx^i)G(x;t) = H(x-t)y_o^{(i)}(x)$$

para todo $i < n-1$. Logo a solução final terá a forma

$$y(x) - \sum_{o}^{N} {}_i A_i (d^i/dx^i) G(x;t) = y_o(x)$$

ou

$$y(x) = y_o(x) + \sum_{o}^{N} {}_i A_i (d^i/dx^i) G(x;t) \qquad (24')$$

como solução final da equação proposta.

É imediato que tanto a solução (II.24') como a (II.23') são soluções gerais do problema pois cada uma delas se compõe fundamentalmente da soma de uma solução do problema homogêneo com uma solução particular do correspondente problema não homogêneo.

iv) Equações diferenciais lineares ordinárias com parte não homogênea em deltas e suas derivadas. (II

A mesma técnica até agora proposta e usada, aplica-se também a equações como

$$Ly(x) = \sum_{oi}^{N} A_i \delta^{(i)}(x-t_i) \qquad (25)$$

Pelo uso dos mesmos argumentos empregados em iii) acima poderemos escrever a (II.25) na forma

$$L\{y(x) - \sum_{o\,i}^{N} A_i (d^i/dx^i) G(x;t_i)\} = 0$$

donde, seguindo trâmites parecidos obtemos a solução geral:

$$y(x) = y_o(x) + \sum_{o\,i}^{N} A_i (d^i/dx^i) G(x;t_i) \qquad (25')$$

v) Equação diferencial ordinária e linear com coeficientes em delta e suas derivadas.

Como último caso vamos considerar a equação

$$Ly(x) = \sum_{o\,i}^{N} A_i \delta^{(i)}(x-t_i) y(x) \qquad N < n \qquad (26)$$

de especial interesse em mecânica quântica. Usando a propriedade (II.12), válida para qualquer f(x), reescrevemos a (II.26) na forma

$$Ly(x) = \sum_{o}^{N} {}_{i} A_i (-1)^i \delta(x-t_i) y^{(i)}(t_i)$$

e substituindo as deltas como acima teremos.

$$Ly(x) = \sum_{o}^{N} {}_{i} A_i (-1)^i y^{(i)}(t_i) LG(x;t_i)$$

ou

$$L\{y(x) - \sum_{o}^{N} {}_{i} A_i (-1)^i y^{(i)}(t_i) G(x;t_i)\} = 0$$

ou ainda

$$y(x) - \sum_{o}^{N} {}_{i} (-1)^i A_i G(x;t_i) y^{(i)}(t_i) = y_o(x) \quad (26')$$

Resta-nos determinar as N+1 quantidades $y^{(i)}(t_i)$ o que poderá ser feito derivando-se sucessivamente a equação (II.26'):

$$y^{(1)}(x) - \sum_{o}^{N} {}_{i} (-1)^i A_i (d/dx) G(x;t_i) y^{(i)}(t_i) = y_o'$$

e

$$y^{(2)}(x) - \sum_{o}^{N} {}_{i} (-1)^i A_i (d^2/dx^2) G(x;t_i) y^{(i)}(t_i) = y_o^{(2)}(x)$$

....

$$y^{(N)}(x) - \sum_{o}^{N} {}_{i} (-1)^i A_i (d^N/dx^N) G(x;t_i) y^{(i)}(t_i) = y_o^{(N)}(x)$$

Substituindo nas equações acima x por cada um dos t_k sucessivamente e em cada uma delas, obteremos o sistema linear algébrico

$$y(t_k) - \sum_{o}^{N} {}_{i} (-1)^i A_i G(t_k;t_i) y^{(i)}(t_i) = y_o(t_k)$$

$$y^{(1)}(t_k) - \sum_{o}^{N} (-1)^i A_i (d/dt_k) G(t_k;t_i) y^{(i)}(t_i) = y^{(1)}(t_k)$$

....

$$y^{(N)}(t_k) - \sum_{o}^{N} (-1)^i A_i (d^N/dt_k^N) G(t_k;t_i) y^{(i)}(t_i) = y^{N}(t_k) \qquad (26'')$$

O que representa um total de $(n + 1)^2$ equações para as $(N + 1)^2$ incógnitas $y^{(i)}(t_k)$, i, k variando de 0 a N. Chegamos, portanto, a um sistema linear algébrico coerente, sendo então possível determinar todas as $y^{(i)}(t_k)$ e

$$y(x) = y_o(x) + \sum_{o}^{N} (-1)^i A_i G(x;t_i) y^{(i)}(t_i)$$

será solução de (II.26) com $y^{(i)}(t_i)$ determinadas a partir do sistema (II.26'').

A P Í T U L O   III

NTERAÇÕES DELTIFORMES EM PROBLEMAS SEPARÁVEIS

A delta introduzida na forma de potencial separá rel nas diversas variáveis apresenta-se como recurso largaiente empregado[39], sobretudo quando se procura modelos para interações de curtíssimo alcance como nos casos dos modelos le esferas rígidas ou em certos modelos de interação de ele:rons com (ou impurezas de) redes cristalinas. Estes tipos le interações não acrescentam maiores dificuldades - quando comparado com o tratamento usual sem deltas - no que tange a manipulação das equações diferenciais que representam o sistema.

III-1) Modelo de interação N-corpos com pontos fixos:

Mesmo o caso geral de equação de Schroedinger para N corpos com interação delta mais potencial externo usual como

$$\sum_i L_i \Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \delta(r_i - \alpha_{ij}) \Psi(R) \qquad (1)$$

com[40]

$$L_i = H_i - \varepsilon_i \quad ; \quad \sum_i \varepsilon_i = E \quad ; \quad a_{ii} \equiv 0$$

que é uma generalização da (I.3) admite, como se verá, soluções exatas, sempre que for conhecido o problema sem deltas:

$$\sum_i L_i \phi(R) = 0 \qquad (2)$$

Evidentemente, nestes casos, dada a separabilidade nas variáveis r_i, os problemas (III.1) e (III.2) admitem solução do tipo:

$$\Psi(R) = \prod_{k=1}^{N} \psi_k(r_k) \qquad (3)$$

Aqui é fundamental observar que operadores como os L_i sempre admitem inverso, i.é, sempre existem funções de Green $G_i(r_i, r_i')$ tais que

$$L_i G_i(r_i; \alpha_{ij}) = \delta(r_i - \alpha_{ij}) \qquad (4)$$

A hipótese (III.3) quando posta na (III.1) conduz à equação

$$\sum_i \prod_{k=1}^{N} \psi_k \{L_i \psi_i - \sum_j a_{ij} \delta(r_i - \alpha_{ij}) \psi_i\} = 0 \qquad (5)$$

Seguindo um procedimento usual, dividimos cada termo da soma em i de (III.5) por $\Psi(R)$ ficando:

$$\sum_i (1/\psi_i)\{L_i \psi_i - \sum_j a_{ij} \delta(r_i - \alpha_{ij}) \psi_i\} = 0 \qquad (6)$$

Aqui, como cada termo depende apenas da variável r_i, devemos admitir que todos serão proporcionais, ou seja, cada termo deverá satisfazer

$$(1/\psi_i)\{L_i \psi_i - \sum_j a_{ij} \delta(r_i - \alpha_{ij}) \psi_i\} = \beta_i$$

ou

$$L_i \psi_i - \sum_j a_{ij} \delta(r_i - \alpha_{ij}) \psi_i = \beta_i \psi_i$$

ou ainda, incorporando β_i ao operador e o redenominando Λ_i

$$\Lambda_i\psi_i = \sum_j a_{ij}\delta(r_i-\alpha_{ij})\psi_i \qquad (7)$$

com os β_i implícitos em Λ_i satisfazendo $\sum_i\beta_i = 0$.

Observamos que a (III.7) é novamente uma equação para o movimento de um corpo sujeito a potencial externo mais interação delta nos ponto $r_i = \alpha_{ij}$. Para elas são facilmente determinadas soluções mediante emprego das técnicas propostas no cap. II, numa de suas possíveis variações. Admitindo que Λ_i tenha inverso - o que não é propriamente uma hipótese nova pois L_i possui inverso - então existe G_i tal que

$$\Lambda_i G_i(r_i;\alpha_{ij}) = \delta(r_i-\alpha_{ij}) \qquad (8)$$

Usando a propriedade (II.12) aplicada a funções de mais de uma variável, podemos reescrevê-la na forma:

$$\Lambda_i\psi_i(r_i) = \sum_j a_{ij}\delta(r_i-\alpha_{ij})\psi_i(\alpha_{ij}) \qquad (7')$$

Na (III.7') substituindo cada $\delta(r_i-\alpha_{ij})$ pela (III.8) ficamos com

$$\Lambda_i\psi_i = \sum_j a_{ij}G_i(r_i;\alpha_{ij})\psi_i(\alpha_{ij}) \qquad (9)$$

ou então

$$\Lambda_i\{\psi_i - \sum_j a_{ij}G_i(r_i;\alpha_{ij})\psi_i(\alpha_{ij})\} = 0 \qquad (10)$$

Neste altura é lícito concluir que se vale a igualdade (III.10) então devemos ter

$$\psi_i - \sum_j a_{ij}G_i(r_i;\alpha_{ij})\psi_i(\alpha_{ij}) = \psi_{oi}(r_i) \qquad (11)$$

com $\Lambda_i \psi_{oi}(r_i) = 0$ como uma possibilidade de ver satisfeita a (III.10). Reescrevendo a (III.11) noutra forma, chegamos a expressão:

$$\psi_i(r_i) = \psi_{oi}(r_i) + \sum_j a_{ij} \psi_i(\alpha_{ij}) G_i(r_i;\alpha_{ij}) \quad (11')$$

Onde convém observar que a solução ψ de uma partícula sujeita a potencial externo usual mais interação deltiforme é composta da solução do problema sem as deltas mais uma conbinação linear de funções de Green com coeficientes que dependem tanto das amplitudes das deltas - os a_{ij} - como do valor das próprias soluções - não localidade - nos exatos pontos de interação. Estas considerações, naturalmente são ad hoc e logo abaixo serão refeitas em termos mais auto consistentes do ponto de vista lógico.

Nesta altura, para dar prosseguimento, retomamos o artifício de substituir variáveis por constantes, gerando um sistema algébrico linear para as diversas $\psi_i(\alpha_{ij})$ calculando a (III.11') nos diversos pontos de interação:

$$\psi_i(\alpha_{kn}) = \psi_{oi}(\alpha_{kn}) + \sum_j a_{ij} G(\alpha_{kn};\alpha_{ij}) \psi_i(\alpha_{ij}) \quad (12)$$

As (III.12) formam um sistema algébrico linear com incógnitas na forma de valores das funções ψ_i calculadas nos diversos pontos α_{kn}. O sistema é não homogêneo e, pelo geral, solúvel, pois o número de incógnitas é sempre igual ao número de equações geradas. Naturalmente, mesmo para o mais simples dos problemas reais - excessão possivelmente de um sistema livre a menos das interações deltas - ficará extremamente trabalhoso resolvê-lo literalmente. Será necessário, ou, ao menos, de grande valia, o uso de computador para o cálculo final das diversas $\psi_i(\alpha_{kn})$. Rotinas com as quais problemas deste tipo são facilmente solúveis, mesmo para um computador de pequeno porte, são facilmente encontradas na literatura de cálculo operacional[41].

Retomemos agora as considerações a respeito da forma geral das soluções de problemas como o (III.1). Acima afirmamos, de maneira algo provisória, que as soluções se apresentavam como a soma de uma solução do problema sem deltas mais combinação linear de funções de Green com coeficientes dependentes tanto das amplitudes das deltas como de valores particulares das próprias funções de onda em questão. Naturalmente considerações semelhantes soam incorretas pois estaríamos incorrendo numa espécie de tautologia: a função definida participaria da própria definição. Nesta altura, no entanto, fica simples reconsiderar tudo em termos mais exatos. Resolvido o sistema (III.12) cada $\psi_i(\alpha_{ij})$ será combinação multilinear dos $\psi_{oi}(\alpha_{kn})$ e das $G_i(\alpha_{kn};\alpha_{ij})$ além dos a_{ij}. Imediato então concluir que as soluções finais serão compostas de um termo que será a solução do problema sem interação delta mais uma combinação linear de funções de Green $G_i(r_i;\alpha_{kn})$ com coeficientes que serão uma combinação multilinear de valores das $\psi_{oi}(\alpha_{kn})$ com os coeficientes

a_{ij} e as funções de Green calculadas nos pontos fixos $(\alpha_{kn};\alpha_{ij})$ participando de forma mais envolvida.

III-2) Modelo de interação semiclássica para N-corpos.

Numa tentativa de enriquecer um pouco a série de abordagens disponíveis para problemas de muitos corpos e talvez adquirir alguma visão adicional para sistemas deste tipo com interação binária, propomos como modelo a estudar o representado pela equação:

$$\sum_i L_i \Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \delta(r_i - \langle r_j \rangle) \Psi(R) \qquad (13)$$

com L_i e a_{ij} da mesma forma que em (III.1').

Neste modelo, que representa um passo intermediário entre o problema (III.1) e o modelo geral abordado no capítulo IV, cada partícula, além da interação de campo externo usual, interage com todas as demais N-1 partículas quando atinge a posição média quântica de cada uma.

Em (III.13) $\langle r_j \rangle$ é a posição média da partícula, calculada quanticamente, e como tal vale

$$\langle r_j \rangle = \int \Psi^{\dagger} r_j \Psi dR$$

O presente modelo, por ser formalmente idêntico ao (III.1) como aquele é também exatamente solúvel e as soluções assumirão a forma:

$$\Psi(R,\langle R \rangle) = \prod_{i=1}^{N} \psi_i(r_i;\langle R \rangle) \qquad (15)$$

onde $<R> = (<r_1>,<r_2>,...,<r_N>)$; separável nas variáveis r_i, mas, não necessariamente separável nos parâmetros - a eliminar - $<r_i>$. Para a determinação destes parâmetros usaremos o sistema de equações (III.14) que, noutra forma, ficaria:

$$<r_j> = \int dr_1 dr_2 \ldots dr_N \prod_{k=1}^{N} \psi_k^{\dagger} r_j \prod_{s=1}^{N} \psi_s =$$

$$= \prod_{i=1}^{N} \int dr_i \psi_i^{\dagger} r_j \psi_i =$$

$$= \prod_{i \neq j}^{N} \int dr_i \psi_i^{\dagger} \psi_i \cdot \int dr_j \psi_j^{\dagger} r_j \psi_j =$$

$$= |\Psi| \int dr_j \psi_j^{\dagger} r_j \psi_j \; / \int dr_j \psi_j^{\dagger} \psi_j$$

supondo normalizado, teremos então:

$$<r_j> = \int dr_j \psi_j^{\dagger} r_j \psi_j \; / \int dr_j \psi_j^{\dagger} \psi_j \tag{16}$$

O sistema acima é quem permitirá o cálculo de todos os parâmetros $<r_j>$ que, uma vez conhecidos, serão substituidos em (III.15)

Resolver o sistema (III.16) não é certamente, tarefa fácil pois, em geral, nem mesmo linear é o sistema algébrico daí resultante. Aqui, novamente, o recurso de um computador será praticamente imprescindível.

Vale a pena observar ainda que modelos semiclássicos seriam também aqueles equacionados pela (III.13), mantidos os mesmos significados de L_i e R, sem que entretanto, $<r_j>$ fossem valores médios calculados quanticamente. Uma outra possibilidade seria, por exemplo, posições médias clássicas. Este modelo, embora menos refinado, teria a vantagem de evigar as dificuldades de cálculo do sistema (III.16).

Também exatamente solúveis seriam modelos mais gerais, com interação binária dependente de posição média clássica ou quântica e com forma:

$$\sum_i L_i \Psi(R;<R>) = \sum_{ij} a_{ij} \delta(r_i - f_{ij}(<R>)) \Psi(R;<R>) \qquad (17)$$

com f_{ij} fazendo parte de um conjunto de $N(N-1)$ funções distintas dos parâmetros $<r_j>$, a_{ij} e L_i como em (III.1).

CAPÍTULO IV

N-CORPOS: INTERAÇÕES DELTIFORMES EM PROBLEMAS NÃO SEPARÁVES

Conforme aventado no capítulo I, nosso objetivo principal será a análise de modelos mais gerais que aqueles abordados por H.Lieb[28], McGuire[29] e outros. Gostaríamos de incluir num modelo, além das interações de campos externos usuais - não permitidas naqueles modelos - amplitudes de interação a_{ij} distintas para cada par de partículas e, possivelmente massas diferentes para cada uma delas.

No capítulo III abordamos uma classe de modelos peculiares, e que lá denominamos semiclássicos, para sistemas de N-corpos, todos exatamente solúveis. Aqueles, contudo, não representavam interações binárias na acepção própria da palavra. Aqui atacaremos os modelos de interação propriamente binária e deltiforme. A equação geral para tais modelos será a (I.8) que aqui repetimos:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij}\delta(r_i - r_j)\Psi(R) \tag{1}$$

Com a única particularização

$$L_i = -(h/2m_i)\nabla_i^2 + V_i(r_i) - k_i^2 \tag{1'}$$

sendo k_i tal que

$$\sum_i k_i^2 = E$$

a energia do sistema.

IV-1) Sobre um modelo para-quântico.

Como veremos adiante, as dificuldades que acompanham um modelo geral como o (IV.1) são embaraçosas e algumas delas até agora insuperadas. Procurando contornar alguns problemas antes insolúveis, propomos como modelo preliminar:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij}\,\delta(r_i - r_j)\,\Psi_o(R) \tag{2}$$

com Λ e a_{ij} como definidos em (IV.1) e Ψ_o satisfazendo $\Lambda\Psi_o = 0$, mais alguma condição de contorno apropriada.

Realmente este modelo escapa até ao contexto da mecânica quântica, uma vez que a sua equação nem mesmo de Schroedinger é. No entanto, além das esperanças de que sua solução seja fisicamente aproveitável - o que não seria surpreendente pois no mínimo ela seria a primeira aproximação da solução de (IV.1) através das técnicas iterativas de Picard - há a esperança muito mais alentadora de que o estudo destas mesmas soluções nos conduza ao caminho certo para a descoberta das soluções do problema geral. Felizmente estas esperanças não são, em absoluto, infundadas, como veremos logo adiante.

As soluções de (IV.2) são imediatas sempre que se conhece a função de Green do operador Λ. Nestes casos teríamos:

$$\Psi(R) = \Psi_o(R) + \sum_{ij} a_{ij} \int dR'\,G(R;R')\,\delta(r'_i - r'_j)\,\Psi_o(R') \tag{3}$$

sendo a notação a que vínhamos adotando.[40]

Noutra linha de abordagem, bem mais frutífera, para soluções de (IV.2) poderíamos supor

$$\Psi(R) = \sum_{ij}\psi_{ij}(R) \tag{4}$$

ficando a equação original na forma

$$\Lambda\{\sum_{ij}\psi_{ij}\} = \sum_{ij}a_{ij}\delta(r_i - r_j)\Psi_o$$

ou

$$\sum_{ij}\Lambda\psi_{ij} = \sum_{ij}a_{ij}\delta(r_i - r_j)\Psi_o \tag{5}$$

Como $\Lambda = \sum_k L_k$ podemos fazer

$$\Lambda = L_i + L_j + \sum_{k \neq i,j} L_k = L_{ij} + \Lambda^{ij}$$

com L_{ij} operando apenas nas variáveis r_i e r_j e Λ^{ij} apenas nas demais.

Supondo ainda cada ψ_{ij} separável na forma

$$\psi_{ij}(R) = f^{ij}(R^{ij})g_{ij}(R_{ij})$$

a (IV.5) ficaria

$$\sum_{ij}(g_{ij}\Lambda^{ij}f^{ij} + f^{ij}L_{ij}g_{ij}) = \sum_{ij}a_{ij}\delta(r_i - r_j)\Psi_o(R)$$

Tanto f como g são arbitrárias; podemos então particularizar a primeira impondo

$$\Lambda^{ij}f^{ij} = 0 \tag{7}$$

ficando a equação original na forma:

$$\sum_{ij}f^{ij}L_{ij}g_{ij} = \sum_{ij}a_{ij}\delta(r_i - r_j)\Psi_o \tag{8}$$

Estando as f determinadas pela (IV.7) a (IV.8) seria a equivalente exata da (IV.2), mas, não seria mais, em geral, a coeficientes constantes, o que, à primeira vista, parece embaraçoso. No entanto, poderíamos deixar a responsabilidade de satisfazer eventuais condições de contorno ao conjunto das f, e optar por uma solução particular da (IV.8). Para tanto seria suficiente impor

$$f^{ij}L_{ij}g_{ij} = a_{ij}\delta(r_i-r_j)\Psi_o$$

ou

$$L_{ij}g_{ij}(R_{ij}) = a_{ij}\delta(r_i-r_j)\Psi_o(R)/f^{ij}(R^{ij}) \qquad (9)$$

Para a solução desta última seria suficiente determinar funções de Green $G_{ij}(R_{ij};R'_{ij})$ do operador L_{ij} o o que, em geral, é consideravelmente mais fácil que a determinação da função de Green $G(R;R')$ do operador Λ . Feito isto teríamos:

$$g_{ij}(R_{ij}) = a_{ij}\int dr'_i dr'_j \delta(r'_i-r'_j)G_{ij}(R_{ij};R'_{ij}) . \qquad (10)$$
$$.\{\Psi_o(R^{ij},R'_{ij})/f^{ij}(R^{ij})\}$$

e, finalmente a solução do problema inicial dada por

$$\Psi(R) = \sum_{ij}\psi_{ij} = \sum_{ij}f^{ij}(R^{ij}).g_{ij}(R_{ij}) =$$

$$\sum_{ij}a_{ij}f^{ij}.\int dr'_i dr'_i\delta(r'_i-r'_i)G_{ij}(R_{ij};R'_{ij})\Psi_o(R^{ij},R'_{ij})/f^{ij}(R^{ij})$$

ou, efetuando uma das integrações, mediante o emprego da propriedade da delta "sob sinal de integração" (II.3') :

$$\Psi(R) = \sum_{ij}\psi_{ij} = \sum_{ij} f^{ij}.g_{ij} =$$

$$\sum_{ij} a_{ij} f^{ij} \int dr_i^! G_{ij}(R_{ij};R_{ij}^!)\Psi_o(R^{ij},R_{ij}^!)/f^{ij}(R^{ij})$$

como as variáveis r_i e r_j não são argumentos das f^{ij} podemos retirá-las das integrais, simplificando a solução:

$$\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i^! G_{ij}(R_{ij};R_{ii}^!)\Psi_o(R^{ij},R_{ii}^!) \qquad (11)$$

Se, em adição, as condições de contorno do problema permitirem que a solução $\Psi_o(R)$ seja separável, teremos mais simplesmente:

$$\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \prod_{\substack{k\neq i\\ \neq j}} \psi_{ok} \int dr_i^! G_{ij}(R_{ij};R_{ij}^!)\psi_{oi}(r_i^!)\psi_{oj}(r_j^!) \qquad (12)$$

A condição de separabilidade da $\Psi_o(R)$ parece necessária ao passo representado pela (IV.10) embora no estágio final - (IV.11) - esta condição seja dispensável: é suficiente que exista alguma transformação de coordenadas que transforme a Ψ_o em função separável.

Admitido que $\Psi_o(R)$ é separável ou admitido simplismente que $\Lambda^{ij}\Psi_o = 0 \;\forall\, i,j$ podemos provar que realmente a (IV.11) é uma solução de (IV.2). A prova é feita mediante aplicação de Λ sobre a Ψ assim determinada:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \int dr' \Lambda\{G_{ij}(R_{ij};R_{ii}^!)\Psi_o(R^{ij},R_{ii}^!)\} =$$

$$= \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i^! \{L_{ij} G_{ij}(R_{ij};R_{ii}^!)\}\Psi_o +$$

$$+ \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i^! G_{ij}(R_{ij};R_{ii}^!)\{\Lambda^{ij}\Psi_o(R^{ij},R_{ii}^!)\}$$

ou

$$\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i' \delta(r_i - r_i') \delta(r_j - r_i') \Psi_o(R^{ij}, R_{ii}') =$$

$$= \sum_{ij} a_{ij} \delta(r_i - r_j) \Psi_o(R)$$

Poder-se-ia imaginar que as condições de contorno do problema fossemtais que não permitissem impor, em adição, $\Lambda^{ij}\Psi_o(R) = 0$. Fisicamente isto não teria sentido pois, segundo McGuire[29], é de se esperar que a função de onda de um conjunto de N partículas passe a ser a função de onda de N-1 partículas cada vez que uma delas é remetida ao infinito deixando assim de participar do sistema. Fica assim evidente que qualquer que seja a condição de contorno - fisicamente aceitável - imposta sobre a $\Psi_o(R)$ a solução final da (IV.2) será sempre da forma (IV.11).

IV-2) Modelos para-quânticos generalizados.

A forma (IV.11) da solução de (IV.2) sugere, juntamente com a prova da não necessariedade de separabilidade da Ψ_o feita ao final do parágrafo anterior, que todo modelo do tipo:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \delta(r_i - r_j) \Phi(R) \qquad (13)$$

com $\Phi(R)$ tal que

$$\Lambda^{ij}\Phi(R) = 0 \qquad \forall i,j$$

terá solução exata da forma

$$\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i' G_{ij}(R_{ij}; R_{ii}') \Phi(R^{ij}, R_{ii}')$$

A prova é imediata sendo feita mediante a aplicação de Λ sobre ambos os membros de (IV,14) e uso das propriedades impostas a ϕ.

Fica então demonstrado que qualquer modelo como o (IV.13) é exatamente solúvel, com soluções dadas pelas (IV.14), cada vez que se souber resolver o problema - a, no máximo, seis dimensões - :

$$L_{ij}G_{ij}(R_{ij};R'_{ij}) = \delta(r_i-r'_i)\delta(r_j-r'_j) \tag{15}$$

Vale a pena observar ainda que modelos mais gerais como:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij}(R_{ij})\delta(r_i-r_j)\phi_{ij}(R) \tag{13'}$$

serão também exatamente solúveis, nas mesmas condições, sempre que ϕ_{ij} satisfizer $\Lambda^{ij}\phi_{ij} = 0$, e se conhecer a função de Green dada pela (IV.15). Suas soluções serão da forma:

$$\Psi(R) = \sum_{ij}\int dr'_i a_{ij}(R'_{ij})G_{ij}(R_{ij};R'_{ii})\phi_{ij}(R^{ij},R'_{ii}) \tag{16}$$

sendo a prova imediata seguindo-se os mesmos trâmites que os indicados para a (IV.13) acima.

IV-3) Sobre uma possibilidade de equivalência.

Consideremos um modelo, fisicamente pouco real, mas, de amplas possibilidades no que diz respeito a visão que pode fornecer para problemas semelhantes e métodos matemáticos a empregar:

$$\Lambda\Psi_{ij}(R) = a_{ij}\delta(r_i - r_j)\Psi_{ij}(R) \tag{16}$$

É natural interpretar que a (IV.16) descreverá um sistema de N corpos com interação de campo externo usual, sendo que duas das partículas, a i e a j, interagem também entre si, mediante a delta de amplitude a_{ij}.

Suponhamos, em adição, o que fisicamente é realista, que

$$\Psi_{ij}(R) \to \phi_{ij}(R^{ij}, b_i, b_j)$$

quando $r_i \to b_i$ e $r_j \to b_j$, com

$$\Lambda^{ij}\phi_{ij}(R^{ij}, b_i, b_j) = 0 \qquad \forall i,\ j,\ b$$

Isto é: supondo que quando as partículas i e j são "congeladas" nas posições fixas b_i e b_j, as demais N-2 partículas do sistema ignoram o acontecimento e continuam interagindo da forma usual, então poderemos construir soluções exatas da (IV.1) que assumirão a forma:

$$\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i' G_{ij}(R_{ij}; R_{ii}') \phi_{ij}(R^{ij}, R_{ii}') \tag{17}$$

desde que se imponha que as soluções devam satisfazer condições de contorno - de certa forma introduzidas aqui ad hoc - de que sobre as fronteiras não físicas do problema elas atendam $\Psi(S_{ij}) = \phi_{ij}(R^i, r_j)$. Aqui $S_{ij} = (R^i, r_j)$ representa pontos em cada superfície lateral da hiperpirâmide de vértice na origem e faces nos hiperplanos $r_i = r_j$. Estas condições não prejudicam as condições físicas do problema, uma vez que elas - as físicas - seriam impostas sobre a base da hiperpirâmide completando, do ponto de vista da análise, o cerco da região dentro da qual se resolve o problema matemático.

IV-4) Solução do problema $\Lambda\Psi_{ij}(R) = a_{ij}\delta(r_i-r_j)\Psi_{ij}(R)$

Dada a forma do operador Λ podemos separar variáveis supondo

$$\Psi_{ij}(R) = f^{ij}(R^{ij}).g_{ij}(R_{ij})$$

donde

$$\Lambda\Psi_{ij}(R) = [\Lambda^{ij} + L_{ij}]f^{ij}.g_{ij} =$$

$$= g_{ij}\Lambda^{ij}f^{ij} + f^{ij}L_{ij}g_{ij} =$$

$$= a_{ij}\delta(r_i-r_j)f^{ij}(R^{ij}).g_{ij}(R_{ij})$$

Escolhendo o conjunto $\{f^{ij}(R^{ij})\}$ tal que satisfaça ao sistema $\Lambda^{ij}f^{ij}(R^{ij}) = 0$, ficamos com a equação

$$L_{ij}g_{ij}(r_i,r_j) = a_{ij}\delta(r_i-r_j)g_{ij}(r_i,r_j) \qquad (18)$$

que, basicamente é um problema de dois corpos.

Este artifício não só conduz à solução do problema, como fornece aquela solução conveniente satisfazendo $\Lambda^{ij}\Psi_{ij}(R) = 0$ usada na secção (IV-3) e que motivou o seu estudo. A determinação final das g_{ij}'s pode ser feita atra vés da substituição de variáveis:

$$r_i - r_j = u_i$$

$$r_i + r_j = u_j$$

ficando a equação (IV.18) na forma

$$\bar{L}_{ij} g_{ij}(u_i, u_j) = a_{ij}\delta(u_i) g_{ij}(u_i, u_j) \qquad (19)$$

que é do tipo (II.23). Se $V_i(r_i) = V_i$ = constantes - problema livre a menos da interação deltiforme - então o problema se separa mais uma vez

$$g_{ij}(u_i, u_j) = U_i(u_i).U_j(u_j)$$

ficando completamente solúvel.

IV-5) Modelo de interação deltiforme: N-1 sobre uma partícul

Seja a equação

$$\Lambda\Phi_m = \sum_i a_{im}\delta(r_i - r_m)\Phi_m(R) \qquad (20)$$

descrevendo o movimento de um gás de N partículas de massas M_i todas interagindo com campos externos através de potenciais $V_i(r_i)$ e todas, menos uma, a j-ésima partícula, interagindo via deltas com a última.

Mediante a substituição de variáveis:

$$u_i = r_i - r_m$$

$$u_m = r_m$$

a (IV.20) assume a forma:

$$\bar{\Lambda}\Phi_m(U) = \sum_i a_{im}\delta(u_i)\Phi_m(U) \tag{21}$$

que será exatamente solúvel quando conhecida a função de Green de $\bar{\Lambda}$.

Caso não exista a interação de campo externo $V_i(r_i)$, $\bar{\Lambda}$ será do tipo de Λ, i.é:

$$\bar{\Lambda} = \sum_n \bar{L}_n = \sum_n (\hbar/2M_n)\nabla_n^2 + \sum_n k_n^2$$

e a (IV.20) será do tipo (II.23) e, portanto, sempre exatamente solúvel.

<u>Lema 1</u>: Dado o conjunto Φ_m, solução do sistema (IV.20), podemos construir uma solução de (IV.1) da forma $\Psi(R) = \sum_n \Phi_n(R)$, sempre que sobre ele se impuser a condição

$$\sum_n \Phi_n(R^i, r_j) = \Phi_i(R^i, r_j) \tag{22}$$

Realmente, neste caso, aplicando Λ sobre a $\Psi(R)$ assim definida, teremos:

$$\Lambda\Psi(R) = \Lambda\sum_n \Phi_n(R) = \sum_n \Lambda\Phi_n(R) =$$

$$= \sum_n\sum_i a_{in}\delta(r_i - r_n)\Phi_n(R)$$

ou, pelo uso da propriedade (II.6) da delta

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{in} a_{in}\delta(r_i - r_n)\Phi_n(R^n, r_i) =$$

$$= \sum_{in} a_{in}\delta(r_i - r_n).\sum_k \Phi_k(R^n, r_i) =$$

$$= \sum_{in} a_{in}\delta(r_i - r_n)\Psi(R)$$

o que completa a prova da afirmativa.

Esta é mais uma possibilidade para a determinação da solução exata do problema geral proposto em (IV.1) restando, como único ponto de dificuldade (prática) o cálculo de condições de contorno como a (IV.22), na fronteira não física do problema.

IV-6) Existência de soluções simétricas frente permutação de partículas.

Se o modelo (IV.1) pretende descrever um gas de bosons, então é imperativo, do ponto de vista quântico, que admita soluções totalmente simétricas frente a permutação de duas quaisquer partículas.

Deste argumento decorre, como primeira imposição, que Λ seja simétrico frente permutação de variáveis, o que implica

i) $V_i(r_i) = V_k(r_k)\big|_{r_k = r_i} = V(r_i)$, i.e, cada partícula deve interagir de forma idêntica com o campo externo.

ii) $M_i = M_k$, i.é, todas as partículas são de mesma massa.

iii) $a_{ij} = a$, mesmas amplitudes de interação para qualquer partícula.

Em adição, necessário também se faz impor simetria na interação binária deltiforme. Esta contudo, dada a simetria natural do funcional delta - $\delta(r_i-r_j) = \delta(r_j-r_i)$ - e dada a imposição iii) já feita acima, sempre será simétrica frente a permutação de variáveis. Não seria portanto a introdução de interação com campos externos $V_i(r_i)$, que perturbaria a simetria do sistema de bosons, frente permutação de duas partículas quaisquer. Em suma, escolhidos $V_i = V_k = V$ e $M_i = M_k = M$, (IV.1) necessariamente - para atender ao princípio de exclusão de Pauli - deverá admitir solução simétrica.

<u>Lema 2</u>: As soluções do sistema

$$L_i\phi_i(R) = \sum_j a_{ij}\delta(r_i-r_j)\phi_i(R) \tag{23}$$

com L_i dado pela (IV.1') a menos da particularização i) acima, se totalmente simétricas frente a permutação de variáveis, serão também solução de

$$\Lambda\Psi(R) = a\sum_{ij}\delta(r_i-r_j)\Psi(R) \tag{24}$$

onde $\Lambda = \sum_i L_i$.

Realmente, atendidas estas condições, teremos:

$$\begin{aligned}\Lambda\phi_k &= \sum_i L_i\phi_k(R) = \sum_i L_i\phi_i(R) = \\ &= a\sum_{ij}\delta(r_i-r_j)\phi_i(R) = \\ &= a\sum_{ij}\delta(r_i-r_j)\phi_k(R).\end{aligned}$$

No sistema (IV.23) , por sua vez, somente a va riável r_i participa do operador diferencial; os demais r_j comparecem à equação na qualidade de simples parâmetros. Assim sendo, o problema recai no (IV.20) e, seguindo um procedimento análogo ao lá adotado, obteríamos soluções do tipo

$$\phi_i(R) = a\sum_j G_i(r_i;r_j)\phi_i(R^i,r_j) \tag{25}$$

onde cada $G_i(r_i;r_j) = G(r_i;r_j)$ e satisfaz equações como:

$$L_i G(r_i;r_i') = \delta(r_i - r_i')$$

e cada $\phi_i(R^i,r_j)$ tem a forma

$$\phi_i(R) = (S_i\Delta)/\Delta$$

com Δ determinantes funcionais de forma genérica:

$$\Delta(R) = a^{N-1}\begin{vmatrix} \lambda+G(r_1;r_1) & G(r_1;r_2) & G(r_1;r_3) & \cdots & G(r_1;r_N) \\ G(r_2;r_1) & \lambda+G(r_2;r_2) & G(r_2;r_3) & \cdots & G(r_2;r_N) \\ G(r_3;r_1) & G(r_3;r_2) & \lambda+G(r_3;r_3) & \cdots & G(r_3;r_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ G(r_N;r_1) & G(r_N;r_2) & G(r_N;r_3) & \cdots & \lambda+G(r_N;r_N) \end{vmatrix}$$

e sendo $(S_i\Delta)$ o determinante Δ com a coluna i substituida pela coluna - aqui representada em forma de linha - :

$$[\phi_{oi}(R^i,r_1) \quad \phi_{oi}(R^i,r_2) \quad \phi_{oi}(R^i,r_3) \quad \ldots \quad \phi_{oi}(R^i,r_N)]$$

na qual $\phi_{oi}(R)$ satisfaz $\Lambda\phi_{oi}(R) = 0$; com $\lambda = 1/a$.

Nestas condições, a solução de (IV.24) assumirá a forma

$$\Psi(R) = a\sum_j G(r_i;r_j)(S_i\Delta)/\Delta \qquad (26)$$

que deverá ser escolhida totalmente simétrica de modo a não depender do índice i .

IV-7) Existência de solução separável numa soma de parte delta interagente com solução do problema sem deltas.

Retomemos o modelo geral (IV.1) e suponhamos que sua solução seja separável em

$$\Psi(R) = \Psi_o(R) + \Psi_1(R) \qquad (27)$$

com

$$\Lambda\Psi_o(R) = 0$$

e

$$\Psi_1(R^i,r_j) = 0 \quad , \quad \forall_{ij} \qquad (28)$$

Substituindo a (IV.27) na (IV.1), esta última se transforma, mediante o uso das condições (IV.28), em

$$\Lambda\Psi_1(R) = \sum_{ij} a_{ij}\delta(r_i-r_j)\Psi_o(R) \qquad (29)$$

que é do tipo (IV.2) e, portanto, admite solução na forma (IV.3) e/ou (IV,11).

Analisemos cada uma das possibilidade:

i) Substituindo a (IV.3) na (IV.27) teremos, como solução da (IV.1), a função

$$\Psi(R) = \Psi_o(R) + \overline{\Psi}_o(R) + \sum_{ij} a_{ij} \int dR' G(R;R') \delta(r_i'-r_j') \Psi_o(R')$$

onde $\overline{\Psi}_o(R)$ é alguma outra solução geral do problema homogêneo $\Lambda\overline{\Psi}_o(R) = 0$. Como se trata aqui de determinar soluções as mais gerais possíveis, podemos escrever simplesmente:

$$\Psi(R) = \overline{\Psi}_o(R) + \sum_{ij} a_{ij} \int dR' G(R;R') \delta(r_i'-r_j') \Psi_o(R') \tag{30}$$

para solução de (IV.1) dependente de função de Green de Λ, desde que se tenha

$$\sum_{ij} a_{ij} \int dR' G(R;R') \delta(r_i'-r_j') \Psi_o(R') \Big|_{r_k=r_n} = 0$$

condição que certamente será atendida sempre que escolhermos $G(R;R')$ tal que

$$G(R;R') \Big|_{r_k=r_n} = 0 \qquad \forall\, k,n \tag{31}$$

ii) A segunda forma alternativa de solução será substituir em (IV.27) a (IV.11) ficando então

$$\Psi(R) = \Psi_o(R) + \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i' G_{ij}(R_{ij};R_{ii}') \cdot \\ \cdot\, \Psi_o(R^{ij},R_{ii}') \tag{32}$$

Também aqui, para atender às condições (IV.28), devemos impor condições sobre a função de Green que no caso poderiam ser:

$$\sum_{ij} a_{ij} \int dr_i' G_{ij}(R_{ij};R_{ii}') \Psi_o(R^{ij},R_{ii}') \Big|_{r_k=r_n} = 0 \tag{33}$$

qualquer que sejam k e n . Uma condição suficiente para satisfazer a (IV.33) seria $G_{ij}\Big|_{r_k=r_n} = 0$ o que teria sentido desde que G_{ij} fosse escolhida na forma

$$\overline{G}_{ij}(R;R'_{ij}) = \overline{\Psi}_o(R) + G_{ij}(R_{ij};R'_{ij}) \qquad (35)$$

com $\overline{\Psi}_o(R)$ alguma solução particular de Λ e L_{ij} satisfazendo:

$$\overline{\Psi}_o(R)\Big|_{r_k=r_n} + G_{ij}(R_{ij};R'_{ii})\Big|_{r_k=r_n} = 0 \qquad (36)$$

qualquer que sejam k e n. Nestas condições a solução de (IV.1) seria então

$$\Psi(R) = \Psi_o(R) + \sum_{ij} a_{ij} \int dr'_i \overline{G}_{ij}(R;R'_{ii})\Psi_o(R^{ij},R'_{ii}) \qquad (37)$$

com $\overline{G}_{ij}$ dada por (IV.35) e satisfazendo

$$\overline{G}_{ij}(R;R'_{ii})\Big|_{r_k=r_n} = 0 \qquad (38)$$

qualquer que sejam k , n , i , j e R'_{ii}.

IV-8) Existência de solução separável num produto de parte delta interagente com solução de problema sem deltas.

Seja o modelo (IV.1) para o qual suponhamos sosução na forma

$$\Psi(R) = \phi(R)\psi(R) \qquad (39)$$

Veremos como, particularizando de uma ou outra maneira a ϕ ou a ψ, o problema se reduz a outros com vantagens.

i) Levando em conta a forma particular de Λ e L_k é imediato chegar a

$$L_k(\phi\psi) = \psi(\partial^2/\partial x_k^2)\phi + 2\left[(\partial/\partial x_k)\phi\right]\left[(\partial/\partial x_k)\psi\right] + \phi L_k\psi \equiv$$

$$\equiv \gamma_k(x_k;\psi)\phi + \phi L_k\psi \tag{40}$$

para os problemas unidimensionais.

Usando a (IV.40) obtemos:

$$\Lambda(\phi\psi) = \sum_k \gamma_k(x_k;\psi)\phi + \phi\sum_k L_k\psi \equiv \Gamma(X;\psi)\phi + \phi\Lambda\psi \tag{41}$$

A (IV.1), para casos unidimensionais, assume então a forma:

$$\Gamma(X;\psi)\phi + \phi\Lambda\psi = \sum_{ij} a_{ij}\delta(x_i - x_j)\phi\psi \tag{42}$$

Se particularizarmos ψ impondo $\Lambda\psi = 0$, sem outro vínculo adicional, podemos reduzir a (IV.42) à

$$\Gamma(X;\psi)\phi = \sum_{ij} a_{ij}\delta(x_i - x_j)\psi \tag{43}$$

desde que se imponha

$$\phi(X)\Big|_{x_i = x_j} = 1 \qquad \forall_{ij} \tag{43'}$$

e à (IV.43) com (IV.43') é a equivalente de (IV.42) que, por sua vez, equivalia exatamente à (IV.1), para casos unidimensionais.

A imposição (IV.43') aqui adotada ad hoc não prejudica a condição de contorno do problema físico que no caso ficaria sob responsabilidade da $\psi(X)$.

O problema (IV.43) é do tipo (IV.2) ou seja, um modelo para-quântico quando Γ tiver forma $\sum_k \gamma_k$ com cada γ_k dependente apenas da variável x_k. Sua solução pode ser imediatamente determinada na forma (IV.3), uma vez calculada a $G(X;X')$, aqui função de Green de Γ.

Soluções na forma (IV.11) ou (IV.14) podem ser pesquisadas, sobretudo para o caso em que L_i é operador de partícula livre unidimensional, situação em que $\gamma_k(x_k,\psi)$ pode ser escolhido dependente apenas de x_k. Para este caso particular teríamos soluções do tipo:

$$\phi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \int dx_i^! g_{ij}(X_{ij};X_{ii}^!) \psi(X^{ij},X_{ii}^!) \tag{44}$$

onde g_{ij} é tal que

$$(\gamma_i + \gamma_j) g_{ij}(X_{ij};X_{ij}^!) = \delta(x_i - x_i^!)\delta(x_j - x_j^!)$$

ii) Alternativamente, da (IV.42) poderíamos retirar

$$\Gamma(X;\psi)\phi = 0 \qquad \text{com} \qquad \phi(X^i,x_j) = 1 \tag{45}$$

$$\Lambda\psi(X) = \sum_{ij} a_{ij} \delta(x_i - x_j) \tag{46}$$

A (IV.45) seria um problema sem deltas (que admitimos solúvel mediante alguma técnica conhecida) e a (IV.46) um problema com deltas que é solúvel mediante a inversão do operador lambda.

iii) Uma terceira possibilidade seria, na (IV.42), incorporar à Γ a parte $\sum_k V_k(x_k)$ de Λ ficando a (IV.42) na forma

$$\overline{\Gamma}(X;\psi)\phi + \phi H_o\psi = \sum_{ij} a_{ij}\delta(x_i - x_j)\phi\psi \qquad (42')$$

com

$$\overline{\Gamma}(X;\psi) = \Gamma(X;\psi) + \sum_k V_k(x_k)$$

A (IV.42') poderia novamente ser abordada como em i) ou ii) acima. Cabe salientar que ao abordar a (IV,42') seguindo a sitemática ii), a equivalente da (IV.46) passaria a ser, basicamente, uma equação de segunda ordem a coeficientes constantes, o que simplificaria ainda mais o problema.

IV-8) Soluções para modelos em derivadas de deltas.

O interesse na introdução de modelos com derivadas de deltas baseia-se, sobretudo, nas considerações feitas à página 18 (cap.I) onde se comenta ser idéia corrente uma espécie de equivalência entre potenciais pseudo-funções (partes finitas) e combinação linear de deltas e suas derivadas.

Problemas de um corpo como o (I.1) são exatamente solúveis pois, na verdade, são casos particulares da (II.26) cuja técnica de solução está dada ao final do capítulo II. Cabe salientar, contudo, que sendo $\Lambda = H - E$, H operador de segunda ordem, então Λ será também de segunda ordem e a máxima ordem de derivação permitida sobre os deltas será um. Consequentemente o modelo (I.1) , só pode admitir deltas e derivadas de deltas para que seja solúvel.

Em problema de muitos corpos serão exatamente solúveis os modelos para-quânticos com derivadas primeiras que sejam do tipo

$$\Lambda\Psi(X) = \sum_{ij} a_{ij}\delta(x_i - x_j)\Phi(X) +$$
$$\sum_{ij} a'_{ij}\delta'_i(x_i - x_j)\Phi(X) \tag{47}$$

quer mediante uso da função de Green de Λ ficando a solução na forma

$$\Psi(X) = \sum_{ij} a_{ij}\int dX' G(X;X')\delta(x'_i - x'_j)\Phi(X')$$
$$+ \sum_{ij} a'_{ij}\int dX' G(X;X')\delta'_i(x'_i - X'_j)\Phi(X') \tag{48}$$

quer mediante função de Green de L_{ij} ficando, neste caso, a solução na forma

$$\Psi(X) = \sum_{ij}\int dx'_i dx'_j G_{ij}(X_{ij};X'_{ij})(\delta + \delta'_i)\Phi(X') \tag{49}$$

Sendo que, com esta restrição à primeira ordem de derivação nas deltas, existe a primeira derivada das funções de Green e podemos reescrever a (IV.49):

$$\Psi(X) = \overline{\Psi}(X) + \sum_{ij} a'_{ij}\int dx'_i G_{ij,i}(X_{ij};X'_{ii})\Phi(X^{ij},X'_{ii}) \tag{50}$$

onde $\overline{\Psi}(X)$ é a solução (IV.14) para o caso unidimensional e $G_{ij,i}(X_{ij};X'_{ii})$ é a derivada de G_{ij} em relação a x_i.

Destas considerações a respeito de modelos para-quânticos é fácil concluir que continuarão solúveis após a adição de termos em primeiras derivadas de deltas, os modelos cuja solução dependem basicamente da solução de modelos para-quânticos. Nesta categoria agrupam-se os modelos tratados nas secções (IV-1) , (IV-2) e (IV-7), com a óbvia restrição de que as condições de contorno para Ψ sejam tais que excluam a possibilidade do aparecimento de termos do tipo $\{\partial^2 G(x;x')/\partial x \partial x'\}\Big|_{x=x'}$, pois sem esta restrição os modelos com derivadas de deltas não permitiriam solução, como facilmente se depreende do exposto na secção (II-4).

CAPÍTULO V

N-CORPOS: INTERAÇÃO DELTA SUPERFICIAL

V-1) Formulação do problema.

Pelo que veremos abaixo, sob este título se agrupa toda uma classe de problemas envolvendo potenciais deltiformes. Uma característica essencial de todos eles é, certamente, a presença de produtos de deltas. Tais potenciais representam, em geral, uma interação somente quando duas ou mais partículas se encontram num mesmo ponto de um subconjunto - em geral uma variedade diferenciável - do conjunto (espaço) de definição do problema. No que se segue representaremos este subconjunto de definição do problema por S .

Dentre todos os problemas de interação delta superficial o que apresenta maior interesse, do ponto de vista da Física, é aquele em que duas partículas só interagem quando se encontram juntas em S . Nos enunciados que se seguem apresentaremos, para cada caso, este problema de interação binária e o caso - mais acadêmico - de interação N-ária. O último é o caso extremado em que se verifica interação somente quando todas as partículas do sistema se encontram juntas em um único ponto de S . Os casos intermediário de interação ternária[42], quaternária, etc, embora de formulação imedi ata, não apresentam maiores interesses ao nosso estudo.

Aqui e no que se segue, salvo observação em contrário, continuaremos com Λ da forma que vínhamos usando nos capítulos anteriores.

1) Formulação de problemas unidimensionais:

Em problemas unidimensionais o conjunto S será composto unicamente dos pontos a e/ou b, extremos do segmento de reta de definição do problema.

i) Para interação binária o problema de interação delta superficial - melhor talvez seria "delta puntiforme" - pode ser enunciado na forma

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij}\delta(x_i - x_j)\delta(x_i - a)\Psi(R) + $$
$$+ \sum_{ij} b_{ij}\delta(x_i - x_j)\delta(x_i - b)\Psi(R) \qquad (1)$$

onde $R = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$ e a interação de amplitude a_{ij} só acontece quando $x_i = x_j = a$ e a de amplitude b_{ij} quando $x_i = x_j = b$, a e b extremos do intervalo de definição do problema.

Uma possibilidade ainda, generalizando a interação delta superficial, é introduzir m pontos de contacto representados por a_k, k variando de 1 a m, assumindo, o modelo, a forma:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} \sum_{1}^{m} {}_{k}\, a_{ij}^{k}\delta(x_i - x_j)\delta(x_i - \alpha_k)\Psi(R) \qquad (2)$$

A (V.1) é, claramente, um caso particular deste último.

ii) Já o problema de interação N-ária teria enunciado

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{1}^{m}{}_{k} a^{k}\delta(x_1-\alpha_k)\delta(x_2-\alpha_k) \ \ldots \ \delta(x_N-\alpha_k)\Psi(R) \qquad (3)$$

com casos particulares como a (V.2) . Convém observar que para $N = 2$ o problema (V.2) é idêntico ao (V.3).

2) Formulação de problemas bidimensionais.

Quando o espaço de definição do problema é bidimensional o conjunto S será, em geral, a união de vários segmentos de linha, cada um dos quais derivável no mínimo até segunda ordem. Esta imposição advém do fato de ser S , por hipótese, a fronteira física do problema. Disto segue, em adição, que S deverá ser conexo.

Sem limitar essencialmente o alcance do modelo, adotaremos, para S , o conjunto dos pontos de arcos de curvas dados por $y = f_k(x)$. Com estas hipóteses, o problema de interação delta superficial a duas dimensões será enunciado como;

i) Para interação binária:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{1}^{m}{}_{k}\sum_{ij} a^{k}_{ij}\delta(x_i-x_j)\delta(y_i-y_j)\delta\{y_i-f_k(x_i)\}\Psi(R) \qquad (4)$$

onde agora $R = (r_1,r_2,r_3,\ldots,r_N)$ e $r_i = (x_i,y_i)$.

ii) Para interação N-ária:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{1}^{m}{}_k a^k \delta(x_1-x_2)\delta(x_1-x_3) \ldots \delta(x_1-x_N) . \tag{5}$$
$$. \delta(y_1-y_2)\delta(y_1-y_3) \ldots \delta(y_1-y_N)\delta\{y_1-f_k(x_1)\}\Psi(R)$$

3) Formulação de problemas tridimensionais.

Em problemas tridimensionais, o subconjunto S será escolhido como uma parte de uma superfície $z = f(x,y)$. Nos casos mais gerais S deverá ser a união conexa de várias partes do tipo acima, devendo possuir ainda propriedades como derivabilidade até ordem dois no mínimo, além de outras que talvez se façam necessárias em cada problema específico.

Por se tratar aqui de formulações gerais estamos, na verdade, propondo modelos mais vigorosos que aqueles na prática adotados. Praticamente, é dispensável qualquer generalidade maior do que aquela fornecida por $f(x,y)$ representando planos ou calotas esféricas centradas na origem.

i) Problema tridimensionais de interação delta superficial binária, serão descritas pelo modelo:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{1}^{m}{}_k \sum_{ij} a_{ij}^k \delta(x_i-x_j)\delta(y_i-y_j)\delta(z_i-z_j)\delta\{z_i-f_k(x_i,y_i)\}\Psi(R) \tag{6}$$

onde, como a própria equação revela, acontece interação sempre que $r_i = r_j$ e ambos sobre a superfície $z_i = f(x_i,y_i)$.

ii) Problema de interação N-ária serão descritos por equações do tipo:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{1}^{m}{}_k a^k \delta(x_1-x_2)\ldots\delta(x_1-x_N).\delta(y_1-y_2)\ldots\delta(y_1-y_N).$$
$$.\delta(z_1-z_2)\ldots\delta(z_1-z_N)\delta\{z_1-f_k(x_1,y_1)\}\Psi(R) \tag{7}$$

V-2) Formulação Geral do Problema:

Consideremos aqui apenas o caso de interação delta superficial tridimensional. Seja, por exemplo, a equação (V.6) com $m = 1$. No caso o subconjunto S onde as interações se passam é a superfície $z = f(x,y)$ e o operador $\Lambda = H - E$. Observemos que o problema representa uma interação delta superficial qualquer que seja o tipo de coordenadas adotadas. Apenas por escolha casual optamos, ao escrever a equação, pelas coordenadas cartesianas. Se ao invés delas tivéssemos escolhido coordenadas esféricas o enunciado ficaria exatamente o mesmo desde que se entendesse x_i, y_i, z_i como coordenadas esféricas e se tomasse a hamiltoniana H também expressa neste mesmo sistema de coordenadas. Se a escolha não recaísse sobre coordenadas esféricas mas sobre outras quaisquer curvilíneas, as considerações acima continuariam válidas.

Em vista disto sempre podemos então adotar um sistema de coordenadas curvilíneas no qual a superfície fique expressa por $f(x,y) = 0$ ou seja, em que os z_i = cte sejam planos coordenados. Neste caso o problema de interação delta superficial sempre poderá ser enunciado na forma:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij}\delta(x_i - x_j)\delta(y_i - y_j)\delta(z_i - z_j)\delta(z_i)\Psi(R) \tag{8}$$

ou

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij}\delta(x_i - x_j)\delta(y_i - y_j)\delta(z_i)\delta(z_j)\Psi(R) \tag{9}$$

ou então:

$$\Lambda\Psi\ (R) = \sum_{ij} a_{ij}\delta(r_i - r_j)\delta(z_i)\Psi(R) \tag{9'}$$

Observamos que todas estas considerações, feitas as devidas modificações, se aplicam, igualmente, aos casos uni e bidimensionais.

V-3) Modelos para-quânticos de interação delta superficial.

Como no capítulo IV, definimos modelos para-quânticos substituindo, na equação do modelo quântico, as funções de onda exatas com coeficientes deltiformes, pela função de onda de um problema sem deltas:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij}\delta(x_i - x_j)\delta(y_i - y_j)\delta(z_i - z_j)\delta\{z_i - f(x_i, y_i)\}\Psi_o(R) \tag{10}$$

que é o caso geral de problemas com interação delta superficial tridimensional em uma única superfície. Na (V.10) o sistema de coordenadas não foi particularizado e, por enquanto, podemos supô-lo cartesiano. Simplificando a notação podemos reescrevê-lo na forma:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij}\delta(r_i - r_j)\delta\{z_i - f(x_i, y_i)\}\Psi_o(R) \tag{11}$$

O problema (V.11) sempre terá solução exata quando se conhece a função de Green do operador Λ. No caso a solução ficaria

$$\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij}\int dR' G(R;R')\delta(r_i' - r_j')\delta\{z_i' - f(x_i', y_i')\}\psi_o(R') \tag{12}$$

sendo $G(R;R')$ a função de Green de Λ.

Seguindo, contudo, uma linha paralela àquela adotada no capítulo IV para modelos para-quânticos de sistemas de N-corpos, podemos provar que a (V.11) sempre possuirá solução

$$\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i' G_{ij}(R_{ij};R_{ii}')\delta\{z_i'-f(x_i',y_i')\}\Psi_o(R^{ij},R_{ii}') \tag{13}$$

com

$$L_{ij}G_{ij}(R_{ij};R_{ij}') = \delta(r_i-r_i')\delta(r_j-r_j') \tag{14}$$

sendo L_{ij} a parte do operador Λ que só depende de r_i e r_j. Realmente, aplicando $\Lambda = L_{ij} + \Lambda^{ij}$ a ambos os membros de (V.13) teremos:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i' \{L_{ij}G_{ij}(R_{ij};R_{ii}')\}\delta\{z_i'-f(x_i',y_i')\}\Psi_o(R^{ij},R_{ii}')$$

$$+ \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i' G_{ij}(R_{ij};R_{ii}')\delta\{z_i'-f(x_i',y_i')\}\Lambda^{ij}\Psi_o(R^{ij},R_{ii}')$$

o que fornece, considerando as propriedades de G_{ij} e que $\Lambda^{ij}\Psi_o = 0$ por hipótese:

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i' \delta(r_i-r_i')\delta(r_j-r_i')\delta\{z_i'-f(x_i'-y_i')\}\Psi_o(R^{ij},R_{ii}')$$

ou, mediante o uso das propriedades da delta "sob sinal de integração":

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij}\delta(r_i-r_j)\delta\{z_i-f(x_i,y_i)\}\Psi_o(R)$$

como queríamos demonstrar.

Aqui também podemos definir modelos para-quânticos generalizados mediante a substituição da Ψ_o nas suas várias posições dentro do primeiro modelo por elementos de um conjunto de funções Φ_{ij} todas satisfazendo $\Lambda^{ij}\Phi_{ij} = 0$. Nestes casos toda a classe de modelos

$$\Lambda\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij}\,\delta(r_i - r_j)\,\delta\{z_i - f(x_i', y_i')\}\Phi_{ij}(R) \qquad (15)$$

sempre será exatamente solúvel, com soluções na forma:

$$\Psi(R) = \sum_{ij} a_{ij} \int dr_i' G_{ij}(R_{ij}; R_{ii}')\,\delta\{z_i' - f(x_i', y_i')\}\Phi_{ij}(R^{ij}, R_{ii}')$$

V-4) Soluções separadas na forma de soma de funçõe delta interagente com solução de problema sem delcas.

i) Seja o caso geral de interação delta superficial (v.9'). Paralelamente ao que foi feito na secção (IV-7) podemos supor uma solução de (v.9') na forma

$$\Psi(R) = \Psi_0(R) + \Psi_1(R) \qquad (16)$$

com $\Lambda\Psi_o = 0$ e

$$\Psi_1(R^i, r_j) = 0 \qquad \forall_{ij} \qquad (17)$$

ficando o modelo inicial equivalente a

$$\Lambda\Psi_1(R) = \sum_{ij} a_{ij}\,\delta(r_i - r_j)\,\delta(z_i)\Psi_o(R) \qquad (18)$$

A (V.18) admite abordagem nas duas linhas i) e ii) apresentadas na secção (IV-7) conduzindo à soluções nas formas (IV.30) - com condição (IV.31) e $\Psi_o(R')$ substituida por $\delta(z_i')\Psi_o(R')$ - ou (IV.32) - com condição (IV.38), desde que agora se entenda $\delta(z_i')\Psi_o(R^{ij}, R_{ii}')$ ocupando o lugar de $\Psi_o(R^{ij}, R_{ii}')$.

Importante observar, neste caso, que a condição (V.17) pode ser substituida por outra mais simples como

$$\Psi_1(R^i, x_i, y_i, 0) = 0$$

ficando a (V.9') - após feita a substituição (V.16) para $\Psi(R)$, dada ainda por

$$\Lambda\Psi_1(R) = \sum_{ij} a_{ij}\delta(r_i - r_j)\delta(z_i)\Psi_o(R) \qquad (19)$$

que novamente é uma equação de modelo para-quântico igualmente abordável mediante qualquer das formas citadas ao final do parágrafo anterior.

iii) O modelo (V.9') poderia ainda ser estudado via emprego de técnica semelhante à adotada na secção (IV-8), conduzindo a equações análogas perfeitas daquelas que lá aparecem. Não esploramos com mais detalhes esta possibilidade porque a abordagem feita em ii), desta secção, nos parece suficientemente poderosa para solucionar o problema geral, não havendo, portanto, carência de alternativa que aparentemente não se mostrará mais eficiente.

Para completar o estudo do modelo de interação delta superficial é sumamente elucidativo observar que, dentro da formulação do problema geral dado pela (V.9') , fica estabelecido que qualquer destas equações poderá sempre ser resolvida pelas técnicas de muitos corpos do capítulo IV. A razão disto está no fato de que a equação do modelo de interação delta superficial só difere daquela para sistemas de muitos corpos com interação binária deltiforme pelo termo $\delta(z_i)$. Este acréscimo, ao contrário de - como se poderia imaginar - aumentar o trabalho de solução, virá simplificar a sistemática, diminuindo o número de integrações necessárias.

C O N C L U S Õ E S

Vários modelos de interação deltiforme foram apresentados os quais admitem, sob condições claramente amplas, soluções exatas. O estudo foi conduzido sob forma bastante generalizada, não se preocupando com elaborações em modelos particulares que neste trabalho ficam em aberto, possibilitando futuras aplicações com o objetivo de determinar propriedades específicas de sistemas assim descritos. Nesta linha convém salientar que ao menos os problemas de condensação de Bose Einstein com impurezas deltiformes[20] ficam com domínios ampliados frente a nova classe de modelos exatamente solúveis. Também, seguindo tendências da literatura atual poder-se-iam determinar energias de estado fundamental e, em casos de limites termodinâmicos, as propriedades macroscópicas dos sistemas.

Salientamos ainda que em todos os problemas abordados restringimo-nos a acrescentar, sobre a interação usualmente adotada, uma interação deltiforme, supondo, portanto, que o problema sem deltas esteja perfeitamente conhecido. Este é certamente o caso dos sistemas de partículas livres[42] além daqueles interagindo com potenciais harmônicos, proporcionais ao inverso do quadrado das distâncias entre partículas[24] e outros mais particulares como os de partes constantes.

Outros problemas mais gerais, uma vez solucionados sem interação deltiforme, poderão ser também solucionados com o acréscimo de uma interação deltiforme, ao menos nas condições dos parágrafos (IV-1) a (IV-5), (IV-7), (IV-8), (V-3) e (V-4).

O tratamento, salvo algumas excessões, foi a tres dimensões espaciais, liberdade que se tem apenas ainda quando o problema sem deltas é exatamente solúvel com esta generalidade. A medida que se reduz o número de dimensões espaciais, aumenta o número de problemas usuais exatamente solúveis significando isto que a técnica aqui estabelecida terá maiores chances de aplicação em problemas unidimensionais.

Soluções como a (IV.3) são praticáveis também quando Λ não for separável em soma de L_i's. Especificamente, são solúveis na forma (IV.3) os problemas com

$$\Lambda = -\sum_i (h/2M_i)\nabla_i^2 + V(R) - E$$

desde que dele se conheça a função de Green satisfazendo condições como as lá impostas. Disto decorre ainda que o problema geral, com esta generalização, terá solução exata na forma do parágrafo (IV-7).

Técnicas de perturbação à partir do teorema do ponto fixo são aplicáveis em todos os problemas aqui tratados com a vantagem adicional de se ter algumas das integrais - dada a propriedade (II.3') da delta - simplificadas.

Particularmente, um problema como o (IV.1) terá solução aproximada Ψ^n, em ordem n, mediante a aplicação do teorema do ponto fixo - quando Λ assim o permitir - na forma:

$$\Psi^n(R) = \sum_{ij} a_{ij} \int dR' G(R;R') \delta(r_i'-r_j') \Psi^{n-1}(R')$$
$$= \sum_{ij} a_{ij} \int dR'^i G(R;R'^i, r_j') \Psi^{n-1}(R'^i, r_j')$$

com a redução de uma integração em cada termo, simplificando assim o trabalho de cálculo.

A abordagem (IV-5) do problema (IV.20) aplicável ao caso geral mediante o Lema 1, se presta, quando generalizada, à uma técnica de iteração peculiar e que se enquadra, como veremos, dentro das condições de aplicação do teorema do ponto fixo.

Basicamente, dado o problema geral (IV.1) suponhamos uma solução do tipo $\Psi = \sum_{ij} \phi_{ij}$ com

$$\sum_{ij} \phi_{ij}(R^k, r_s) = \phi_{ks}(R^k, r_s)$$

Nas condições acima o problema inicial se reduz a

$$\Lambda \sum_{ks} \phi_{ks} = \sum_{ij} a_{ij} \delta(r_i - r_j) \phi_{ij}(R^i, r_j)$$

que poderá ser decomposto em

$$\Lambda \phi_{ij} = a_{ij} \delta(r_i - r_j) \phi_{ij}(R^i, r_j)$$

encaminhando a uma solução exata nos moldes do modelo (IV. 16); ou então em

$$\Lambda \phi_{i+1,j} = a_{ij} \delta(r_i - r_j) \phi_{ij}(R^i, r\ )$$

encaminhando a uma solução iterada. Para exclarecer melhor a possibilidade, consideremos o problema de tres corpos:

$$\Lambda(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3) = a\delta(r_1-r_2)\phi_1 + b\delta(r_1-r_3)\phi_2 + c\delta(r_2-r_3)\phi_3$$

que poderá ser decomposto no sistema:

$$\Lambda\phi_1 = b\delta(r_1-r_3)\phi_2$$
$$\Lambda\phi_2 = c\delta(r_2-r_3)\phi_3$$
$$\Lambda\phi_3 = a\delta(r_1-r_2)\phi_1$$

Tomando inicialmente $\phi_2 = \Psi_o$ - solução de $\Lambda\Psi_o = 0$ - substituida na primeira das equações determina-se ϕ_1^1 que posta na terceira fornecerá ϕ_2^1 etc, podendo a rea plicação ser feita ad infinitum. Para verificar que o proces so decorre da aplicação do teorema do ponto fixo basta escre ver o sistema na forma matricial:

$$\Lambda \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & b\delta(r_1-r_3) & 0 \\ 0 & 0 & c\delta(r_2-r_3) \\ a\delta(r_1-r_2) & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{bmatrix}$$

que é do tipo

$$\Lambda u(R) = Tu(R)$$

e, portanto, solúvel mediante esta técnica sempre que $\Lambda^{-1}T$ for contrativo.

Pelo menos certos casos de interações delta em problemas de N corpos[44] serviram como exemplo normativo para quantização de uma particular equação de Schroedinger não linear[45]. É uma questão aberta a equivalência formal de outros modelos deltiformes - como os apresentados neste trabalho - com outras formas de não linearidade da equação de Schroedinger.

É solúvel um reduzido número de casos de descrição do comportamento de uma partícula interagindo com outras cujo movimento é a priori conhecido. Um dos casos é o do movimento de uma partícula no campo de atração de dois potenciais deltiformes cujos suportes se distanciam com velocidade constante[46]. Nossas técnicas tem este como caso particular e permitem tratar outros casos mais gerais do mesmo problema.

Evidentemente a lista citada de problemas abertos por este trabalho não pretende, nem de longe, ser exaustiva. Exemplifica apenas o campo de aplicabilidade das técnicas aqui desenvolvidas.

IOTAS E REFERÊNCIAS.

1 - L.Schwartz - Théorie des Distributions I,II - Paris (50/51)

2 - W.Güttinger - Phys.Rev., 89(1953)1004.

3 - W.Güttinger - Fortsch.der Physik, 14(1966)483.

4 - W.Güttinger - SIAM J.Appl.Math., 15(1967)964.

5 - *Definição exata do conceito dada no cap. II, pag. 33.*

6 - *Veja, por exemplo:* L.Schwartz - Ann.Univ.Grenoble, 21 (1945)57, ou ibidem, 23(1948)7.

7 - W.Güttinger - Prog.Theor.Phys., 13(1955)612.
- Z.Naturf., 10a(1955)257.

8 - L.N.Cooper - Phys.Rev., 100(1955)362.
- Arnowitt and Deser - Phys.Rev., 100(1955)349.
- J.R.MacDonald and M.K.Brachman - Rev.Mod.Phys., 28(1956)393.
- H.Schmidt - Z.für Physik, 151(1958)365.
- L.Schwartz - Matematica y Fisica Cuantica, Univ. Buenos Ayres, (1958).

9 - *Conceito que definimos adiante - cap. II, pags. 30-31.*

10 - *Nesta relação, além das refs.: 2, 3, 4, 7, 8 e 15, convém citar ao menos:*
- V.Gorgé - Lorentz-Invariant Distributions, (preprint) Sycuse Univ. - N.York (1966
- W.Güttinger - N.Cimento, 36(1965)968; 10(1958)1;
- Nucl.Phys., 9(1959)429,
- Proc. of the International Symposium on non Local Quantum Field Theories - Dubna (1967)96.
- W.Güttinger e E.Pfaffelhuber - N.Cimento, 52((1967)389;

- W.Güttinger e E.Pfaffelhuber - SIAM J.Appl.Math., 15(1967)1030.
- Unrenormalizable Interactions in Minkowski and Euclidian Space (preprint) Univ. of Munich (1966)
- Unrenormalizable Field Theories im terms of Lorentz Invariant Generalized Functions - SIAM Fall Meeting (1966) Stony Brook.
- W.Güttinger, R.Penzl e E.Pfaffelhuber - Ann.Phys., 33(1966)246
- N.Cimento, 43(1966)423.
- H.H.Aly, W.Güttinger e H.J.W.Müller - Singular interactions in Quantum Field Theory (in "Lectures in High-Energy Theoretical Physics" - London & Breach Publ.Co., N.York).
- W.Güttinger e J.A.Swieca - Z.Naturf., 16a(1961)1265.
- E.Pfaffelhuber - Propagators em Terms of Generalized Functions (preprint) - Univ. of Munich (1968).
- P.K.Ghosh - Schwartz's Theory of Distributions and some of its applications in Physics - Satyendranth Bose 70th Birthday Commemoration Volume, part II, pp. 135 -150. Prof. S.N.Bose 70th Birthday Celebration Commettee, (1966) Calcuta.
- P.D.Methée - Sur les distributions invariantes dans le groupe des rotations de Lorentz - (tese) - (1954).
- A.V.Khare and T.Pradhan - Pertubations Theory Calculations of delta functions derivatives em equal-time charge current commutator - SAHA Inst. of Nucl. Physics No: SIMP-TH/72-4 (1972).
- J.L.Gervais and F.J.Yndurãin - General Representation of Cau-

sal Distributions - N.York University.

- P. Kristensen, L.Mejlbo and E.Thue Poulsen - Tempered Distributions in Infinitely Many Dimensions III - Linear Transformations of Field Operators (1966).
- M.Minami - Prog.Theor.Phys., 39(1968)460 e 35(1966)705.
- P.D.Methée - Transformées de Fourier de distributions invariantes liées a la résolution de l'équations des ondes - Coll.Inter.du CNRS, Nancy (1956).
  - C.R. de l'Ac. de Sc. t. 240(1955)1179
  - ibidem t. 241(1955)684.
- C.L.R.Braga - Transformations de Fourier de Distributions Invariantes. Univ. S.Paulo (1960).
- H.W.Rupertsberger - Acta Physica Austriaca, 32(1970)317.

11 - K.Huang, C.N.Yang - Phys.Rev., 105(1957)776.

12 - K.Dettmann e G.Leibfried - Z.Physik, 234(1970)181.
I.R.Lapidus - Am. J.Phys., 37(1969)930 e 1064.
J.F.Reading e J.L.Sigel - Phys.Rev.B, 5(1972)566.

13 - N.L.Teixeira - Não Localizabilidade em Mecânica Quântica Tese de Livre Docência - Porto Alegre - 1968.
- Equations with Distributions as coefficients (preprint) - FFCL Araraquara - S.P.(1969).

14 - *Veja por exemplo:* K.M.Case - Phys.Rev., 80(1950)797.

15 - W.Güttinger e E.Pfaffelhuber - Solution of singular integral equations by means of pseudofunctions - SIAM Fall Meeting - (1966) - Stony Brook.

16 - *Ver por exemplo em refs. 3 ou 4.*

17 - M.Bauer e M.Moshinsky - Nucl.Phys., 4(1957)615.

- M.Moshinsky - Rev.Mexic.Fis., 6(1957)185.

18 - R.E.Schenter e H.S.Zwibel e R.L.Cassola - Am.J.Phys., 37(1969)1242.

19 - D.A.Atkinson e H.W.Crater - Am.J.Phys., 4(1975)301.

20 - S.G.Rosa Jr., O.Hipólito e R.Lobo - Phys.Rev.A, 11(1975)1454.

21 - R.Loverriere e J.Proiol - Am.J.Phys., 37(1972)809.

- C.K.Lai - J.Math.Phys., 15(1974)954

- C.K.Lai e C.N.Yang - Phys.Rev.A, 3(1971)393.

22 - *Veja por exemplo:* The Many Body Problem - C.DeWitt - John Willey & Sons, Inc., (1958) N.York - pp 347 - 355.

23 - J.Wolfes - J.Math Phys., 15(1974)1420.

24 - F.Calogero - J.Math.Phys., 12(1971)419.

25 - M.Girardeau - J.Math.Phys., 136(1960)516.

26 - J.K.Percus e G.J.Yevick - Phys.Rev., 136(1964)B290.

27 - N.M.Vitrial - J.Math.Phys., 12(1971)2467.

28 - E.H.Lieb e W.Liniger - Phys.Rev., 130(1963) e 1616.

29 - J.B.McGuire - J.Math.Phys., 5(1964).

- ibidem, 6(1965)432.

- ibidem, 7(1966)123.

30 - J.Zinn Justin e E.Brezin - Un problème a N corps soluble (preprint) Sérvice de Physique Théorique Centre d'Etudes Necléaires de Saclay, (1966).

31 - M.Gaudin - J.Math.Phys., 12(1971)1674 3 1677.

32 - *Usamos o termo "paridade" como tradução de "pairing".*

33 - I.M.Green e S.A.Moskowski - Phys.Rev., 139(1965)B790.

34 - A.Plastino et al. Phys.Rev., 145(1966)837.

- A. Plastino et al. - Bull.Am.Phys.Soc., 11(1966)320.
- B.J.Verhaar e L.D.Telsma - Nucl.Phys., A90(1967)612.
- L.Le Tourneux e J.M.Eisenberg - The surface delta interaction and excitations in closed shell nuclei - Univ. of Virginia, Charlottesville, Virginia.
- K.R.Greider - Phys.Rev., 136(1964)B420.

35 - *Veja, por exemplo:*

- I.M.Gel'Fand, G.E.Shilov, N.Ya.Vilenkin - Generalized Functions I-IV, N.York (1964), Berlin (1963).
- W.Güttinger - Singular Operations in Theoretical Physics - A Course on Distribution Analysis and its applications - Inst.Fis. Teórica, (1956) SP.
- *Ou ainda refs.: 1, 2 ou 4 acima.*

36 - *São exemplos:*

- M.V.Mironov - J.Appl.Math.Mech., 32(1968)23.
- A.Checroun - Rev.CETHEDEC, 13(1968)9.

37 - *Alguns trabalhos que se enquadram nesta linha são os das refs.: 17 a 20, 23 a 31 e 33 e 34, podendo-se acrescentar:*

- R.K.Janev e Z.Marič - Phys.Lett., 46(1974)313.
- C.K.Najundar - J.Math.Phys., 13(1972)705.
- L.R.Dodd - J.Math.Phys., 11(1970)207.

- C.Marchioro - J.Math.Phys., 11(1970)2193.

- A.H.Zemanian e R.P.Tewarson - SIAM J.Numer.Anal., 4(1967)271

38 - E.Schmutzer - Acta Phys.Acad.Sci.Hungar., 24(1968)325.

39 - *Veja por exemplo refs. 11 e 17.*

40 - *Quanto à notação adotamos, salvo especificação em contrário:*

- r_i *o vetor posição da partícula* i *no espaço usual (podendo ser uni, bi ou tridimensional).*
- $R = (r_1, r_2, r_3, \ldots, r_N)$.
- $R^{ij} = (r_1, r_2, \ldots, r_{i-1}, r_{i+1}, \ldots, r_{j-1}, r_{j+1}, \ldots, r_N)$.
- $R_{ij} = (r_i, r_j)$. *Ficando assim claro o significado de expressões como:* $F(R)$, $G(R^{ij})$, $H(R_{IJ})$. *Como exemplo desta notação temos* $F(R) \equiv F(R^{ij}, R_{ij}) \equiv F(R^{ij}, r_i, r_j)$.
- *Adotamos também* $\delta_i'(x_i - x_j) \equiv (\partial/\partial x_i)\delta(x_i - x_j)$.

41 - Shan S.Kuo - Numerical Methods and Computers - Addison Wesley Publ.Co.Inc.(1966).

42 - *Não exatamente em interação delta superficial mas em problemas de tres corpos, encontramos na literatura*[23] *o estudo de um modelo com interação ternária.*

43 - W.Grants Cooper - J.Math.Phys., 13(1972)809.

44 - C.N.Yang - Phys.Rev.Lett., 19(1967)1312.
- Phys.Rev., 168(1968)192.

45 - D.J.Kaup - J.Math.Phys., 16(1975)2036.

46 - S.K.Zhdanov e A.S.Chikhachev - Sov.Phys.Dokl., 19(1975)696.