

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

SILVIO MOTTA DE JESUS DA SILVA

**Aplicação em alguns casos de métodos de quantização semiclássica a potenciais solúveis e
condicionalmente solúveis**

Guaratinguetá

2018

Silvio Motta de Jesus da Silva

**Aplicação em alguns casos de métodos de quantização semiclássica a potenciais solúveis e
condicionalmente solúveis**

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

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Batista Hott

Guaratinguetá

2018

S586a	Silva, Silvio Motta de Jesus da Aplicação em alguns casos de métodos de quantização semiclássica a potenciais solúveis e condicionalmente solúveis / Silvio Motta de Jesus da Silva – Guaratinguetá, 2018. 40 f.: il. Bibliografia: f. 39-40 Trabalho de Graduação - Bacharelado em Física – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, 2018. Orientador: Prof. Dr. Marcelo Batista Hott 1. Física matemática. 2. Teoria quântica. 3. Física – Estudo e ensino. I. Título. CDU 53
-------	--

Luciana Máximo

Bibliotecária CRB-8/3595

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

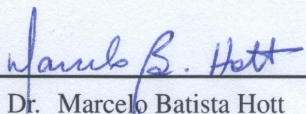
SILVIO MOTTA DE JESUS DA SILVA

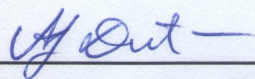
ESTE TRABALHO DE GRADUAÇÃO FOI JULGADO ADEQUADO COMO PARTE DO
REQUISITO PARA A OBTENÇÃO DO DIPLOMA DE "GRADUANDO EM FÍSICA -
BACHARELADO "

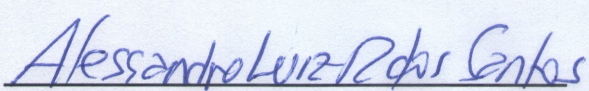
APROVADO EM SUA FORMA FINAL PELO CONSELHO DE CURSO DE GRADUAÇÃO EM
FÍSICA - BACHARELADO

Profº Dr. MARCO AURÉLIO ALVARENGA MONTEIRO
Coordenador

BANCA EXAMINADORA:


Profº Dr. Marcelo Batista Hott
Orientador/UNESP-FEG/DFQ


Profº Dr. Alvaro de Souza Dutra
UNESP-FEG/DFQ


Dr. Alessandro Luiz Ribeiro dos Santos
ITA/DCTA

Dezembro , 2018

Aos meus pais que com muito carinho e apoio não mediram esforços para que eu chegasse até essa etapa de minha vida. À Maria Gabriela Barbosa pois sem ela talvez nunca tivesse criado a coragem de cursar Física, obrigado pelo carinho, paciência e por me trazer paz em meio ao frenesi de cada semestre.

AGRADECIMENTOS

Sou grato a todos os professores que contribuíram com a minha trajetória acadêmica, especialmente ao Prof. Dr. Marcelo Batista Hott responsável pela orientação do meu projeto. Obrigado por esclarecer tantas dúvidas e ser tão atencioso e paciente.

Agradeço à Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, por me proporcionar um ambiente criativo e amigável para os estudos.

Ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e à Reitoria da UNESP pela concessão de bolsa de iniciação científica.

Aos meus companheiros de turma por proporcionarem um ambiente saudável de aprendizagem. Estar cercado por pessoas interessadas e dedicadas a aprender sempre me incentivou a fazer o meu melhor, por isso merecem o meu eterno agradecimento.

Este trabalho contou com o apoio das seguintes entidades:

CNPq - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico

PROPe - Pró-Reitoria de pesquisa da UNESP

“Tenho a impressão de ter sido uma criança brincando à beira-mar, divertindo-me em descobrir uma pedrinha mais lisa ou uma concha mais bonita que as outras, enquanto o imenso oceano da verdade continua misterioso diante de meus olhos.”
(Isaac Newton)

RESUMO

O presente trabalho visa o estudo e a aplicação de métodos de quantização semiclássicos em potenciais exatamente e condicionalmente solúveis. O primeiro método apresentado é a Regra de Quantização Apropriada que pode ser considerado como um método que introduz um termo de correção quântica a quantização de Wilson-Sommerfeld. O segundo é o Formalismo de Hamilton-Jacobi quântico que é uma generalização do Formalismo de Hamilton-Jacobi clássico e tem como vantagem não ser necessário se resolver nenhuma equação de movimento para obter informações sobre a energia do sistema. Ambos os métodos foram aplicados ao oscilador harmônico e ao potencial chamado Scarf trigonométrico, potenciais esses conhecidos por serem exatamente solúveis. A fim de se expandir a utilidade dos métodos, ambos foram aplicados para se obter o espectro de energia a um potencial específico que pertence à classe dos potenciais denominados condicionalmente solúveis.

PALAVRAS-CHAVE: Quantização. Sistemas Não Lineares. Semiclássico.

ABSTRACT

The present work seeks the study and application of semiclassical quantization methods in exactly and conditionally soluble potentials. The first method presented is the Proper Quantization Rule that can be considered as a method that introduces a quantum correction term in Wilson-Sommerfeld quantization. The second is the Hamilton-Jacobi Quantum Formalism, which is a generalization of classical Hamilton-Jacobi theory and has the advantage of not having to solve any equation of motion to obtain information about the energy of system. Both methods were applied to the harmonic oscillator and to a potential called Scarf trigonometric, which are known to be exactly soluble systems. In order to expand the utility of methods, both were applied to obtain the energy spectrum at a specific potential that belongs to a class of potentials known as conditionally soluble.

KEYWORDS: Quantization. Non Linear Systems. Semiclassical.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	REGRA DE QUANTIZAÇÃO APROPRIADA (PQR)	13
3	APLICAÇÕES DA REGRA DE QUANTIZAÇÃO APROPRIADA (PQR) . .	16
3.1	Oscilador Harmônico	16
3.2	Scarf trigonométrico	17
4	TEORIA DE HAMILTON-JACOBI	19
4.1	Transformações Canônicas e funções geradoras	19
4.2	Equação de Hamilton-Jacobi	21
4.3	Variáveis de Ângulo-Ação	22
4.4	Teoria quântica de Hamilton-Jacobi	23
5	APLICAÇÕES DO FORMALISMO DE HAMILTON-JACOBI	27
5.1	Oscilador harmônico	27
5.2	Scarf trigonométrico	29
6	POTENCIAIS CONDICIONALMENTE SOLÚVEIS	34
7	CONCLUSÃO	38
	REFERÊNCIAS	39

1 INTRODUÇÃO

A regra de quantização de Wilson-Sommerfeld-Bohr (QWSB)¹ foi de extrema importância no auge da física moderna pois pela primeira vez foi possível se desenvolver uma regra geral de quantização capaz de reproduzir, de primeiros princípios, regras de quantização fundamentais na física moderna que até então eram somente postuladas.

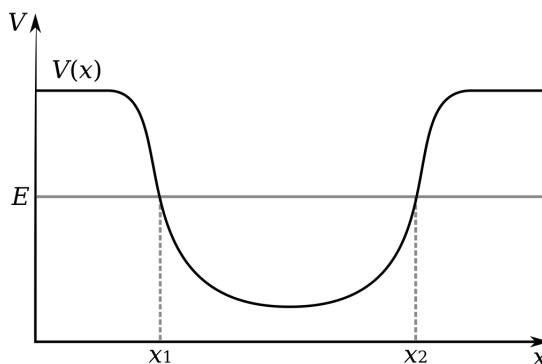
A regra é válida para sistemas físicos que apresentem coordenadas periódicas em função do tempo, sendo estas condições quânticas dadas por

$$\oint p_{c_q} dq = n_q h, \quad (1.1)$$

onde q é uma coordenada generalizada de uma determinada partícula, p_{c_q} é o momento (clássico) generalizado associada a essa partícula, n_q é um número quântico cujo valores são sempre inteiros, positivos e diferentes de zero, e $\oint$ significa que a integração é realizada sobre um período da coordenada q (EISBERG; RESNICK, 1979).

Para que um sistema seja periódico é necessário que possamos garantir que ele possua estados ligados, para isso é necessário que o potencial estudado seja do tipo poço, onde define-se poço como uma região em torno de um mínimo local do sistema. Partículas com energia menor que as energias da borda do poço são ditas como estando em um estado ligado ou confinado.

Figura 1 – Representação de um poço de potencial genérico



Fonte: Koantum (2007)

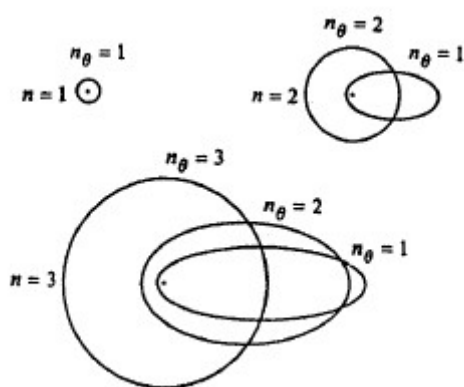
Em sistemas periódicos chamamos de pontos de retorno do sistema pontos onde a partícula muda o sentido do seu movimento. Logo os pontos onde $E = V(x)$ são pontos de retorno pois a velocidade da partícula deve ser nula nesses pontos. Em muitos casos os pontos de retorno coincidem com a borda do potencial podendo a equação (1.1) ser integrada em função dos pontos de retorno, uma vez que integrar por dq é integrar por todos os pontos localizados entre os pontos de retorno dos sistema.

Uma das importantes aplicações da QWSB foi a resolução do problema do modelo atômico de Bohr que não era capaz de explicar a estrutura fina do hidrogênio, uma decomposição em várias linhas espectrais com frequências muito próximas encontradas em todos os espectros atômicos que pode

¹ Em algumas fontes essa regra pode ser denominada apenas como regra de quantização de Wilson-Sommerfeld (QWS)

ser observada apenas por equipamentos de alta resolução. Ao se supor que os elétrons se moviam em órbitas elípticas, Sommerfeld inferiu um segundo número quântico n_θ , chamado de secundário ou azimutal, que deu origem ao que chamamos de órbitas degeneradas que são órbitas elípticas ou circulares com diferentes números quânticos secundários, mas mesmo número quântico principal. Isso implica que elétrons que percorrem diferentes órbitas degeneradas possuem a mesma energia, uma vez que os níveis de energia dependem somente do número quântico principal.

Figura 2 – Algumas órbitas elípticas degeneradas no modelo de Bohr-Sommerfeld. Uma das órbitas sempre corresponde a uma órbita circular como proposto inicialmente por Bohr. O núcleo está localizado no foco comum das elipses



Fonte: Eisberg (1979)

Com o advento da “nova mecânica quântica” a equação de Schrödinger se estabelece como principal equação dinâmica para sistemas quânticos. Através da mesma é possível descrever como o estado de um sistema evolui com o tempo. Informações importantes puderam ser obtidas utilizando-se as funções de onda fazendo com que métodos semiclássicos como a QWSB perdessem espaço.

Um dos principais problemas que a QWSB apresentava era a incapacidade de reproduzir o espectro completo de energia de sistemas quânticos, uma vez que quanticamente o estado de energia de ponto zero², estado esse com número quântico principal $n = 0$, é permitido.

Embora a equação de Schrödinger tenha possibilitado o desenvolvimento da mecânica quântica, resolvê-la envolve trabalhar com equações diferenciais que muitas vezes exigem métodos complexos e soluções aproximadas. Com o passar dos anos diversos métodos foram sendo desenvolvidos na tentativa de se facilitar e até mesmo de resolver problemas que não pudessem ser resolvidos por completo via equação de Schrödinger. Entre os métodos mais conhecidos estão a aproximação SUSYQM (COOPER; KHARE; SUKHATME, 1995), a aproximação WKB (WENTZEL, 1926) e a regra de quantização exata (MA; XU, 2005), sendo válido nos perguntarmos se nem que seja por uma questão de praticidade matemática não seria possível se utilizar de métodos semiclássicos como uma alternativa.

No presente trabalho são apresentados dois métodos de quantização semiclássicos, o primeiro chamamos de regra de quantização apropriada (PQR), que tem como principal destaque ter uma

² Planck sugeriu que nos limites de temperatura próximo ao do zero absoluto, a energia de um oscilador não seria nula, mas sim meio quantum $hf/2$, energia que recebeu o nome de energia de ponto zero. Mais tarde Einstein reinterpretou seu significado como o de uma espécie de “energia residual” que átomos e moléculas retem mesmo estando em total repouso.

estrutura parecida com QWSB (1.1), com um certo abuso de linguagem podemos até dizer que a PQR funciona como uma correção quântica para Wilson-Sommerfeld.

O segundo método é o Formalismo de Hamilton-Jacobi quântico (FHJQ) que é uma teoria quântica construída em cima da teoria clássica de Hamilton-Jacobi estudada em muitos livros de mecânica clássica. O método busca encontrar análogos quânticos para grandezas e postulados clássicos, bem como o reaproveitamento de condições de contorno em um problema quântico, o que nos leva a uma regra de quantização onde os níveis de energia são influenciados pelo número de pólos que o sistema estudado possui e em suas respectivas contribuições de resíduo. Uma das maiores vantagens do FHJQ é a possibilidade de se determinar os níveis de energia de um sistema ligado sem a necessidade de se resolver uma equação dinâmica para o sistema.

No capítulo 2, partindo da equação de Schrödinger chegaremos na regra de quantização exata, uma melhoria dessa técnica é o que chamamos de regra que quantização apropriada, acreditamos que essa seja a motivação para o nome "apropriada". Em seguida, no capítulo 3, aplicamos a PQR ao problema do oscilador harmônico que é um dos sistemas mais fundamentais em um curso de física, e ao potencial não linear chamado Scarf Trigonométrico utilizado na descrição de partículas que se organizam com um arranjo periódico, como um cristal, é um potencial não linear exatamente solúvel pertencente a uma classe de potenciais chamados de *shape invariant* (COOPER; KHARE; SUKHATME, 1995), embora encontramos uma série desses potências

No capítulo 4 buscamos desenvolver a teoria clássica que deu origem ao formalismo de Hamilton-Jacobi e generalizamos as principais funções e equações de modo a se encontrar um análogo quântico a essa formalismo. No capítulo 5 aplicamos o FHJQ aos mesmos exemplos resolvidos via PQR.

No capítulo 6 veremos uma nova classe de potenciais denominados condicionalmente solúveis, e uma vez que a PQR e o FQHJ funcionam perfeitamente para potenciais exatamente solúveis é interessante expandir a aplicação de tais métodos para essa nova classe.

2 REGRA DE QUANTIZAÇÃO APROPRIADA (PQR)

Partindo da equação de Schrödinger pretende-se obter a PQR proposta em (QIANG; DONG, 2010), que é um método de quantização semiclássico usado para encontrar o espectro de energia completo de sistemas, inclusive com a energia de ponto zero.

A equação de Schrödinger independente do tempo (ESIT) em uma dimensão espacial é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (2.1)$$

onde m é a massa da partícula e $V(x)$ é a energia potencial à qual uma partícula está submetida que é considerada uma função real contínua com pontos de retorno x_a e x_b .

É possível ver que a ESIT é um caso particular da equação de Sturm-Liouville, que é uma equação diferencial ordinária de segunda ordem dada por

$$-\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + s(x)y = \lambda r(x)y, \quad (2.2)$$

com $p(x) = \hbar^2/2m$, $y = \psi(x)$, $s(x) = V(x)$, $r(x) = 1$ e $\lambda = E$.

Segundo (BAILEY, 1966) uma estratégia que pode ser utilizada para facilitar a resolução de um problema de Sturm-Liouville é a definição de um ângulo de fase, também chamado de função de fase $\phi(x)$ da seguinte forma:

$$\phi(x) = \frac{d}{dx} \ln[\psi(x)] = \frac{1}{\psi(x)} \frac{d\psi(x)}{dx}, \quad (2.3)$$

Ao se substituir (2.3) na ESIT (2.1) obtém-se uma equação diferencial de primeira ordem não linear para $\phi(x)$ dada por

$$\frac{d}{dx} \phi(x) = -\frac{2M}{\hbar^2} [E - V(x)] - \phi(x)^2, \quad (2.4)$$

equação esta um caso específico da equação de Riccati.

Trabalhar com $\phi(x)$ nos dá a vantagem de reduzir a ordem da equação diferencial, uma vez que o número de condições de contorno necessárias para se obter a solução exata de uma equação diferencial é igual a ordem da equação. Entretanto a equação de Riccati é uma equação não linear e tentar resolvê-la é tão problemático quanto tentar resolver a equação de Schrödinger.

Ao se conhecer uma solução particular da equação Riccati seria possível linearizá-la, mas esse não será o caso dos problemas tratados na presente monografia.

Partindo da equação de Riccati obteremos a "regra de quantização exata" proposta por (MA; XU, 2005) e logo após uma breve discussão encontraremos a "regra de quantização apropriada" proposta por (QIANG; DONG, 2010).

Seja $\tan(\theta - n\pi) = k(x)/\phi(x)$, com $k(x) = \sqrt{2M[E - V(x)]}/\hbar = p_c/\hbar$ e n aumentando em

um toda vez que x atravessa um nó de $\phi(x)$, temos:

$$\theta(x) = \tan^{-1} \left(\frac{k(x)}{\phi(x)} \right) + n\pi \quad (2.5)$$

tal que

$$\frac{d\theta}{dx} = \frac{[\phi(x)k'(x) - k(x)\phi'(x)]}{[\phi^2(x) + k^2(x)]}, \quad (2.6)$$

com as variáveis linhas representando uma única derivada em função de x .

Utilizando-se a equação de Riccati (2.4) na equação acima temos

$$\frac{d\theta}{dx} = k(x) - \phi(x) \left[\frac{dk(x)}{dx} \right] \left[\frac{d\phi(x)}{dx} \right]^{-1}, \quad (2.7)$$

integrando ambos os lados num intervalo contido entre os pontos de retorno clássicos do sistema temos que o lado esquerdo fica

$$\int_{x_a}^{x_b} \frac{d\theta}{dx} dx = N\pi - \lim_{x \rightarrow x_A} \arctan \left[\frac{k(x)}{\phi(x_A)} \right] + \lim_{x \rightarrow x_B} \arctan \left[\frac{k(x)}{\phi(x_B)} \right] = N\pi, \quad (2.8)$$

uma vez que em um ponto de retorno p_c é nulo e isso implica em $k(x)$ também nulo, N é o número de nós¹ de ϕ na região em que $E \geq V(x)$ e é sempre relacionado ao número de nós da função de onda (n) por $N = n + 1$.

Ao se integrar o lado direito da equação (2.7) e escrevendo a equação em função da integral em $k(x)$ obtemos a regra de quantização exata proposta por (MA; XU, 2005) onde

$$\int_{x_a}^{x_b} k(x) dx = N\pi + \int_{x_a}^{x_b} \phi(x) \left[\frac{dk(x)}{dx} \right] \left[\frac{d\phi(x)}{dx} \right]^{-1} dx. \quad (2.9)$$

A integral do lado direito da equação (2.9) é chamada de termo de correção quântico e apesar dos autores não fazerem nenhuma alusão a esse fato é possível se observar que a equação (2.9) se assemelha muito à regra de quantização de Wilson-Sommerfeld (1.1) acrescida de um termo de correção e com $p_c = \hbar k(x)$, com a diferença que na QWSB não é possível se relacionar n com número de nós de alguma função, a integral era tomada num período completo do movimento e n só pode assumir um valor real inteiro e diferente de zero, enquanto na regra de quantização exata um estado com $n = 0$ é permitido é só precisamos integrar sobre metade do período.

Ainda no trabalho de (MA; XU, 2005) foi descoberto que para sistemas exatamente solúveis o número de nós da função de onda não influencia no termo de correção quântica, de modo que nesses sistemas é possível se utilizar a regra de quantização exata para se encontrar todos os autoestados de energia do sistema, incluindo o de energia de ponto zero, que pode ser calculado diretamente utilizando-se a equação de Riccati.

Aproveitando-se dessa propriedade (QIANG; DONG, 2010) desenvolveram a "regra de quantização apropriada" que tem esse nome pois procura facilitar o cálculo do termo de correção encontrado na regra de quantização exata.

¹ pontos de uma função ondulatório que permanecem fixos e de amplitude nula

Partindo da equação (2.9) a integral de correção para $n = 0$ pode ser escrita como

$$\int_{x_{0a}}^{x_{0b}} k'_0(x) \frac{\phi_0(x)}{\phi'_0(x)} dx = -\pi + \int_{x_{0a}}^{x_{0b}} k_0(x) dx, \quad (2.10)$$

com $k_0(x) = \sqrt{2M[E_0 - V(x)]}/\hbar$. $k_0(x)$ é o valor $k(x)$ quando o sistema se encontra no estado de energia de ponto zero. Uma vez que o termo de correção não depende do número de nós, podemos substituir (2.10) em (2.9), obtendo assim

$$\int_{x_a}^{x_b} k(x) dx - \int_{x_{0a}}^{x_{0b}} k_0(x) dx = (N - 1)\pi = n\pi. \quad (2.11)$$

que é chamada de "regra de quantização apropriada" ou *proper quantum rules* originalmente. Com a PQR o problema envolve duas integrais com a mesma forma matemática de modo que podemos calcular a primeira integral com a função $k(x)$ e logo após substituir os valores de energia E_n pelo valor da energia de ponto zero E_0 obtendo assim o valor da segunda integral sem a necessidade de resolvê-la, o que simplifica a grande dificuldade que surge em vários problemas de se calcular a integral de correção via regra de quantização exata (2.9).

3 APLICAÇÕES DA REGRA DE QUANTIZAÇÃO APROPRIADA (PQR)

Para que seja possível obter o termo de correção quântico da PQR é necessário conhecer a energia de ponto zero do sistema que pode ser obtida utilizando-se a equação de Riccati (2.4). Entretanto, não podemos obter ϕ resolvendo a equação de Riccati diretamente uma vez que não conhecemos uma solução particular do problema, não sendo possível linearizá-lo.

Como já discutido no capítulo 2 o termo de correção quântica independe do número de nós da função de onda para sistemas exatamente solúveis. Logo, iremos focar em encontrar o termo de correção para a função ψ no estado fundamental, com o ângulo de fase no estado fundamental dado por $\phi_0(x)$. Assim partiremos para um método de tentativa e erro, onde damos um *Ansatz* para a forma da função $\phi_0(x)$ que satisfaça a equação de Riccati. Se considerarmos hipoteticamente que a energia de ponto zero do sistema é nula, temos que a equação de Riccati pode ser escrita como

$$\frac{d}{dx}\phi_0(x) + \phi_0(x)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V(x), \quad (3.1)$$

de modo que baseando-se na forma do potencial é possível se dar um *Ansatz* razoável para ϕ_0 .

Para título de exemplificação será resolvido o problema do oscilador harmônico e logo após aplicaremos a PQR ao potencial Scarf trigonométrico que faz parte de uma classe de potenciais que foram resolvidos analiticamente através de técnicas de supersimetria (COOPER; KHARE; SUKHATME, 1995), e desde então vem sendo altamente explorados por diversos métodos, incluindo a regra de quantização exata e a PQR, (SERRANO; GU; DONG, 2010), (GU; DONG; MA, 2008). O potencial Scarf trigonométrico foi escolhido para ser resolvido pois em nenhuma das bibliografias estudadas foi encontrado a solução do mesmo através da PQR.

3.1 OSCILADOR HARMÔNICO

O potencial do oscilador é dado por $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, onde m é a massa e ω a frequência angular da partícula. A equação de Riccati (2.4) pode ser invertida de modo que o potencial em função do ângulo de fase é dado por

$$\frac{m\omega^2}{2}x^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d\phi_0(x)}{dx} + \phi_0(x)^2 \right] + E_0. \quad (3.2)$$

Uma vez que o potencial possui um termo quadrático, buscamos um *Ansatz* capaz de nos dar um termo quadrático quando substituído na equação de Riccati. Para o oscilador harmônico o *Ansatz* escolhido foi $\phi_0 = -(Ax + B)$. Buscamos encontrar valores para as constantes A e B que façam com que o *Ansatz* dado consiga reproduzir o potencial, caso essas constantes não possam ser determinadas um novo *Ansatz* precisaria ser dado. Substituindo ϕ_0 em (3.2) temos

$$\frac{m\omega^2}{2}x^2 = \frac{(\hbar A)^2}{2m}x^2 + \frac{\hbar^2 AB}{m}x - \frac{A\hbar^2 - (B\hbar)^2}{2m} + E_0. \quad (3.3)$$

Comparando-se os monômios de mesma ordem de ambos os lados da equação temos o sistema

$$\frac{(\hbar A)^2}{2m} = \frac{mw^2}{2}, \quad \frac{\hbar^2 AB}{m} = 0 \quad \text{e} \quad E_0 - \frac{A\hbar^2 - (B\hbar)^2}{2m} = 0, \quad (3.4)$$

de modo que concluímos que $A = mw/2$, $B = 0$ e $E_0 = \hbar w/2$. Como as constantes puderam ser determinadas nosso *Ansatz* inicial para a forma do ângulo de fase é válido. Sabendo o valor da energia de ponto zero do sistema nos resta agora determinar o valor da primeira integral de quantização da equação (2.11).

Os pontos de retorno do sistema são dados pelos pontos onde $E = V(x)$, portanto

$$x_A = \sqrt{\frac{2E}{mw^2}} = a \quad \text{e} \quad x_B = -\sqrt{\frac{2E}{mw^2}} = -a, \quad (3.5)$$

a primeira integral de quantização (2.11) pode ser escrita como

$$\int_{-a}^a k(x) dx = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{\frac{mw^2}{2}} \int_{-a}^a \sqrt{-(x+a)(x-a)} dx. \quad (3.6)$$

A integral acima foi resolvida com o auxílio do software de cálculo algébrico MATHEMATICA

$$\int_{-a}^a \sqrt{-(x+a)(x-a)} dx = \frac{\pi a^2}{2} = \frac{\pi E}{mw^2}. \quad (3.7)$$

Para se encontrar o valor da integral de correção basta se substituir E por E_0 no resultado acima de forma que a integral de correção fica

$$\int_{-a_0}^{a_0} k_0(x) dx = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{\frac{mw^2}{2}} \frac{\pi E_0}{mw^2}. \quad (3.8)$$

Substituindo as equações (3.7) e (3.8) na equação (2.11) e resolvendo a equação para E temos:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar w \quad \text{com, } n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.9)$$

que é o espectro de energia do oscilador harmônico quântico já bem conhecido em várias literaturas.

3.2 SCARF TRIGONOMÉTRICO

De modo a se encontrar exatamente os mesmo autovalores encontrados em (COOPER; KHARE; SUKHATME, 1995) consideramos $2M = \hbar = 1$. O potencial Scarf trigonométrico é dado por

$$V(x) = -A^2 + U_0[\sec(\alpha x)]^2 - U_1 \sec(\alpha x) \tan(\alpha x), \quad (3.10)$$

com $U_0 = (A^2 + B^2 - A\alpha)$ e $U_1 = (2A - \alpha)$.

Através da mudança de variável $y = \sin(\alpha x)$ o potencial $V(x)$ fica

$$V(y) = \frac{A^2 y^2 - U_1 y - (A^2 - U_0)}{1 - y^2}. \quad (3.11)$$

Buscando um *Ansatz* capaz de nos dar um termo quadrático e um linear em y , bem como a mesma base que o potencial quando substituído na equação de Ricatti (2.4) escolhemos um *Ansatz* na forma $\phi_0 = -(Ay - B)/\sqrt{1 - y^2}$.

Repetindo-se de maneira análoga os procedimentos feitos com o oscilador harmônico temos que a energia de ponto zero do sistema é $E_0 = 0$. É importante destacar que o potencial se encontra deslocado em $-A^2$, uma vez que o valor original da energia de ponto zero deveria ser A^2 . Esse deslocamento pode ser feito sempre de modo a simplificar mais a integral de correção pois substituiremos um zero o que quase sempre simplifica o cálculo do termo de correção.

Seja $\Delta = 4(E + A^2)(E + A^2 - U_0) + U_1^2$ os pontos de retorno são dados por

$$y_A = \frac{U_1 - \sqrt{\Delta}}{2F - A^2} = a \quad \text{e} \quad y_B = \frac{U_1 + \sqrt{\Delta}}{2F - A^2} = b, \quad (3.12)$$

a primeira integral de quantização (2.11) pode ser escrita como

$$\int_{y_A}^{y_B} k(y) dy = \frac{\sqrt{A^2 + E}}{\alpha} \int_a^b \sqrt{-\frac{(y-a)(y-b)}{1-y^2}} dy. \quad (3.13)$$

A integral acima foi resolvida com o auxílio do software de cálculo algébrico MATHEMATICA

$$\int_a^b \sqrt{-\frac{(y-a)(y-b)}{1-y^2}} dy = \frac{\pi}{2} \left(2 + \sqrt{1+a+b+ab} - \sqrt{1-a-b+ab} \right) \quad (3.14)$$

Substituindo-se os limites de integração temos

$$\int_{y_A}^{y_B} k(y) dy = \frac{\pi}{2\alpha} \left(2\sqrt{A^2 + E} - \sqrt{U_0 - U_1} + \sqrt{U_0 + U_1} \right). \quad (3.15)$$

Para se encontrar o valor da integral de correção basta se substituir E por $E_0 = 0$ no resultado obtido acima de forma que a integral de correção é dada por

$$\int_{y_{0A}}^{y_{0B}} k_0(y) dy = \frac{\pi}{2\alpha} \left(2A - \sqrt{U_0 - U_1} + \sqrt{U_0 + U_1} \right). \quad (3.16)$$

Substituindo as equações (3.15) e (3.16) na equação (2.11) e resolvendo a equação para E temos:

$$E_n = (A + n\alpha)^2 - A^2 \quad \text{com } n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.17)$$

que é o espectro de energia conhecido para o potencial Scarf trigonométrico via (COOPER; KHARE; SUKHATME, 1995). Caso não tivéssemos feito $2M = \hbar = 1$, os autovalores de energia seriam dados por

$$E_n = \left(A + \frac{n\pi\alpha\hbar}{2M} \right)^2 - A^2. \quad (3.18)$$

Por fim é importante notar que o deslocamento de $-A^2$ feito originalmente no potencial continua presente no espectro de energia, podendo ser facilmente removido do problema caso necessário.

4 TEORIA DE HAMILTON-JACOBI

4.1 TRANSFORMAÇÕES CANÔNICAS E FUNÇÕES GERADORAS

As equações de Lagrange são invariantes sob uma transformação geral de coordenadas, isto é, sua forma permanece a mesma qualquer que seja a escolha das coordenadas generalizadas. (LE MOS, 2007)

No formalismo hamiltoniano as coordenadas e momentos são variáveis independentes, o que nos faz buscar por transformações de coordenadas no espaço de fase que preservem a forma das equações de Hamilton. Isso nos possibilitará escolher variáveis canônicas que simplifiquem a hamiltoniana e, em decorrência, facilitem a resolução das equações de movimento.

Dada as variáveis canônicas $\{q, p\}$, a Hamiltoniana $H(q, p, t)$ e as equações de Hamilton

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (4.1)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \text{ com } i = 1, \dots, n, \quad (4.2)$$

considere as transformações inversíveis

$$Q_i = Q_i(q, p, t) \text{ e } P_i = P_i(q, p, t), \text{ com } i = 1, \dots, n, \quad (4.3)$$

de modo que seja possível definir uma função $K(Q, P, t)$ cujas equações de movimento para as novas variáveis preservem a forma hamiltoniana, ou seja

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i}, \quad (4.4)$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}, \text{ com } i = 1, \dots, n. \quad (4.5)$$

Escrevendo o princípio variacional para ambos os conjuntos de coordenadas temos:

$$\delta \int_{t_2}^{t_1} \left\{ \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) \right\} dt = 0 \quad (4.6)$$

e

$$\delta \int_{t_2}^{t_1} \left\{ \sum_{i=1}^n P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t) \right\} dt = 0. \quad (4.7)$$

Ambos os integrandos podem diferir entre si por uma derivada total em relação ao tempo de uma função $\Phi(q, p, t)$ pois

$$\delta \int_{t_2}^{t_1} \frac{d\Phi}{dt} = \delta \Phi(q(t_2), p(t_2), t_2) - \delta \Phi(q(t_1), p(t_1), t_1) = 0 \quad (4.8)$$

uma vez que $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ e $\delta p(t_1) = \delta p(t_2) = 0$. Deste modo as transformações (4.3) preservam a forma hamiltoniana das equações de movimento se

$$\sum_{i=1}^n (p_i \dot{q}_i - H(q, p, t)) = P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t) dt + \frac{d\Phi}{dt}, \quad (4.9)$$

ou na forma diferencial

$$\sum_{i=1}^n (p_i q_i - P_i Q_i) dt + (K - H) dt = d\Phi. \quad (4.10)$$

Logo uma transformação inversível (4.3) é dita ser canônica se e somente se existirem funções $K(Q, P, t)$ e $\Phi(q, p, t)$ que satisfaçam uma das equações acima.

Definindo a função geradora $F_1(q, Q, t) = \Phi(q, p(q, Q, t), t)$ pode-se observar facilmente que a equação (4.9) é satisfeita se

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad P_i = \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \quad (4.11)$$

e

$$K(Q, P, t) = H(q, p, t) + \frac{\partial F_1}{\partial t}, \quad (4.12)$$

note que dada uma função geradora F_1 uma transformação canônica fica automaticamente definida por (4.11) e a Hamiltoniana transformada é dada por (4.12). Todavia pode não ser vantajoso e até mesmo possível considerar $\{q, Q\}$ variáveis independentes, logo podemos supor funções geradoras que dependam de outras combinações de variáveis. Seja por exemplo uma função geradora do tipo $F_2 = F_2(q, P, t)$, definimos

$$F_2 = \sum_i P_i Q_i + F_1 = \sum_i P_i Q_i(q, P, t) + \Phi(q, p(q, P, t), t), \quad (4.13)$$

note que

$$-\sum_i P_i dQ_i = -d\left(\sum_i P_i Q_i\right) + \sum_i Q_i dP_i. \quad (4.14)$$

Ao se substituir as equações (4.13) e (4.14) na equação (4.10) esta assume a forma

$$\sum_{i=1}^n (p_i dq_i + Q_i dP_i) dt + (K - H) dt = dF_2. \quad (4.15)$$

Novamente podemos observar que a equação acima é satisfeita com

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \quad (4.16)$$

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \text{ e} \quad (4.17)$$

$$K(Q, P, t) = H(q, p, t) + \frac{\partial F_2}{\partial t}. \quad (4.18)$$

4.2 EQUAÇÃO DE HAMILTON-JACOBI

Seja um dado sistema descrito pelo par de variáveis canônicas $\{q, p\}$ e por uma Hamiltoniana $H(q, p, t)$ iremos supor que exista uma função geradora $S(q, P, t)$, também chamada de função principal de Hamilton, capaz de efetuar uma transformação canônica no sistema de modo que a hamiltoniana transformada seja nula, ou seja, $K(Q, P, t) = 0$. Nesse caso as equações de movimento se tornam simplesmente

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0, \quad (4.19)$$

sendo as soluções das equações de movimento trivialmente determinadas como $Q_i = \beta_i$ e $P_i = \alpha_i$ com α_i e β_i constantes. Da equação (4.18) temos

$$K(Q, P, t) = 0 = H(q, p, t) + \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (4.20)$$

Usando a relação de transformação (4.16) temos

$$p_i = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial q_i}, \quad (4.21)$$

de modo que a equação (4.20) se torna

$$H\left(q_1, \dots, q_n, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_n}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (4.22)$$

A equação acima é conhecida como equação de Hamilton-Jacobi, que é uma equação diferencial parcial com $n + 1$ variáveis independentes $q_1, \dots, q_n, t$. A relação de transformação (4.17) também pode ser reescrita em função de S

$$Q_i = \beta_i = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial \alpha_i}. \quad (4.23)$$

Caso a Hamiltoniana não dependa explicitamente do tempo, a função geradora $S(q, P, t)$, pode ser reescrita como

$$S(q, \alpha, t) = W(q, \alpha) - at, \quad (4.24)$$

onde $W(q, \alpha)$ é chamada de função característica de Hamilton. Desta forma, obtém-se a equação de Hamilton-Jacobi independente do tempo:

$$H\left(q_1, \dots, q_n, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_n}\right) + \frac{\partial W}{\partial t} = a. \quad (4.25)$$

É possível mostrar que $W = \int p_i dq_i$, ou seja W equivale a ação abreviada¹. Tomando-se a derivada total no tempo de W temos

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\partial W}{\partial q_i} \dot{q}_i. \quad (4.26)$$

¹ Em algumas literaturas mais antigas é comum chamar a equação (4.29) apenas como ação, embora que já há algum tempo vem se adotando o termo ação para se referir a integral do princípio de Hamilton

Substituindo a equação (4.24) na equação (4.21) temos que

$$p_i = \frac{dW}{dq_i}. \quad (4.27)$$

Procedimento análogo pode ser feito com a equação (4.24) em (4.23) de forma a obtermos

$$Q_i = \frac{dW}{d\alpha_i}. \quad (4.28)$$

Substituindo p_i na equação (4.26) e integrando temos

$$W = \int p_i \dot{q}_i dt = \int p_i dq_i \quad (4.29)$$

como queríamos demonstrar.

4.3 VARIÁVEIS DE ÂNGULO-AÇÃO

Sistemas que realizam movimentos periódicos são de grande interesse na física sendo em muitos desses casos mais interessante se ter informação sobre a frequência do movimento do que sobre o comportamento dinâmico do corpo em si, logo definiremos um novo conjunto de variáveis denominadas de ângulo-ação de modo a encontrarmos as frequências do sistema.

Começamos definindo a variável de ação J_i como

$$J_i = \frac{1}{2\pi} \oint p_i dq_i, \quad (4.30)$$

com a integral sendo tomada por um período de libração ou rotação do sistema. Importante notar que como J é função de α , uma vez que α está associado ao momento, podemos sempre tomar sua inversa de modo que

$$J = J(\alpha) \quad \text{ou} \quad \alpha = \alpha(J), \quad (4.31)$$

logo a função característica de Hamilton $W(q, \alpha)$ pode ser escrita como

$$W = W(q, J). \quad (4.32)$$

Definimos variáveis angulares ϕ_i como sendo as variáveis canônicas conjugadas aos J_i onde

$$\phi_i = \frac{\partial W}{\partial J_i}. \quad (4.33)$$

As equações de movimento para ϕ_i podem ser escritas utilizando-se as equações (4.24) e (4.22) onde

$$\dot{\phi}_i = \frac{\partial K}{\partial J_i} = \frac{\partial H}{\partial J_i} = \omega_i \quad (4.34)$$

4.4 TEORIA QUÂNTICA DE HAMILTON-JACOBI

O formalismo quântico de Hamilton-Jacobi foi proposto por Leacock and Padgett em dois trabalhos, (LEACOCK; PADGETT, 1983) e (LEACOCK; PADGETT, 1987), como sendo uma generalização da teoria de Hamilton-Jacobi clássica com a diferença de que quando aplicada à sistemas físicos periódicos ela nos forneceria não mais a frequência do movimento, como ocorre no caso clássico, mas sim os autovalores de energia do sistema.

Considere um sistema independente do tempo onde uma partícula descreve um movimento unidimensional sobre a influência de um potencial V , na representação de Schrödinger a hamiltoniana fica

$$\hat{H} \equiv H(\hat{x}, \hat{p}) = \hat{p}^2 + V(\hat{x}), \quad (4.35)$$

com $\hat{x} = x$ o operador de posição e $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ o operador de momento conjugado.

Poderíamos buscar um par de transformações canônicas quânticas que levassem o conjunto $\hat{x}, \hat{p}$ a um novo conjunto $\hat{X}, \hat{P}$, porém será melhor se trabalharmos com autovalores ao invés de operadores logo a teoria foi construída para os autovalores x, p, Q, P e E ao invés dos operadores $\hat{x}, \hat{p}, \hat{Q}, \hat{P}$ e $\hat{H}$.

Assim como no caso clássico ainda é possível se realizar uma transformação canônica no sistema de modo que a Hamiltoniana transformada seja nula, isso implica que tanto P como Q sejam constantes (4.19), logo podemos relacionar P com alguma constante α que escolheremos como sendo a energia do sistema de modo que

$$P = P(E) \quad \text{ou} \quad E = E(P). \quad (4.36)$$

Usando os autovalores podemos realizar uma transformação canônica quântica da mesma forma que definimos classicamente em (4.27) e (4.28), de modo que

$$p(x, E) = \frac{\partial}{\partial x} W(x, E(P)) \quad \text{e} \quad (4.37)$$

$$Q(x, E) = \frac{\partial}{\partial P} W(x, E(P)), \quad (4.38)$$

onde $W(x, E(P))$ é chamada de função quântica característica de Hamilton e $p(x, E)$ é chamada de função quântica de momento.

Seja uma função geradora $S(x, E, t)$ a equação quântica de Hamilton-Jacobi é dada por

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial S}{\partial t} + V(x) = 0, \quad (4.39)$$

note que no limite clássico, onde $\hbar \rightarrow 0$, é possível se recuperar a equação de Hamilton-Jacobi clássica em uma dimensão (4.22):

$$H \left(q, \frac{\partial S}{\partial q} \right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0, \quad (4.40)$$

com $H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x)$.

Como visto no capítulo 4.2 caso a Hamiltoniana do sistema não dependa explicitamente do tempo, a função geradora S pode ser reescrita como (4.24). Considere que a constante a seja a energia E do sistema de modo que

$$S(x, E, t) = W(q) - Et, \quad (4.41)$$

que quando substituída na equação (4.39) nos da

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 W(x, E)}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} \left[\frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \right]^2 = [E - V(x)], \quad (4.42)$$

ou, como postulado por (LEACOCK; PADGETT, 1983)

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 W(x, E)}{\partial x^2} + \left[\frac{\partial W(x, E)}{\partial x} \right]^2 = 2m[E - V(x)], \quad (4.43)$$

equação esta a de Hamilton-Jacobi quântica independente do tempo. A mesma pode ser reescrita em função de $p(x, E)$ (4.37) como

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + (p(x, E))^2 = 2m[E - V(x)] \equiv p_c^2(x, E). \quad (4.44)$$

Vale ressaltar que função de momento quântico $p(x, E)$ é totalmente distinta do operador de momento quântico $\hat{p}$. Assumiremos que as condições de contorno aos quais a função clássica de momento p_c está sujeita sejam válidas para a função momento quântico $p(x, E)$, e por uma condição física ditada pelo Princípio da Correspondência devemos impor que

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} p(x, E) \rightarrow p_c(x, E) \quad (4.45)$$

para todo x com E fixo. O princípio da correspondência também pode ser utilizado como uma condição de contorno de um dado problema.

Segundo (BHALLA; KAPOOR; PANIGRAHI, 1997b) $p(x, E)$ se relaciona com a função de onda ψ através de

$$p(x, E) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi(x, E)}{\partial x}, \quad (4.46)$$

onde pode-se perceber que $p(x, E)$ possui pólos em todos os nós da função de onda, pois $\psi = 0$ em um nó.

Suponha que próximo a um ponto a que é um zero da função de onda possamos escrever ψ como

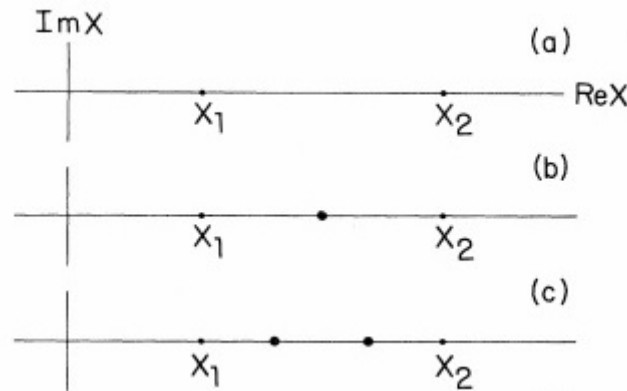
$$\psi = (x - a)\Phi(x), \quad (4.47)$$

expandindo $p(x)$ em uma série de Laurent temos:

$$p \approx \frac{\hbar}{i} \frac{1}{x - a} + \dots \quad (4.48)$$

substituindo (4.48) em (4.44) é possível ver que a equação é satisfeita somente se o pólo que temos for de primeira ordem em a . Via teorema dos resíduos podemos encontrar que a contribuição desse pólo simples será igual a $-i\hbar$. A mesma lógica pode ser aplicada a qualquer zero da função de onda, onde encontraríamos que a contribuição de resíduo seria sempre igual a $-i\hbar$. O número de zeros de uma função de onda é igual ao número quântico principal de um sistema, ou nível de estado excitado de uma partícula, por esse motivo essas singularidades que variam de número em função do estado quântico recebem o nome de **pólos móveis**, é importante ressaltar que esses pólos estão confinados entre os pontos de retorno do sistema definidos como x_a e x_b que são pontos onde $E = V(x)$. Ver Figura 3.

Figura 3 – O plano complexo onde a função clássica de momento (p_c) e a função quântica de momento ($p(x, E)$) estão definidas, sendo ambas as funções limitadas pelos pontos de retorno x_a e x_b , a imagem (a) representa $p(x, E)$ no estado fundamental onde $n = 0$, logo a função não possui nenhum nó e consequentemente nenhum pólo. Em (b) estamos no primeiro estado excitado onde $n = 1$, o pólo é representado por um ponto preto, em (c) estamos no segundo estado excitado onde $n = 2$, logo possuímos dois pólos, vale lembrar que o resíduo do pólos móveis sempre será igual a $-i\hbar$, logo em (b) a soma dos resíduos é igual a $-i\hbar$ já em (c) a soma dos resíduos será igual a $-2i\hbar$ e no n -ésimo estado excitado a soma dos resíduos será igual a $-ni\hbar$



Fonte: Leacock (1983)

Outras singularidades podem surgir em (4.43) devido a forma do potencial $V(x)$, essas singularidades recebem o nome de **pólos fixos**, já que não dependem do nível de energia do sistema, embora seja comum dizermos que os pólos criados pelo potencial são pólos da função $p(x, E)$.

Após definirmos o análogo quântico para o momento, buscamos agora um análogo quântico para a variável de ação (4.30). Classicamente ela é definida como a integral do momento sobre um ciclo, assumiremos que uma integral análoga possa ser construída para o caso quântico com a função de momento quântico agora sendo integrada sobre um dado contorno C no plano complexo que engloba os pontos de retorno de $p_c(x, E)$

$$J = J(E) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_C p(x, E) dx. \quad (4.49)$$

Vale relembrar que $p_c = \sqrt{2m[E - V(x)]}$ possui uma reta de corte no eixo real localizada entre os pontos de retorno x_1 e x_2 , que são valores para os quais p_c^2 é nulo, classicamente selecionamos apenas

um ramo particular da raiz e por isso esses autovalores de energia são incompletos.

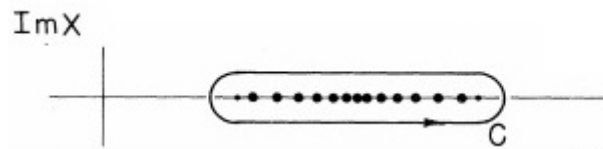
Para que possamos utilizar a variável de ação quântica J primeiro precisamos obter seus autovalores, para isso seria interessante saber o valor da integral de (4.49). Via teorema dos resíduos sabemos que a integral em $p(x, E)$ tem resultado igual a

$$\oint_C p(x)dx = 2\pi i \sum_{j=1}^k \text{Res}.p(x_j), \quad (4.50)$$

Para um dado estado n da função de onda sabemos que o número de pólos da função de onda também será n , logo poderemos concluir que $p(x, E)$ irá possuir n pólos móveis cujo resíduo já sabemos ser igual a $-i\hbar$, logo só precisamos somar as n contribuições de resíduo. Desse modo (4.30) fica

$$J(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_C p(x, E)dx = n\hbar. \quad (4.51)$$

Figura 4 – Representação do contorno C que engloba os pontos de retorno x_a e x_b e todos os pólos móveis do sistema, nesse caso estamos no décimo terceiro estado estado excitado, portanto existem treze pólos localizados sobre o eixo real



Fonte: Leacock (1983)

5 APLICAÇÕES DO FORMALISMO DE HAMILTON-JACOBI

5.1 OSCILADOR HARMÔNICO

A título de exemplificação iremos resolver o oscilador harmônico via formalismo de Hamilton-Jacobi conforme feito em (BHALLA; KAPOOR; PANIGRAHI, 1997b).

O potencial do oscilador é dado por $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, onde m é a massa e ω a frequência angular da partícula, então a equação de Hamilton-Jacobi (4.44) para o potencial do oscilador fica

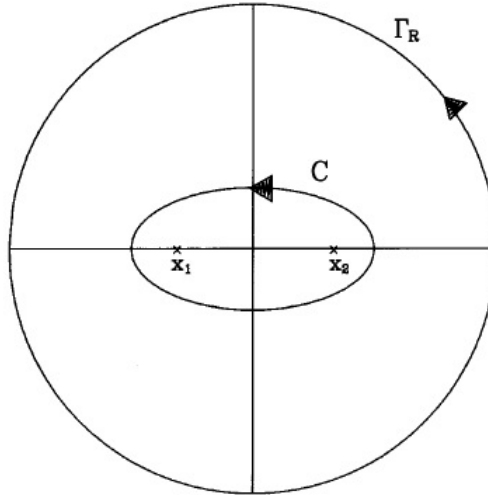
$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + (p(x, E))^2 = 2m \left[E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right] \equiv p_c^2(x, E), \quad (5.1)$$

os pontos de retorno clássicos são dados por $x_1 = -\sqrt{2E/m\omega^2}$ e $x_2 = \sqrt{2E/m\omega^2}$.

Como estamos interessados na quantização dos autovalores de energia do sistema devemos encontrar o valor da variável de ação quântica J (4.51). Para o potencial do oscilador harmônico não existem pólos fixos entre os pontos de retorno, o contorno C em (4.51) deve englobar os dois pontos de retorno bem como todos os pólos móveis do sistema. Embora não existam pólos fixos entre os pontos de retorno o potencial tem um pólo fixo no infinito pois $V(x) \rightarrow \infty$ quando $x \rightarrow \infty$, consequentemente $p(x, E)$ também deve explodir com $x \rightarrow \infty$.

Para podermos analisar um pouco mais o pólo no infinito vamos sugerir um contorno circular Γ_R de raio R , de modo que possamos tomar o limite em que $R \rightarrow \infty$.

Figura 5 – Contorno para o problema do oscilador harmônico



Fonte: Bhalla (1997b)

Como não existem pólos entre a curva C e a curva Γ_R podemos afirmar através do teorema de Cauchy que toda região entre as curvas terá uma integral nula, logo não importa se integrarmos através da curva C ou da Γ_R , já que ambas darão o mesmo resultado, logo

$$I_{\Gamma_R} = J(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma_R} p(x, E) dx. \quad (5.2)$$

Podemos analisar melhor o pólo em $x = \infty$ ao realizarmos a mudança de variável $y = 1/x$ movendo o pólo do infinito para o ponto $y = 0$. Desse modo, a curva Γ_R agora é mapeada numa curva γ_R cuja forma não nos interessa a priori.

As equações de Hamilton-Jacobi e de $J(E)$ podem ser reescritas em termos da variável y como:

$$i\hbar y^2 \frac{\partial \bar{p}(y, E)}{\partial y} + (\bar{p}(y, E))^2 = 2m[E - \frac{m\omega^2}{2y^2}] \equiv \bar{p}_c^2(x, E) \quad (5.3)$$

e

$$I_{\Gamma_R} = J(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_R} f(y, E) dy = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_R} \frac{\bar{p}(y, E)}{y^2} dy, \quad (5.4)$$

com $\bar{p}(y, E) = p(1/x, E)$.

Para se calcular a contribuição do pólo em $y = 0$ realizamos uma expansão de Laurent em torno desse ponto:

$$\bar{p}(y, E) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(y)^n + \sum_{q=1}^{\infty} \frac{b_q}{(y)^q}. \quad (5.5)$$

Substituindo a equação acima em (5.4) é possível se notar que a única contribuição não nula será para $n = 1$, pois $\bar{p}(y, E)/y^2 dy \approx a_1/y$, ou seja a_1 é o resíduo da função quântica de momento. Agora que sabemos que a_1 será o resíduo da função precisamos determinar unicamente seu valor, já que todos os outros coeficientes possuem contribuição nula quando integrados. Substituindo-se (5.5) em (5.3) e comparando os monômios de mesma ordem do lado esquerdo e direito da equação temos o seguinte sistema de equações

$$b_1 = \pm im\omega, \quad 2a_0b_1 = 0, \quad \text{e} \quad i\hbar b_1 + 2a_1b_1 + a_0^2 = 2mE. \quad (5.6)$$

A dualidade de sinal de b_1 pode ser removida usando o Princípio da correspondência (4.45), onde utilizando-se a série de Laurent (5.5) agora para o momento clássico concluímos que $p_c \approx im\omega/y$, logo o sinal escolhido para b_1 deve ser o positivo para que o limite seja respeitado. Definido o sinal de b_1 podemos concluir que $a_0 = 0$ e que $a_1 = (2E - \hbar\omega)/(2i\omega)$.

Como discutido anteriormente, o único termo da expansão que possui uma contribuição não nula é aquele com coeficiente a_1 , logo a função momento quântico $\bar{p}(y, E)$ pode ser escrita como

$$\bar{p}(y, E) = a_1 y = -i \frac{(2E - \hbar\omega)}{(2\omega)} y. \quad (5.7)$$

Substituindo a equação acima em (5.4) temos

$$I_{\Gamma_R} = J(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_R} \frac{a_1}{y} dy, \quad (5.8)$$

e conforme equação (4.50) podemos escrever a integral de uma função $f(y)$ com um único pólo na origem como

$$2\pi i a_1 = \oint_{\gamma_R} f(y) dy. \quad (5.9)$$

Substituindo a equação acima em 5.4 temos

$$J(E) = ia_1 = \frac{(2E - \hbar\omega)}{2\omega} \quad (5.10)$$

usando 4.51 e resolvendo o sistema para E encontramos que

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad (5.11)$$

que é o espectro de energia do oscilador harmônico quântico já bem conhecido e encontrado em várias literaturas.

5.2 SCARF TRIGONOMÉTRICO

Assim como através da regra de quantização apropriada, uma série de trabalhos foram desenvolvidos via FHJQ (BHALLA; KAPOOR; PANIGRAHI, 1997b), (BHALLA; KAPOOR; PANIGRAHI, 1997b), (RANJANI; SANDHYA; KAPOOR, 2015).

Aqui selecionamos o potencial Scarf trigonométrico para que seja possível observar as diferenças entre resolver um problema utilizando-se a regra de quantização apropriada e o formalismo de Hamilton-Jacobi.

O potencial Scarf trigonométrico é de maneira completa dado por

$$V(x) = -A^2 + \left(A^2 + B^2 - \frac{A\alpha\hbar}{\sqrt{2M}}\right) [\sec(\alpha x)]^2 - \left(2A - \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2M}}\right) \sec(\alpha x) \tan(\alpha x). \quad (5.12)$$

Através da mudança de variável $y = e^{i\alpha x}$, e seja $\bar{\alpha} = \frac{\alpha\hbar}{2M}$, o potencial pode ser reescrito como

$$V(y) = -A^2 + \frac{4y^2(A^2 + B^2 - A\bar{\alpha})}{(y^2 + 1)^2} + \frac{2Byi(2A - \bar{\alpha})(y^2 - 1)}{(y^2 + 1)^2}. \quad (5.13)$$

As equações (4.44) e (4.51) podem ser reescritas na forma

$$p^2(y, E) + \hbar\alpha y \frac{\partial p(y, E)}{\partial y} = 2m \left[E + A^2 - \frac{4y^2(A^2 + B^2 - A\bar{\alpha})}{(y^2 + 1)^2} - \frac{2Byi(2A - \bar{\alpha})(y^2 - 1)}{(y^2 + 1)^2} \right] \quad (5.14)$$

e

$$J(E) = \frac{1}{2\pi i\alpha} \int_C dy \frac{p(y, E)}{y} = n\hbar. \quad (5.15)$$

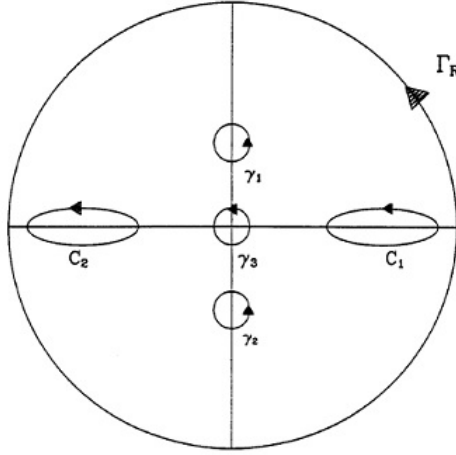
Podemos identificar em (5.14) e (5.15) que $p(y, E)$ possui pólos fixos em $y = 0$, $y = \pm i$ e $y = \infty$.

Seja $I_{\Gamma R}$ a integral através de um contorno circular de raio R , raio este que pode ser estendido até o infinito de forma a abranger todos os outros pólos do problema, temos que

$$I_{\Gamma R} = I_{C1} + I_{C2} + I_{\gamma 1} + I_{\gamma 2} + I_{\gamma 2}, \quad (5.16)$$

onde γ_i com $i = 1, 2, 3$ são contornos que envolvem os pólos fixos em $y = i$, $y = -i$ e $y = 0$ respectivamente, e C_j com $j = 1, 2$ são contornos que englobam os pólos móveis de contribuição igual a $n\hbar$ (4.51).

Figura 6 – Contorno para potencial Scarf trigonométrico



Fonte: Bhalla (1997a)

Precisamos agora encontrar as contribuições de cada um dos pólos do problema, para isso examinamos cada pólo individualmente encontrando seus resíduos.

Começamos examinando o pólo em $y = i$, o primeiro passo é expandirmos $p(y, E)$ em uma série de Laurent em torno de i

$$p(y, E) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (y - i)^n + \sum_{q=1}^{\infty} \frac{b_q}{(y - i)^q}. \quad (5.17)$$

Ao substituir a expansão acima em (5.15) fica claro que o termo de resíduo será o coeficiente b_1 da expansão pois ele nos fornecera um termo do tipo $f(y) \approx 1/(y - 1)$, logo iremos considerar que a expansão de $p(y, E)$ resulta apenas em

$$p(y, E) = \frac{b_1}{(y - i)}, \quad (5.18)$$

desconsiderando os valores dos outros coeficientes da expansão.

Ao substituir (5.18) em (5.14) temos:

$$\frac{b_1^2}{(y - i)^2} - \hbar \alpha y \frac{b_1}{(y - i)^2} = 2m \left[E + A^2 - \frac{4y^2(A^2 + B^2 - A)\bar{\alpha}}{(y^2 + 1)^2} - \frac{2Byi(2A - \bar{\alpha})(y^2 - 1)}{(y^2 + 1)^2} \right]. \quad (5.19)$$

Comparando-se os monômios de mesma ordem do lado esquerdo e direito da equação e logo após tomando $y \rightarrow i$ temos

$$b_1^2 - \hbar \alpha b_1 = -2m[(A^2 + B^2 - A\bar{\alpha}) - B(2A - \bar{\alpha})], \quad (5.20)$$

resolvendo essa equação do segundo grau temos que b_1 pode ser dado por

$$b_1 = \frac{\hbar\alpha \pm i(2\sqrt{2M}(A - B) - \hbar\alpha)}{2}, \quad (5.21)$$

onde a dualidade de sinal será removida mais a frente.

O termo de resíduo em $y = -i$ será dado por $b_1'^1$ pelos mesmos argumentos utilizados para b_1 , logo só ele nos interessa. Utilizando os mesmos procedimentos feitos acima para o pólo em $y = i$ temos que

$$b_1' = \frac{-\hbar\alpha \pm i(2\sqrt{2M}(A - B) - \hbar\alpha)}{2}. \quad (5.22)$$

O resíduo para o pólo em $y = 0$ será dado pelo coeficiente a_0 pois ao substituirmos a série

$$p(y, E) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(y)^n + \sum_{q=1}^{\infty} \frac{b_q}{(y)^q} \quad (5.23)$$

na equação (5.15) temos que a_0 será o coeficiente do termo de ordem y^{-1} , logo ele será o resíduo de modo que repetindo-se os precedimentos utilizados no pólo em $y = i$ concluímos que

$$a_0 = \pm\sqrt{2M(E + A^2)}. \quad (5.24)$$

Para encontramos o resíduo em $y = \infty$ precisamos realizar uma nova mudança de variável onde $y = 1/z$ de modo a se transportar o pólo presente no infinito para a origem do sistema de referência da variável z , logo escrevendo (5.14), (5.15) em função de z , expandindo z em série de Laurent e repetindo os mesmos procedimentos feitos anteriormente para os outros pólos temos que o resíduo $a_0'^2$ é

$$a_0' = \pm\sqrt{2M(E + A^2)}. \quad (5.25)$$

É possível se perceber que em todos os casos há uma dualidade de sinal, para os pólos em $y = \pm i$ devemos utilizar o princípio da correspondência (4.45) como condição de contorno para se determinar os sinais corretos.

Iremos fazer como exemplo o limite para o pólo em $y = i$ mas o limite para $y = -i$ pode ser feito de maneira análoga. Seja

$$p_c^2 = 2m[E - V(y)] = 2m \left[E + A^2 - \frac{4y^2(A^2 + B^2)}{(y^2 + 1)^2} - \frac{2Byi(2A)(y^2 - 1)}{(y^2 + 1)^2} \right], \quad (5.26)$$

iremos expandir p_c em uma série de Laurent em torno de $y = i$, como para p apenas o coeficiente b_1 foi necessário iremos considerar que a expansão seja dada apenas por $p_c = b_1/(y - 1)$ de modo que a

¹ linha é usada apenas para diferenciarmos o resíduo do pólo em $y = i$ do resíduo em $y = -1$, não simbolizando derivada.

² novamente linha é utilizada apenas para diferenciarmos o resíduo do pólo em $y = 0$ do resíduo em $y = \infty$, não simbolizando derivada.

equação acima seja dada por

$$\frac{b_1^2}{(y-1)^2} = 2m \left[E + A^2 - \frac{4y^2(A^2 + B^2)}{(y^2 + 1)^2} - \frac{2Byi(2A)(y^2 - i)}{(y^2 + 1)^2} \right]. \quad (5.27)$$

Comparando-se os monômios de mesma ordem do lado esquerdo e direito da equação e logo após tomando $y \rightarrow i$ temos

$$b_1^2 = -2m[A^2 + B^2 - 2AB], \quad (5.28)$$

de modo que $b_1 = i\sqrt{2m}(A - B)$. É possível ver que o sinal positivo deve ser escolhido em (5.21) para que o princípio da correspondência seja respeitado.

Para os pólos na origem e no infinito a dualidade de sinal persiste mesmo após tomarmos o limite proposto. Em (BHALLA; KAPOOR; PANIGRAHI, 1997b) é proposto um outro possível limite a ser tomado. Seja $\omega(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\psi_0} \frac{\partial \psi_0}{\partial x}$, ao expandirmos uma função $\omega(x)$ no limite em que a energia tende a energia de ponto zero do sistema temos que

$$\lim_{E \rightarrow E_0} p(x, E) = -\sqrt{2m}\omega(x) \quad (5.29)$$

Note que ω pode ser escrita em função de ϕ (2.3) do método PQR, logo tomando-se o mesmo limite em que a energia tende a energia de ponto zero do sistema temos

$$\lim_{E \rightarrow E_0} p(x, E) = -i\sqrt{2M}\phi_0(x) \quad (5.30)$$

sendo possível se utilizar o mesmo ϕ_0 obtido via PQR, lembrando também que no caso do potencial Scarf trigonométrico $E_0 = 0$.

Na variável x , a função ϕ_0 determinada para o potencial Scarf via PQR pode ser escrita como $\phi_0 = -A \tan(\alpha x) + B \sec(\alpha x)$, onde através da mudança de variável $y = e^{i\alpha x}$ temos:

$$\phi_0(y) = -\frac{A(y^2 - 1)}{i(y^2 + 1)} + \frac{2By}{(y^2 + 1)}, \quad (5.31)$$

de modo que

$$\lim_{E \rightarrow E_0} p(y, E) = -\sqrt{2M} \left[\frac{-A(y^2 - 1)}{(y^2 + 1)} + \frac{2Biy}{(y^2 + 1)} \right] \quad (5.32)$$

Para sabermos o sinal correto do resíduo no pólo em $y = 0$ basta substituirmos $E_0 = 0$ na equação acima, de modo que

$$\lim_{E \rightarrow 0} p(y, E) = -\sqrt{2M}A, \quad (5.33)$$

ou seja sinal negativo para a_0 deve ser escolhido. O mesmo procedimento pode ser feito para o resíduo do pólo localizado no infinito, tomando-se o cuidado de mudarmos o limite para a variável z de modo que o sinal positivo é o correto para a'_0 .

Em resumo, agora que todos os sinais foram definidos aplicando o método dos resíduos podemos finalmente escrever as integrais de cada uma das curvas que englobam os pólos da função como

$$\alpha I_{\Gamma R} = \sqrt{2M(E + A^2)}, \quad (5.34)$$

$$\alpha I_{\gamma_1} = \sqrt{2M}(A - B), \quad (5.35)$$

$$\alpha I_{\gamma_2} = \sqrt{2M}(A + B), \quad (5.36)$$

$$\alpha I_{\Gamma 3} = -\sqrt{2M(E + A^2)}, \quad (5.37)$$

$$\alpha I_{C1} = \alpha I_{C2} = n\alpha\pi. \quad (5.38)$$

Substituindo-se o resultado das integrais acima em (5.16) e resolvendo a equação para E temos que

$$E_n = \left(A + \frac{n\pi\alpha\hbar}{2M} \right)^2 - A^2, \quad (5.39)$$

ou seja, o mesmo resultado encontrado em (COOPER; KHARE; SUKHATME, 1995) via métodos de supersimetria, ou via PQR (3.18).

6 POTENCIAIS CONDICIONALMENTE SOLÚVEIS

Do trabalho (DUTRA, 1993) foi proposta uma nova classe de potenciais chamados de condicionalmente solúveis. Para essa nova classe de potenciais é possível, através da imposição de condições sobre os parâmetros do potencial, encontrar suas soluções exatas com os autovalores e autoestados bem definidos. Essa nova classe de potenciais ocupa uma linha intermediária entre os potenciais ditos exatamente solúveis e os chamados quase exatamente solúveis¹.

O tratamento desses potenciais é feito através de uma equação de Schrödinger modificada. Seja $V(x)$ um potencial condicionalmente solúvel, através de uma mudança de variáveis do tipo $x = f(y)$ e de uma redefinição da função de onda usual para $\psi(x, t) = \sqrt{f'(y(x))}\chi(x, t)$ a equação de Schrödinger (2.1) é modificada para χ , tomando a forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} + V_T(y) \right] \chi''(y) = E_T \chi(y), \quad (6.1)$$

onde cada linha representa uma derivada parcial tomada em função de y , E_T é uma constante que faz a função da energia nessa nova equação,

$$V_T(y) - E_T = (f'(y))^2 [V(f(y)) - E] + \Delta V(y) \quad (6.2)$$

e

$$\Delta V(y) = \frac{\hbar^2}{M} \left[-\frac{1}{4} \frac{f'''(y)}{f'(y)} + \frac{3}{8} \left[\frac{f''(y)}{f'(y)} \right]^2 \right]. \quad (6.3)$$

Seja α um número real, transformações do tipo $f(y) = y^\alpha$ sempre irão produzir um termo de ordem y^{-2} em ΔV , devendo esse termo ser removido para que seja possível se reduzir o problema a um potencial do tipo oscilador harmônico na nova variável y .

Para tratarmos um problema que envolva um potencial condicionalmente solúvel através do formalismo de Hamilton-Jacobi nos baseamos no trabalho de (RANJANI et al., 2004) onde através de certas mudanças de variável é possível se modificar um problema que possua pólos no infinito ou na origem do sistema de maneira a eliminá-los do problema.

Essas simplificações podem ser feitas se introduzimos uma variável χ definida pelas equações

$$q = F(y)\Phi \quad \text{e} \quad \chi = \Phi + \frac{1}{2} \frac{d}{dy} \ln[F(y)]. \quad (6.4)$$

Partindo da equação de Hamilton-Jacobi quântica (4.44) realizamos uma mudança geral de coordenadas do tipo $y = f(x)$ e definimos as função q e F como sendo

$$q = q(y) \equiv ip(x(y)) \quad \text{e} \quad F(y) = \frac{df(x)}{dx}, \quad (6.5)$$

¹ potenciais onde se pode obter exatamente um número finito de estados, sendo o restante determinados numericamente

de modo que a equação de Hamilton-Jacobi quântica toma a forma

$$q^2(y) + \hbar F(y) \frac{dq(y)}{dy} + 2m[E - V(y)] = 0. \quad (6.6)$$

Após algumas substituições simples chegamos em uma equação de Hamilton-Jacobi agora para χ dada por

$$\chi^2 + \hbar \frac{d\chi}{dy} + \frac{2m}{F^2}[E - V(y)] - \frac{\hbar^2}{2} \frac{F''}{F} + \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{F'}{F} \right)^2 = 0 \quad (6.7)$$

Segundo (RANJANI et al., 2004) essa equação de Hamilton-Jacobi modificada pode ser usada para qualquer potencial e devemos impor que existam apenas pólos sobre o eixo real para função χ de modo que pólos no infinito e na origem "desapareçam" quando mapearmos $p(x, E)$ em $\chi(y, E)$ através dos passos acima. Dito isso, vale observar que a equação (6.7) possui uma forma muito parecida com (6.1) e (6.3).

No trabalho de (DUTRA, 1993) foram apresentados dois potenciais que se tornam solúveis via fixação de um valor bem específico de um dos parâmetros do potencial, sendo eles

$$V(x) = Ax^{2/3} + \frac{B}{x^{2/3}} + \frac{G_0}{x^2} \quad (6.8)$$

e

$$V(x) = \frac{A}{x} + \frac{B}{x^{1/2}} + \frac{G_0}{x^2}, \quad (6.9)$$

sendo o primeiro escolhido para ser resolvido via FHJQ, o segundo pode ser facilmente resolvido de maneira análoga. Esses potenciais claramente possuem pólos fixos no infinito e na origem sendo interessante utilizarmos as mudanças proposta por (RANJANI et al., 2004).

Partindo da transformação $x = f(y) = y^{3/2}$ podemos escrever a função $F(y)$ e suas derivadas em função de y como

$$F(y) = \frac{2}{3}y^{-1/2}, \quad F'(y) = -\frac{1}{3}y^{-3/2} \quad \text{e} \quad F''(y) = \frac{1}{2}y^{-5/2}. \quad (6.10)$$

O potencial reescrito em função de y fica

$$V(y) = Ay + \frac{B}{y} + \frac{G_0}{y^3}, \quad (6.11)$$

substituindo (6.10) e (6.11) em (6.7) temos

$$\chi^2 + \hbar \frac{d\chi}{dy} + \frac{9m}{2}(Ey - Ay^2 - B) - \frac{72mG_0 - 5\hbar^2}{16y^2} = 0. \quad (6.12)$$

Por se tratar de um potencial condicionalmente solúvel deve-se impor que o termo proporcional a y^{-2} vá a zero, de forma que a condição necessária para que o potencial seja solúvel é que $G_0 =$

$-5\hbar^2/72m$, de maneira que a equação (6.12) é simplificada

$$\chi^2 + \hbar \frac{d\chi}{dy} + \frac{9m}{2}(Ey - Ay^2 - B) = 0. \quad (6.13)$$

Fazendo uma nova mudança de variável onde $y = v + E/2A$, assim como foi feito em (DUTRA, 1993), a equação (6.13) toma a forma

$$\chi^2 + \hbar \frac{d\chi}{dv} + 2m \left[\left(\frac{9}{4} \frac{E^2}{4A} - B \right) - \frac{9}{4} Av^2 \right] = 0. \quad (6.14)$$

Definindo $k = 9A/2$ e $\bar{E} = 9/4(E^2/4A - B)$ temos

$$\chi^2 + \hbar \frac{d\chi}{dv} + 2m \left(\bar{E} - \frac{kv^2}{2} \right) = 0, \quad (6.15)$$

que é a equação de Hamilton-Jacobi para o oscilador harmônico conforme equação (5.1) se assumirmos que $\chi = ip$. Logo é possível se mapear o problema em um oscilador harmônico cujo espectro já é conhecido, k desempenha o papel de constante elástica de modo que a frequência do oscilador pode ser escrita como $\bar{w} = \sqrt{9A/2m}$.

Sabendo que o espectro de energia do oscilador harmônico é dado pela equação (5.11), mas com $w = \bar{w}$ e $E = \bar{E}$ tem-se que

$$\bar{E} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \bar{w}. \quad (6.16)$$

Substituindo os valores de $\bar{w}$ e $\bar{E}$ na equação (6.16) e isolando E podemos obter o espectro de energia do problema inicial como sendo

$$E_n^2 = \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\frac{9A}{2m}} + \frac{9B}{4} \right] \frac{16A}{9}, \quad (6.17)$$

que é o mesmo espectro de energia encontrado em (DUTRA, 1993).

Para se abordar um potencial condicionalmente solúvel utilizando a PQR iremos mostrar que é possível partindo-se da equação da Riccati (2.4) chegar na equação de Hamilton Jacobi para χ (6.7) de modo que os procedimentos após serão idênticos aos feitos via FHJQ.

Primeiramente a função quântica de momento p , definida em (4.46) pode ser escrita em função da fase ϕ definida em (2.3), de modo que

$$p(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi(x, E)}{\partial x} = -i\hbar \phi(x). \quad (6.18)$$

Em função de p a equação de Riccati (2.4) fica

$$p^2 - i \frac{dp}{dx} = E - V(x), \quad (6.19)$$

por simplicidade consideramos $\hbar^2 = 2m = 1$.

Assim como feito via FHJQ realizamos uma mudança geral de coordenadas do tipo $y = f(x)$ e definimos as função q e F como

$$F(y) = \frac{df(x)}{dx} \quad \text{e} \quad q = q(y) \equiv ip(x(y)) = F(y) \frac{d}{dy} \ln \bar{\psi} \quad \text{com} \quad \bar{\psi} = \psi(y), \quad (6.20)$$

de modo que a equação de Riccati fica

$$q^2 + Fq' + [E - V(y)] = 0, \quad (6.21)$$

cada linha acima de uma variável representa uma derivada em função de y .

Se definirmos $\phi(x) = d/dy(\ln \bar{\psi})$ temos que $q = F(y)\phi(y)$ definição essa idêntica àquela feita em (6.4). Em função de ϕ a equação (6.21) fica

$$F^2\phi^2 + F^2\phi' + FF'\phi + [E - V(y)] = 0. \quad (6.22)$$

Vamos supor que possamos escrever $\bar{\psi}$ na forma $\psi = G\varphi$ de modo que

$$\phi = \frac{d}{dy} \ln \bar{\psi} = \frac{d}{dy} \ln G + \frac{d}{dy} \ln \varphi = H + \chi \quad (6.23)$$

onde consideramos

$$H = \frac{d}{dy} \ln G \quad \text{e} \quad \chi = \frac{d}{dy} \ln \varphi, \quad (6.24)$$

Em função das novas variáveis H e χ a equação (6.22) fica

$$F^2(H^2 + \chi^2 + 2H\chi) + F^2(H' + \chi') + FF'(H + \chi) + [E - V(y)] = 0. \quad (6.25)$$

se impomos que $(2HF^2 + FF')\chi = 0$ temos que

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d}{dy} \ln F \quad \text{e portanto} \quad \chi = \phi + \frac{1}{2} \frac{d}{dy} \ln F. \quad (6.26)$$

Por fim reescrevendo a equação (6.25) somente em termos de F temos

$$\chi^2 + \hbar \frac{d\chi}{dy} + \frac{2m}{F^2} [E - V(y)] - \frac{\hbar^2}{2} \frac{F''}{F} + \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{F'}{F} \right)^2 = 0 \quad (6.27)$$

que é exatamente a equação (6.7) de modo que para um potencial condicionalmente solúvel podemos mapear a equação de Riccati na equação de Hamilton-Jacobi para χ , de modo que podemos aplicar os mesmos métodos utilizados acima.

7 CONCLUSÃO

No presente trabalho foram apresentados dois métodos semiclássicos capazes de quantizar sistemas quânticos por completo. O primeiro foi a PQR que se mostrou interessante pois adiciona um termo de correção quântico a QWBS, termo de correção esse que pode ser calculado facilmente quando sabemos a energia de ponto zero do sistema, entretanto uma das motivações que levaram métodos semiclássicos a perderem força foi justamente o fato deles não serem capazes de determinar a energia de ponto zero do sistema, de modo que a utilização da equação de Riccati para se encontrar a energia de ponto zero se tornou uma poderosa ferramenta que a PQR apresenta, entretanto, por não conhecermos uma solução particular da equação de Riccati precisamos recorrer para a tentativa e erro de modo que nem sempre é simples ou até mesmo possível se encontrar um *Ansatz* para ϕ_0 que satisfaça a equação da Riccati.

Outro ponto que pesa contra a PQR é que algumas integrais de quantização se mostram extremamente complexas e nem mesmo programas de integração se mostraram capazes de resolvê-las, logo simplesmente ter a energia de ponto zero do sistema ainda não garante que é possível se encontrar o espectro de energia do sistema.

O segundo método apresentado foi o FHJQ, que por ser uma generalização do formalismo de Hamilton-Jacobi clássico possibilita que problemas com solução clássica possam ser explorados quanticamente pois agora temos uma forma de mapear um caso tratado via formalismo de Hamilton-Jacobi clássico em um caso tratado via FHJQ, embora nenhum caso dessa ligação tenha sido apresentado nessa monografia. Uma das grandes vantagens do FHJQ é a relação entre estados quantizáveis e os pólos que o problema possui, de modo que via teorema dos resíduos não temos o problema de resolver integrais complicados como acontece frequentemente na PQR. Outro fator interessante é o fato da função quântica de momento (p) respeitar o princípio da correspondência, o que mostra claramente que o FHJQ é uma ponte entre a mecânica quântica e a mecânica clássica.

Apesar de resolvermos apenas sistemas unidimensionais, ambos os métodos podem ser generalizados para duas e três dimensões, de modo que teríamos o aparecimento de outros números quânticos. (PERKINS; SMITH, 2018) (SERRANO; DONG, 2013).

Em diversos momentos do trabalho é possível ver que de alguma forma ambos os métodos de quantização estão ligados, embora uma relação clara entre ambos ainda não possa ser feita.

Concluimos dizendo que talvez a maior força e ao mesmo maior defeito de métodos semiclássicos é o fato deles de certa forma ignorarem o princípio da incerteza, o que pode causar um certo desconforto para muitos, mas é inegável que poder trabalhar com um espaço de fase de uma partícula é muito vantajoso e conforme vimos essas abordagens semiclássicas são capazes de apresentar e reproduzir resultados para toda uma gama de potenciais solúveis e condicionalmente solúveis, de modo que talvez seja interessante se aprofundar mais nas suas particularidades.

REFERÊNCIAS

- BAILEY, P. B. Sturm-liouville eigenvalues via a phase function. **SIAM Journal on Applied Mathematics**, Philadelphia, v. 14, n. 2, p. 242–249, 1966.
- BHALLA, R.; KAPOOR, A.; PANIGRAHI, P. Quantum hamilton–jacobi analysis of phases of supersymmetry in quantum mechanics. **International Journal of Modern Physics A**, Singapore, v. 12, n. 10, p. 1875–1894, 1997.
- BHALLA, R.; KAPOOR, A.; PANIGRAHI, P. Quantum hamilton–jacobi formalism and the bound state spectra. **American Journal of Physics**, New York, v. 65, n. 12, p. 1187–1194, 1997.
- COOPER, F.; KHARE, A.; SUKHATME, U. Supersymmetry and quantum mechanics. **Physics Reports**, Amsterdam, v. 251, n. 5-6, p. 267–385, 1995.
- DUTRA, A. de S. Conditionally exactly soluble class of quantum potentials. **Physical Review A**, New York, v. 47, n. 4, p. R2435, 1993.
- EISBERG, R.; RESNICK, R. **Física quântica**. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1979.
- GU, X.-Y.; DONG, S.-H.; MA, Z.-Q. Energy spectra for modified rosen–morse potential solved by the exact quantization rule. **Journal of Physics A: mathematical and theoretical**, Bristol, v. 42, n. 3, p. 035303, 2008.
- KOANTUM. In: **Wikimedia Commons**. Disponível em <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Potential_well.png>. Acesso em 08 nov. 2018.
- LEACOCK, R. A.; PADGETT, M. J. Hamilton-jacobi/action-angle quantum mechanics. **Physical Review D**, New York, v. 28, n. 10, p. 2491, 1983.
- LEACOCK, R. A.; PADGETT, M. J. Quantum action-angle-variable analysis of basic systems. **American Journal of Physics**, New York, v. 55, n. 3, p. 261–264, 1987.
- LEMOS, N. A. **Mecânica analítica**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2007.
- MA, Z.-Q.; XU, B.-W. Quantum correction in exact quantization rules. **Europhysics Letters**, Paris, v. 69, n. 5, p. 685, 2005.
- PERKINS, D. T.; SMITH, R. A. Exactness of bohr–sommerfeld quantisation for two non-central potentials. **Journal of Physics A: mathematical and theoretical**, Bristol, v. 51, n. 45, p. 455305, 2018.
- QIANG, W.-C.; DONG, S.-H. Proper quantization rule. **Europhysics Letters**, Paris, v. 89, n. 1, p. 10003, 2010.
- RANJANI, S. S. et al. Bound state wave functions through the quantum hamilton–jacobi formalism. **Modern Physics Letters A**, Singapore, v. 19, n. 19, p. 1457–1468, 2004.
- RANJANI, S. S.; SANDHYA, R.; KAPOOR, A. Shape invariant rational extensions and potentials related to exceptional polynomials. **International Journal of Modern Physics A**, Singapore, v. 30, n. 24, p. 1550146, 2015.
- SERRANO, F.; GU, X.-Y.; DONG, S.-H. Qiang–dong proper quantization rule and its applications to exactly solvable quantum systems. **Journal of Mathematical Physics**, New York, v. 51, n. 8, p. 082103, 2010.

SERRANO, F. A.; DONG, S.-H. Proper quantization rule approach to three-dimensional quantum dots. **International Journal of Quantum Chemistry**, New York, v. 113, n. 20, p. 2282–2286, 2013.

WENTZEL, G. Eine verallgemeinerung der quantenbedingungen für die zwecke der wellenmechanik. **Zeitschrift für Physik**, Berlin, v. 38, n. 6-7, p. 518–529, 1926.