

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA**  
**"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"**  
**CAMPUS DE GUARATINGUETÁ**

**DOUGLAS WILLIAN VIEIRA**

**Aplicações de transformadas de Fourier unilaterais  
em sistemas quânticos simples e familiares**

Guaratinguetá

2021

**Douglas Willian Vieira**

**Aplicações de transformadas de Fourier unilaterais  
em sistemas quânticos simples e familiares**

Trabalho de Graduação apresentada ao Conselho de Curso de Graduação em Física da Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Graduação em Física.

Orientador:

Prof<sup>o</sup> Dr. Antonio Soares de Castro

Guaratinguetá

2021

|       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| V658a | <p>Vieira, Douglas Willian</p> <p>Aplicações de transformadas de Fourier unilaterais em sistemas quânticos simples e familiares / Douglas Willian Vieira - Guaratinguetá, 2024.</p> <p>44 f : il.</p> <p>Bibliografia: f. 43-44</p> <p>Trabalho de Graduação em Física – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Engenharia e Ciências de Guaratinguetá, 2024.</p> <p>Orientador: Prof. Dr. Antonio Soares de Castro</p> <p>1. Fourier, Transformadas de. 2. Schrodinger, Equação de. 3. Teoria quântica. 4. Osciladores harmônicos. I. Título.</p> <p>CDU 530.145</p> |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA**  
**"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"**  
**CAMPUS DE GUARATINGUETÁ**

**DOUGLAS WILLIAN VIEIRA**

ESTE TRABALHO DE GRADUAÇÃO FOI JULGADO ADEQUADO COMO PARTE DO  
REQUISITO PARA A OBTENÇÃO DO DIPLOMA DE "GRADUADO EM FÍSICA"

APROVADO EM SUA FORMA FINAL PELO CONSELHO DE CURSO DE  
GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Profº Dr. JULIO MARNY HOFF DA SILVA  
Coordenador

**BANCA EXAMINADORA:**



---

Profº Dr. Antonio Soares de Castro  
Orientador/Universidade Estadual Paulista Júlio de  
Mesquita Filho (UNESP)



---

Profº Dr. Elias Leite Medonça  
Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita  
Filho (UNESP)



---

Profº Dr. Wagner Maciel Castilho  
Centro Tecnológico da Marinha em São Paulo  
(CTMSP)

## **DADOS CURRICULARES**

### **DOUGLAS WILLIAN VIEIRA**

**NASCIMENTO** 29/05/1989 - Taubaté / SP

**FILIAÇÃO** Adelino Vieira  
Maria Ivanda Francisca Vieira

**2017 / 2021** Graduação (Física- Bacharelado)  
FEG-UNESP

Dedico este trabalho a todos que contribuíram para minha jornada.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar à minha família: meu pai; minha mãe; e minha irmã. Eles me apoiaram, toleraram, e tiveram muita paciência comigo, me proporcionando um robusto alicerce emocional, acreditando sempre em minha jornada.

À minha segunda família: minha madrinha; meu padrinho; Karen; Nilce; e meus dois melhores amigos, Eduardo e Júlio.

À minha namorada Carolina, por estar ao meu lado em tempo integral me proporcionando muito amor e carinho.

Aos amigos da van, por tornarem as viagens uma forma divertida e um passatempo prazeroso.

Aos meus amigos: Mathias; Vitor; e Bruno “Cachoeira”, pelo auxílio intelectual e pelo momentos de companheirismo e distração.

A todos os professores pelo conhecimento transmitido a mim, em especial ao meu orientador Prof. Dr. Antonio Soares de Castro, por sua atenção singular e a oportunidade a mim atribuída.

A todos os funcionários que tornaram a Universidade um lugar prazeroso.

Agradeço especialmente à PROPE/UNESP pelo suporte financeiro, me dando a oportunidade de realizar este trabalho com tranquilidade.



*“O importante não é estar aqui ou ali, mas ser. E ser é uma ciência delicada, feita de pequenas observações do cotidiano, dentro e fora da gente. Se não executamos essas observações, não chegamos a ser: apenas estamos, e desaparecemos.”*  
*(Carlos Drummond de Andrade)*

## RESUMO

Neste trabalho implementamos a técnica da transformada de Fourier unilateral para resolver a equação de Schrödinger independente do tempo. Para começar, aprofundamos o conhecimento sobre a transformada de Fourier unilateral e seu processo de inversão, cuidando das condições de contorno apropriadas. Notadamente, a transformada seno de Fourier obedece à condição de contorno homogênea de Dirichlet na origem, enquanto a transformada cosseno de Fourier obedece à condição de contorno homogênea de Neumann na origem. Posteriormente, efetuamos sucessivas derivações nas transformadas de Fourier unilaterais com o intuito de observar quando há interferências entre as transformadas seno e cosseno de Fourier. Também foi feito um estudo do comportamento das derivadas das transformadas de Fourier unilaterais próximo à origem. Essas propriedades diferenciais nos mostraram uma quantidade restrita de equações diferenciais cujas resoluções serão eficientes por intermédio das transformadas de Fourier unilaterais. Possivelmente, esse número restrito de equações resolvíveis se dá justamente devido à interferência entre as transformadas seno e cosseno que ocorre dependendo da ordem da derivada das transformadas. Após feito o estudo da transformada de Fourier unilateral e suas propriedades, abordamos a partícula numa caixa centrada na origem por intermédio da transformada de Fourier unilateral. Para um potencial simétrico em relação à origem, as autofunções possuem paridades definidas: autofunções pares obedecem à condição de contorno homogênea de Neumann na origem quando então é conveniente utilizar a transformada cosseno de Fourier, enquanto autofunções ímpares obedecem à condição de contorno homogênea de Dirichlet na origem, neste caso é apropriado usar a transformada seno de Fourier. Essas condições, juntamente com as condições de contorno de Dirichlet nos extremos da caixa, resultaram nas transformadas de Fourier unilaterais finitas, que estabelecem uma estreita relação com as séries de Fourier. Esta observação nos levou diretamente à resolução do problema. Em seguida, aplicamos a transformada de Fourier unilateral na equação do oscilador harmônico quântico unidimensional. Primeiramente, foi necessário uma transformação funcional adicional, pois a transformada de Fourier unilateral aplicada à equação de Schrödinger não resultou em uma equação mais simples. O problema em questão dispõe de um potencial par definido no intervalo  $(-\infty, \infty)$ , isso permitiu focar nossa atenção ao semieixo positivo aplicando a transformada de Fourier unilateral neste semieixo. Assim, após obter o resultado desejado, realizamos a inversão da transformada e efetuamos sua extensão adequada: simétrica para autofunções pares ou antissimétrica para autofunções ímpares. Além disso, houve a necessidade de utilizar propriedades diferenciais das transformadas de Fourier unilaterais inversas. O problema foi resolvido a partir da autofunção relacionada ao nível de energia mais baixo.

**PALAVRAS-CHAVE:** Transformada de Fourier unilateral; Transformada cosseno de Fourier; Transformada seno de Fourier; Transformada de Fourier unilateral finita; Partícula numa caixa; Poço quadrado infinito; Oscilador harmônico quântico unidimensional.

## ABSTRACT

In this work we implement the unilateral Fourier transform technique to resolve the time-independent Schrödinger equation. At first, we introduced and developed concepts related to unilateral Fourier transform and the inversion process, taking care of the appropriate boundary conditions. Of special importance, the Fourier sine transform obeys the homogeneous Dirichlet boundary condition at the origin, while the Fourier cosine transform obeys the homogeneous Neumann boundary condition at the origin. Subsequently, we performed successive derivations in the unilateral Fourier transforms to observe when there are interferences between the sine and cosine Fourier transforms. A study of the behavior of the derivatives of unilateral Fourier transforms at the origin was also carried out. These differential properties showed us a restricted amount of differential equations whose resolutions will be efficient through unilateral Fourier transforms. Possibly, this restricted number of solvable equations is precisely due to the interference between the sine and cosine transforms, which occurs depending on the order of the derivative of the transforms. After studying the unilateral Fourier transforms and their properties, we approach the particle in a box centered at the origin through the unilateral Fourier transform. For a symmetrical potential in relation to the origin, the eigenfunctions have definite parities: even eigenfunctions satisfy the Neumann homogeneous boundary condition at the origin when it is then convenient to use the Fourier cosine transform, while odd eigenfunctions obey the Dirichlet homogeneous boundary condition at the origin, in this case it is appropriate to use the Fourier sine transform. These conditions, along with the Dirichlet boundary conditions at the ends of the box, resulted in finite unilateral Fourier transforms, which establish a close relationship with the Fourier series. This observation led us directly to the resolution of the problem. After this, we apply the unilateral Fourier transform on the one-dimensional quantum harmonic oscillator equation. First, an additional functional transformation was necessary, because the unilateral Fourier transform applied to the Schrödinger equation did not result in a simpler equation. The problem in question has a potential even defined in the interval  $(-\infty, \infty)$ , this allowed us to focus our attention on the positive semi-axis by applying the unilateral Fourier transform on this semi-axis. Thus, after obtaining the desired result, we performed the inversion of the transform and carried out its appropriate extension: symmetric for even eigenfunctions or antisymmetric for odd eigenfunctions. Furthermore, there was a need to use differential properties of inverse unilateral Fourier transforms. The problem was solved from the eigenfunction related to the lowest energy level.

**KEYWORDS:** Unilateral Fourier transform; Fourier cosine transform; Fourier sine transform; Finite unilateral Fourier transform; Particle in a box; Infinite square-well potential; One-dimensional quantum harmonic oscillator.

## SUMÁRIO

|          |                                                                                                            |           |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>INTRODUÇÃO</b>                                                                                          | <b>11</b> |
| <b>2</b> | <b>A TRANSFORMADA DE FOURIER UNILATERAL</b>                                                                | <b>13</b> |
| 2.1      | A transformada de Fourier unilateral e suas propriedades                                                   | 13        |
| 2.2      | Transformada de Fourier unilateral finita                                                                  | 17        |
| <b>3</b> | <b>A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER</b>                                                                            | <b>18</b> |
| 3.1      | A equação de Schrödinger independente do tempo                                                             | 20        |
| 3.2      | Estados ligados                                                                                            | 23        |
| 3.3      | Potenciais pares                                                                                           | 24        |
| <b>4</b> | <b>OS ESTADOS QUÂNTICOS DO POÇO QUADRADO INFINITO POR INTERMÉDIO DA TRANSFORMADA DE FOURIER UNILATERAL</b> | <b>26</b> |
| 4.1      | Introdução                                                                                                 | 26        |
| 4.2      | Poço quadrado infinito                                                                                     | 26        |
| 4.3      | A transformada de Fourier unilateral finita                                                                | 28        |
| 4.4      | A solução geral do problema                                                                                | 31        |
| <b>5</b> | <b>O OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO UNIDIMENSIONAL POR INTERMÉDIO DA TRANSFORMADA DE FOURIER UNILATERAL</b>  | <b>33</b> |
| 5.1      | Introdução                                                                                                 | 33        |
| 5.2      | O oscilador harmônico quântico unidimensional                                                              | 33        |
| 5.3      | A transformada de Fourier unilateral                                                                       | 36        |
| 5.4      | Transformada de Fourier unilateral inversa                                                                 | 38        |
| 5.5      | A solução geral do problema                                                                                | 40        |
| <b>6</b> | <b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>                                                                                | <b>42</b> |
|          | <b>REFERÊNCIAS</b>                                                                                         | <b>43</b> |

## 1 INTRODUÇÃO

Com o passar dos séculos, o avanço tecnológico permitiu a realização de experimentos cada vez mais sofisticados, até que no início do século XX, os cientistas obtiveram alguns resultados experimentais evidenciando fenômenos inexplicáveis pelos conhecimentos da época. Sendo assim, grandes nomes da física em geral iniciaram uma longa investigação para obter uma explicação plausível para tais fenômenos. Com um árduo e instigante trabalho, os físicos elaboraram diversas hipóteses sobre a natureza da luz e da matéria e suas interações. Dessas hipóteses surgiu a mecânica quântica apresentando uma formulação teórica satisfatória na descrição das interações em escalas atômicas e subatômicas.

A equação de Schrödinger suplementada pela teoria probabilística governa a mecânica quântica não relativística. Neste âmbito temos uma gama de sistemas quânticos descritos por potenciais independentes do tempo, e nestas circunstâncias trabalhamos com a equação de Schrödinger independente do tempo (um problema de autovalor). Isto posto, para resolvê-lo completamente precisamos obter o par característico autovalor-autofunção. Os autovalores são as energias possíveis do sistema e a combinação linear de todos as autofunções juntamente com a parte temporal nos fornece a equação de onda que caracteriza o sistema físico estudado.

Neste trabalho, resolveremos a equação de Schrödinger independente do tempo de forma não usual, mais especificamente, resolveremos por intermédio da transformada de Fourier unilateral. Abordaremos dois diferentes potenciais, o poço quadrado infinito e o oscilador harmônico quântico, sistemas ubíquos em livros-textos (DAVYDOV, 1965; SCHIFF, 1968; MERZBACHER, 1970; EISBERG; RESNICK, 1974; SHANKAR, 1980; GASIOROWICZ, 2003; GRIFFITHS, 2005). Ao tratarmos esses dois sistemas, o poço quadrado infinito definido no intervalo  $[-L/2, L/2]$  e o oscilador harmônico quântico definido no intervalo  $(-\infty, \infty)$ , com transformadas de Fourier unilaterais definidas no intervalo  $[0, \infty)$ , vemos que é possível realizar a transformação da equação de Schrödinger independente do tempo nos concentrando somente no semieixo positivo. A ideia subjacente ao método utilizado é que nesse espaço transformado, o problema fique mais acessível para a resolução. Assim, obtendo o resultado no espaço transformado deve-se realizar sua inversão para chegar na função original.

No capítulo 2, descreveremos a transformada de Fourier unilateral e suas propriedades, incluindo sua condição de existência e suas propriedades de diferenciação. Duas importantes condições para se fazer a escolha adequada entre a transformada seno e cosseno de Fourier não podem passar despercebidas, as condições de contorno homogêneas na origem: condição de contorno homogênea de Neumann, e condição de contorno homogênea de Dirichlet, veja por exemplo (CASTRO, 2020). Posteriormente no capítulo 3, abordaremos sucintamente a teoria quântica vigente que servirá de sustentação para os capítulos posteriores. O capítulo 4 retrata um trabalho derivado de um artigo publicado na Revista Brasileira de Ensino de Física (VIEIRA; CASTRO, 2020). Neste artigo, o poço quadrado infinito de  $[0, L]$  foi resolvido por intermédio da transformada de Fourier unilateral após de Castro (CASTRO, 2020) expor os erros em se abordar tal sistema por intermédio da transformada de Laplace (GUPTA; VERMA, 2019). No capítulo 5, abordaremos o problema do oscilador harmônico

quântico unidimensional via transformada de Fourier unilateral. O problema em questão já foi resolvido por esse tipo de método de transformação (NOGUEIRA; CASTRO, 2015). A maneira como os autores trataram o problema necessitou de uma tabela de integrais para se resolver as transformadas de Fourier unilaterais inversas, deste modo, as autofunções foram escritas em termos de soluções da equação hipergeométrica confluyente. De modo diferente, resolveremos a transformada de Fourier unilateral inversa relacionada com a autofunção do estado fundamental, e então adquiriremos a solução geral do problema. Uma parte deste capítulo será submetido à publicação. Finalmente, no capítulo 6 temos as considerações finais do trabalho.

## 2 A TRANSFORMADA DE FOURIER UNILATERAL

A ideia implícita ao método de transformadas integrais para resolver uma equação diferencial é a conversão em uma equação transformada que possa ser resolvida com maior simplicidade. Em seguida deve-se executar a inversão da transformada para obter a função original. Este processo pode ser penoso, senão impraticável, se a integral atrelada à transformação inversa não estiver contida em uma tabela de integrais (CHURCHILL, 1958; ARFKEN, 1985; BUTKOV, 1988; RILEY; HOBSON; BENCE, 2006; POULARIKAS, 2010; DEBNATH; BHATTA, 2010). É muito importante salientar que a utilização do método depende basicamente do intervalo permitido para a variável envolvida na integração e também das condições de contorno impostas sobre a função nos extremos do intervalo. A transformada de Fourier unilateral é uma ferramenta útil para realizar transformações em funções absolutamente integráveis em um intervalo semi-infinito, dependendo das condições de contorno homogêneas na origem, condição de Dirichlet ou Neumann.

### 2.1 A TRANSFORMADA DE FOURIER UNILATERAL E SUAS PROPRIEDADES

A transformada de Fourier exponencial e sua transformada inversa são, na devida ordem, definidas por — veja, e.g. (BUTKOV, 1988)

$$\mathcal{F}\{f(x)\} = F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) e^{ikx}, \quad (2.1)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\{F(k)\} = f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk F(k) e^{-ikx}. \quad (2.2)$$

Substituindo a expressão (2.1) na (2.2), obtemos o teorema da integral de Fourier:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-ikx} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi f(\xi) e^{ik\xi}. \quad (2.3)$$

Usufruindo da fórmula de Euler  $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ , chegamos na seguinte integral:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk (\cos kx - i \sin kx) \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi f(\xi) (\cos k\xi + i \sin k\xi). \quad (2.4)$$

Supondo que  $f(\xi)$  tenha paridade definida,  $f(-\xi) = -f(\xi)$  (ímpar) ou  $f(-\xi) = f(\xi)$  (par), obtemos as seguintes integrais

$$f(-\xi) = \begin{cases} -f(\xi) & \Rightarrow f(x) = \sqrt{2/\pi} \int_0^\infty dk \left[ \sqrt{2/\pi} \int_0^\infty d\xi f(\xi) \operatorname{sen} k\xi \right] \operatorname{sen} kx, \\ f(\xi) & \Rightarrow f(x) = \sqrt{2/\pi} \int_0^\infty dk \left[ \sqrt{2/\pi} \int_0^\infty d\xi f(\xi) \cos k\xi \right] \cos kx. \end{cases} \quad (2.5)$$

A partir disso, as transformadas seno e cosseno de Fourier, denotadas por  $\mathcal{F}_s \{f(x)\} = F_s(k)$  e  $\mathcal{F}_c \{f(x)\} = F_c(k)$  respectivamente, são definidas para  $k = |k|$  pelas subseqüentes integrais:

$$\mathcal{F}_s \{f(x)\} = F_s(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx f_s(x) \operatorname{sen} kx, \quad (2.6)$$

$$\mathcal{F}_c \{f(x)\} = F_c(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx f_c(x) \cos kx, \quad (2.7)$$

onde  $f_s(x)$  e  $f_c(x)$  são as funções ímpar e par, respectivamente, restritas ao intervalo  $[0, \infty)$ . As funções originais  $f_s(x)$  e  $f_c(x)$ , com base em certas condições, podem ser recuperadas, na devida ordem, pelas transformadas seno e cosseno inversas, denotadas por  $\mathcal{F}_s^{-1} \{F_s(k)\}$  e  $\mathcal{F}_c^{-1} \{F_c(k)\}$  e expressas por

$$\mathcal{F}_s^{-1} \{F_s(k)\} = f_s(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk F_s(k) \operatorname{sen} kx, \quad (2.8)$$

$$\mathcal{F}_c^{-1} \{F_c(k)\} = f_c(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk F_c(k) \cos kx. \quad (2.9)$$

Uma condição suficiente para a existência da transformada de Fourier unilateral e sua inversa é que a função contida no integrando seja absolutamente integrável no intervalo  $[0, \infty)$ . Além disso, a escolha da transformação seno ou cosseno é decidida pelas condições de contorno homogêneas na origem: condição de Dirichlet ( $f(x)|_{x=0} = 0$ ) ou condição de Neumann ( $df(x)/dx|_{x=0} = 0$ ), respectivamente. Além do mais, o par das transformadas de Fourier unilaterais satisfaz o teorema de Parseval:

$$\int_0^\infty dx |f_s(x)|^2 = \int_0^\infty dk |F_s(k)|^2, \quad (2.10)$$

$$\int_0^\infty dx |f_c(x)|^2 = \int_0^\infty dk |F_c(k)|^2. \quad (2.11)$$

Podemos realizar sucessivas derivações em relação à variável  $k$ , nas integrais (2.6) e (2.7). Desse modo, ficamos com as seguintes expressões

$$\frac{d^{2n} F_c(k)}{dk^{2n}} = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx x^{2n} f_c(x) \cos kx, \quad (2.12)$$

$$\frac{d^{2n+1} F_c(k)}{dk^{2n+1}} = (-1)^{n+1} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx x^{2n+1} f_c(x) \sin kx, \quad (2.13)$$

$$\frac{d^{2n} F_s(k)}{dk^{2n}} = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx x^{2n} f_s(x) \sin kx, \quad (2.14)$$

$$\frac{d^{2n+1} F_s(k)}{dk^{2n+1}} = (-1)^{n+1} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx x^{2n+1} f_s(x) \cos kx, \quad (2.15)$$

onde  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Do mesmo modo, realizando sucessivas derivações em relação à variável  $x$  nas relações (2.8) e (2.9), temos

$$\frac{d^{2n} f_c(x)}{dx^{2n}} = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk k^{2n} F_c(k) \cos kx, \quad (2.16)$$

$$\frac{d^{2n+1} f_c(x)}{dx^{2n+1}} = (-1)^{n+1} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk k^{2n+1} F_c(k) \sin kx, \quad (2.17)$$

$$\frac{d^{2n} f_s(x)}{dx^{2n}} = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk k^{2n} F_s(k) \sin kx, \quad (2.18)$$

$$\frac{d^{2n+1} f_s(x)}{dx^{2n+1}} = (-1)^{n+1} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk k^{2n+1} F_s(k) \cos kx. \quad (2.19)$$

Outras importantes relações surgem quando fazemos  $k \rightarrow 0$  nas integrais (2.12), (2.13), (2.14) e (2.15), ficando com as derivadas das funções transformadas na origem:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n} F_c(k)}{dk^{2n}} = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx x^{2n} f_c(x), \quad (2.20)$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1} F_s(k)}{dk^{2n+1}} = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx x^{2n+1} f_s(x), \quad (2.21)$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1} F_c(k)}{dk^{2n+1}} = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n} F_s(k)}{dk^{2n}} = 0. \quad (2.22)$$

De modo semelhante, fazendo  $x \rightarrow 0$  nas relações (2.16), (2.17), (2.18) e (2.19), encontramos

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{d^{2n} f_c(x)}{dx^{2n}} = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx k^{2n} F_c(k), \quad (2.23)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1} f_s(x)}{dx^{2n+1}} = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx k^{2n+1} F_s(k), \quad (2.24)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{d^{2n} f_s(x)}{dx^{2n}} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1} f_c(x)}{dx^{2n+1}} = 0. \quad (2.25)$$

Para obter êxito em aplicações nas equações diferenciais, é importante saber como expressar as transformadas das derivadas de  $f(x)$  em termos de  $F(k)$  e suas derivadas. As transformadas de Fourier unilaterais possuem as seguintes propriedades:

$$\mathbb{F} \left\{ x \frac{df(x)}{dx} \right\} = -F(k) - k \frac{dF(k)}{dk}, \quad (2.26)$$

$$\mathbb{F} \left\{ \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \right\} = -k^2 F(k), \quad (2.27)$$

sendo que o operador  $\mathbb{F}$  remete tanto à transformada cosseno de Fourier quanto à transformada seno de Fourier, satisfazendo as condições de fronteira já estabelecidas que garantem a existência da transformada unilateral e sua inversa.

## 2.2 TRANSFORMADA DE FOURIER UNILATERAL FINITA

As transformadas de Fourier unilaterais podem também ser aplicadas ao longo de um intervalo finito, caracterizando uma transformada de Fourier unilateral finita. Isto posto, para  $n \in \mathbb{N}$ , temos as seguintes integrais — veja, e.g. (CHURCHILL, 1958):

$$F_s(n) = \frac{2}{L} \int_0^L dx f_s(x) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}, \quad (2.28)$$

$$F_c(n) = \frac{2}{L} \int_0^L dx f_c(x) \cos \frac{n\pi x}{L}. \quad (2.29)$$

Analogamente à transformada de Fourier unilateral, uma condição suficiente para a existência da transformada de Fourier unilateral finita é a função ser absolutamente integrável no intervalo  $[0, L]$ , ou seja,  $\int_0^L dx |f(x)| < \infty$ . Então, como um caso particular da representação generalizada da série de Fourier — veja, e.g. (BUTKOV, 1988), as séries de Fourier em senos e cossenos definidas no intervalo  $[0, L]$  convergem para as funções  $f_s(x)$  e  $f_c(x)$ , respectivamente:

$$f_s(x) = \sum_{n=1}^{\infty} F_s(n) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}, \quad (2.30)$$

$$f_c(x) = \frac{F_c(0)}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} F_c(n) \cos \frac{n\pi x}{L}. \quad (2.31)$$

As equações (2.28) e (2.30), (2.29) e (2.31), caracterizam pares de transformadas de Fourier unilaterais finitas e suas respectivas inversas. Especialmente, a (2.30) satisfaz à seguinte condição de contorno de Dirichlet:  $f_s(x)|_{x=L} = 0$ . Enquanto a (2.31) satisfaz à condição de contorno de Neumann  $df_c(x)/dx|_{x=L} = 0$ .

### 3 A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Para estudar sistemas físicos devemos avaliar até onde as leis que regem esses sistemas são válidas, formulando à medida do necessário, novas leis. Por exemplo, temos na mecânica clássica as equações de movimento derivadas da segunda lei de Newton, as quais não são satisfeitas para objetos com velocidades comparáveis à velocidade da luz, então nesse limite de grandes velocidades são válidos os postulados e as equações da mecânica relativística. Já em sistemas físicos que abrangem partículas elementares não relativísticas, os estados quânticos desses sistemas são determinados pela resolução da equação de Schrödinger. Esta equação é uma equação diferencial parcial, linear, de segunda ordem nas coordenadas espaciais e primeira ordem no tempo. A solução da equação Schrödinger é uma função de onda, que fornece todas as informações físicas do sistema o qual é intrinsecamente caracterizado pelo seu potencial e pela massa da partícula.

A equação de Schrödinger unidimensional não relativística é descrita por — veja, e.g. (EISBERG; RESNICK, 1974; GASIOROWICZ, 2003; GRIFFITHS, 2005)

$$\mathcal{H}\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}, \quad (3.1)$$

onde  $i$  é a unidade imaginária,  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$  e  $\mathcal{H}$  é o operador hamiltoniano, dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t), \quad (3.2)$$

com  $m$  sendo a massa da partícula, e  $V(x, t)$  o potencial ao qual a partícula está submetida.

Veremos agora uma importante relação que aparece em diversas áreas da física: a equação de continuidade. Para determinarmos isso, vamos começar multiplicando a equação (3.1) pelo complexo conjugado da função de onda  $\Psi^*(x, t)$ , subtrairmos do complexo conjugado de (3.1) multiplicado por  $\Psi(x, t)$ , e assumindo que o potencial  $V(x, t)$  seja real, chegamos na seguinte equação:

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2im} \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Psi^* - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right). \quad (3.3)$$

Manipulando o lado direito da (3.3), obtemos

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\hbar}{2im} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right]. \quad (3.4)$$

A partir disso, podemos definir a corrente de probabilidade  $j$  como

$$j(x, t) \equiv \frac{\hbar}{2im} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right). \quad (3.5)$$

A priori, a incumbência da corrente de probabilidade é prever se existe um fluxo de probabilidade no sentido positivo de  $x$  ou no sentido negativo de  $x$ . Tal probabilidade advém da interpretação estatística da teoria quântica vigente, que permite obter da função de onda informações referentes à probabilidade de encontrar a partícula numa determinada região do espaço em um certo instante específico. Haja vista, definimos densidade de probabilidade como:

$$\rho(x, t) \equiv |\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t). \quad (3.6)$$

Desta forma, o produto  $\rho(x, t)dx$  é a probabilidade de encontrar uma partícula dentro do elemento linear infinitesimal  $dx$  em torno de  $x$  num dado tempo  $t$ . Enfim, substituindo a derivada em relação ao tempo da (3.6) na (3.4), chegamos na equação de continuidade:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0. \quad (3.7)$$

Pela equação (3.7) concluímos que a probabilidade de encontrarmos a partícula em um determinado sistema quântico é localmente conservada.

Voltando para a relação (3.6) e efetuando sua integral em todo espaço, ficamos com a subsequente relação:

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi(x, t)|^2, \quad (3.8)$$

a qual estabelece a probabilidade de encontrar a partícula associada à função de onda  $\Psi(x, t)$  em todo espaço. Derivando a (3.8) em relação ao tempo e utilizando (3.1) e seu complexo conjugado, temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x, t) (\mathcal{H} \Psi(x, t)) - \int_{-\infty}^{+\infty} dx (\mathcal{H} \Psi^*(x, t)) \Psi(x, t). \quad (3.9)$$

A teoria quântica vigente e sua subsequente interpretação probabilística demanda que a integral em todo espaço da densidade de probabilidade deve ser uma quantidade finita e constante:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = \text{constante}, \quad (3.10)$$

isso é possível somente se

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x, t) (\mathcal{H} \Psi(x, t)) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx (\mathcal{H} \Psi^*(x, t)) \Psi(x, t). \quad (3.11)$$

A relação (3.11) mostra que o operador hamiltoniano  $\mathcal{H}$  é hermitiano. Portanto, podemos concluir que a conservação da probabilidade em todo espaço é determinante para a hermiticidade de  $\mathcal{H}$ . De forma geral, o operador hermitiano é definido por — veja, e.g. (BUTKOV, 1988)

$$\int_a^b f^*(Qg) dx = \int_a^b (Qf)^* g dx, \quad (3.12)$$

onde  $f$  e  $g$  são funções quaisquer, que satisfazem condições de contorno adequadas. É instrutivo mencionar algumas características dos operadores hermitianos que estarão presentes nos próximos passos deste trabalho: o operador hermitiano possui autovalores reais, autofunções pertencentes a autovalores distintos são ortogonais, por último, autofunções de um operador hermitiano servem de base para a solução geral da equação de Schrödinger.

### 3.1 A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO

Agora iremos estudar os estados estacionários da equação de Schrödinger, como esses estados são estabelecidos e quais suas consequências. Primeiramente, iremos supor que o sistema quântico seja caracterizado por um potencial que depende somente da posição, ou seja,  $V = V(x)$ . Deste modo, podemos utilizar o seguinte *Ansatz* de separação de variáveis:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t). \quad (3.13)$$

Substituindo (3.13) na (3.1), chegamos na equação separada:

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x). \quad (3.14)$$

Podemos representar o lado esquerdo da equação acima por  $g(t)$ , do lado direito temos uma função  $f(x)$ . Assim,  $g(t) = f(x)$  somente será verdade para qualquer valor de  $t$  e  $x$  se  $g(t) = f(x) = c$ , sendo  $c$  uma constante de separação. Fazendo uma escolha sugestiva de modo que  $c = E$  com  $E \in \mathbb{R}$ , temos do lado esquerdo da (3.14) a equação temporal:

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = E. \quad (3.15)$$

Nitidamente, a equação acima independe da forma do potencial. Ademais, a (3.15) se trata de uma equação diferencial de primeira ordem, portanto é facilmente resolvida por integração direta, e apresenta o seguinte resultado

$$\phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (3.16)$$

Por conveniência, omitiremos a constante de integração que será englobada pela resolução da equação dependente apenas das coordenadas. Dessa forma, substituindo a (3.16) na (3.13) temos uma solução particular para a equação de Schrödinger:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (3.17)$$

Esta solução é chamada de estado estacionário (independente do tempo). Esta denominação não é intuitiva e pode gerar confusão, pois na (3.17) temos a variável temporal contida na exponencial complexa. Contudo, como salientado anteriormente, a função de onda somente tem significado no contexto da interpretação estatística sendo de maior interesse a grandeza densidade de probabilidade. Assim, substituindo (3.17) em (3.6), temos

$$\rho(x, t) \equiv |\Psi(x, t)|^2 = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi^*(x) e^{+\frac{i}{\hbar}Et} = |\psi(x)|^2, \quad (3.18)$$

O resultado acima mostra que a densidade de probabilidade independe tempo, o que caracteriza os estados estacionários. Mais ainda, a relação (3.18) também apresenta uma importante conclusão. Olhando para a equação de continuidade (3.7), vemos que a densidade de probabilidade é derivada com relação ao tempo, assim ficamos com

$$\frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0 \implies j = \text{uniforme}, \quad (3.19)$$

ou seja, a corrente de probabilidade é uniforme e estacionária.

Voltando para a equação (3.14), restringindo nossa atenção para seu lado direito, podemos escrever

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E}{dx^2} + V(x) \psi_E(x) = E \psi_E(x). \quad (3.20)$$

A (3.20) é uma equação de autovalor com o par característico  $(E, \psi_E)$ , nomeada equação de Schrödinger independente do tempo. A solução desejada para este problema de autovalor depende unicamente do tipo de potencial  $V(x)$ , então, para diferentes potenciais temos diferentes soluções. Isto posto, a solução da equação de Schrödinger independente do tempo pode envolver infinitos pares característicos, portanto a solução geral da equação de Schrödinger abrange a combinação linear de todos os autoestados. Essa possibilidade de expansão em séries em termos de autofunções é uma característica de um operador hermitiano. Por fim, no caso de autovalores contínuos teremos uma integral, se os autovalores forem discretos obtemos

$$\Psi(x, t) = \sum_{\lambda} c_{\lambda} \psi_{E_{\lambda}}(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\lambda} t}, \quad (3.21)$$

onde  $c_{\lambda}$  são coeficientes a serem determinados a partir da função de onda inicial  $\Psi(x, 0)$ .

Agora, vamos ver como se trata a continuidade da autofunção, começando com a análise da vizinhança em  $x = a$  e posteriormente integrando, chegamos a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{a-\xi}^{a+\xi} dx \frac{d^2 \psi}{dx^2} = \int_{a-\xi}^{a+\xi} dx [E - V(x)] \psi(x), \quad (3.22)$$

onde  $\xi > 0$ . Executando a integral dos dois lados da (3.22) e aplicando o teorema do valor médio no lado direito da equação em questão, temos

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=a+\xi} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=a-\xi} \leq \frac{4m\xi}{\hbar^2} \cdot \text{MAX} |[E - V(x)]\psi(x)|, \quad (3.23)$$

sendo  $MAX$  o valor máximo do integrando do lado direito de (3.22) no intervalo  $2\xi$ . Fazendo  $\xi \rightarrow 0$  e se  $V(x)$  for finito no intervalo sob consideração, concluímos que

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} \left( \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=a+\xi} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=a-\xi} \right) = 0, \quad (3.24)$$

ou seja,  $d\psi(x)/dx$  é contínua na região de consideração. Além disso, sabemos que a descontinuidade de uma função num ponto arbitrário leva à inexistência de sua derivada nesse ponto, portanto, analisando o processo inverso temos que, se  $d\psi(x)/dx$  for contínua,  $\psi(x)$  também será.

### 3.2 ESTADOS LIGADOS

Os estados ligados surgem em situações em que a partícula se encontra em um potencial confinante, isto é, a partícula não tem energia suficiente para escapar da região onde o potencial está atuando. Assim sendo, temos uma importante exigência, que as autofunções se anulem no infinito:

$$\psi_E(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0. \quad (3.25)$$

Ante o exposto, foi visto que para os estados estacionários, a corrente deve ser uniforme (3.19). Então, analisando a (3.5) podemos concluir devido à (3.25) que para os estados ligados temos

$$j = 0, \quad \forall x, \quad (3.26)$$

ou seja, em todo espaço o valor da corrente se mantém nulo. Além disso, a (3.25) estabelece uma área bem definida abaixo de uma curva que representa a função densidade de probabilidade  $\rho(x)$ . Portanto, para os estados ligados, a condição de contorno de (3.20) é dado por

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_E(x)|^2 < \infty. \quad (3.27)$$

Mais ainda, além da autofunção ser quadrado integrável, temos mais uma importante restrição, que (3.27) em todo espaço não apenas deve ser finita como deve ser igual a 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_E(x)|^2 dx = 1. \quad (3.28)$$

Esta é a chamada condição de normalização da autofunção.

### 3.3 POTENCIAIS PARES

Para potenciais pares, temos  $V(x) = V(-x)$ . Estes potenciais são facilitadores para obter o par característico autovalor-autofunção da equação Schrödinger independente do tempo (3.20), pois neste caso a equação em questão é invariante sob reflexão através da origem ( $x \rightarrow -x$ ): .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(-x)}{dx^2} + V(x) \psi_E(-x) = E \psi_E(-x). \quad (3.29)$$

Portanto, tanto  $\psi_E(x)$  quanto  $\psi_E(-x)$  satisfazem à mesma equação para um dado  $E$ . Tendo em vista que a equação (3.29) é linear, temos que combinações lineares de duas soluções também é solução:

$$\psi_E^{(\pm)}(x) = \psi_E(x) \pm \psi_E(-x). \quad (3.30)$$

Fazendo a troca de  $x \rightarrow -x$  na solução acima, temos

$$\psi_E^+(-x) = +\psi_E^+(x), \quad (3.31)$$

$$\psi_E^-(-x) = -\psi_E^-(x). \quad (3.32)$$

Estas duas autofunções linearmente independentes compartilham o mesmo autovalor, havendo em princípio uma dupla degenerescência, ou seja, dois estados com diferentes paridades possuem a mesma energia. Entretanto, devido à continuidade da autofunção e sua derivada em  $x = 0$ , a dupla degenerescência é eliminada colocando condições de contorno sobre  $\psi_E(x)$  na origem as quais podem ser dadas de duas formas distintas: autofunções pares obedecem à condição de Neumann homogênea ( $d\psi_E(x)/dx|_{x=0} = 0$ ), enquanto autofunções ímpares obedecem à condição de Dirichlet ( $\psi_E(x)|_{x=0} = 0$ ). Além do mais, como as autofunções possuem paridade definida, podemos restringir nossa atenção

apenas ao semieixo positivo de  $x$  e, após obtermos a solução neste semieixo, encontrarmos a extensão correta para a solução, simétrica ou antissimétrica.

## 4 OS ESTADOS QUÂNTICOS DO POÇO QUADRADO INFINITO POR INTERMÉDIO DA TRANSFORMADA DE FOURIER UNILATERAL

### 4.1 INTRODUÇÃO

Na teoria quântica, uma partícula confinada por paredes impenetráveis é geralmente chamada de partícula na caixa. Para casos unidimensionais e não relativísticos, esse tipo de sistema é modelado por um poço quadrado infinito. Este é um dos problemas mais simples na mecânica quântica exibindo muitas características da física quântica, e por este motivo aparece em muitos livros introdutórios sobre mecânica quântica (SCHIFF, 1968; EISBERG; RESNICK, 1974; COHEN; BERNARD; LALOË, 1977; SHANKAR, 1980; GASIOROWICZ, 2003; GRIFFITHS, 2005). Embora não seja um sistema realista, serve como uma idealização de sistemas complexos que ocorrem na natureza, e em algumas circunstâncias, reflete as propriedades de certos sistemas reais. Usualmente, as soluções são encontradas por uma resolução direta e curta da equação de Schrödinger independente do tempo, impondo a continuidade das autofunções nas paredes de confinamento. Em contraste, em um artigo recentemente difundido na literatura (GUPTA; VERMA, 2019), este problema foi alegado ter sido resolvido por intermédio da transformada de Laplace, porém, enfaticamente refutado devido à sua inversão errônea (CASTRO, 2020). Assim, despertando interesse em aplicar ao longo de um intervalo finito outros tipos de transformações integrais definidas geralmente sobre um intervalo infinito ou semi-infinito de integração. Isto posto, o poço quadrado infinito definido no intervalo  $[0, L]$ , foi resolvido por intermédio da transformada de Fourier unilateral finita (VIEIRA; CASTRO, 2020). A maneira como foi abordado o problema resultou em uma transformada seno de Fourier finita, que possui estreita relação com a série de Fourier. Neste trabalho, iremos complementar o referido artigo resolvendo o poço quadrado infinito definido em um intervalo simétrico em relação à origem, impondo as condições de contorno apropriadas sobre a autofunção e sua derivada na origem.

### 4.2 POÇO QUADRADO INFINITO

O potencial do poço quadrado infinito é

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq L/2 \\ \infty, & |x| > L/2, \end{cases} \quad (4.1)$$

representando o confinamento de uma partícula dentro da região  $|x| \leq L/2$ . Deste modo, a equação de autovalor valor (3.20), pode ser escrita como

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + E \right) \psi_E(x) = 0, \quad |x| \leq L/2, \quad (4.2)$$

además,

$$\psi_E(x) = 0, \quad |x| > L/2. \quad (4.3)$$

A continuidade das autofunções demanda que  $\psi_E(x)|_{|x|=L/2} = 0$ . Portanto, podemos compactar a autofunção escrevendo

$$\psi_E(x) = \theta(L/2 + x)\theta(L/2 - x)f_E(x), \quad (4.4)$$

onde  $\theta(x)$  é a função degrau, descrita por

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (4.5)$$

Dessarte,  $f_E(x)$  obedece às mesmas condições de fronteira que  $\psi_E(x)$ , ou seja,  $f_E(x)|_{|x|=L/2} = 0$  e satisfaz à equação diferencial (4.2), assim

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + E \right) f_E(x) = 0, \quad |x| \leq L/2. \quad (4.6)$$

Consequentemente pela (3.28), temos

$$\int_{-L/2}^{+L/2} dx |f_E(x)|^2 = 1. \quad (4.7)$$

### 4.3 A TRANSFORMADA DE FOURIER UNILATERAL FINITA

De início, é instrutivo mencionar que devido ao potencial  $V(x)$  estar centrado na origem, as autofunções possuem paridades definidas, ou seja,  $\psi_E(-x) = \pm\psi_E(x)$ , e em razão disso  $f_E(-x) = \pm f_E(x)$ . Isto posto, as condições de Dirichlet e Neumann na origem, juntamente com a anulação de  $f_E(x)$  em  $x = L/2$ , nos permitem escrever as transformadas de Fourier unilaterais:

$$F_s^{(E)}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{L/2} dx f_s^{(E)}(x) \sen kx, \quad (4.8)$$

$$F_c^{(E)}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{L/2} dx f_c^{(E)}(x) \cos kx. \quad (4.9)$$

Por outro lado, vamos supor que  $f_s^{(E)}(x)$  e  $f_c^{(E)}(x)$  podem ser expressas em termos das transformadas de Fourier unilaterais inversas, logo

$$f_s^{(E)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk F_s^{(E)}(k) \sen kx, \quad (4.10)$$

$$f_c^{(E)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk F_c^{(E)}(k) \cos kx. \quad (4.11)$$

Impondo as condições de fronteira de Dirichlet em  $x = L/2$  a  $f_s^{(E)}(x)$  e  $f_c^{(E)}(x)$ , podemos concluir que os valores originalmente contínuos de  $k$  se restringem agora a valores discretos. Em vista disto, para a transformada seno de Fourier e sua inversa, temos

$$k = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (4.12)$$

Outrossim, para a transformada cosseno de Fourier e sua inversa,

$$k = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (4.13)$$

Em consequência, tanto  $F_s^{(E)}(k)$  quanto  $F_c^{(E)}(k)$  podem ser expressos por um conjunto infinito de números  $F_n^{(E)}$ . Portanto, a integral sobre os valores contínuos de  $k$  passa a ser um somatório sobre os valores discretos de  $n$ :

$$f_s^{(E)}(x) = \sum_{n=2,4,6,\dots}^{\infty} F_n^{(E)} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}, \quad (4.14)$$

$$f_c^{(E)}(x) = \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} F_n^{(E)} \cos \frac{n\pi x}{L}. \quad (4.15)$$

Note que as expressões (4.14) e (4.15) são familiares, se tratam de séries seno e cosseno de Fourier. Além do mais, repare que agora as equações (4.8) e (4.9) configuram uma correspondência entre  $f^{(E)}(x)$  no intervalo  $[0, L/2]$  e uma sequência de números  $F_n^{(E)}$ . A partir disto, podemos nos preparar para achar todos os autoestados. Levando as séries seno e cosseno de Fourier, (4.14) e (4.15), respectivamente, para a equação diferencial (4.6), temos

$$\sum_{n=2,4,6,\dots}^{\infty} \left( \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} - E \right) F_n^{(E)} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L} = 0, \quad (4.16)$$

e

$$\sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \left( \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} - E \right) F_n^{(E)} \cos \frac{n\pi x}{L} = 0. \quad (4.17)$$

Multiplicando as equações (4.16) e (4.17) respectivamente por

$$\operatorname{sen} \frac{\tilde{n}\pi x}{L} = 0, \quad \tilde{n} = 2, 4, 6, \dots, \quad (4.18)$$

e

$$\cos \frac{\tilde{n}\pi x}{L} = 0, \quad \tilde{n} = 1, 3, 5, \dots, \quad (4.19)$$

integrando de 0 a  $L/2$ , achamos

$$\sum_{n=2,4,6,\dots}^{\infty} \left( \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} - E \right) F_n^{(E)} \int_0^{L/2} dx \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L} \operatorname{sen} \frac{\tilde{n}\pi x}{L} = 0, \quad (4.20)$$

e

$$\sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \left( \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} - E \right) F_n^{(E)} \int_0^{L/2} dx \cos \frac{n\pi x}{L} \cos \frac{\tilde{n}\pi x}{L} = 0. \quad (4.21)$$

Usufruido da relação de ortogonalidade expressa por

$$\int_0^{L/2} dx \sin \frac{n\pi x}{L} \sin \frac{\tilde{n}\pi x}{L} = \frac{L}{2} \delta_{n\tilde{n}}, \quad (4.22)$$

e também

$$\int_0^{L/2} dx \cos \frac{n\pi x}{L} \cos \frac{\tilde{n}\pi x}{L} = \frac{L}{2} \delta_{n\tilde{n}}, \quad (4.23)$$

onde  $\delta_{n\tilde{n}}$  é o símbolo delta de Kronecker, descrito por

$$\delta_{n\tilde{n}} = \begin{cases} 1, & n = \tilde{n} \\ 0, & n \neq \tilde{n}, \end{cases} \quad (4.24)$$

por fim, chegamos a seguinte equação:

$$\sum_{n=2,4,6,\dots}^{\infty} \left( \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} - E \right) F_n^{(E)} \delta_{n\tilde{n}} = 0, \quad (4.25)$$

e

$$\sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \left( \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} - E \right) F_n^{(E)} \delta_{n\tilde{n}} = 0. \quad (4.26)$$

Desta maneira, o delta de Kronecker agirá sobre todos os termos da soma, e assim concluímos que somente a parcela com  $n = \tilde{n}$  permanece e as relações (4.25) e (4.26) se reduzem a

$$\left( \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} - E \right) F_n^{(E)} = 0, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.27)$$

Tomando um, e apenas um  $F_n^{(E)} \neq 0$ , temos

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.28)$$

com

$$f_n(x) = F_n^{(n)} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 2, 4, 6, \dots, \quad (4.29)$$

e

$$f_n(x) = F_n^{(n)} \cos \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (4.30)$$

#### 4.4 A SOLUÇÃO GERAL DO PROBLEMA

O método efetuado permitiu resolver o problema do poço quadrado infinito utilizando somente o semieixo positivo de  $x$ . Vimos que ao aplicar a transformada de Fourier unilateral utilizando a condição de contorno homogênea de Dirichlet na extremidade do poço ( $x = L/2$ ) possibilitou a transição da transformada de Fourier unilateral para uma série de Fourier. Tal transição nos levou diretamente ao par autovalor-autofunção do problema. Com o problema resolvido no semieixo positivo de  $x$ , devemos agora fazer a extensão apropriada, simétrica ou antissimétrica. Devido a  $x = 0$  ser um ponto regular no poço quadrado infinito, a continuidade das autofunções e suas derivadas na origem estabelecem que os autovalores pares satisfazem à condição de Neumann homogênea na origem, enquanto autofunções ímpares satisfazem à condição homogênea de Dirichlet. Evidentemente, um autovalor par não permite uma extensão antissimétrica, do mesmo jeito, um autovalor ímpar não permite uma extensão simétrica, por conseguinte, obtemos um espectro não degenerado. Por fim, as autofunções em todo o eixo  $x$  são:

$$\psi_n^{(E)}(x) = \theta(L/2 + x)\theta(L/2 - x) \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 2, 4, 6, \dots, \quad (4.31)$$

$$\psi_n^{(E)}(x) = \theta(L/2 + x)\theta(L/2 - x) \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (4.32)$$

Onde  $F_n^{(n)} = \sqrt{2/L}$ , foi determinado pela expressão (4.7). A (4.28) juntamente com as soluções (4.31) e (4.32) caracterizam o conjunto  $(E_n, \psi_n)$ , estando de acordo com os resultados encontrados pelos métodos usuais.

## 5 O OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO UNIDIMENSIONAL POR INTERMÉDIO DA TRANSFORMADA DE FOURIER UNILATERAL

### 5.1 INTRODUÇÃO

O oscilador harmônico quântico unidimensional é ubíquo na literatura que envolve a mecânica quântica. Na vizinhança de um ponto de equilíbrio estável, uma variedade de sistemas podem ser aproximados por esse potencial. Além do mais, pode ser usado no estudo de vibrações de átomos, em moléculas diatômicas, vibrações em cristais, na eletrodinâmica de sistemas quânticos e até mesmo estruturas nucleares. Sendo um dos sistemas mais simples e acessíveis que admite solução analítica precisa, o oscilador harmônico quântico já foi resolvido analiticamente por uma gama de variados métodos, dentre os quais estão as séries de potências, por intermédio dos operadores escada (DAVYDOV, 1965; SCHIFF, 1968; MERZBACHER, 1970; EISBERG; RESNICK, 1974; COHEN; BERNARD; LALOË, 1977; SHANKAR, 1980; GASIOROWICZ, 2003; GRIFFITHS, 2005), pelo método das integrais de caminho de Feynman, veja por exemplo (FEYNMAN; HIBBS, 1965) e também por transformada de Laplace (PIMENTEL; CASTRO, 2012). Em um artigo recentemente publicado, o oscilador harmônico quântico foi resolvido via transformada de Fourier unilateral (NOGUEIRA; CASTRO, 2015). O artigo em questão, aborda variados equívocos em diferentes artigos nos quais alegaram resolver o oscilador harmônico quântico por intermédio da transformada de Fourier exponencial (MUÑOZ, 1998; PONOMARENKO, 2004; ENGEL, 2006; PALMA; RAFF, 2011). De Castro e Nogueira também nos motivaram a rever o potencial do oscilador harmônico via transformada de Fourier unilateral. No entanto, diferentemente dos referidos autores que realizaram o processo de inversão das transformadas de Fourier unilaterais utilizando uma tabela de integrais resultando em uma função hipergeométrica confluyente atrelada com as autofunções, neste trabalho, realizamos o processo de inversão de modo mais simples, usufruindo das propriedades diferenciais das transformadas de Fourier unilaterais inversas, resolvendo o problema a partir da autofunção relacionada ao estado fundamental.

### 5.2 O OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO UNIDIMENSIONAL

No problema do oscilador harmônico quântico unidimensional, uma partícula está submetida a um potencial  $V(y) = m\omega^2 y^2/2$ , onde  $m$  é a massa da partícula,  $\omega$  a frequência angular e  $y \in (-\infty, \infty)$ . Deste modo, o operador hamiltoniano apresenta o seguinte formato:

$$\mathbb{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 y^2. \quad (5.1)$$

Consequentemente, de acordo com a (3.1), temos a equação de Schrödinger independente do tempo para o oscilador harmônico unidimensional:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E(y)}{dy^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 \psi_E(y) = E\psi_E(y). \quad (5.2)$$

Para simplificar, vamos introduzir a variável adimensional  $x \equiv \sqrt{m\omega/\hbar} y$ . Assim, com as devidas alterações, a equação (5.2) resume-se a

$$\frac{d^2\psi_\varepsilon(x)}{dx^2} + (2\varepsilon - x^2)\psi_\varepsilon(x) = 0, \quad (5.3)$$

onde  $\varepsilon \equiv E/(\hbar\omega)$ . A (5.3) é uma equação de autovalor com o par característico  $(\varepsilon, \psi_\varepsilon)$  sendo  $\varepsilon \in \mathbb{R}$ , com a subsequente condição de contorno:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_\varepsilon(x)|^2 < \infty, \quad (5.4)$$

ou seja, a autofunção deve ser quadrado integrável.

Veremos a seguir, como a equação (5.3) se comporta na vizinhança da origem. Neste caso temos  $x \approx 0$ , sendo assim, o termo  $2\varepsilon$  é dominante sobre  $x^2$ , nos permitindo escrever a seguinte equação:

$$\frac{d^2\psi_\varepsilon(x)}{dx^2} + 2\varepsilon\psi_\varepsilon(x) \approx 0. \quad (5.5)$$

Com o *Ansatz*  $\psi_\varepsilon = x^\delta$ , sendo  $\delta$  uma constante arbitrária, obtemos

$$\delta(\delta - 1) + 2\varepsilon x^2 \approx 0. \quad (5.6)$$

Lembrando que  $x \approx 0$ ,

$$\delta(\delta - 1) = 0. \quad (5.7)$$

A equação acima apresenta duas soluções diferentes:  $\delta = 0$  e  $\delta = 1$ . Assim, a equação (5.5) possui duas soluções linearmente independentes, uma solução par ( $x^0$ ), e uma ímpar ( $x^1$ ). Claramente,

cada uma dessas soluções satisfaz condições de contorno distintas, para  $x^0$  é satisfeita a condição de Neumann ( $d\psi_\varepsilon(x)/dx|_{x=0} = 0$ ), já para  $x^1$  é satisfeita a condição de Dirichlet ( $\psi_\varepsilon(x)|_{x=0} = 0$ ).

Continuando o trabalho com a equação (5.3), vamos agora analisar o seu comportamento assintótico. Quando  $|x| \rightarrow \infty$ , o termo  $x^2$  prevalece sobre  $2\varepsilon$ . Deste modo, ficamos com a seguinte equação assintótica:

$$\frac{d^2\psi_\varepsilon(x)}{dx^2} - x^2\psi_\varepsilon(x) \approx 0. \quad (5.8)$$

Com o *Ansatz*  $\psi_\varepsilon(x) = e^{\alpha x^2}$ , sendo  $\alpha$  uma constante arbitrária, adquirimos

$$4\alpha^2 - 1 + \frac{2\alpha}{x^2} \approx 0. \quad (5.9)$$

Como  $|x| \rightarrow \infty$ ,

$$4\alpha^2 - 1 = 0. \quad (5.10)$$

A equação acima tem duas soluções distintas:  $\alpha = \pm 1/2$ . Deste modo, podemos concluir que o comportamento assintótico de (5.8) é  $\psi_\varepsilon(|x| \rightarrow \infty) \simeq e^{\pm x^2/2}$ . Contudo, pela relação (5.4) a autofunção deve ser quadrado integrável limitando nossa escolha a  $\alpha = -1/2$ . Além disso, como a função exponencial predomina sobre qualquer potência de  $x$ , podemos assegurar que o comportamento assintótico de  $\psi_\varepsilon(x)$  é dado por

$$\psi_\varepsilon(|x| \rightarrow \infty) \simeq x^\gamma e^{-x^2/2}, \quad (5.11)$$

com  $\gamma$  arbitrário.

Enfim, podemos escolher uma fatoração adequada para  $\psi_\varepsilon$ , tal que

$$\psi_\varepsilon(x) = \phi(x)e^{x^2/2}. \quad (5.12)$$

A escolha do expoente positivo da (5.12) tem por finalidade assegurar que  $\phi(x) \rightarrow 0$  quando  $|x| \rightarrow \infty$ . Analisando (5.12) para  $|x|$  extremamente grande, concluímos que  $\phi(|x| \rightarrow \infty) \simeq x^\gamma e^{-x^2}$ . Além do mais, o comportamento de  $\phi(x)$  é o mesmo de  $\psi_\varepsilon(x)$  na vizinhança da origem. Deste modo, com a

escolha da fatoraçoão em questão,  $\phi(x)$  é absolutamente integrável no intervalo  $[0, \infty)$  garantindo a existência da transformada de Fourier unilateral.

Substituindo a fatoraçoão (5.12) na equaçoão (5.3), obtemos

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + 2x\frac{d\phi(x)}{dx} + (2\varepsilon + 1)\phi(x) = 0. \quad (5.13)$$

Note que  $x = 0$  é um ponto regular na (5.13), além disso, a equaçoão em questão possui paridade par, comportando assim  $\phi(x)$  com paridade definida. Além do mais, já estabelecemos o comportamento de  $\phi(x)$  na vizinhança da origem e também para  $|x|$  muito grande, garantindo que  $\phi(x)$  seja absolutamente integrável no intervalo  $[0, \infty)$ . Assim, podemos aplicar a transformada seno ou cosseno de Fourier na equaçoão (5.13).

### 5.3 A TRANSFORMADA DE FOURIER UNILATERAL

Restringindo nossa atenção ao semieixo positivo de  $x$  podemos realizar a transformada de Fourier unilateral na equaçoão (5.13), obtendo assim

$$\frac{dF(k)}{dk} + \left( \frac{k}{2} - \frac{\varepsilon - 1/2}{k} \right) F(k) = 0, \quad (5.14)$$

onde  $F(k)$  pode ser tanto  $F_s(k)$  quanto  $F_c(k)$ . Nitidamente a equaçoão (5.14) é de primeira ordem, por conseguinte pode ser facilmente resolvida por integração direta. O resultado da (5.14) é:

$$F(k) = A k^{\varepsilon-1/2} e^{-k^2/4}, \quad (5.15)$$

onde  $A$  é uma constante de integração e  $\varepsilon$  ainda é indeterminado.

A equaçoão (5.14) possui uma singularidade isolada em  $k = 0$ , então devemos estabelecer algumas restriçoões para os valores de  $\varepsilon$  para que (5.15) não carregue singularidade que inviabilize o processo de resolução do problema.

Como já mencionado, a condiçoão suficiente que garante a existência da transformada de Fourier unilateral inversa, é que  $F(k)$  deve ser absolutamente integrável no intervalo  $[0, \infty)$ . Em vista disso, temos imposto uma primeira restriçoão, dada por  $\varepsilon > -1/2$ . Mais ainda, substituindo (5.15) na relação de Parseval (2.11), obtemos uma restriçoão ainda mais forte que a anterior, ou seja,  $\varepsilon > 0$ . Vamos agora atrás de restriçoões ainda maiores daquela imposta pela relação de Parseval sobre os valores permitidos de  $\varepsilon$ . Primeiramente, vemos que  $x^n\phi(x)$ , com  $n = 0, 1, 2, \dots$ , é tão compatível com as transformadas

de Fourier unilaterais quanto  $\phi(x)$ . Isto posto, as relações (2.12), (2.13), (2.14) e (2.15) com  $f_c(x)$  representando a função  $\phi(x)$  par e  $f_s(x)$  representando a função  $\phi(x)$  ímpar, restritas ao intervalo  $[0, \infty)$ , nos diz que em princípio  $F(k)$  é analítica  $\forall k$ . No entanto, vamos analisar o que acontece quando  $k \rightarrow 0$ , iniciando na devida ordem, com as propriedades (2.20) e (2.22):

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n} F_c(k)}{dk^{2n}} < \infty, \quad (5.16)$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1} F_c(k)}{dk^{2n+1}} = 0. \quad (5.17)$$

As relações acima são respectivamente de finitude e nulidade para as derivadas de  $F_c(k)$  próximo da origem. Tais relações devem ser satisfeitas quando impostas sobre (5.15) e suas derivadas. Vamos iniciar desenvolvendo as seis primeiras derivadas de (5.15) impondo as condições de finitude (5.16) e nulidade (5.17) para  $k \rightarrow 0$ :

$$\begin{cases} k^{\varepsilon-1/2} = \text{finito} \\ (\varepsilon - 1/2)k^{\varepsilon-3/2} = 0 \end{cases}, \quad \text{para } n = 0, \quad (5.18)$$

$$\begin{cases} (\varepsilon - 1/2)(\varepsilon - 3/2)k^{\varepsilon-5/2} = \text{finito} \\ (\varepsilon - 1/2)(\varepsilon - 3/2)(\varepsilon - 5/2)k^{\varepsilon-7/2} = 0 \end{cases}, \quad \text{para } n = 1, \quad (5.19)$$

$$\begin{cases} (\varepsilon - 1/2)(\varepsilon - 3/2)(\varepsilon - 5/2)(\varepsilon - 7/2)k^{\varepsilon-9/2} = \text{finito} \\ (\varepsilon - 1/2)(\varepsilon - 3/2)(\varepsilon - 5/2)(\varepsilon - 7/2)(\varepsilon - 9/2)k^{\varepsilon-11/2} = 0 \end{cases}, \quad \text{para } n = 2. \quad (5.20)$$

Note que a primeira linha das relações (5.18) é satisfeita quando  $\varepsilon \geq 1/2$ , já a relação de nulidade da segunda linha de (5.18) é satisfeita se  $\varepsilon = 1/2$  ou  $\varepsilon > 3/2$ . Mantendo as restrições anteriores, temos para a primeira linha de (5.19):  $\varepsilon = 1/2$  ou  $\varepsilon \geq 5/2$ , já para a segunda linha de (5.19) temos  $\varepsilon = 1/2$ ,  $\varepsilon = 5/2$  ou  $\varepsilon > 7/2$ . Mantendo as restrições anteriores, para a primeira linha de (5.20), temos  $\varepsilon = 1/2$ ,  $\varepsilon = 5/2$  ou  $\varepsilon \geq 9/2$ . Finalmente, para a segunda linha de (5.20) temos  $\varepsilon = 1/2$ ,  $\varepsilon = 5/2$ ,  $\varepsilon = 9/2$  ou  $\varepsilon > 11/2$ . Portanto, concluímos que de modo geral temos  $\varepsilon - 1/2 = 2n$ , sendo  $n \in \mathbb{N}$ .

Para a transformada seno de Fourier, de acordo com a (2.21) e (2.22), temos

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1} F_s(k)}{dk^{2n+1}} < \infty, \quad (5.21)$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n} F_s(k)}{dk^{2n}} = 0. \quad (5.22)$$

Analogamente ao desenvolvimento realizado para  $F_c(k)$ , vamos iniciar executando as seis primeiras derivadas de (5.15) impondo as condições de finitude (5.21) e nulidade (5.22) para  $k \rightarrow 0$ :

$$\begin{cases} k^{\varepsilon-1/2} = 0 \\ (\varepsilon - 1/2)k^{\varepsilon-3/2} = \text{finito} \end{cases}, \quad \text{para } n = 0, \quad (5.23)$$

$$\begin{cases} (\varepsilon - 1/2)(\varepsilon - 3/2)k^{\varepsilon-5/2} = 0 \\ (\varepsilon - 1/2)(\varepsilon - 3/2)(\varepsilon - 5/2)k^{\varepsilon-7/2} = \text{finito} \end{cases}, \quad \text{para } n = 1, \quad (5.24)$$

$$\begin{cases} (\varepsilon - 1/2)(\varepsilon - 3/2)(\varepsilon - 5/2)(\varepsilon - 7/2)k^{\varepsilon-9/2} = 0 \\ (\varepsilon - 1/2)(\varepsilon - 3/2)(\varepsilon - 5/2)(\varepsilon - 7/2)(\varepsilon - 9/2)k^{\varepsilon-11/2} = \text{finito} \end{cases}, \quad \text{para } n = 2. \quad (5.25)$$

A primeira linha das relações (5.23) é satisfeita quando  $\varepsilon > 1/2$ , já a relação de finitude da segunda linha de (5.23) é satisfeita se  $\varepsilon \geq 3/2$ . Mantendo as restrições anteriores, para a primeira linha de (5.24), temos  $\varepsilon = 3/2$  ou  $\varepsilon > 5/2$ , já para a segunda linha de (5.24) temos  $\varepsilon = 3/2$ , ou  $\varepsilon \geq 7/2$ . Mantendo as restrições anteriores, para a primeira linha de (5.25), temos  $\varepsilon = 3/2$ ,  $\varepsilon = 7/2$  ou  $\varepsilon > 9/2$ . Finalmente, para a segunda linha de (5.25) temos  $\varepsilon = 3/2$ ,  $\varepsilon = 7/2$ , ou  $\varepsilon > 11/2$ . Portanto, de modo geral temos:  $\varepsilon - 1/2 = 2n + 1$ , sendo  $n \in \mathbb{N}$ .

Por fim, podemos concluímos que  $k = 0$  é um ponto regular de (5.15) com

$$\varepsilon = n + 1/2, \quad (5.26)$$

onde  $n \in \mathbb{N}$ , sendo  $n$  par para  $F_c(k)$  e  $n$  ímpar para  $F_s(k)$ .

#### 5.4 TRANSFORMADA DE FOURIER UNILATERAL INVERSA

Na sessão anterior estabelecemos o conjunto de todos autovalores, podemos assim nos concentrar em achar o conjunto de autofunções. Haja vista que já estabelecemos as restrições para que  $F(k)$  seja absolutamente integrável no intervalo  $[0, \infty)$ , podemos escrever as transformadas de Fourier unilaterais inversas:

$$\phi_{2n}(x) = A_{2n} \int_0^\infty dk k^{2n} e^{-k^2/4} \cos kx, \quad (5.27)$$

$$\phi_{2n+1}(x) = A_{2n+1} \int_0^\infty dk k^{2n+1} e^{-k^2/4} \sen kx. \quad (5.28)$$

Fazendo  $n = 0$  em (5.27), obtemos uma integral mais simples, tal que

$$\phi_0(x) = A_0 \int_0^\infty dk e^{-k^2/4} \cos kx. \quad (5.29)$$

Utilizando a integral tabelada (3.896.4) da referência (GRADSHTEYN; RYZHIK, 2007), obtemos a solução da integral (5.29):

$$\phi_0(x) = B_0 e^{-x^2}. \quad (5.30)$$

Este resultado está relacionado com a autofunção do estado fundamental, ou seja, estado de menor energia. Sendo infinitamente diferenciável em todo o espaço, podemos obter as derivadas de (5.30):

$$\frac{d^n \phi_0(x)}{dx^n} = (-1)^n B_0 e^{-x^2} H_n(x), \quad (5.31)$$

onde  $H_n(x)$  são os polinômios de Hermite, determinados pela fórmula de Rodrigues — veja e.g. 8950.1 da referência (GRADSHTEYN; RYZHIK, 2007)

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \quad (5.32)$$

com  $n \in \mathbb{N}$ . Analogamente ao procedimento utilizado anteriormente o qual estabelecemos (5.31), podemos efetuar sucessivas derivações na (5.29), obtendo assim

$$\frac{d^{2n} \phi_0(x)}{dx^{2n}} = (-1)^n A_0 \int_0^\infty dk k^{2n} e^{-k^2/4} \cos kx, \quad (5.33)$$

$$\frac{d^{2n+1} \phi_0(x)}{dx^{2n+1}} = (-1)^{n+1} A_0 \int_0^\infty dk k^{2n+1} e^{-k^2/4} \sin kx. \quad (5.34)$$

A integrais em (5.33) e (5.34) são proporcionais às transformadas de Fourier unilaterais inversas (5.27) e (5.28), na devida ordem. Deste modo, podemos compactamente escrever  $\phi(x)$  em termos das derivadas de  $\phi_0(x)$ :

$$\phi_n(x) = C_n \frac{d^n \phi_0(x)}{dx^n}. \quad (5.35)$$

Por fim, substituindo (5.31) na (5.35), obtemos o resultado relacionado ao conjunto de todas as autofunções restritas no semieixo positivo de  $x$ :

$$\phi_n(x) = N_n e^{-x^2} H_n(x). \quad (5.36)$$

## 5.5 A SOLUÇÃO GERAL DO PROBLEMA

O método implementado permitiu que uma equação de segunda ordem (5.13) fosse simplificada para uma equação de primeira ordem contendo uma singularidade na origem (5.14). A equação de primeira ordem foi facilmente resolvida por integração direta, apresentando como resultado uma função com um expoente associado aos autovalores ainda irresolutos. As propriedades diferenciais das transformadas de Fourier unilaterais próximas à origem auxiliaram na restrição dos valores do expoente da função transformada nos levando diretamente ao espectro de autovalores. Logo após isso, resolvemos a transformada cosseno de Fourier inversa conexa com o estado fundamental. O resultado dessa integral permitiu com auxílio das propriedades diferenciais das transformadas de Fourier unilaterais, obter o conjunto das autofunções a partir da autofunção relacionada com o nível de energia mais baixo.

Com o problema resolvido no semieixo de  $x$ , devemos agora fazer a extensão apropriada, simétrica ou antissimétrica. Devido a  $x = 0$  ser um ponto regular em (5.3), a continuidade das autofunções e suas derivadas na origem estabelecem que as autofunções pares satisfazem à condição de Neumann homogênea na origem, enquanto autofunções ímpares satisfazem à condição homogênea de Dirichlet. Naturalmente, um autovalor par não permite uma extensão antissimétrica, do mesmo jeito, um autovalor ímpar não permite uma extensão simétrica, consequentemente, obtemos um espectro não degenerado. Enfim, a solução completa do problema é estabelecida relacionando a (5.36) com a fatoração (5.12), e também utilizando a propriedade do polinômio de Hermite:  $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$ , portanto temos

$$\psi_n(x) = N_n e^{-x^2/2} H_n(x), \quad (5.37)$$

$$E_n = (n + 1/2) \hbar \omega. \quad (5.38)$$

Mostramos que o oscilador harmônico quântico pode ser resolvido por intermédio da transformada unilateral de Fourier. O modo como abordamos o problema evitou a complexidade da resolução

das integrais relacionadas com a transformada de Fourier unilateral inversa. Vimos que foi preciso resolver somente uma integral relacionada com autofunção do estado fundamental, e com auxílio das propriedades diferenciais das transformadas de Fourier unilaterais, adquirimos a solução geral do problema.

## 6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho os esforços foram orientados para resolver sistemas simples exequíveis da mecânica quântica utilizando métodos integrais poucos explorados. Dentro de tais sistemas, estavam o poço quadrado infinito definido no intervalo  $[-L/2, L/2]$  e o oscilador harmônico quântico definido no intervalo  $(-\infty, \infty)$ . A abordagem desses dois sistemas utilizando a transformada de Fourier unilateral definida no intervalo  $[0, \infty)$  permitiu resolver o problema no semieixo positivo de  $x$ . Logo após a obtenção do resultado desejado conseguimos realizar a extensão simétrica para autovalores pares e antissimétrica para autovalores ímpares, obtendo por fim a solução completa do problema.

No problema do poço quadrado infinito, a transformada de Fourier unilateral permitiu que a condição de fronteira homogênea de Dirichlet na extremidade do poço ( $x = L/2$ ) possibilitasse a transição da transformada unilateral de Fourier para uma série de Fourier. Além do mais, mostramos que os estados estacionários da partícula em uma caixa, por intermédio da transformada unilateral de Fourier, pode ser encontrada com simplicidade por ser uma ferramenta que tem conformidade com as condições de contorno desde o início.

No problema do oscilador harmônico quântico mostramos que este sistema também pode ser resolvida via transformada de Fourier unilateral. Antes de tudo, foi preciso escolher a transformação funcional com cuidado a fim de assegurar a existência das transformadas de Fourier unilaterais. A resolução da equação transformada foi obtida sem problema, já que a eficácia do método permitiu transformar uma equação de segunda ordem para uma equação de primeira ordem. As condições de finitude e nulidade relacionadas com função transformada precisaram ser satisfeitas, isto nos levou diretamente ao conjunto de autovalores. A partir disso, resolvemos somente uma integral relacionada à autofunção do estado fundamental e obtemos a solução geral do problema.

## REFERÊNCIAS

- DAVYDOV, A. S. **Quantum Mechanics**. 2nd. ed. Oxford: Pergamon Press, 1965.
- SCHIFF, L. I. **Quantum Mechanics**. 3th. ed. New York, Toronto and London: McGraw-Hill Book Company, 1968.
- MERZBACHER, E. **Quantum Mechanics**. 2nd. ed. New York, London, Sydney and Toronto: John Wiley and Sons, Inc., 1970.
- EISBERG, R.; RESNICK, R. **QUANTUM PHYSICS of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles**. 6th. ed. New York: John Wiley and Sons, Inc., 1974.
- SHANKAR, R. **Principles of Quantum Mechanics**. 2nd. ed. New York: Plenum Press, 1980.
- GASIOROWICZ, S. **Quantum Physics**. 3rd. ed. Hoboken: John Wiley and Sons, Inc., 2003.
- GRIFFITHS, D. J. **Introduction to Quantum Mechanics**. 2nd. ed. New Jersey: Prentice Hall, 2005.
- CASTRO, Antonio S. de. A caveat about applications of the unilateral Fourier transform. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, São Paulo, v. 42, e20200129 (2020). Disponível em: [http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1806-11172020000100105&lng=pt&nrm=iso](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172020000100105&lng=pt&nrm=iso). Acesso em: 11 mar. 2021.
- VIEIRA, D. W.; CASTRO, A. S. Quantum states of a particle in a box via unilateral Fourier transform. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, São Paulo, v.42, e20200145 (2020). Disponível em: [http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1806-11172020000100451&lng=pt&nrm=iso](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172020000100451&lng=pt&nrm=iso). Acesso em: 11 mar. 2021.
- CASTRO, A. S. Frustrating use of the Laplace transform for the quantum states of a particle in a box. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, São Paulo, v.42, e20200079 (2020). Disponível em: [http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1806-11172020000100436&lng=pt&nrm=iso](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172020000100436&lng=pt&nrm=iso). Acesso em: 11 mar. 2021.
- GUPTA, R.; GUPTA, R.; VERMA, D. Eigen energy values and eigen functions of a particle in an infinite square well potential by Laplace transforms. **International Journal of Innovative Technology and Exploring Engineering**, v.8, p.6-9 (2019). Disponível em: [https://www.researchgate.net/publication/330352231\\_Eigen\\_energy\\_values\\_and\\_eigen\\_functions\\_of\\_a\\_particle\\_in\\_an\\_infinite\\_square\\_well\\_potential\\_by\\_laplace\\_transforms](https://www.researchgate.net/publication/330352231_Eigen_energy_values_and_eigen_functions_of_a_particle_in_an_infinite_square_well_potential_by_laplace_transforms). Acesso em: 12 Mar. 2021.
- NOGUEIRA, P. H. F.; CASTRO, A. S. de. Revisiting the quantum harmonic oscillator via unilateral Fourier transforms. **European Journal of Physics**, v.37, n1, p.015402 (2015). Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0143-0807/37/1/015402>. Acesso em: 31 mar. 2021.

CHURCHILL, R. V. **Operational Mathematics**. 2nd. ed. New York, Toronto and London: McGraw-Hill Book Company, 1958.

ARFKEN, G. **Mathematical Methods for Physicists**. 3rd. ed. San Diego: Academic Press, 1985.

BUTKOV, E. **Física Matemática**. Rio de Janeiro: LTC, 1988.

RILEY, K. F.; HOBSON, M. P.; BENCE, S. J. **Mathematical Methods for Physics and Engineering**. 3rd. ed. Cambridge University Press, 2006.

POULARIKAS, A. D. **Transforms and Applications Handbook**. 3th. ed. London, New York and Boca Raton: (CRC Press) Taylor and Francis Group, 2007.

DEBNATH, L.; BHATTA, D. **Integral Transforms and Their Applications**. 2nd. ed. London and New York: Chapman and Hall (CRC Press), Taylor and Francis Group, 2010.

COHEN-TANNOUDJI, C.; BERNARD, D.; and LALOË, F. **Quantum Mechanics**. v1. Paris: Hermann, 1977.

FEYNMAN R. P.; HIBBS, A R. **Quantum Mechanics and Path Integrals**. New York: McGraw-Hill, 1965.

PIMENTEL, D. R. M.; CASTRO, A. S. A Laplace transform approach to the quantum harmonic oscillator. **European Journal of Physics**, v.34, p.199-294 (2013). Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0143-0807/34/1/199/meta>. Acesso em: 28 jul. 2021.

MUÑOZ, G. Integral equations and the simple harmonic oscillator. **American Journal of Physics**, v.66, p.254-256 (1998). Disponível em: <http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/66/3/10.1119/1.18855>. Acesso em: 28 jul. 2021.

PONOMARENKO, S. A. Quantum harmonic oscillator revisited: A Fourier transform approach. **American Journal of Physics**, v.72, p.1259-1260 (2004). Disponível em: <http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/72/9/10.1119/1.1677395>. Acesso em: 28 jul. 2021.

ENGEL, A. Comment on Quantum harmonic oscillator revisited: A Fourier transform approach by S. A. Ponomarenko [Am. J. Phys. 72 (9) 1259-1260 (2004)]. **American Journal of Physics**, v.74, p.837 (2006). Disponível em: <http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/74/9/10.1119/1.2221343>. Acesso em: 28 jul. 2021.

PALMA, G.; RAFF, U. A novel application of a Fourier integral representation of bound states in quantum mechanics. **American Journal of Physics**, v.79, p.201-205 (2011). Disponível em: <http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/79/2/10.1119/1.3531975>. Acesso em: 28 jul. 2021.

GRADSHTEYN, I. S.; RYZHIK, I. M. **Table of Integrals, Series, and Products**. 7th. ed. New York: Academic Press, 2007.