

UNESP - Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”

DOUGLAS ROBERTO DE MATOS PIMENTEL

**POTENCIAIS SINGULARES NA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER
UNIDIMENSIONAL VIA TRANSFORMADA DE LAPLACE**

Guaratinguetá

2013

DOUGLAS ROBERTO DE MATOS PIMENTEL

POTENCIAIS SINGULARES NA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER
UNIDIMENSIONAL VIA TRANSFORMADA DE LAPLACE

Trabalho de Graduação apresentado 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 Bacharelado.

Orientador: Prof. Dr. Antonio Soares de Castro

Guaratinguetá

2013

P644p Pimentel, Douglas Roberto de Matos
Potenciais singulares na equação de Schrödinger unidimensional via transformada de Laplace / Douglas Roberto de Matos Pimentel – Guaratinguetá : [s.n], 2012.
54 f.: il.
Bibliografia: f. 51-52

Trabalho de Graduação em Bacharelado em Física – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, 2012.
Orientador: Prof. Dr. Antonio Soares de Castro

1. Laplace, Transformadas de 2. Mecânica quântica 3. Osciladores harmônicos I. Título

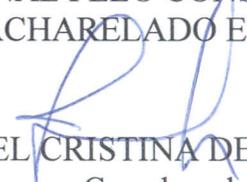
CDU 517.44

**POTENCIAIS SINGULARES NA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER
UNIDIMENSIONAL VIA TRANSFORMADA DE LAPLACE**

DOUGLAS ROBERTO DE MATOS PIMENTEL

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

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


Prof. Dr. ISABEL CRISTINA DE CASTRO MONTEIRO
Coordenador

BANCA EXAMINADORA:


Prof. Dr. ANTONIO SOARES DE CASTRO
Orientador/UNESP-FEG


Prof. Dr. OLIVIA MARIA BERENGUE
UNESP-FEG


Prof. Dr. FERNANDO LUIZ DE CAMPOS CARVALHO
UNESP-FEG

Janeiro de 2013

Publicações

- PIMENTEL, D. R. M. e DE CASTRO, A. S. A Laplace transform approach to the quantum harmonic oscillator. **Eur. J. Phys.**, v. 34, p. 199-204, 2013
- FERRO, M. A. S. ; SABA, M. M. F. ; NACCARATO, K. P. ; YAMASAKI, J. ; PIMENTEL, D. R. M. Lightning risk warnings based on atmospheric electric field measurements in Brazil. **Journal of Aerospace Technology and Management**, v. 3, p. 301-310, 2011.

Bolsas de Estudo

- Bolsista FAPESP com o projeto *Soluções da equação de Schrödinger via transformada de Laplace*, sob a orientação do Prof. Dr. Antonio Soares de Castro, no período de 01 de julho de 2012 a 31 de dezembro de 2012.
- Bolsista CNPq/PIBIC com o projeto *Monitoramento do campo elétrico atmosférico na região de São José dos Campos*, sob a orientação do Dr. Marco Antonio da Silva Ferro, no período de 01 de outubro de 2009 a 30 de junho de 2012.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente aos meus pais, Nilda e Geraldo, pelos ensinamentos dados e pela confiança depositada em minhas decisões.

Aos meus irmãos, Breno e Raíssa, que sempre se fizeram presentes em minha vida.

Ao professor Antonio Soares de Castro, pelo grande incentivo a mim dado.

Aos companheiros de sala e aos moradores e ex-moradores da moradia estudantil pelos anos de faculdade compartilhados.

Também agradeço à FAPESP e ao CNPq pelo apoio financeiro.

PIMENTEL, D. R. M. **Potenciais singulares na equação de Schrödinger unidimensional via transformada de Laplace.** 2013. 54 f. Trabalho de Graduação (Graduação em Bacharelado em Física) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2013.

Resumo

Este trabalho tem como principal objetivo tratar casos unidimensionais conhecidos e interessantes em mecânica quântica por uma abordagem incomum nesta área da física. O método operacional da transformada de Laplace, apesar de utilizado pelo próprio Erwin Schrödinger em 1926 ao tratar da equação radial para o átomo de hidrogênio, se mostrou esquecido por décadas. No entanto, voltou a se mostrar uma poderosa ferramenta da física-matemática aplicada à mecânica quântica, surgindo em diversos trabalhos recentes.

O método se mostra propício na abordagem de casos onde temos potenciais pares, pois isto implica em autofunções com paridade definida, e como o domínio desta transformada se estende de 0 a ∞ , basta encontrarmos a autofunção no semieixo positivo e, com as condições de contorno impostas sobre a autofunção na origem mais a continuidade (descontinuidade) da autofunção e sua derivada, fazemos a extensão ímpar, par ou ambas, para obtermos a autofunção em todo o eixo.

Fatorando o comportamento da autofunção no infinito e na origem, tomamos o devido cuidado com os pontos que poderiam nos trazer algum problema na sequência da resolução, assim conseguimos manipular a equação de Schrödinger independente do tempo de forma a torná-la conveniente à aplicação da transformada de Laplace. O Capítulo 3 mostra a metodologia que deve se seguir para buscarmos as soluções de cada problema.

PALAVRAS-CHAVE: transformada de Laplace, mecânica quântica, oscilador harmônico, potenciais singulares.

PIMENTEL, D. R. M. **Singular potentials in one-dimensional Schrödinger equation via Laplace transform**. 2013. 54 f. Graduate Work (Graduate in Physics) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2013.

Abstract

The present work has as its goal to treat well known and interesting unidimensional cases from quantum mechanics through an unusual approach within this field of physics. The operational method of Laplace transform, in spite of its use by Erwin Schrödinger in 1926 when treating the radial equation for the hydrogen atom, turned out to be forgotten for decades. However, the method has gained attention again for its use as a powerful tool from mathematical physics applied to the quantum mechanics, appearing in recent works.

The method is specially suitable to the approach of cases where we have potential functions with even parity, because this implies in eigenfunctions with defined parity, and since the domain of this transform ranges from 0 to ∞ , it suffices that we find the eigenfunction in the positive semi axis and, with the boundary conditions imposed over the eigenfunction at the origin plus the continuity (discontinuity) of the eigenfunction and its derivative, we make the odd, even or both parity extensions so we can get the eigenfunction along all the axis.

Factoring the eigenfunction behavior at infinity and origin, we take the due care with the points that might bring us problems in the later steps of the solving process, thus we can manipulate the Schrödinger's Equation regardless of time, so that way we make it convenient to the application of Laplace transform. The Chapter 3 shows the methodology that must be followed in order to search for the solutions to each problem.

KEYWORDS: Laplace transform, quantum mechanics, harmonic oscillator, singular potentials.

Lista de Figuras

2.1	Autofunções próximas à origem quando $\beta = -2$ e $\alpha > 0$. Linha contínua para a autofunção no semieixo positivo, linha tracejada para a extensão ímpar e linha pontilhada para a extensão par.	24
2.2	Autofunções próximas à origem quando $\beta = -2$ e $\alpha < 0$. Linha contínua para a autofunção no semieixo positivo, linha tracejada para a extensão ímpar e linha pontilhada para a extensão par.	24
2.3	Linha contínua para autofunção próxima à origem quando $\beta > -1$ e $s = 0$. Linha pontilhada para sua extensão par.	25
2.4	Linha contínua para autofunção próxima à origem quando $\beta > -2$ e $s = 1$. Linha tracejada para sua extensão ímpar.	25
2.5	Linha contínua para autofunção próxima à origem no caso de um potencial regular. Linha tracejada para sua extensão ímpar.	27
2.6	Linha contínua para autofunção próxima à origem no caso de um potencial regular. Linha pontilhada para sua extensão par.	27
4.1	Perfis do potencial singular. Linha tracejada para $\alpha < 0$ e linha contínua para $\alpha > 0$	36
4.2	Autofunções normalizadas no semieixo positivo para o átomo de hidrogênio unidimensional. Linha contínua para o estado fundamental e linha tracejada para o primeiro estado excitado.	38
4.3	Perfis do potencial de Kratzer para α_1 e α_2 com os mesmos sinais. Linha contínua para $\alpha_1 > 0$ e $\alpha_2 \geq 0$ e linha tracejada para $\alpha_1 < 0$ e $\alpha_2 \leq 0$	39
4.4	Perfil do potencial de Kratzer para $\alpha_1 > 0$ e $\alpha_2 < 0$	39
4.5	Perfil do potencial de Kratzer para $\alpha_1 < 0$ e $\alpha_2 > 0$	40
4.6	Soluções normalizadas no semieixo positivo para o estado fundamental do potencial de Kratzer. A linha contínua é solução para $\alpha_2 < 0$ ($\alpha_2 = -0,12\hbar^2/m$) e a linha tracejada é solução para $\alpha_2 > 0$ ($\alpha_2 = 4,38\hbar^2/m$).	42
4.7	Perfil do potencial do oscilador harmônico singular. Ele contém três possibilidades de perfis. A linha tracejada indica que temos $\alpha_2 < 0$, a pontilhada é para $\alpha_2 > 0$ e o caso do oscilador não-singular, $\alpha_2 = 0$, é indicado pela linha contínua. Em todos os casos foi considerado $\alpha_1 = 0$	43

- 4.8 Perfil do potencial de Kratzer com $\alpha_1 > 0$ e $\alpha_2 < 0$ somado ao oscilador harmônico quântico. 44
- 4.9 Perfil do potencial de Kratzer com $\alpha_1 < 0$ e $\alpha_2 > 0$ somado ao oscilador harmônico quântico. 44
- 4.10 Espectro de energia para o problema no semieixo $[0, \infty)$, onde $\epsilon = E_n/\hbar\omega$. Os quadrados são as energias para o oscilador harmônico simples e a linha contínua descreve as energias dos autoestados do potencial singular. 47
- 4.11 Autofunções normalizadas correspondentes ao estado fundamental para o oscilador harmônico singular no semieixo positivo. A linha contínua descreve o comportamento para $\alpha < 0$ ($\alpha = -0,12\hbar^2/m$), a linha tracejada descreve o caso em que $\alpha = 0$ e a linha pontilhada é responsável por descrever a situação de $\alpha > 0$ ($\alpha = 4,38\hbar^2/m$). 47
- 4.12 Espectro de energia para o problema em todo o eixo $(-\infty, \infty)$, onde $\epsilon = E_n/\hbar\omega$. Os quadrados são as energias para as autofunções ímpares do oscilador harmônico simples, os círculos para as pares e a linha contínua descreve as energias das autofunções degeneradas do potencial singular. 48

Sumário

1	Introdução	10
2	Estados ligados na equação de Schrödinger	12
2.1	Estados estacionários	13
2.2	Estados ligados	15
2.3	Comportamento próximo à origem	17
2.3.1	Potencial singular	18
2.3.2	Potencial regular	26
2.4	Comportamento assintótico	28
2.4.1	Potencial singular	28
2.4.2	Potencial regular	28
3	Transformada de Laplace aplicada à equação hipergeométrica confluyente	30
4	Casos específicos	35
4.1	$V(x) = \alpha x ^\beta$	35
4.1.1	Caso $\beta = -2$	37
4.1.2	Caso $\beta = -1$	37
4.2	$V(x) = \frac{\alpha_1}{ x } + \frac{\alpha_2}{x^2}$ ($\alpha_1 \neq 0$)	38
4.3	$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{\alpha_1}{ x } + \frac{\alpha_2}{x^2}$ ($\omega > 0$)	43
4.3.1	Oscilador harmônico quântico ($\alpha_2 = 0$)	46
4.3.2	Oscilador pseudoharmônico quântico ($\alpha_2 \neq 0$)	46
5	Conclusões	49
A	Equação hipergeométrica confluyente	51
	Referências bibliográficas	52

Capítulo 1

Introdução

Um dos principais pilares da física atual é a mecânica quântica, esta área se preocupa em descrever a natureza das interações físicas em escalas microscópicas. Nesta escala ocorrem diversos fenômenos físicos que fogem ao senso comum e percebemos que a já bem conhecida mecânica newtoniana não consegue descrever tais situações. Esta foi a principal motivação para o desenvolvimento da mecânica quântica. Diferentemente de tantas outras teorias físicas, como relatividade geral, mecânica de Newton, eletrodinâmica clássica e outras, não conseguimos associar a mecânica quântica a um nome específico, seu desenvolvimento (que perdura até os dias atuais) é fruto de um árduo e instigante trabalho de muitos renomes da física e ciência em geral. A mecânica quântica surpreende-nos por diversos motivos, seja qual for a forma com a qual se aborde esta teoria, sempre surgem fatos inesperados, seja experimental, filosófica ou matematicamente.

Abordaremos neste trabalho alguns problemas famosos com um tratamento matemático pouco explorado em mecânica quântica e veremos que há grandes vantagens em se abordar de tal maneira.

Para descrevermos uma situação física em mecânica quântica, devemos obter a solução da famosa equação de Schrödinger, a qual será explicitada no próximo capítulo. Buscaremos aqui as soluções dos estados estacionários, ou seja, independentes do tempo. A equação de Schrödinger independente do tempo é uma equação de autovalor, então para resolvê-la completamente devemos encontrar o par característico, autofunção-autovalor, que satisfaça tal equação. Os autovalores encontrados nesta equação são exatamente as energias possíveis do sistema e as autofunções juntamente com a solução temporal da equação de Schrödinger nos fornecem a função de onda da partícula estudada, e é esta função de onda que nos dá todas as informações que caracterizam o sistema físico em questão.

Trabalhando com o método de transformadas integrais espera-se sempre que cheguemos a uma forma transformada mais simples da equação que descreve o problema inicial, sendo assim, o problema é resolvido de uma forma mais fácil e amigável, no entanto, após encontrar a solução da equação transformada, devemos fazer a transformada inversa, e

então sim, encontrar a solução do problema original. Em especial, utilizaremos a transformada de Laplace para abordar tais problemas quânticos. Este método permite chegar a soluções de forma elegante, no entanto, sua transformada inversa pode ser extremamente difícil e até mesmo impossível de se obter, portanto, é algo que requer atenção especial. Já nos primórdios da mecânica quântica, o próprio Erwin Schrödinger, em 1926, se utilizou deste método para tratar a equação radial do átomo de hidrogênio [21], no entanto, esta abordagem se fez esquecida por décadas, porém, nos últimos anos, trabalhos com este enfoque têm surgido. Os potenciais de Coulomb, do oscilador, exponencial e de Yamaguchi, foram abordados por Englefield [10] em 1968. Cerca de vinte anos atrás, o átomo de hidrogênio foi reexaminado via método da transformada de Laplace [22]. O potencial singular $1/x$ [20], o de Morse [4], o harmônico N-dimensional [5], o pseudoharmônico e tipo-Mie [2] e ainda o delta de Dirac [7] também foram abordados recentemente por este método. Tal transformada tem se mostrado uma interessante ferramenta matemática a se utilizar em problemas quânticos com certas características em comum. Usando o método da transformada de Laplace, é mostrado que podemos abordar diferentes situações físicas com uma mesma metodologia e chegamos a resultados consistentes com os resultados obtidos por outros métodos matemáticos, além disto, o método adotado mostra que podemos obter as autoenergias do sistema sem nem mesmo encontrarmos suas autofunções.

Partes deste Trabalho de Conclusão de Curso foram apresentadas em eventos científicos. O trabalho intitulado “Explorando os estados estacionários do oscilador harmônico quântico unidimensional via transformada de Laplace: elegância e simplicidade” foi apresentado no CIC-UNESP-Guaratinguetá, e a versão “A Laplace transform approach to the quantum harmonic oscillator” está publicada no *European Journal of Physics* (veja [19]). No entanto, tal trabalho não teve mérito suficiente para ser apresentado no CIC-UNESP-São Pedro. Os trabalhos “Oscilador harmônico quântico singular unidimensional via transformada de Laplace” e “O oscilador harmônico quântico singular unidimensional revisitado” foram apresentados no XXXV Congresso Paulo Leal Ferreira de Física Teórica e na primeira edição da *Fundamental Physics School*, respectivamente. O trabalho intitulado “O oscilador harmônico singular revisitado” será submetido à publicação na *Revista Brasileira de Ensino de Física*.

Este Trabalho de Conclusão de Curso é o clímax de uma proposta de iniciação científica aprovada pela FAPESP (Processo nº: 2012/07131-0).

Capítulo 2

Estados ligados na equação de Schrödinger

Quando queremos resolver certo problema físico, utilizamos leis físicas, equacionamos nosso problema e buscamos suas soluções. No caso de corpos macroscópicos a baixas velocidades, utilizamos a mecânica newtoniana. Aplicando as leis de Newton, podemos resolver o problema e encontrar a grandeza física de interesse.

Diferentemente da mecânica newtoniana, em quântica, quem faz o papel principal não são as forças, mas sim, os potenciais a que certas partículas estão submetidas. É esta grandeza que caracteriza cada situação. Busca-se sempre a chamada função de onda da partícula, $\Psi(x, t)$, que é responsável por conter todas as informações físicas de um sistema quântico e deve obedecer a famosa equação de Schrödinger [14]:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \mathcal{H}\Psi(x, t), \quad (2.1)$$

onde i é a unidade imaginária, \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , m é a massa da partícula e \mathcal{H} é o operador hamiltoniano dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x, t), \quad (2.2)$$

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

A mecânica quântica deve ser interpretada de forma probabilística [14] (e não determinística, como é a mecânica newtoniana), portanto, a função de onda $\Psi(x, t)$ contém as informações referentes à probabilidade de se encontrar uma partícula em alguma posição, ou à probabilidade da partícula estar com algum momento específico, e etc. Diz-se portanto que $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ é a densidade de probabilidade.

Também temos a exigência de que as funções de onda satisfaçam certas condições. No fundo, pode-se resumir isto dizendo que elas devem pertencer ao espaço de Hilbert com produto interno definido por [14] $\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^*(x, t)\Psi_2(x, t)$. Isto quer dizer que as funções

são elementos de um espaço vetorial e devem ser quadrado-integráveis, ou seja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) dx < \infty. \quad (2.3)$$

Se tomarmos a equação (2.1) e multiplicarmos por $\Psi^*(x, t)$ (onde o asterisco significa tomar seu complexo conjugado), e subtrairmos do complexo conjugado de (2.1) multiplicado por $\Psi(x, t)$, ganharemos a seguinte equação:

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right). \quad (2.4)$$

Agora, com a definição de densidade de probabilidade já comentada anteriormente, juntamente com a definição de corrente de probabilidade (fluxo de probabilidade) dada por:

$$J(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right), \quad (2.5)$$

obtemos uma equação que surge naturalmente em diversas áreas da física como na eletrodinâmica e na dinâmica dos fluidos. Esta é a equação da continuidade, como mostrada abaixo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0. \quad (2.6)$$

Esta equação descreve de que maneira a probabilidade deve se conservar.

A mecânica quântica é uma teoria baseada em postulados. Um deles é a importante exigência de que os operadores correspondentes a grandezas físicas devem ser *hermitianos*, pois os autovalores de um operador destes são sempre reais, e assim, equivalem a quantidades físicas observáveis [14]. A hermiticidade de um certo operador \mathcal{O} é definida por [11],

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^* \mathcal{O} \Psi_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx (\mathcal{O} \Psi_1)^* \Psi_2, \quad (2.7)$$

onde temos que Ψ_1 e Ψ_2 são funções de onda quaisquer. Naturalmente,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^* \mathcal{O} \Psi_2 < \infty, \quad (2.8)$$

ou seja, este produto interno deve ter um valor finito. Esta finitude nos será útil mais adiante, quando tratarmos do comportamento da função de onda na origem.

2.1 Estados estacionários

Como vimos anteriormente, a função de onda depende tanto da posição quanto do tempo, e agora precisamos encontrar um modo de calcularmos a solução de (2.1). Uma gama de sistemas quânticos podem ser descritos por potenciais que são independentes

do tempo, $V(x)$. Isto nos permite aplicar o método de separação de variáveis à equação (2.1). Escrevendo a função de onda como

$$\Psi(x, t) = \psi(x)T(t), \quad (2.9)$$

e substituindo na equação de Schrödinger, obtemos a equação separada abaixo:

$$i\hbar \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V. \quad (2.10)$$

Como conseguimos separar as variáveis, devemos igualar cada lado desta equação a uma constante, a chamada constante de separação. De modo sugestivo escolhe-se a letra E para denotar tal constante.

Primeiramente resolvemos o lado esquerdo de (2.10), ou seja, a parte temporal de nossa solução. Teremos assim:

$$i\hbar \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = E. \quad (2.11)$$

Sua solução é uma exponencial complexa dada por:

$$T(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (2.12)$$

Agora olhamos para o membro direito da equação (2.10). Igualando à constante E , teremos:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \left[k^2 + \frac{2mV(x)}{\hbar^2} \right] \psi(x) = 0, \quad (2.13)$$

onde definimos $k = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$. E esta é a equação com a qual este capítulo está interessado em lidar, a chamada equação de Schrödinger independente do tempo. A partir de agora os problemas serão considerados resolvidos após encontrarmos a solução de (2.13). Os problemas agora serão caracterizados pelos potenciais envolvidos em cada situação física abordada.

As soluções particulares (2.9) são chamadas de estados estacionários. Isto não fica evidente quando olhamos para a solução (2.9), pois nela aparece um termo dependente do tempo, advindo da solução (2.12), no entanto, a grandeza de interesse em mecânica quântica não é a função de onda em si, mas sim a densidade de probabilidade $\rho(x, t)$, que nos dá neste caso:

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \psi^* e^{\frac{iEt}{\hbar}} \psi e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = |\psi(x)|^2. \quad (2.14)$$

Fica claro agora que a densidade de probabilidade independe do tempo, o que justifica chamarmos tais soluções de estados estacionários. Isto mostra que a probabilidade de se encontrar uma partícula em alguma posição não é alterada conforme passa o tempo, esta probabilidade se mantém a mesma sempre.

Pelo fato de ρ não depender mais do tempo quando lidamos com potenciais dependentes somente do espaço, somos agora levados a ver que tipo de consequência isto acarreta, por exemplo, na equação da continuidade. O primeiro termo de (2.6) contém uma derivada temporal da densidade de probabilidade, mas neste caso estacionário temos que a probabilidade se mantém a mesma sempre, pois é independente do tempo, logo, teremos que a equação (2.6) se tornará:

$$\frac{\partial J}{\partial x} = 0 \implies J = \text{uniforme.} \quad (2.15)$$

Esta equação nos mostra a uniformidade da corrente de probabilidade, ou seja, ela é a mesma em todo o espaço. Levando a solução de (2.9) na expressão da corrente de probabilidade, obtemos a seguinte expressão:

$$J = \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right). \quad (2.16)$$

Ou seja, concluímos que para o caso de um sistema quântico onde temos um potencial independente do tempo agindo, a corrente de probabilidade é uniforme e estacionária, significando que ela não muda seu valor ao variarmos o tempo ou o espaço.

2.2 Estados ligados

Especificaremos agora uma classe importante de soluções da equação de Schrödinger: os estados ligados. Estes estados ocorrem quando um potencial tem a capacidade de confinar ou prender uma partícula em uma determinada região do espaço, ou seja, a partícula não tem energia cinética o suficiente para vencer o potencial e escapar da região. Os estados ligados são importantíssimos, pois eles modelam situações interessantes como moléculas, átomos, e etc.

Nestes estados se faz uma importante exigência, a de que a autofunção que descreve a partícula seja nula no infinito, ou seja, que não haja probabilidade de encontrarmos uma partícula em um lugar muito distante, mais precisamente, fora da região compreendida pelo potencial ao qual a partícula está sendo submetida. Isto é resumido pela seguinte expressão matemática:

$$\psi(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0. \quad (2.17)$$

Desta forma, podemos agora falar em normalização da função de onda, pois com seus extremos indo a zero, temos uma área bem definida abaixo da função densidade de probabilidade, $\rho(x)$. Da equação (2.3) vimos a condição de existência da função de onda, ou seja, ela deve ser quadrado-integrável, porém agora, para os estados ligados, uma condição mais restritiva é feita. A integral de $\rho(x)$ em todo espaço não somente deve ser finita

como deve ser igual a 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1. \quad (2.18)$$

Da equação (2.15), vimos que para estados estacionários a corrente J independe da posição. Como agora temos que no infinito $\psi(x)$ deve se anular, esperamos então que em todo o espaço este valor de corrente se mantenha, ou seja:

$$J = 0, \quad \forall x \in (-\infty, \infty). \quad (2.19)$$

Potenciais pares são dotados de uma particularidade que facilita muito a busca por autofunções da equação (2.13). Se fizermos a troca de $x \rightarrow -x$ em (2.13) e usarmos o fato de que $V(x) = V(-x)$, obtemos a seguinte equação:

$$\frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} - \left[k^2 + \frac{2mV(x)}{\hbar^2} \right] \psi(-x) = 0. \quad (2.20)$$

Ou seja, $\psi(x)$ e $\psi(-x)$ satisfazem à mesma equação, nos fornecendo o mesmo autovvalor. Sabe-se também que a combinação linear de duas soluções é também uma solução, portanto, podemos fazer $\psi^+(x) = \psi(x) + \psi(-x)$ e $\psi^-(x) = \psi(x) - \psi(-x)$. Nota-se que fazendo a troca $x \rightarrow -x$, as soluções combinadas nos fornecem:

$$\psi^+(x) = \psi^+(-x) \Rightarrow \psi^+(x) \text{ é par} \quad (2.21)$$

$$\psi^-(x) = -\psi^-(-x) \Rightarrow \psi^-(x) \text{ é ímpar.}$$

Portanto, caso estejamos lidando com potenciais pares, podemos buscar a autofunção no semieixo positivo, e então, a partir de condições de contorno na origem, analisar quais das extensões possíveis no semieixo negativo (par ou ímpar ou ambas) são aceitáveis como solução do problema em todo o eixo. Desta forma, vemos que as autofunções do operador hamiltoniano \mathcal{H} também são autofunções do operador paridade \mathcal{P} :

$$\mathcal{H}\psi_n^{(p)} = E_n^{(p)}\psi_n^{(p)} \quad (2.22)$$

$$\mathcal{P}\psi_n^{(p)} = p\psi_n^{(p)},$$

onde $p = \pm 1$ e n denota quaisquer outros números quânticos. Por causa da paridade, podemos nos concentrar na autofunção no semieixo positivo. Condições de contorno serão impostas sobre a autofunção na origem, em casos que aceitem ambas extensões (par e ímpar), teremos duas autofunções distintas com uma mesma energia ($E_n^{(-)} = E_n^{(+)}$), diz-se então que são estados duplamente degenerados. Problemas unidimensionais com potenciais regulares exibem espectros de estados ligados não-degenerados (ver [15]). No

entanto, ao depararmos com potenciais singulares na origem, tanto as funções pares quanto as ímpares devem satisfazer à condição homogênea de Dirichlet na origem ($\psi(0) = 0$), e cada nível de energia terá uma degenerescência de grau dois. Porém, há mais condições de contorno na origem que devem ser obedecidas, relacionadas às derivadas das autofunções neste ponto, e assim, em alguns casos uma extensão ou outra pode ser excluída, tornando-a não-degenerada.

2.3 Comportamento próximo à origem

Neste trabalho consideraremos potenciais singulares na origem. Devemos agora, analisar o comportamento nas proximidades da origem da autofunção buscada. A autofunção deve ter um bom comportamento quando fizermos $x \rightarrow 0$ e a primeira exigência que é feita é que a autofunção seja contínua. Isto deve ser sempre satisfeito em mecânica quântica [14]. Uma possível descontinuidade de salto de $\psi(x)$ em $x = 0$ conduz a um valor esperado de energia cinética infinito. Isto se dá porque

$$\psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) - \frac{d\psi}{dx} \frac{d\psi^*}{dx}, \quad (2.23)$$

e sua última parcela contribui para o valor esperado da energia cinética na vizinhança da origem com

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \delta^2(x) = \infty. \quad (2.24)$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac.

Já a derivada de $\psi(x)$ admite comportamentos descontínuos. Quando se trata de potenciais que tendem a valores infinitos ao fazermos $x \rightarrow 0$ a derivada de $\psi(x)$ pode ser descontínua, isto fica evidente se tomarmos a equação (2.13) nestas condições. Isolando o termo de derivada segunda e integrando ambos seus lados nas proximidades da origem, obtemos que:

$$\psi'(+\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V(x)\psi(x) dx, \quad (2.25)$$

onde temos que ε é muito pequeno. Desta forma, o valor desta integral nos dá o quão descontínua a derivada de $\psi(x)$ é. Esta integral tem os limites determinados em um intervalo simétrico, portanto, podemos afirmar baseados no valor principal de Cauchy que, mesmo que a integral tenha um comportamento indesejado na origem (singularidade), caso a autofunção seja ímpar, teremos a integral igual a zero, o que implica que ψ' é contínua. Já no caso de autofunção par a descontinuidade só poderá ser determinada com

o conhecimento da forma de $V(x)$ e $\psi(x)$. Podemos resumir isto com a seguinte equação:

$$\psi'(+\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) = \begin{cases} \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V(x)\psi(x) dx & (\text{par}) \\ 0 & (\text{ímpar}). \end{cases} \quad (2.26)$$

Vemos aqui que devemos descrever como o potencial também se comporta quando estamos trabalhando próximo à origem do nosso sistema. Os potenciais pares que trataremos se comportam da seguinte maneira quando $x \rightarrow 0$:

$$V(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow 0} \alpha|x|^\beta, \quad (2.27)$$

onde temos que α e β são parâmetros que descrevem cada caso de interesse. São nestes tipos de potenciais que estaremos focados em trabalhar. Não só o comportamento do potencial, mas também o comportamento da autofunção próximo à origem deve ser conhecido para podermos prosseguir. A forma do potencial descrita por (2.27) mostra dois tipos distintos de comportamento: os potenciais singulares e os regulares. A partir de agora veremos cada caso com mais profundidade.

2.3.1 Potencial singular

Estudaremos primeiramente os potenciais singulares ($\beta < 0$), para isto, voltamos à equação (2.13) e inserimos o potencial descrito na equação (2.27). Ao tomarmos o limite de $x \rightarrow 0$ vemos que o termo do potencial predomina sobre todos os outros, pois temos $\beta < 0$. Desta forma ficamos com a seguinte equação para os potenciais singulares:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \mu|x|^\beta\psi \simeq 0, \quad (2.28)$$

onde temos que $\mu = 2m\alpha/\hbar^2$. É esta equação que esmiuçaremos para retirar todas as informações possíveis e necessárias para descrevermos o comportamento da autofunção ψ nas proximidades da origem quando sujeita a um potencial do tipo considerado.

Como a equação (2.28) descreve o comportamento próximo da origem, podemos utilizar o seguinte *ansatz*:

$$\psi \underset{|x| \rightarrow 0}{\sim} \begin{cases} Ax^{s_+} + Bx^{s_-}, & \text{para } \mu \neq -1/4 \\ Dx^{1/2} + Fx^{1/2} \ln x, & \text{para } \mu = -1/4. \end{cases} \quad (2.29)$$

que nos fornece a seguinte equação algébrica:

$$s_\pm(s_\pm - 1) - \mu x^{\beta+2} = 0. \quad (2.30)$$

A exigência de bom comportamento próximo à origem nos força a fazer $F = 0$ quando $\mu = -1/4$, pois envolve $\ln x$, que vai para infinito quando $x \rightarrow 0$.

Na equação (2.30) vemos uma restrição para os potenciais escritos como na forma sugerida, β não pode tomar qualquer valor se quisermos soluções bem comportadas na origem, pois $\beta \geq -2$. O caso de $\beta > -2$ implica que $s_{\pm} = 0$ ou $s_{\pm} = 1$. O caso de $\beta = -2$ nos dá que:

$$s_{\pm} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + \mu}. \quad (2.31)$$

Além de termos a princípio duas parcelas na autofunção, temos a possibilidade de $s_{\pm} \in \mathbb{R}$ e de $s_{\pm} \in \mathbb{C}$, dependendo do valor de μ , ou seja, depende da intensidade do potencial que estamos lidando. É natural neste tipo de situação utilizarmos algumas ferramentas para eliminar soluções que podem ser desagradáveis no decorrer da busca pelas autofunções, como por exemplo, a normalização, a densidade de corrente e a regularização do potencial em questão.

A autofunção deve ser normalizável, então nas proximidades da origem devemos ter:

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} |\psi|^2 dx < 1 \implies \begin{cases} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} |Ax^{s_+} + Bx^{s_-}|^2 dx < 1 \\ |D|^2 \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} |x| dx < 1, \end{cases} \quad (2.32)$$

com ε muito próximo da origem. Devemos analisar o integrando da primeira integral de (2.32) para verificarmos sua existência. Temos que:

$$|Ax^{s_+} + Bx^{s_-}|^2 = |A|^2 x^{2\text{Re } s_+} + |B|^2 x^{2\text{Re } s_-} + 2 \text{Re}(AB^* x^{s_+ + s_-^*}). \quad (2.33)$$

Das duas primeiras parcelas deste integrando temos que a existência da integral exige que $\text{Re } s_{\pm} > -1/2$. Para s_+ isto não causa problemas, pois sua parte real é maior ou igual a $1/2$, já para s_- vemos uma limitação em seus valores que implica em uma limitação nos valores de μ . Analisando primeiramente o caso de $s_{\pm} \in \mathbb{R}$, o integrando (2.33) nos dá que:

$$\mu \geq -\frac{1}{4} \implies \begin{cases} s_+ > -\frac{1}{2} \\ s_- > -\frac{1}{2}, \mu < \frac{3}{4} \\ s_+ + s_-^* = 1. \end{cases} \quad (2.34)$$

A última parcela de (2.33) é a única que pode dar informação de $s_{\pm} \in \mathbb{C}$. Neste caso, fazendo $\lambda = \sqrt{|1/4 + \mu|}$, podemos escrever:

$$2 \text{Re}(AB^* x^{1+2i\lambda}) = 2x [\text{Re}(AB^*) \cos(2\lambda \ln x) - \text{Re}(AB^*) \text{sen}(2\lambda \ln x)]. \quad (2.35)$$

Este integrando, quando $x \rightarrow 0$, tem um comportamento indesejado, pois os logaritmos nos argumentos dos seno e cosseno tendem ao infinito, implicando em um mal comportamento das funções trigonométricas. Para solucionarmos isto devemos fazer $\text{Re}(AB^*) = 0$, no entanto, a normalização não nos indica de que maneira devemos zerar tal termo, devemos então procurar por outro método para abordar nossa autofunção nas proximidades da origem.

Outra abordagem possível é utilizar a regularização do potencial, que significa torná-lo não-singular na origem, porém de modo que possamos tomar um limite e recuperar a característica singular do potencial e então encontrarmos um termo predominante em (2.29). Como pode ser visto em [15], este método toma que para um certo intervalo $|x| < x_0$ com x_0 muito próximo de zero, o potencial se comporta de forma constante, ou seja:

$$V(x_0) = \alpha|x_0|^{-2} = \text{constante}. \quad (2.36)$$

Assim, ficamos com uma simples equação diferencial para resolver. Fazendo $V_0 = 2mV(x_0)/\hbar^2$, teremos:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = 0 \implies \psi(x) = Ce^{\sqrt{V_0}x} + De^{-\sqrt{V_0}x}. \quad (2.37)$$

Pelo fato de nosso potencial ter se tornado regular, agora podemos fazer a exigência de que ψ e ψ' sejam contínuas em todo o espaço, inclusive em $x = x_0$, então utilizamos agora as autofunções (2.29) e (2.37) no ponto x_0 e conseguimos duas equações, igualando as funções e suas derivadas. Apenas trabalhando com essas duas equações, chegamos a seguinte relação:

$$\frac{A}{B} \propto x_0^{s_- - s_+}. \quad (2.38)$$

Agora podemos tomar o limite de $x_0 \rightarrow 0$ e teremos a situação que procuramos, ou seja, o comportamento de nossa solução nas proximidades da origem. Como $s_- < s_+^1$, o expoente de (2.38) é sempre negativo e o limite tomado nos dá que $A \gg B$, portanto, o comportamento da autofunção próximo à origem é ditado por:

$$\psi(x) \underset{x \rightarrow 0}{\sim} Ax^{s_+}. \quad (2.39)$$

Então, ficamos com o resultado dado por (2.39) com $s_+ = 1/2 + \sqrt{1/4 + \mu}$ com $\mu \geq -1/4$, e nada podemos afirmar sobre o caso com $\mu < -1/4$.

Outra ferramenta que podemos usar é a corrente $J(x)$. Com (2.29) em sua expressão,

¹Aqui devemos ter cuidado com nossa argumentação, pois a afirmação de que $s_- < s_+$ só pode ser feita se considerarmos $s_{\pm} \in \mathbb{R}$ e $s_{\pm} \neq 1/2$. Considerando a possibilidade de $s_{\pm} \in \mathbb{C}$ o método da regularização se mostra ineficiente. Este é um primeiro indício de que devemos procurar por outra abordagem.

obtemos:

$$J(x) = \frac{\hbar}{m} \left\{ |A|^2 x^{2\text{Re } s_+ - 1} \text{Im } s_+ + |B|^2 x^{2\text{Re } s_- - 1} \text{Im } s_- \right. \\ \left. + \text{Im} [AB^* x^{s_+ + s_-^* - 1} (s_-^* - s_+)] \right\}. \quad (2.40)$$

Da análise dos estados ligados, vimos pela equação (2.19) que a corrente deve se anular independentemente da posição. Cada um dos três termos de (2.40) deve ser identicamente a zero. Para os dois primeiros termos zerarem devemos ter

$$\begin{aligned} \text{Re } s_{\pm} &> 1/2 \\ \text{ou} \\ s_{\pm} &\in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Para s_+ vemos que o caso que abrange mais soluções é o de $s_+ \in \mathbb{R}$ (já que inclui $s_+ = 1/2$) e para s_- a única condição possível é a de $s_- \in \mathbb{R}$ (pois de (2.31) vemos que s_- nunca será maior que $1/2$), logo temos que $s_{\pm} \in \mathbb{R}$. Esta condição faz com que a última parcela em (2.40) fique:

$$\text{Im} [AB^* x^{s_+ + s_-^* - 1} (s_-^* - s_+)] = -2 \text{Im} (AB^*) \sqrt{\frac{1}{4} + \mu}. \quad (2.42)$$

Vemos que para fazer (2.42) igual a zero devemos ter $\text{Im}(AB^*) = 0$ ou $\mu = -1/4$, claramente a primeira opção é a mais abrangente e é a que deve ser levada em consideração. Assim, concluímos que o uso da corrente não exclui uma das soluções, e afirma que s_{\pm} deve ser real, implicando em $\mu \geq -1/4$.

O uso da regularização nos dá um termo predominante da autofunção próxima à origem dado em (2.39), mas não elimina valores complexos para s_+ , em contrapartida, o uso da corrente $J(x)$ elimina valores complexos para s_+ , porém leva em consideração ambas parcelas de (2.29) (no caso de $\mu \neq -1/4$) como autofunção aceitável. Utilizando ambos resultados somos levados a considerar a autofunção dada por $\psi(x) \sim Ax^{s_+}$ com:

$$s_+ = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \mu}, \text{ com } \mu \geq -\frac{1}{4} \implies \alpha \geq -\frac{\hbar^2}{8m}. \quad (2.43)$$

A princípio, este resultado nos parece bastante satisfatório, pois seus argumentos são baseados em ferramentas já muito utilizadas, no entanto, podemos usar um argumento mais poderoso e ver que estávamos sendo levados a resultados abrangentes demais. O uso da regularização e da corrente de probabilidade é interessante, porém, podemos nos lembrar de um dos postulados da mecânica quântica e fazer uso dele, e veremos a enorme facilidade que ele nos traz nesta abordagem na origem e, além disto, também nos mostra

que a autofunção aceitável é ainda um pouco mais restritiva do que a encontrada em (2.43).

Os operadores de energia devem ser hermitianos, ou seja, as equações (2.7) e (2.8) devem ser satisfeitas. O operador hamiltoniano se comporta da seguinte maneira próximo à origem:

$$\mathcal{H} = \mathcal{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\mu}{x^2} \right), \quad (2.44)$$

onde \mathcal{K} é o operador energia cinética e V é o operador energia potencial.

Na vizinhança da origem, os termos

$$\begin{aligned} K_{\bar{n}n} &= \psi_{\bar{n}}^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_n \\ V_{\bar{n}n} &= \psi_{\bar{n}}^* \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mu}{x^2} \right) \psi_n \end{aligned} \quad (2.45)$$

ameaçam a hermiticidade dos operadores energia cinética e energia potencial. Para $\mu \neq -1/4$, escrevemos

$$\begin{aligned} K_{\bar{n}n} &\simeq -\frac{\hbar^2 \mu}{2m} \left(A_{\bar{n}}^* A_n x^{2 \operatorname{Re} s_+ - 2} + B_{\bar{n}}^* B_n x^{2 \operatorname{Re} s_- - 2} + \right. \\ &\quad \left. A_{\bar{n}}^* B_n x^{s_+ + s_- - 2} + B_{\bar{n}}^* A_n x^{s_+ + s_- - 2} \right), \end{aligned} \quad (2.46)$$

e para $\mu = -1/4$,

$$K_{\bar{n}n} \simeq -\frac{\hbar^2 \mu}{2m} \frac{1}{x} \left[D_{\bar{n}}^* D_n + F_{\bar{n}}^* F_n \ln^2 x + (D_{\bar{n}}^* F_n + D_n F_{\bar{n}}^*) \ln x \right]. \quad (2.47)$$

Em ambos os casos $K_{\bar{n}n} \simeq -V_{\bar{n}n}$. De (2.46) e (2.47) concluímos que a hermiticidade dos operadores energia cinética e energia potencial é verificada somente se exigirmos $\operatorname{Re} s_{\pm} > 1/2$, ou seja, a autofunção com s_- deve ser descartada e ainda $\mu > -1/4 \implies \alpha > -\hbar^2/8m$.

Vimos então, que apenas exigindo a hermiticidade dos operadores \mathcal{K} e V , devemos ter que s_{\pm} é real e maior que $1/2$, diferentemente do que tínhamos obtido na equação (2.43), portanto escrevemos o comportamento da autofunção nas proximidades da origem (agora omitindo o subscrito $+$ em s) da seguinte maneira:

$$\psi(x) \underset{x \rightarrow 0}{\sim} A x^s, \text{ com } s = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \mu}, \mu > -\frac{1}{4} \implies \alpha > -\frac{\hbar^2}{8m}. \quad (2.48)$$

Vemos que a autofunção obtida admite os seguintes comportamentos:

$$\psi(0_+) = \begin{cases} 0, & \beta > -2 \text{ e } s = 1, \text{ ou } \beta = -2 \\ C, & \beta > -2 \text{ e } s = 0. \end{cases} \quad (2.49)$$

Já para sua derivada, temos que:

$$\psi'(0_+) = \begin{cases} 0, & \beta > -2 \text{ e } s = 0, \text{ ou } \beta = -2 \text{ e } \alpha > 0 \\ C, & \beta > -2 \text{ e } s = 1 \\ \infty, & \beta = -2 \text{ e } \alpha < 0. \end{cases} \quad (2.50)$$

Tomando a equação (2.28) e integrando-a em um intervalo simétrico com relação à origem, podemos analisar a continuidade (ou descontinuidade) da derivada nesta região. Ficamos com a seguinte relação:

$$\psi'(+\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) = \begin{cases} \mu \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} x^{s+\beta} dx & (\text{par}) \\ 0 & (\text{ímpar}). \end{cases} \quad (2.51)$$

com ε sendo muito pequeno. Por simetria, vemos que para o caso ímpar, a derivada sempre será contínua, já para o caso par temos que calcular a integral que aparece em (2.51).

$$\beta = -2 \implies \psi'(+\delta) - \psi'(-\delta) = \begin{cases} 0, & \alpha > 0 \\ \infty, & \alpha < 0 \end{cases} \quad (2.52)$$

$$\beta > -2 \implies \psi'(+\delta) - \psi'(-\delta) = \begin{cases} 0, & \beta > -1 \text{ e } s = 0 \\ \infty, & \beta \leq -1 \text{ e } s = 0. \end{cases} \quad (2.53)$$

O potencial que estamos lidando é par, portanto, como mostrado na equação (2.21), conhecendo a função no semieixo positivo, podemos apenas fazer as extensões ímpares e pares para encontrar a autofunção do problema em todo o eixo. As equações (2.49), (2.50) e (2.51) nos dão as extensões possíveis para cada caso de potencial singular. A seguir ilustramos as funções de onda possíveis:

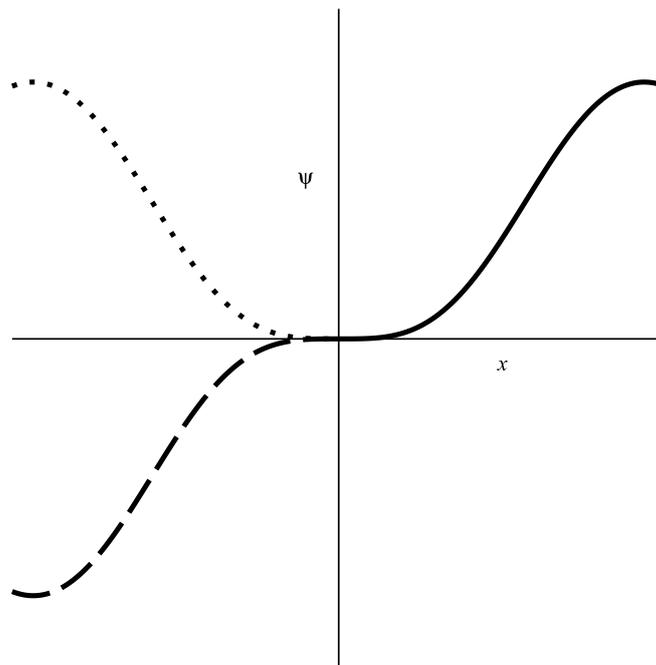


Figura 2.1: Autofunções próximas à origem quando $\beta = -2$ e $\alpha > 0$. Linha contínua para a autofunção no semieixo positivo, linha tracejada para a extensão ímpar e linha pontilhada para a extensão par.

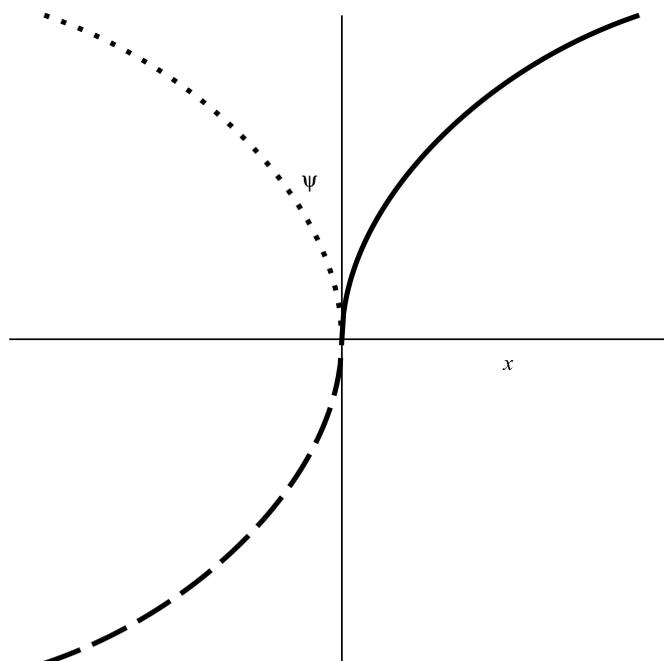


Figura 2.2: Autofunções próximas à origem quando $\beta = -2$ e $\alpha < 0$. Linha contínua para a autofunção no semieixo positivo, linha tracejada para a extensão ímpar e linha pontilhada para a extensão par.

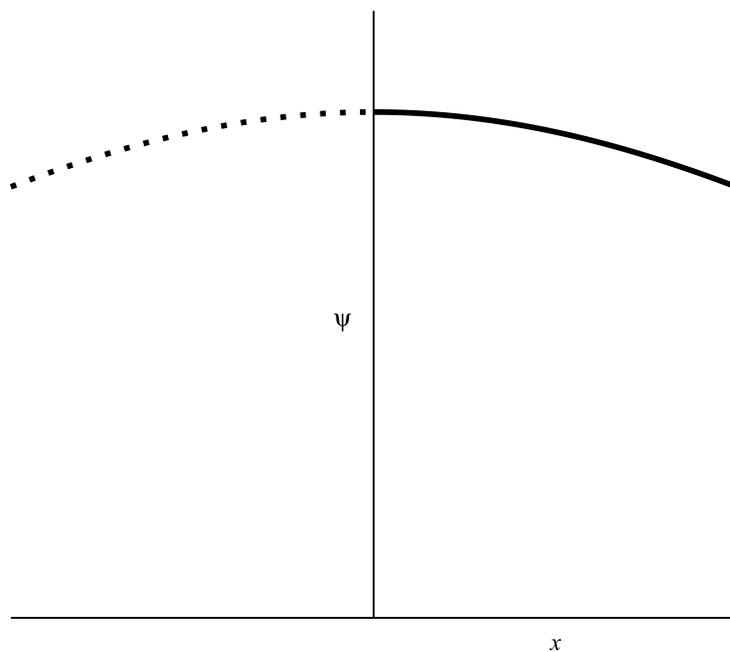


Figura 2.3: Linha contínua para autofunção próxima à origem quando $\beta > -1$ e $s = 0$. Linha pontilhada para sua extensão par.

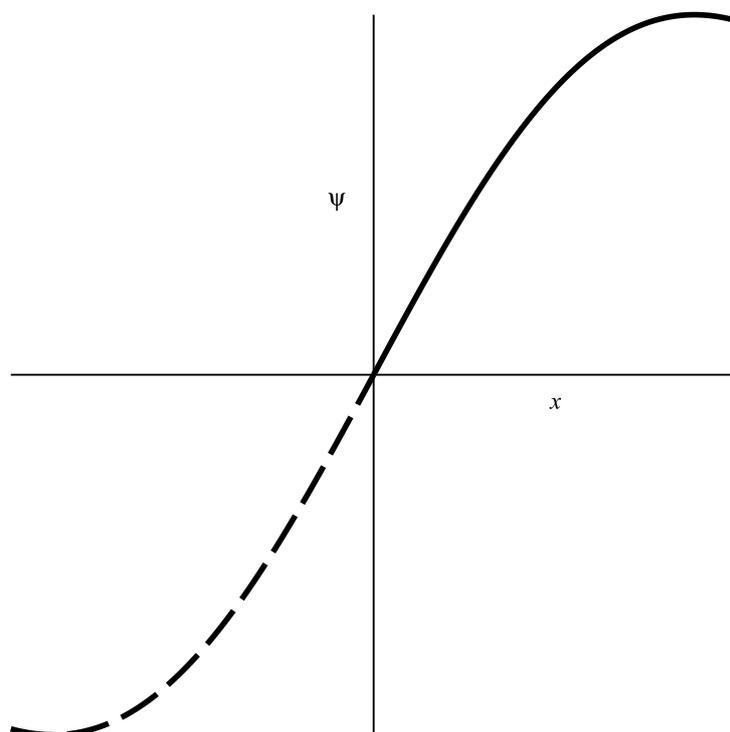


Figura 2.4: Linha contínua para autofunção próxima à origem quando $\beta > -2$ e $s = 1$. Linha tracejada para sua extensão ímpar.

As figuras Fig 2.1 e Fig 2.2 mostram que suas autofunções são duplamente degeneradas. Já as figuras Fig 2.3 e Fig 2.4 mostram autoestados não-degenerados, pois é

impossível ter uma extensão ímpar no caso de $\beta > -1$ e $s = 0$, e uma extensão par no caso de $\beta > -2$ e $s = 1$.

2.3.2 Potencial regular

Fazendo β positivo no potencial estudado, temos o que chamamos de potencial regular. Tomando a equação (2.13), vemos que no limite que estamos estudando ($x \rightarrow 0$) a equação se torna a seguinte:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k^2\psi(x) \simeq 0. \quad (2.54)$$

A equação (2.54) nos fornece a seguinte autofunção nas proximidades da origem:

$$\psi(x) \underset{x \rightarrow 0}{\sim} Cx^s, \text{ com } s = \begin{cases} 0 \\ 1. \end{cases} \quad (2.55)$$

Como era de se esperar, a equação que é regular na origem nos fornece uma solução regular neste ponto.

Podemos proceder como antes e analisar a continuidade de nossa autofunção nas proximidades da origem, com o intuito de descobrir quais são as extensões possíveis de se fazer. Temos para a autofunção que:

$$\psi(0_+) = \begin{cases} 0, \text{ se } s = 1 \\ C, \text{ se } s = 0. \end{cases} \quad (2.56)$$

A derivada de ψ na origem nos dá que:

$$\psi'(0_+) = \begin{cases} C, \text{ se } s = 1 \\ 0, \text{ se } s = 0. \end{cases} \quad (2.57)$$

Por fim, integrando a equação (2.54) em um intervalo simétrico, entre $-\varepsilon$ e ε , como fizemos na seção anterior, chegamos a seguinte igualdade:

$$\psi'(+\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) = k^2 C \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} x^s dx = 0. \quad (2.58)$$

Ambas soluções, tanto para $s = 1$ quanto para $s = 0$, têm derivadas primeiras contínuas. O resultado que obtemos nesta situação de potencial regular é que não há estados

degenerados e podemos resumir com a seguinte equação:

$$\psi(x) = \begin{cases} \text{par se } s = 0 \\ \text{ímpar se } s = 1. \end{cases} \quad (2.59)$$

As figuras a seguir mostram os comportamentos dos resultados obtidos:

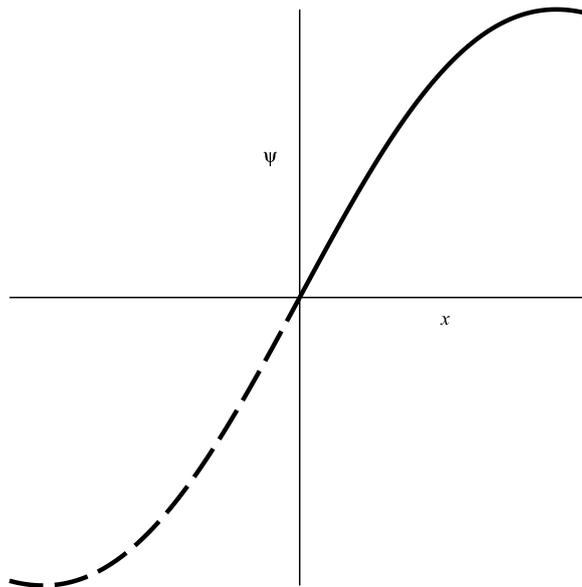


Figura 2.5: Linha contínua para autofunção próxima à origem no caso de um potencial regular. Linha tracejada para sua extensão ímpar.

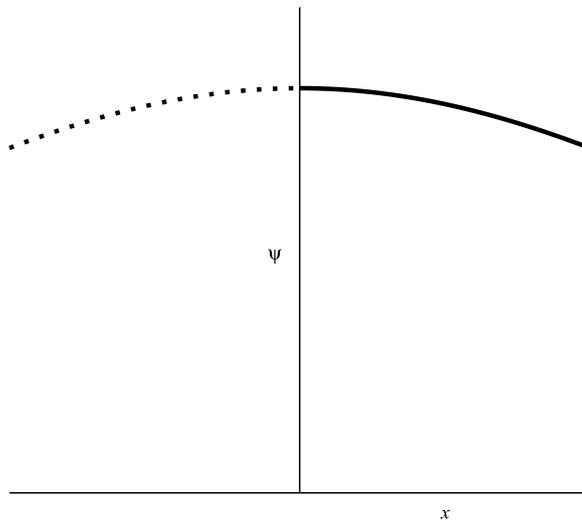


Figura 2.6: Linha contínua para autofunção próxima à origem no caso de um potencial regular. Linha pontilhada para sua extensão par.

2.4 Comportamento assintótico

Primeiramente tivemos o cuidado de tratar os problemas propostos nas vizinhanças da origem, pois ali poderíamos ter alguma surpresa por estarmos levando em conta potenciais com singularidade nesta região, agora iremos tomar o devido cuidado em outro ponto que também merece atenção especial: o infinito.

Os potenciais pares que trataremos se comportam da seguinte maneira quando $|x| \rightarrow \infty$:

$$V(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} \alpha |x|^\beta, \quad (2.60)$$

onde α é uma constante e β pode assumir valores positivos e negativos.

2.4.1 Potencial singular

Na equação de Schrödinger (2.13) tomamos o limite de $x \rightarrow \infty$ e então ficamos com a seguinte equação quando $\beta < 0$:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k^2\psi(x) = 0. \quad (2.61)$$

Como pode ser verificado, a equação (2.61) tem solução geral dada por:

$$\psi(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} Ae^{kx} + Be^{-kx}. \quad (2.62)$$

No entanto, não podemos nos esquecer que em mecânica quântica as funções devem ser bem comportadas no infinito, ou seja, devem ser quadrado-integráveis, indo a zero no infinito. Da solução geral encontrada devemos então fazer a constante $A = 0$, sobrando:

$$\psi \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} Be^{-kx}. \quad (2.63)$$

Além do mais, algo a mais poderia complicar nossa solução. Para $\psi \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$, k não pode ser qualquer um, devemos exigir que ele seja real, senão teríamos uma função periódica, que jamais iria a zero ao fazermos $x \rightarrow \infty$. Portanto, da definição de k dada na equação (2.13), concluímos que se $k \in \mathbb{R}$, então $E < 0$.

2.4.2 Potencial regular

Agora, quando temos um potencial regular ($\beta > 0$), após tomarmos o limite de $x \rightarrow \infty$ na equação de Schrödinger, vemos que nos sobrarão uma equação que se comporta como a que se segue:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \mu|x|^\beta\psi = 0, \quad (2.64)$$

onde $\mu = 2m\alpha/\hbar^2$.

Neste caso teremos uma solução dependente dos parâmetros do potencial. Pode ser verificado que a seguinte solução satisfaz a equação (2.64) e a quadrado-integrabilidade:

$$\psi \underset{|x| \rightarrow \infty}{\sim} C e^{-\frac{\sqrt{|\mu|}}{1+\beta/2} x^{1+\beta/2}}, \quad (2.65)$$

e nada se pode afirmar do sinal das autoenergias.

Antes de partirmos para problemas físicos específicos, trataremos a equação hipergeométrica confluyente, descrita no Apêndice A, através do método operacional da transformada de Laplace, abordada no próximo capítulo. Isto será fundamental na busca pela solução de problemas em quântica. O resultado desta abordagem, juntamente com os comportamentos já descritos serão utilizados para escrevermos a autofunção buscada.

Capítulo 3

Transformada de Laplace aplicada à equação hipergeométrica confluyente

No capítulo seguinte buscaremos soluções da equação de Schrödinger na forma

$$\psi(\xi) = \xi^s e^{-\xi/2} \Phi(\xi), \quad (3.1)$$

com $\xi \geq 0$ e ainda

$$\psi(\xi) \underset{\xi \rightarrow 0}{\sim} A \xi^s \quad (3.2)$$

$$\psi(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\xi/2}. \quad (3.3)$$

de tal forma que $\Phi(\xi)$ é solução da equação hipergeométrica confluyente (Ref. [1], veja também o Apêndice A):

$$\xi \Phi'' + (b - \xi) \Phi' - a \Phi = 0. \quad (3.4)$$

Os comportamentos (3.2) e (3.3) ditam os comportamentos de $\Phi(\xi)$:

$$\Phi(\xi) \underset{\xi \rightarrow 0}{\sim} \text{constante} \quad (3.5)$$

$$\Phi(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\sim} e^{\alpha \xi^\beta}, \quad (3.6)$$

onde $\beta < 1$. Isso ocorre por conta da exigência de bom comportamento no infinito descrito por (3.3). Com (3.6) em (3.1), o expoente da exponencial em (3.1) se tornará $-\xi/2 + \alpha \xi^\beta$, e somente com $\beta < 1$ o expoente se comportará como $-\xi/2$ quando $\xi \rightarrow \infty$.

A definição da transformada de Laplace é dada por [8]:

$$F(s) = \mathcal{L}\{\Phi\} = \int_0^\infty d\xi e^{-s\xi} \Phi(\xi). \quad (3.7)$$

onde $s \in \mathbb{C}$. A existência de sua transformada, como pode ser visto em [8], exige que

$$|\Phi(\xi)| \underset{\xi \rightarrow \infty}{\leq} M e^{c\xi}. \quad (3.8)$$

onde M é uma constante, $c \in \mathbb{R}$ e $\operatorname{Re} s > c$. Sendo isto satisfeito, dizemos que $\Phi(\xi)$ é de ordem exponencial.

Inúmeras propriedades relacionando a transformada com sua função original podem ser obtidas, e aqui utilizaremos em especial as seguintes:

$$\mathcal{L}\{\Phi'\} = sF(s) - \Phi(0) \quad (3.9)$$

$$\mathcal{L}\{\Phi''\} = s^2F(s) - s\Phi(0) - \Phi'(0) \quad (3.10)$$

$$\mathcal{L}\{\xi\Phi\} = -\frac{d\mathcal{L}\{\Phi\}}{ds}. \quad (3.11)$$

Ao aplicarmos a transformada de Laplace na equação (3.4), nos deparamos com situações que envolvem justamente as propriedades explicitadas acima. Após usá-las e rearranjarmos os termos de forma adequada, nos deparamos com a seguinte equação transformada:

$$s(s-1)F'(s) + [(2-b)s + a - 1]F(s) = (1-b)\Phi(0). \quad (3.12)$$

Antes de resolvê-la, compensa fazermos uma análise da equação diferencial obtida. Uma grande vantagem de nossa abordagem através da transformada de Laplace fica evidente ao percebermos que conseguimos transformar uma equação diferencial de segunda ordem em uma equação de primeira ordem. No entanto, não são só vantagens que, a priori, vemos. A equação (3.12) por mais que tenha parecido ser simplificada por sua ordem ter diminuído, em contrapartida se tornou uma equação singular em $s = 0$ e $s = 1$ e também deixou de ser homogênea. Estes pontos, a princípio negativos, poderiam desanimar-nos em continuar nossa abordagem, porém, veremos que o fato de nossa equação ser singular, apenas nos ajuda na busca de sua solução, pois singularidades de uma função transformada estão fortemente relacionadas com comportamentos assintóticos da função original [9], e estes comportamentos já estão bem estabelecidos. Já o fato de termos agora uma equação não-homogênea não trará empecilho algum, pois seguindo a receita de Englefield [10], fica claro que isto não será um estorvo em nossa abordagem.

Para continuarmos, necessitaremos dos dois comportamentos assintóticos [8] que se seguem:

$$F(s) \underset{s \rightarrow s_0}{\sim} \frac{1}{(s-s_0)^\nu} \implies \Phi(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\Gamma(\nu)} \xi^{\nu-1} e^{s_0\xi}, \quad (3.13)$$

onde $\nu > 0$ e s_0 é ponto singular.

$$F(s) \underset{s \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\Gamma(\lambda+1)}{s^{\lambda+1}} \implies \Phi(\xi) \underset{\xi \rightarrow 0}{\sim} \xi^\lambda, \operatorname{Re} \lambda > -1. \quad (3.14)$$

Temos duas singularidades ($s_0 = 0$ e $s_0 = 1$), no entanto, por (3.13), fica claro que $s_0 = 1$ não pode ser utilizado, pois quando $\xi \rightarrow \infty$, $\Phi(\xi)$ tem um comportamento exponencial que deve ser evitado, como mostra o comportamento de (3.5). Logo, utilizando $s_0 = 0$:

$$F(s) \underset{s \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{s^\nu} \implies \Phi(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\sim} \xi^{\nu-1}, \quad (3.15)$$

e novamente voltando ao comportamento ditado por (3.5), agora para origem, temos que (3.14) se torna:

$$F(s) \underset{s \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{s} \implies \Phi(\xi) \underset{\xi \rightarrow 0}{\sim} \text{constante}. \quad (3.16)$$

Uma ótima sugestão de solução para problemas com singularidades de ordem ν na origem é usar o método de Frobenius [3], em que escrevemos uma solução em forma de série da seguinte maneira:

$$F(s) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j s^{j-\nu}. \quad (3.17)$$

De (3.15), sabemos a ordem em que devemos começar nossa série ($-\nu$), e de (3.16) chegamos que a série deve ser truncada em algum $j = n$, na qual a potência de nossa série seja -1 . Assim ficamos com:

$$F(s) = \sum_{j=0}^n c_j s^{j-\nu} = \frac{c_0}{s^\nu} + \dots + \frac{c_n}{s}, \quad (3.18)$$

onde $\nu = n + 1$.

Substituindo $F(s)$ e sua derivada em (3.12), sem resolvê-la ainda, apenas considerando seus termos de mais baixa ordem, obtemos a seguinte equação indicial:

$$\nu = 1 - a. \quad (3.19)$$

Relacionando (3.19) com a igualdade já obtida, $\nu = n + 1$, temos a condição:

$$a = -n. \quad (3.20)$$

Para determinar $F(s)$, devemos agora encontrar os coeficientes c_j de nossa expansão. Prosseguindo com o método de Frobenius, chegamos que

$$c_{j+1} = -c_j \frac{n + b - 1 - j}{j + 1}, \quad j \geq 0. \quad (3.21)$$

Esta relação com a equação transformada nos mostra que o n -ésimo coeficiente pode se

tornar:

$$c_n = \begin{cases} \text{arbitrário, se } b \neq 1 \\ \Phi(0), \text{ se } b = 1. \end{cases} \quad (3.22)$$

Gerando os primeiros termos de (3.21), percebe-se uma relação de recorrência que pode ser obtida através do uso de relações da função gama, $\Gamma(z)$, como pode ser visto em [17]. E então, ficamos com a forma compacta dada por:

$$c_j = c_0 \frac{(-1)^j}{j!} \frac{\Gamma(n+b)}{\Gamma(n+b-j)}, \quad 0 \leq j \leq n. \quad (3.23)$$

Nossa solução transformada é escrita então da seguinte maneira:

$$F(s) = c_0 \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j}{j!} \frac{\Gamma(n+b)}{\Gamma(n+b-j)} s^{j-n-1}. \quad (3.24)$$

Algo que poderia tornar nosso tratamento desagradável é o fato de que devemos ao fim encontrar a transformada inversa de $F(s)$, pois este passo nem sempre é algo simples, e por várias vezes é até mesmo impossível de se obtê-la. Mas a ideia de buscarmos uma solução expandida em série novamente nos traz benefícios, pois a transformada inversa de uma potência qualquer é simples e bem conhecida. Ela é dada por:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s^{\alpha+1}} \right\} = \frac{\xi^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)}. \quad (3.25)$$

Segue de (3.25) que, finalmente, chegamos a solução do nosso problema do modo mais geral possível, e ela é dada como:

$$\Phi(\xi) = c_0 \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j}{j!} \frac{\Gamma(n+b)}{\Gamma(n+b-j)\Gamma(n+1-j)} \xi^{n-j}. \quad (3.26)$$

Porém, não paramos por aí. Fazendo uma inspeção rápida pelas definições de funções especiais encontradas em [1], chegamos a forma reduzida de nossa solução completa:

$$\Phi_n(\xi) = c_0 (-1)^n L_n^{(b-1)}(\xi), \quad \text{com } b > 0, \quad (3.27)$$

onde $L_n^{(\alpha)}(\xi)$ são os polinômios de Laguerre generalizados.

Há dois casos especiais se fizermos $b = 1/2$ e $b = 3/2$, pois os polinômios de Laguerre

se tornam proporcionais aos polinômios de Hermite [1]:

$$L_n^{(-1/2)}(\xi) = \frac{(-1)^n}{n!2^{2n}} H_{2n}(\sqrt{\xi})$$

$$L_n^{(+1/2)}(\xi) = \frac{(-1)^n}{n!2^{2n+1}\sqrt{\xi}} H_{2n+1}(\sqrt{\xi})$$
(3.28)

A partir de agora, depois de termos fatorado as autofunções nas mais gerais formas possíveis em seus comportamentos assintóticos como mostrado no Capítulo 2, e tratado da equação hipergeométrica confluyente conforme este capítulo, estamos finalmente preparados para lidar com problemas específicos e de interesse físico. Até então estávamos lidando com grandezas muito abstratas, somente querendo chegar à natureza matemática dos problemas tratados, isto requer atenção e conhecimento dos argumentos matemáticos utilizados. Estas formas gerais encontradas dos comportamentos de nossas autofunções podem, a princípio, parecerem abragentes demais e às vezes até desnecessárias, no entanto, veremos a facilidade com que ela nos devolve as autofunções ao abordarmos problemas específicos.

Capítulo 4

Casos específicos

Trataremos agora de alguns casos específicos, evidenciando como o tratamento inicial dado é útil para resolvermos com maior facilidade uma gama de problemas físicos. Ficou claro que focamos atenção especial em dois pontos, na origem e no infinito, ou seja, o cuidado foi tomado para podermos abordar problemas no semieixo positivo, o mesmo domínio onde a transformada de Laplace é aplicada [8]. Todo este tratamento foi dado até então, preparando cada situação para que possa admitir a aplicação deste método. No apêndice A temos as características gerais das chamadas equações hipergeométricas confluentes, já no Capítulo 3, o método da transformada de Laplace é definido e aplicado à equação discutida no apêndice A, ou seja, caso chegarmos a equações hipergeométricas confluentes, com funções bem comportadas no semieixo positivo, poderemos recorrer direto ao resultado do Capítulo 3 e obtermos suas soluções particulares.

4.1 $V(x) = \alpha|x|^\beta$

Primeiramente consideraremos o caso em que o potencial é puramente singular na origem ($\beta < 0$). Este tipo de potencial tem os perfis mostrados a seguir:

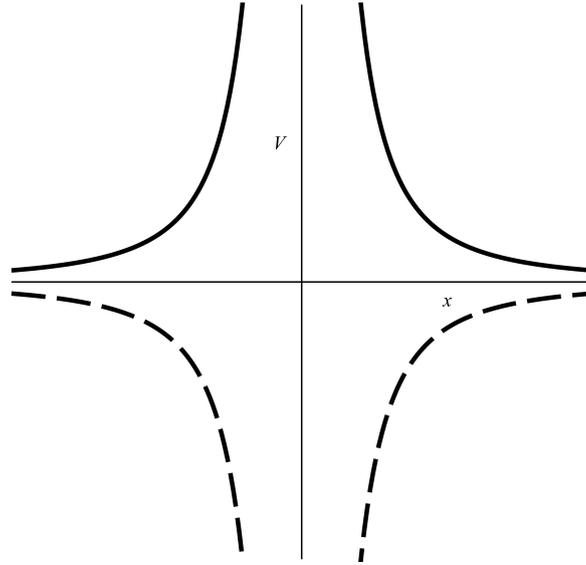


Figura 4.1: Perfis do potencial singular. Linha tracejada para $\alpha < 0$ e linha contínua para $\alpha > 0$.

O potencial para $\alpha > 0$ exige que as energias sejam positivas, no entanto, segundo a equação (2.63), $E < 0$, portanto, não existe solução para $\alpha > 0$.

Temos a seguinte equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - (k^2 + \mu|x|^\beta)\psi(x) = 0. \quad (4.1)$$

O caso singular tem os comportamentos assintóticos ditados pelas equações (2.48) e (2.63), na origem e no infinito, respectivamente. Podemos então, fazendo $\xi = 2kx$, sugerir uma solução fatorada para (4.1) como sendo:

$$\psi(\xi) = \xi^s e^{-\xi/2} \Phi(\xi), \quad (4.2)$$

onde s é dado por (2.48) e por conta de termos fatorado os comportamentos assintóticos da solução, $\Phi(\xi)$ é uma função bem comportada tanto na origem quanto no infinito. Substituindo (4.2) em (4.1), obtemos:

$$\xi\Phi'' + (2s - \xi)\Phi' - \left[s - \frac{s(s-1)}{\xi} + \frac{\mu\xi^{1+\beta}}{(2k)^{2+\beta}} \right] \Phi = 0. \quad (4.3)$$

Os casos a serem tratados estão especificados adiante.

4.1.1 Caso $\beta = -2$

Para o potencial singular com $\beta = -2$, (4.3) se torna:

$$\xi\Phi'' + (2s - \xi)\Phi' - s\Phi = 0. \quad (4.4)$$

Esta é uma equação hipergeométrica confluyente e então recorremos ao resultado do capítulo anterior e vemos que a regularidade de Φ exige que $s = -n$, onde n é um número natural. Porém, $s > 1/2$, o que nos leva a concluir que para $\beta = -2$, não há solução de estados ligados.

4.1.2 Caso $\beta = -1$

Este tipo de potencial agora tratado é conhecido como o problema do átomo de hidrogênio unidimensional. Tal problema é muito discutido e abordado [12] justamente por não haver um consenso sobre a forma de sua solução. Fazendo $\beta = -1$ e $s = 1$ em (4.3), obtemos outra equação hipergeométrica confluyente, dada por:

$$\xi\Phi'' + (2 - \xi)\Phi' - \left(1 + \frac{\mu}{2k}\right)\Phi = 0. \quad (4.5)$$

Neste caso pode-se depreender do Capítulo 3 que a regularidade de Φ exige que a seguinte relação seja satisfeita:

$$1 + \frac{\mu}{2k} = -n. \quad (4.6)$$

É interessante observar que (4.6) exige que μ seja negativo, implicando que α também o seja. Esta última equação é a condição de quantização do nosso problema, pois explicitando k e μ conforme foram definidas inicialmente, obtemos as autoenergias,

$$E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(n+1)^2}. \quad (4.7)$$

Por outro lado, Φ é proporcional aos conhecidos polinômios de Laguerre [17]. Na equação (4.5), o fator que multiplica Φ' contém uma constante e uma variável, a constante é usualmente chamada de b , e como pode ser visto, a autofunção encontrada através da transformada de Laplace apenas depende deste parâmetro. Aqui temos $b = 2$, o que resulta que nossa função buscada deve ser escrita como:

$$\Phi_n(\xi) = N_n L_n^{(1)}(\xi), \quad (4.8)$$

onde N_n é uma constante que pode ser encontrada através da normalização da autofunção. Finalmente, após recorrermos à autofunção encontrada pelo método da transformada de

Laplace, chegamos ao seguinte resultado:

$$\psi_n(\xi) = N_n \xi e^{-\xi/2} L_n^{(1)}(\xi). \quad (4.9)$$

O par exposto por (4.7) e (4.9) constitui a solução do problema definido no intervalo $[0, \infty)$.

A figura adiante mostra como deve se comportar a autofunção obtida em (4.9) já normalizada.

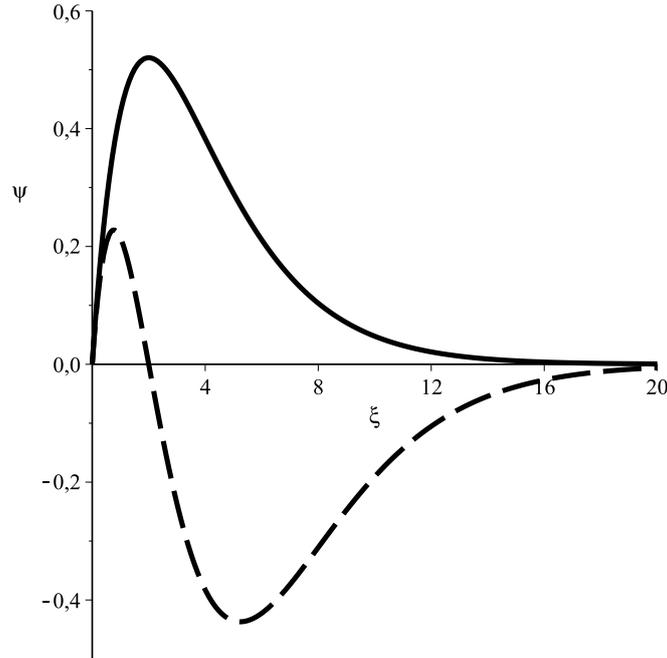


Figura 4.2: *Autofunções normalizadas no semieixo positivo para o átomo de hidrogênio unidimensional. Linha contínua para o estado fundamental e linha tracejada para o primeiro estado excitado.*

A extensão do problema para todo o eixo, isto é $(-\infty, \infty)$, requer como já visto anteriormente que as autofunções tenham paridade ímpar. Este fato chama a atenção, pois como é conhecido [14], um conjunto de funções do espaço de Hilbert que formam uma solução, pode ser usado como base para qualquer outra solução neste mesmo espaço, porém, a base que poderíamos formar com a solução obtida em (4.9) não gera soluções pares.

4.2 $V(x) = \frac{\alpha_1}{|x|} + \frac{\alpha_2}{x^2}$ ($\alpha_1 \neq 0$)

Temos agora um potencial duplamente singular, com um termo inversamente linear e outro inversamente quadrático. Este potencial é conhecido como o potencial de Kratzer, muito utilizado para modelar interações moleculares. Se fizermos $\alpha_1 = 0$, cairemos no

caso tratado na seção anterior, portanto, não consideraremos este caso. As possíveis combinações de sinais nos dão quatro perfis distintos para este potencial. Tais perfis são mostrados nas figuras a seguir:

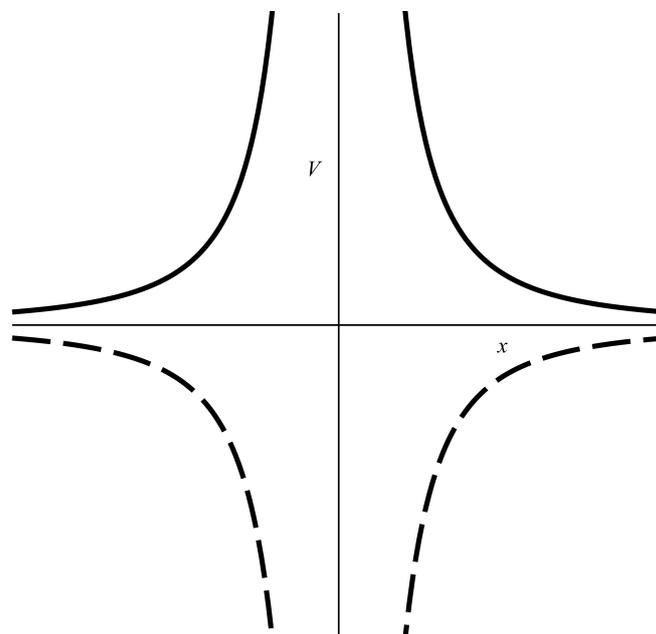


Figura 4.3: *Perfis do potencial de Kratzer para α_1 e α_2 com os mesmos sinais. Linha contínua para $\alpha_1 > 0$ e $\alpha_2 \geq 0$ e linha tracejada para $\alpha_1 < 0$ e $\alpha_2 \leq 0$.*

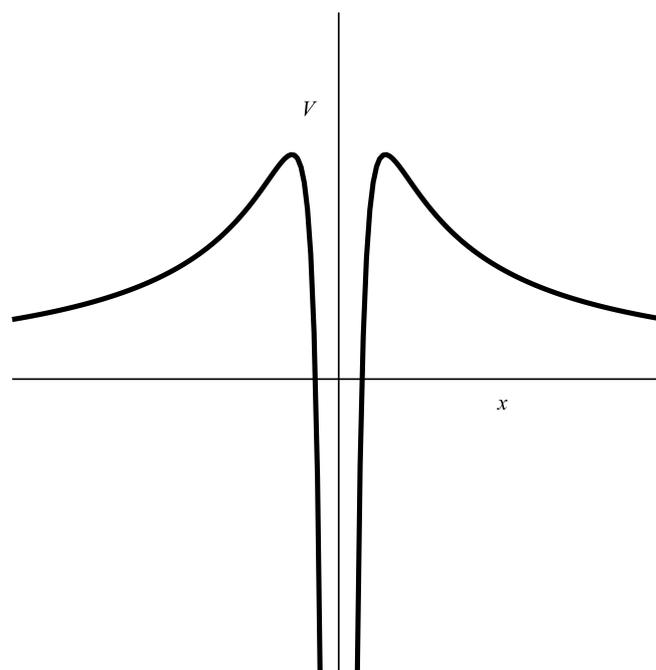


Figura 4.4: *Perfil do potencial de Kratzer para $\alpha_1 > 0$ e $\alpha_2 < 0$.*

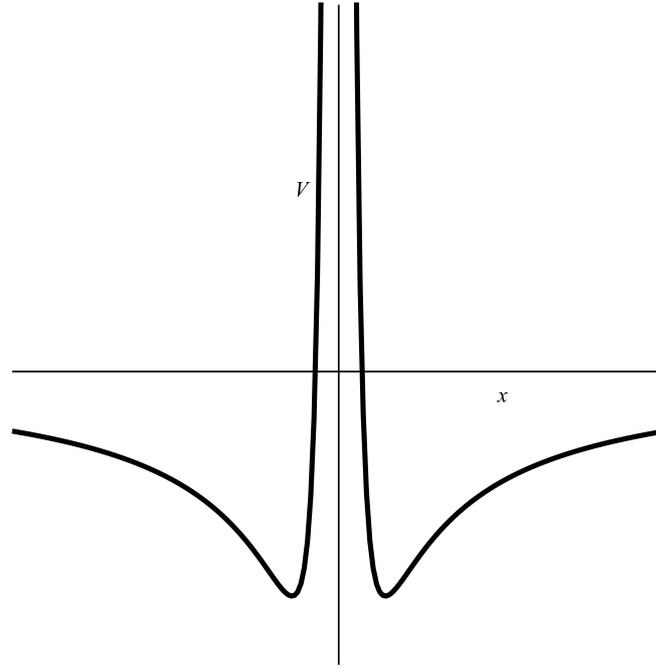


Figura 4.5: Perfil do potencial de Kratzer para $\alpha_1 < 0$ e $\alpha_2 > 0$.

A equação independente do tempo de Schrödinger para este caso toma a seguinte forma:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \left(k^2 + \frac{\mu_1}{|x|} + \frac{\mu_2}{x^2} \right) \psi(x) = 0, \text{ com } \mu_i = \frac{2m\alpha_i}{\hbar^2}, i = 1, 2. \quad (4.10)$$

Assim como no caso anterior, este potencial é singular, e se faz conveniente a mesma mudança de variável $\xi = 2kx$. Isto nos leva a uma equação bem conhecida dos livros-texto de funções, é a chamada equação de Whittaker [1]:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \left(\frac{1}{4} + \frac{\mu_1}{2k\xi} + \frac{\mu_2}{\xi^2} \right) \psi = 0. \quad (4.11)$$

A mudança de variável sugerida, juntamente com os comportamentos assintóticos, nos dá a seguinte autofunção fatorada:

$$\psi(\xi) = \xi^s e^{-\xi/2} \Phi(\xi). \quad (4.12)$$

O caso em que $\mu_2 = 0$ é idêntico ao segundo caso tratado na seção precedente. Já considerando $\mu_2 \neq 0$, o comportamento dominante nas proximidades da origem é ditado pelo termo μ_2/ξ^2 , então teremos:

$$s = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \mu_2} \quad (4.13)$$

Novamente, $\mu_2 > -1/4 \implies \alpha_2 > -\hbar^2/8m$. Com (4.12) em (4.11), obtemos novamente

uma equação hipergeométrica confluyente:

$$\xi\Phi'' + (2s - \xi)\Phi' - \left(s + \frac{\mu_1}{2k}\right)\Phi = 0. \quad (4.14)$$

Já que recaímos em uma equação com esta forma, somos levados a aplicar a transformada de Laplace conforme o Capítulo 3 nos indica. A primeira exigência é que:

$$s + \frac{\mu_1}{2k} = -n, \quad (4.15)$$

que evidentemente é a condição de quantização de nosso problema, nos levando de forma elegante às autoenergias de nosso sistema físico:

$$E_n = -\frac{m\alpha_1^2}{2\hbar^2(n+s)^2}. \quad (4.16)$$

Nota-se através da condição de quantização (4.15) que somente são permitidos $\mu_1 < 0$ ($\alpha_1 < 0$), o que implica que apenas os potenciais das figuras Fig 4.3 e Fig 4.5 são possíveis fisicamente.

Já a solução Φ para (4.14) é dada por:

$$\Phi_n(\xi) = N_n L_n^{(2s-1)}(\xi), \quad (4.17)$$

e finalmente chegamos que a autofunção do problema para o potencial duplamente singular é

$$\psi_n(\xi) = N_n \xi^s e^{-\xi/2} L_n^{(2s-1)}(\xi). \quad (4.18)$$

Esta é a autofunção para o potencial de Kratzer no semieixo positivo. O gráfico a seguir mostra seu comportamento.

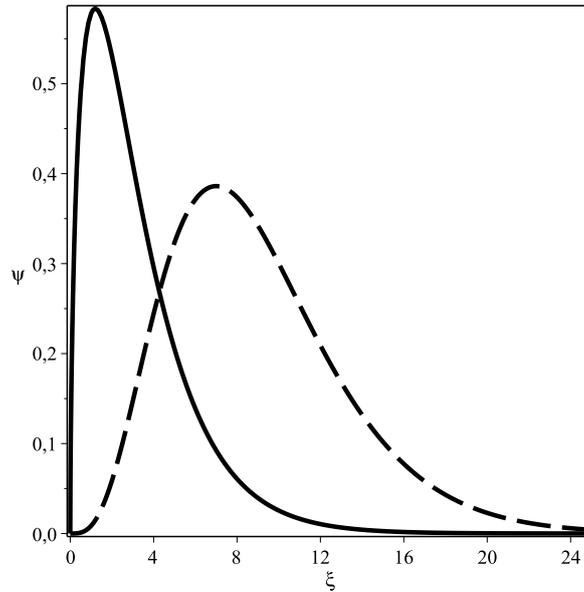


Figura 4.6: Soluções normalizadas no semieixo positivo para o estado fundamental do potencial de Kratzer. A linha contínua é solução para $\alpha_2 < 0$ ($\alpha_2 = -0,12\hbar^2/m$) e a linha tracejada é solução para $\alpha_2 > 0$ ($\alpha_2 = 4,38\hbar^2/m$).

O caso para o domínio definido em todo eixo é duplamente degenerado, aceitando ambas extensões, pares e ímpares, como foi mostrado na subseção 2.3.1.

É interessante e importante ver que se fizermos $\alpha_2 = 0$, temos o caso do átomo de hidrogênio unidimensional visto anteriormente, e é razoável imaginar que este é um caso particular do potencial tratado nesta seção, portanto, esperamos retomar a solução anteriormente encontrada somente fazendo $\alpha_2 = 0$ ($s = 1$) em (4.16) e (4.18). Como pode ser visto, é exatamente isto que ocorre, portanto, vemos que a validade de nossa abordagem se mostra bastante coerente.

Um fenômeno interessante ocorre quando temos um potencial deste agindo sobre uma partícula. Nota-se que existe uma notória transição de fase em $\alpha_2 = 0$. O caso definido no semieixo positivo mostra tal transição através de uma mudança brusca no comportamento da derivada primeira da autofunção na origem. Esta derivada é infinita para $\alpha_2 < 0$, uma constante para $\alpha_2 = 0$ e nula para $\alpha_2 > 0$. O problema definido em todo o eixo deixa evidente esta transição não só por sua derivada primeira na origem, mas também pela degenerescência que é quebrada em $\alpha_2 = 0$. Quando $\alpha_2 < 0$ e $\alpha_2 > 0$, os autoestados são duplamente degenerados, no entanto, para $\alpha_2 = 0$ esta degenerescência desaparece e dá lugar aos autoestados do átomo de hidrogênio unidimensional, que como visto anteriormente, são não-degenerados.

$$4.3 \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{\alpha_1}{|x|} + \frac{\alpha_2}{x^2} \quad (\omega > 0)$$

Este último, e mais geral, potencial a ser tratado pela metodologia proposta neste trabalho contém três termos, um regular e dois singulares. A parte regular é o famoso e importantíssimo potencial do oscilador harmônico simples. Somamos ao potencial regular o potencial de Kratzer e consideramos todas as combinações possíveis. Temos agora cinco perfis de potenciais diferentes, mostrados nas figuras que se seguem:

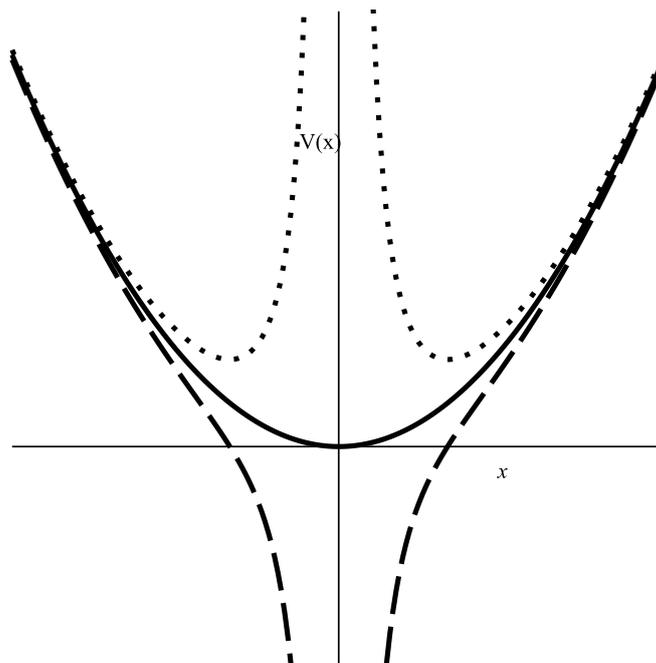


Figura 4.7: Perfil do potencial do oscilador harmônico singular. Ele contém três possibilidades de perfis. A linha tracejada indica que temos $\alpha_2 < 0$, a pontilhada é para $\alpha_2 > 0$ e o caso do oscilador não-singular, $\alpha_2 = 0$, é indicado pela linha contínua. Em todos os casos foi considerado $\alpha_1 = 0$.

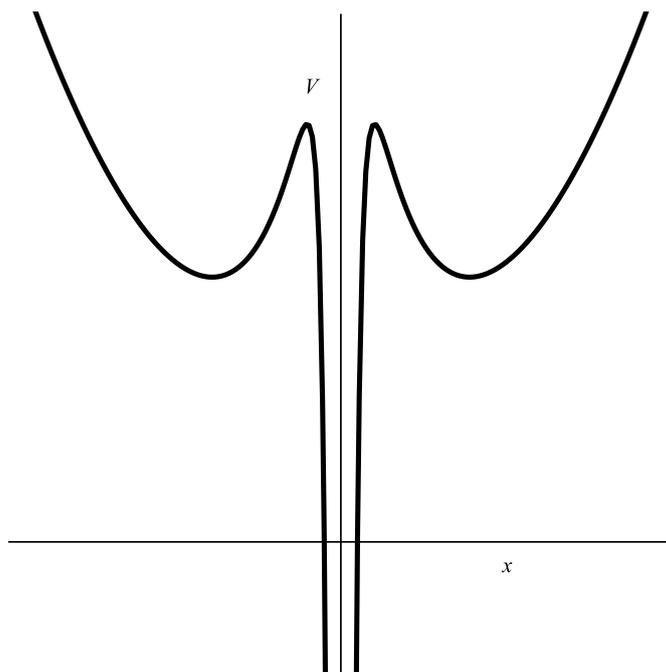


Figura 4.8: Perfil do potencial de Kratzer com $\alpha_1 > 0$ e $\alpha_2 < 0$ somado ao oscilador harmônico quântico.

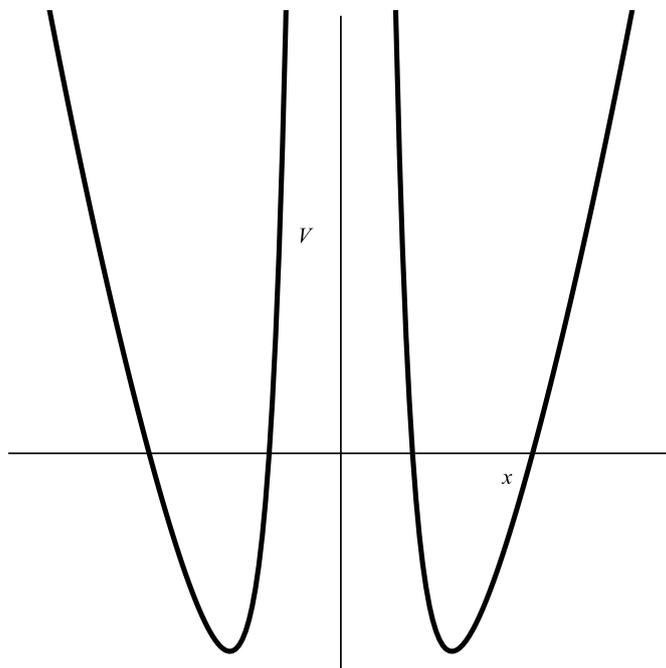


Figura 4.9: Perfil do potencial de Kratzer com $\alpha_1 < 0$ e $\alpha_2 > 0$ somado ao oscilador harmônico quântico.

Neste caso mais geral, temos que nossa equação de Schrödinger independente do

tempo toma a seguinte forma:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \left(k^2 + \gamma^2 x^2 + \frac{\mu_1}{|x|} + \frac{\mu_2}{x^2} \right) \psi(x) = 0, \text{ com } \gamma = \frac{m\omega}{\hbar}. \quad (4.19)$$

Por conta de termos uma parcela com potencial singular, ao fazermos $x \rightarrow \infty$, temos agora um comportamento assintótico diferente dos tratados anteriormente. Utilizando a equação (2.65), vemos que a troca de variáveis conveniente neste caso é fazendo $\xi = \gamma x^2$. Isto implica em uma autofunção fatorada com a forma:

$$\psi_n(\xi) = \xi^{s/2} e^{-\xi/2} \Phi(\xi), \quad (4.20)$$

onde s é dado por (2.48). Substituindo esta autofunção fatorada em (4.19), obtemos a equação que se segue:

$$\xi \Phi'' + \left(s + \frac{1}{2} - \xi \right) \Phi' + \left[\frac{s(s-1) - \mu_2}{4\xi} - \frac{s}{4} - \frac{1}{4} - \frac{k^2}{4\gamma} - \frac{\mu_1}{4\gamma^{1/2}\xi^{1/2}} \right] \Phi = 0. \quad (4.21)$$

Esta equação nos conduzirá aos casos de interesse. Lembrando pela equação (2.31) que $s(s-1) - \mu_2 = 0$ e fazendo $\mu_1 = 0$, obtemos uma equação hipergeométrica confluyente, dada por:

$$\xi \Phi'' + \left(s + \frac{1}{2} - \xi \right) \Phi' - \left(\frac{s}{4} + \frac{1}{4} + \frac{k^2}{4\gamma} \right) \Phi = 0. \quad (4.22)$$

Nossa metodologia, ditada no Capítulo 3, nos dá a seguinte condição de quantização:

$$-n = \frac{s}{4} + \frac{1}{4} + \frac{k^2}{4\gamma}. \quad (4.23)$$

Semelhantemente aos casos anteriores, esta condição nos leva as energias possíveis do sistema físico considerado. Como temos s , n e γ não-negativos, devemos necessariamente ter $k^2 < 0 \implies E > 0$. As energias tomam a seguinte forma:

$$E_n = \hbar\omega \left(2n + s + \frac{1}{2} \right), \quad (4.24)$$

e também teremos que $\Phi(\xi)$ será:

$$\Phi_n(\xi) = N_n L_n^{(s-1/2)}(\xi). \quad (4.25)$$

Temos dois casos particulares a considerar agora. Os casos de $\mu_2 = 0$ e $\mu_2 \neq 0$.

4.3.1 Oscilador harmônico quântico ($\alpha_2 = 0$)

Quando fazemos $\alpha_2 = 0$, estamos tratando o famoso caso do oscilador harmônico quântico. Este potencial é regular, portanto, voltando à seção em que tratamos o potencial regular na origem, mais precisamente analisando a equação (2.55), vemos que na origem temos a solução com $s = 1$ e $s = 0$, ímpar e par, respectivamente. Estes valores para s em (4.25) nos levam a casos especiais dos polinômios de Laguerre em que eles se tornam polinômios de Hermite [1], ou seja,

$$L_n^{(s-1/2)}(\xi) \propto \begin{cases} H_{2n}(\sqrt{\xi}), & \text{se } s = 0 \text{ (par)} \\ \xi^{-1/2} H_{2n+1}(\sqrt{\xi}), & \text{se } s = 1 \text{ (ímpar)}. \end{cases} \quad (4.26)$$

A solução fatorada (4.20) pode ser escrita então da seguinte maneira:

$$\psi_n(\xi) = N_n e^{-\xi/2} H_n(\sqrt{\xi}). \quad (4.27)$$

Já energias para os casos de soluções ímpares ($s = 1$) e soluções pares ($s = 0$) podem ser resumidas, utilizando (4.24), da seguinte maneira:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.28)$$

E como era de se esperar, (4.27) e (4.28) formam exatamente o par característico da solução do oscilador harmônico quântico, como pode ser visto em qualquer livro-texto de mecânica quântica, como [14] ou [11]. Novamente temos de forma evidente que o método da transformada de Laplace é eficiente e nos volta resultados coerentes, justificando assim mais uma vez, sua utilização em problemas de mecânica quântica.

4.3.2 Oscilador pseudoharmônico quântico ($\alpha_2 \neq 0$)

Agora vamos lidar com o problema do oscilador harmônico singular (ou pseudoharmônico). Este potencial é constituído de uma parte regular e outra singular. O termo singular é o dominante quando queremos analisar nas proximidades da origem, e como já foi visto na seção em que tratamos deste caso, deveremos ter pela equação (2.43), $s = 1/2 + \sqrt{1/4 + \mu_2}$, com $\mu_2 > -1/4$. Finalmente teremos, utilizando (4.20), (4.24) e (4.25), que suas energias e suas autofunções são dadas por:

$$E_n = \hbar\omega \left(2n + s + \frac{1}{2} \right) \quad (4.29)$$

$$\psi_n(\xi) = N_n \xi^{s/2} e^{-\xi/2} L_n^{(s-1/2)}(\xi).$$

Este resultado é exatamente o esperado para o potencial harmônico singular. Neste caso, mostramos os espectros de energias para o caso de domínio $[0, \infty)$ e $(-\infty, \infty)$, onde há um ponto interessante a ser discutido. Também mostramos os comportamentos das autofunções, já normalizadas, no semieixo positivo para o estado fundamental:

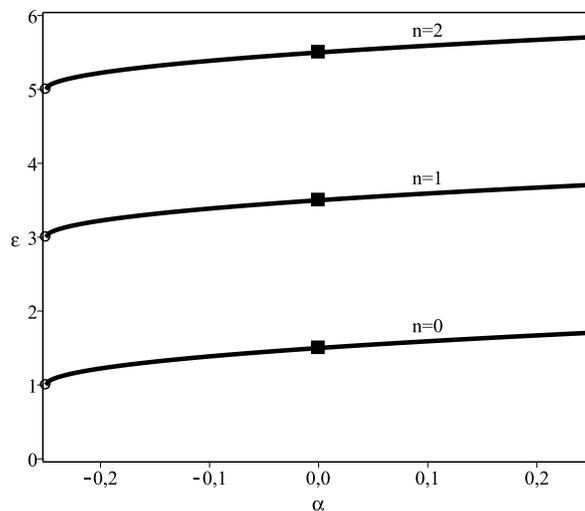


Figura 4.10: Espectro de energia para o problema no semieixo $[0, \infty)$, onde $\epsilon = E_n/\hbar\omega$. Os quadrados são as energias para o oscilador harmônico simples e a linha contínua descreve as energias dos autoestados do potencial singular.

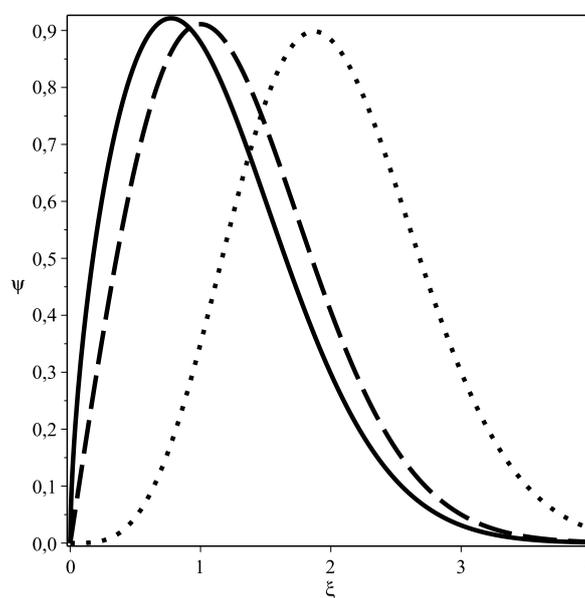


Figura 4.11: Autofunções normalizadas correspondentes ao estado fundamental para o oscilador harmônico singular no semieixo positivo. A linha contínua descreve o comportamento para $\alpha < 0$ ($\alpha = -0,12\hbar^2/m$), a linha tracejada descreve o caso em que $\alpha = 0$ e a linha pontilhada é responsável por descrever a situação de $\alpha > 0$ ($\alpha = 4,38\hbar^2/m$).

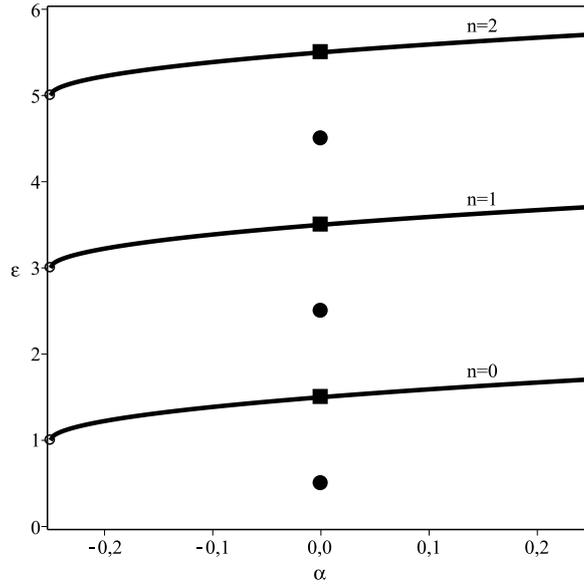


Figura 4.12: Espectro de energia para o problema em todo o eixo $(-\infty, \infty)$, onde $\epsilon = E_n/\hbar\omega$. Os quadrados são as energias para as autofunções ímpares do oscilador harmônico simples, os círculos para as pares e a linha contínua descreve as energias das autofunções degeneradas do potencial singular.

Em ambos os casos de domínio, percebemos, ao contrário do que afirmam a literatura [18], que existem autofunções para partículas submetidas a um potencial atrativo, desde que ele tenha $\alpha > \alpha_{\text{crítico}} = -\hbar^2/8m$. A Fig. 4.11 mostra o comportamento da autofunção quando aumenta-se a intensidade do potencial. Ela tende a se afastar da origem, assim, não há queda para o centro. Ao passarmos do domínio $[0, \infty)$ para $(-\infty, \infty)$ vemos que em seu espectro surgem níveis intrusos de energia em $\alpha = 0$, correspondentes às autofunções pares dos polinômios de Hermite. Neste ponto há uma quebra na degenerescência que existe para $\alpha < 0$ e $\alpha > 0$. A princípio isto pode sugerir o uso do método perturbativo no oscilador harmônico como o fez Lathouwers [16], para se obter as soluções do problema, porém, uma análise mais cuidadosa mostra que isto não pode ser feito, pois há uma variação brusca (mesma característica de transição de fase encontrada no problema para o potencial de Kratzer) da primeira derivada das autofunções na origem ($\alpha = 0 \implies d\psi/dx|_{x=0} = C$, $\alpha < 0 \implies d\psi/dx|_{x=0} = \infty$ e $\alpha > 0 \implies d\psi/dx|_{x=0} = 0$), e isto não é aceitável, tendo em vista que pequenas perturbações no potencial devem causar pequenas perturbações nas autofunções e nas autoenergias.

Capítulo 5

Conclusões

O intuito deste trabalho é o de aplicar uma forma alternativa de resolução de problemas em mecânica quântica. As transformadas integrais são ferramentas matemáticas utilizadas como método de resolução de equações diferenciais em diversas áreas da física, no entanto, não é comum seu uso em mecânica quântica.

Utilizamos aqui o método da transformada de Laplace. Seu uso pode ser feito quando tratamos de potenciais pares, pois como pode ser visto no Capítulo 3, o domínio desta transformada é o semieixo positivo. O fato de termos um potencial par, leva-nos a buscar soluções com paridade definida, como foi mostrado na seção 2.2, portanto, podemos apenas resolver nosso problema no semieixo positivo e depois de analisar a continuidade (descontinuidade) da função e sua derivada na origem, fazemos a extensão par, ímpar ou ambas, dependendo das condições de contorno ali impostas.

A metodologia apresentada é útil para estes casos em que o potencial é par e também para os quais conseguimos transformar a equação inicial em uma hipergeométrica confluyente. O tratamento dado no Capítulo 3 se refere a estes casos, e vemos que isto sendo satisfeito, a condição de quantização é obtida de forma simples e direta, apenas relacionando um parâmetro da equação hipergeométrica confluyente com números naturais. A transformada utilizada também mostra vantagens ao tratarmos a autofunção buscada, pois o truncamento das séries usadas para encontrar a solução, surge de forma natural, apenas usando relações de comportamentos assintóticos da solução transformada com a autofunção original.

Os casos tratados são conhecidos e podemos comparar com a literatura existente. O oscilador harmônico quântico unidimensional foi obtido como um caso especial do potencial mais geral que tratamos e está em perfeito acordo com a literatura. Outro caso tratado e não menos importante foi o do oscilador singular e neste caso encontramos soluções que além de englobarem as soluções conhecidas, nosso trabalho estende este caso e concluímos que diferentemente do que dizem (sem explicação) alguns trabalhos, como em [18], este tipo de potencial admite soluções para potencial atrativo ($\alpha_{crit.} < \alpha < 0$). Outro ponto importante que este potencial nos forneceu é que, ao contrário do que já foi visto

sendo feito [16], o método perturbativo de Rayleight-Schrödinger não pode ser utilizado, pois as pequenas perturbações no potencial devem apenas causar pequenas perturbações na autofunção e nas autoenergias, o que não se vê acontecendo com a mudança brusca das derivadas das autofunções na origem para os casos de $\alpha = 0$ e $\alpha \neq 0$.

O potencial de Kratzer mostrou-se também coerente com os resultados obtidos na literatura [6], este potencial nos proporcionou revisitar um caso já muito discutido, o átomo de hidrogênio unidimensional, que de modo geral, não há um consenso sobre sua solução, pois coisas peculiares surgem neste problema. Como vimos, a solução encontrada contém apenas autofunções ímpares e como sabe-se, qualquer conjunto de autofunções no espaço de Hilbert que é solução de um problema deve poder ser usado como base para soluções de outros problemas, no entanto, neste caso só temos soluções ímpares e suas combinações jamais poderão reproduzir uma solução par, por exemplo. Vemos assim que problemas com potenciais singulares devem ser tomados com um cuidado especial, pois podem surgir soluções com certas anomalias.

Apêndice A

Equação hipergeométrica confluyente

Dá-se o nome de função hipergeométrica confluyente à expansão em série [13] dada por:

$${}_1F_1(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!} = 1 + \frac{a}{b} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{b(b+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \quad (\text{A.1})$$

onde temos que $(a)_n$ é o símbolo de Pochhammer [1]. Esta série é convergente para qualquer valor de z . Esta função é solução da chamada equação hipergeométrica confluyente (ou equação diferencial de Kummer) [1], dada pela seguinte forma:

$$z \frac{d^2 u}{dz^2} + (b - z) \frac{du}{dz} - au = 0, \quad (\text{A.2})$$

no entanto, por termos uma equação diferencial de segunda ordem, devemos ter uma outra função linearmente independente de (A.1) que também satisfaça (A.2). Ao fazermos $u = z^{1-b} v$ e substituindo-a em (A.2), obtemos uma outra equação hipergeométrica confluyente, agora para v :

$$z \frac{d^2 v}{dz^2} + (2 - b - z) \frac{dv}{dz} - (a - b + 1)v = 0. \quad (\text{A.3})$$

A soma de ambas soluções é solução, portanto, a solução geral é expressa como

$$u = A {}_1F_1(a, b, z) + B z^{1-b} {}_1F_1(a - b + 1, 2 - b, z), \quad (\text{A.4})$$

onde A e B são constantes arbitrárias.

A série (A.1) tem algumas propriedades interessantes como, por exemplo, o fato de se tornar um polinômio de grau n quando seu parâmetro $a = -n$, onde $n \in \mathbb{N}^*$. Sendo um pouco mais específico, se tivermos $a = -n$ e $b = \alpha + 1$, temos um polinômio proporcional aos conhecidos polinômios de Laguerre [1],

$${}_1F_1(-n, \alpha + 1, z) = \frac{n!}{(\alpha + 1)_n} L_n^{(\alpha)}(z). \quad (\text{A.5})$$

Suas expansões assintóticas também se fazem necessárias em muitos casos. Ao tomarmos $|z| \rightarrow 0 \implies {}_1F_1(a, b, z) \sim 1$.

Se fizermos $|z| \rightarrow \infty$, teremos [13]:

$${}_1F_1(a, b, z) \sim \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} e^{-ia\pi} z^{-a} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b}. \quad (\text{A.6})$$

Onde $\Gamma(z)$ é a função gama. Se tivermos o caso especial de $a = -n$, onde n é um número natural, teremos:

$${}_1F_1(-n, b, z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} (-1)^n \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b+n)} z^n, \quad (\text{A.7})$$

pois $\Gamma(z)$ tem polos em $z = -n$ [1].

Referências Bibliográficas

- [1] ABRAMOWITZ, M. e STEGUN, I. A. **Handbook of Mathematical Functions**, 1. ed., Toronto: Dover, 1965.
- [2] ARDA, A. e SERVER R. Exact solutions of the Schrödinger equation via Laplace transform approach: pseudoharmonic potencial and Mie-type potentials, **J. Math. Chem.**, v. 50, p. 971-980, 2012.
- [3] BUTKOV, E. **Física Matemática**, Rio de Janeiro: LTC, 1988.
- [4] CHEN, G. The exact solution of the Schrödinger equation with the Morse potential via Laplace transforms, **Phys. Lett. A**, v. 326, p. 55-57, 2004.
- [5] CHEN, G. Exact solutions of the N-dimensional harmonic oscillator via Laplace transformation, **Chin. Phys.**, v. 14, p. 1075, 2005.
- [6] DE CASTRO, A. S. On Duffin-Kummer-Petiau particles with a mixed minimal-nonminimal vector coupling and the nondegenerate bound-states for the one-dimensional inversely linear background, **J. Math. Phys.**, v. 51, n. 102302, 2010.
- [7] DE CASTRO, A. S. Estados ligados em um potencial delta duplo via transformada de Laplace, **Rev. Bras. Ens. Fis.**, v. 34, p. 4301, 2012.
- [8] DOETSCH, G. **Introduction to the Theory and Application of the Laplace Transformation**, Nova Iorque: Springer-Verlag, 1974.
- [9] DYKE, P. P. G. **An Introduction To Laplace Transforms and Fourier Series**, 3. ed., Londres: Springer-Verlag, 2004.
- [10] ENGLEFIELD, M. J. Solution of the Schrödinger equation by Laplace transform, **J. Austr. Math. Soc.**, v. 8, p. 557-567, 1968.
- [11] GASIOROWICZ, S. **Quantum Physics**, 3. ed., Hoboken: John Wiley and Sons, 2003.
- [12] GORDEYEV, A. N. e CHHAJLANY, S. C. One-dimensional hydrogen atom: a singular potential in quantum mechanics, **J. Phy. A: Math. Gen.**, v. 30, p. 6893-6809, 1997.

- [13] GREINER W. **Quantum mechanics, an introduction**, Nova Iorque: Springer-Verlag, 1989.
- [14] GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**, 2. ed., São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.
- [15] LANDAU, L. D. e LIFSHITZ, E. M. **Quantum Mechanics**, 1. ed., Nova Iorque: Pergamon, 1958.
- [16] LATHOUWERS, L. The Hamiltonian $H = (-1/2)d^2/dx^2 + x^2/2 + \lambda/x^2$ reobserved, **J. Math, Phys.**, v. 16, p. 1393, 1975.
- [17] LEBEDEV, N. N. **Special functions and their applications**, Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1965.
- [18] PALMA, G. e RAFF, U. The one-dimensional harmonic oscillator in the presence of a dipole-like interaction, **Am. J. Phys.**, v. 71, n. 3, p. 247-249, 2003.
- [19] PIMENTEL, D. R. M. e DE CASTRO, A. S. A Laplace transform approach to the quantum harmonic oscillator, **Eur. J. Phys.**, v. 34, p. 199-204, 2013.
- [20] RAN, Y.; XUE L.; HU S. e SU R-K. On the Coulomb-type potential of the one-dimensional Schrödinger equation, **J. Phys. A**, v. 33, p. 9265-9272, 2000.
- [21] SCHRÖDINGER, E. Quantisierung als Eigenwertproblem, **Ann. Physik**, v. 384, p. 361-376, 1926.
- [22] SWAINSON, R. A. e DRAKE, G. W. F. A unified treatment of the non-relativistic and relativistic hydrogen atom: I the wavefunctions, **J. Phys. A**, v. 24, p. 79-94, 1991.