



UNESP - Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”

PEDRO HENRIQUE FUSCO NOGUEIRA

**OSCILADOR HARMÔNICO UNIDIMENSIONAL VIA
TRANSFORMADA UNILATERAL DE FOURIER E MAPEAMENTO DO
POTENCIAL DE MORSE UNIDIMENSIONAL NOS POTENCIAIS
PSEUDO-HARMÔNICO E DE KRATZER TRIDIMENSIONAIS**

Guaratinguetá

2015

PEDRO HENRIQUE FUSCO NOGUEIRA

**OSCILADOR HARMÔNICO UNIDIMENSIONAL VIA
TRANSFORMADA UNILATERAL DE FOURIER E MAPEAMENTO DO
POTENCIAL DE MORSE UNIDIMENSIONAL NOS POTENCIAIS
PSEUDO-HARMÔNICO E DE KRATZER TRIDIMENSIONAIS**

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 Bacharelado em Física.

Orientador: Prof. Dr. Antonio Soares de Castro.

Guaratinguetá

2015

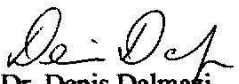
N778o	Nogueira, Pedro Henrique Fusco Oscilador harmônico unidimensional via transformada unilateral de Fourier e mapeamento do potencial de morse unidimensional nos potenciais pseudo-harmônico e de kratzer tridimensionais / Pedro Henrique Fusco Nogueira – Guaratinguetá, 2015. 59 f. : il. Bibliografia : f. 50-54 Trabalho de Graduação em Bacharelado em Física – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, 2015. Orientador: Prof. Dr. Antonio Soares de Castro 1. Schrodinger, Equação de 2. Estados ligados (Mecânica quântica) 3. Fourier, Transformadas de I. Título CDU 530.145
-------	--

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

Pedro Henrique Fusco Nogueira

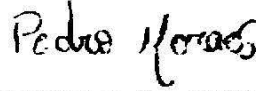
**ESTE TRABALHO DE GRADUAÇÃO FOI JULGADO ADEQUADO COMO
PARTE DO REQUISITO PARA A OBTENÇÃO DO DIPLOMA DE
"GRADUADO EM BACHARELADO EM FÍSICA"**

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


Prof. Dr. Denis Dalmazi
Coordenador

BANCA EXAMINADORA:


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


Prof. Dr. PEDRO H. R. DA SILVA MORAES
INSTITUTO TECNOLÓGICO DE AERONÁUTICA - ITA


Prof. Dr. MARCELO GONÇALVES GARCIA
CENTRO UNIVERSITÁRIO MÓDULO

Dezembro de 2015

Publicações

- NOGUEIRA, P. H. F.; DE CASTRO, A. S. Revisiting the quantum harmonic oscillator via unilateral Fourier transforms. **European Journal of Physics**, v. 37, p. 015402, 2016.

Bolsas de Estudo

- Bolsista FAPESP com o projeto **Tópicos introdutórios em Teoria de Campos**, sob a orientação do Prof. Dr. Fernando Luiz de Campos Carvalho, no período de 01 de dezembro de 2012 a 30 de novembro de 2014.
- Bolsista FAPESP com o projeto **Soluções da equação de Schrödinger via transformadas seno e cosseno de Fourier**, sob a orientação do Prof. Dr. Antonio Soares de Castro, no período de 01 de junho de 2015 a 30 de novembro de 2015.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente meus pais, Persio e Marcia, pelas oportunidades proporcionadas durante minha vida e pelo apoio dado durante este curso.

Aos meus irmãos Paulo (in memoriam) e João, por sempre estarem a meu lado.

Minha noiva Thamires que está presente em todos os momentos.

Todos os amigos pelos momentos compartilhados.

Todos os professores que compartilharam o conhecimento durante o curso, em especial ao professor Dr. Antonio Soares de Castro.

Agradeço também à FAPESP pelo apoio financeiro.

NOGUEIRA, PEDRO FUSCO NOGUEIRA **Oscilador harmônico unidimensional via transformada unilateral de Fourier e mapeamento do potencial de Morse nos potenciais pseudo-harmônico e de Kratzer tridimensionais.** 2015. 59 f.. Trabalho de Graduação (Graduação em Bacharelado em Física) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2015.

Resumo

Neste trabalho tivemos como objetivo aplicar métodos pouco explorados para resolver a equação de Schrödinger independente do tempo. Resolvemos o oscilador harmônico quântico unidimensional via transformada unilateral de Fourier, e os potenciais pseudo-harmônico e de Kratzer tridimensionais via mapeamento no potencial de Morse unidimensional, o qual também foi solucionado.

A aplicação do método da transformada unilateral de Fourier na equação do oscilador harmônico unidimensional é interessante porque o potencial do oscilador harmônico é par o que implica em soluções com paridade bem definida. Como o domínio da transformada unilateral se estende de 0 a ∞ , pudemos nos concentrar em encontrar a autofunção no semieixo positivo e, com as condições de contorno apropriadas na origem mais a continuidade da autofunção e de sua derivada primeira, encontramos as extensões adequadas para a autofunção em todo eixo.

Posteriormente resolvemos o potencial de Morse unidimensional generalizado, a fim de mapeá-lo no potencial potência tridimensional com singularidade inversamente quadrática. Manipulando a equação para este potencial mostramos que só existem dois casos particulares, para estados ligados, que permitem o mapeamento na equação do potencial de Morse. Essas possibilidades são o potencial pseudo-harmônico e o potencial de Kratzer. Substituindo variáveis adequadas, tanto na equação do potencial pseudo-harmônico quanto na do potencial de Kratzer, conseguimos encontrar equações semelhantes à equação do potencial de Morse. Com isso conseguimos identificar os parâmetros dessas equações com os parâmetros do potencial de Morse, de forma que, pudemos encontrar a solução para os potenciais pseudo-harmônico e de Kratzer, assim como para os respectivos casos particulares, oscilador harmônico e potencial de Coulomb, sem nem mesmo resolver as equações correspondentes.

PALAVRAS-CHAVE: equação de Schrödinger, estados ligados, transformada seno e cosseno de Fourier, potencial de Morse, potencial pseudo-harmônico, potencial de Kratzer.

NOGUEIRA, PEDRO HENRIQUE FUSCO **One-dimensional harmonic oscillator via unilateral Fourier transform and mapping the one-dimensional Morse potential onto the three dimensional pseudoharmonic and Kratzer potentials.** 2015. 59 f. Graduate Work (Graduate in Physics) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2015.

Abstract

The objective of this study is to solve the Schrödinger equation for the one-dimensional quantum harmonic oscillator via unilateral Fourier transform, and three-dimensional pseudoharmonic and Kratzer potentials via mapping onto the one-dimensional Morse potential. These methods are little explored in the literature on quantum mechanics.

The unilateral Fourier transform method is interesting because the harmonic oscillator potential is an even potential which implies solutions with well-defined parities. As the domain of unilateral transformed extends from 0 to ∞ , we can focus on finding the eigenfunction in the positive axis and, with appropriate boundary conditions at the origin plus the continuity of eigenfunction and its first derivative, we can find the proper extension to the eigenfunction on the whole axis.

Subsequently we solve the one-dimensional generalized Morse potential, so mapping it onto the three dimensional power potential plus an inverse quadratic term. Manipulating the equation for this potential we show that there are only two particular cases that allow the mapping onto the Morse potential. These possibilities are the pseudoharmonic potential and the Kratzer potential. Substituting appropriate variables in both the equation of the pseudoharmonic potential and the Kratzer potential, we find similar equations to the Morse potential. Thus we can identify the parameters of these equations with the Morse potential parameters, so that we find the solution for the pseudoharmonic potential and Kratzer potential, as well as their particular cases, the harmonic oscillator and the potential Coulomb without solving the corresponding equations.

KEYWORDS: Schrödinger equation, bound states, Fourier transform, Morse potential, pseudoharmonic potential, Kratzer potential.

Lista de Figuras

4.1	Esboço gráfico do potencial de Morse com $V_2 > 0$ e $V_1 \geq 0$	33
4.2	Esboço gráfico do potencial de Morse com $V_2 < 0$ e $V_1 \leq 0$	33
4.3	Esboço gráfico do potencial de Morse com $V_2 > 0$ e $V_1 < 0$	33
4.4	Esboço gráfico do potencial de Morse com $V_2 < 0$ e $V_1 > 0$	33
5.1	Esboço gráfico do potencial pseudo-harmônico com $A > 0$ e $\beta > 0$	40
5.2	Esboço gráfico do potencial pseudo-harmônico com $A < 0$ e $\beta < 0$	40
5.3	Esboço gráfico do potencial pseudo-harmônico com $A > 0$ e $\beta < 0$	41
5.4	Esboço gráfico do potencial pseudo-harmônico com $A < 0$ e $\beta > 0$	41
5.5	Esboço gráfico do potencial de Kratzer com $A > 0$ e $\beta \geq 0$	44
5.6	Esboço gráfico do potencial de Kratzer com $A < 0$ e $\beta \leq 0$	44
5.7	Esboço gráfico do potencial de Kratzer com $A > 0$ e $\beta < 0$	44
5.8	Esboço gráfico do potencial de Kratzer com $A < 0$ e $\beta > 0$	44

Sumário

1	INTRODUÇÃO	10
2	A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER	12
2.1	EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UMA DIMENSÃO	12
2.2	ESTADOS ESTACIONÁRIOS	14
2.3	ESTADOS LIGADOS	16
2.4	POTENCIAIS PARES	16
2.5	EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM TRÊS DIMENSÕES	17
3	SOLUÇÃO DO OSCILADOR HARMÔNICO UNIDIMENSIONAL VIA TRANSFORMADA UNILATERAL DE FOURIER	20
3.1	INTRODUÇÃO	20
3.2	TRANSFORMADA UNILATERAL DE FOURIER	22
3.3	O OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO UNIDIMENSIONAL	24
3.3.1	O problema de autovalor	24
3.3.2	Transformadas seno e cosseno de Fourier	26
3.3.3	A inversão das transformadas	28
3.3.4	Solução completa do problema	30
4	O POTENCIAL DE MORSE UNIDIMENSIONAL	32
4.1	INTRODUÇÃO	32
4.2	ANÁLISE QUALITATIVA DO POTENCIAL DE MORSE	32
4.3	POTENCIAL DE MORSE NA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER	34
5	MAPEAMENTO DE UM PAR DE POTENCIAIS TRIDIMENSIONAIS NO POTENCIAL DE MORSE UNIDIMENSIONAL	38
5.1	INTRODUÇÃO	38
5.2	POTENCIAL POTÊNCIA COM SINGULARIDADE INVERSAMENTE QUADRÁTICA	39
5.2.1	Potencial pseudo-harmônico	40
5.2.2	Potencial de Kratzer	43
6	COMENTÁRIOS FINAIS	48

A	HARMÔNICOS ESFÉRICOS	55
B	FUNÇÃO GAMA	55
C	EQUAÇÃO HIPERGEOMÉTRICA CONFLUENTE	57
C.1	RELAÇÃO DAS FUNÇÕES DE KUMMER COM OS POLINÔMIOS DE LAGUERRE E DE HERMITE	58
C.1.1	Polinômios de Laguerre	58
C.1.2	Polinômios de Hermite	58

1 INTRODUÇÃO

Para descrever as interações microscópicas fazemos o uso da mecânica quântica. Esta, juntamente com a teoria da relatividade, constitui os pilares da física moderna.

No início do século XX foi necessário o desenvolvimento de uma nova teoria para explicar certos resultados experimentais, resultados esses que a física conhecida na época não dava conta de explicar, como a radiação de corpo negro, o efeito Compton, entre outros. Para solucionar tais problema começou-se a formular a mecânica quântica, a qual é fruto de um árduo e instigante trabalho de muitos nomes da física em geral. Seja qual for a forma que abordemos a mecânica quântica somos sempre surpreendidos, comprovando que na escala microscópica ocorrem diversos fenômenos físicos que fogem ao senso comum.

Neste trabalho iremos abordar a equação de Schrödinger, que é a equação responsável por descrever situações físicas na mecânica quântica não relativística. Resolveremos a equação de Schrödinger independente do tempo utilizando métodos matemáticos pouco explorados e com isso mostraremos que existe grande vantagem em abordar a equação através desses métodos.

A equação de Schrödinger independente do tempo é uma equação de autovalor, portanto para obtermos a solução completa desta equação devemos encontrar o par característico correspondente, autovalor e autofunção. Os autovalores da equação correspondem ao espectro de energias do sistema, isto é, são as energias possíveis do sistema. A combinação linear das autofunções, juntamente com a solução temporal da equação de Schrödinger, nos fornece a função de onda da partícula estudada. É esta função de onda que nos fornece todas as características do sistema físico.

Primeiramente trabalharemos com o método de transformadas integrais, mais especificamente o método de transformada unilateral de Fourier, para analisar o oscilador harmônico quântico unidimensional. Após isso iremos abordar o potencial de Morse unidimensional, e em seguida mapear o potencial potência com singularidade inversamente quadrática tridimensional no potencial de Morse unidimensional o que nos permitirá encontrar a solução do potencial pseudo-harmônico e do potencial de Kratzer, assim como dos seus respectivos casos particulares o oscilador harmônico e o potencial de Coulomb.

Descrições da mecânica quântica não relativística segundo a equação de Schrödinger podem ser encontradas em uma grande variedade de livros-textos (veja e.g. [1]-[4]). O Capítulo 2 disserta resumidamente sobre a teoria de Schrödinger para servir de pano de fundo para os capítulos subsequentes. Os Capítulos 3, 4 e 5 retratam o trabalho original

desenvolvido durante o período de iniciação científica de seis meses (projeto Fapesp nº 2014/25456-0). Uma versão do Capítulo 3 encontra-se publicado no periódico *European Journal of Physics* (NOGUEIRA, P. H. F. e DE CASTRO, A. S. Revisiting the quantum harmonic oscillator via unilateral Fourier transforms. *Eur. J. Phys.*, v. 37, p. 015402, 2016.). Uma versão dos Capítulos 4 e 5 também será submetida à publicação em um periódico de circulação internacional. Finalmente, no Capítulo 6 temos os comentários finais do trabalho.

2 A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Para resolver problemas físicos devemos equacionar o problema em questão utilizando as leis físicas corretas para cada situação que queremos estudar. Na mecânica clássica utilizamos as leis de Newton, na eletrodinâmica clássica utilizamos as equações de Maxwell, e assim por diante.

Para resolver problemas físicos na mecânica quântica não relativística fazemos o uso da equação de Schrödinger. Esta é uma equação diferencial parcial, linear, de segunda ordem nas coordenadas e primeira ordem no tempo. Na equação de Schrödinger o que caracteriza o sistema é o potencial ao qual uma partícula está submetida. A solução da equação é a função de onda Ψ , que possui todas as informações físicas do sistema quântico estudado. Começaremos apresentando a equação de Schrödinger em uma dimensão e posteriormente iremos generalizá-la para três dimensões.

2.1 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UMA DIMENSÃO

Em uma dimensão a equação de Schrödinger é:

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

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

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

com m sendo a massa da partícula e V o potencial ao qual a partícula está submetida.

A mecânica quântica não pode ser interpretada de forma determinística (como é na mecânica newtoniana), ela é uma ciência probabilística. Dessa forma, a função de onda Ψ contém todas as informações referentes às probabilidades de encontrar a partícula em certa região do espaço ou com certo momento específico, e etc.

Uma quantidade de grande importância na mecânica quântica é a densidade de probabilidade, a qual é dada por:

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2. \quad (2.3)$$

Integrando a densidade de probabilidade em todo espaço temos a probabilidade de

encontrarmos a partícula descrita pela função de onda. Para o caso de estados ligados, o qual será tratado mais adiante neste trabalho, o movimento da partícula deve estar restrito a certa região do espaço, portanto, temos a seguinte condição de integrabilidade para a densidade de probabilidade:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) dx < \infty. \quad (2.4)$$

Para estados de espalhamento, circunstância na qual o movimento da partícula é irrestrito, a integral acima diverge.

Para que a função de onda tenha significado físico é necessário impormos certas condições de contorno. Para isso exigimos que as funções de onda pertençam ao espaço de Hilbert, isto é, as funções de onda devem ser elementos de um espaço vetorial, além disto, devem ser quadrado-integráveis. O produto interno fica definido por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1^*(x, t) \Psi_2(x, t), \quad (2.5)$$

onde o asterisco significa tomar o complexo conjugado da função.

Outra importante relação que aparece na mecânica quântica é a equação da continuidade. Essa equação aparece em diversas áreas da física, como no eletromagnetismo, na dinâmica de fluidos entre outras. Para encontrarmos esta equação multiplicamos a equação (2.1) por Ψ^* e subtraímos do complexo conjugado de (2.1) multiplicado por Ψ . Com isso chegamos à equação:

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right). \quad (2.6)$$

Definimos então J como sendo a corrente de probabilidade:

$$J(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right). \quad (2.7)$$

Utilizando a definição de densidade de probabilidade, escrevemos finalmente a equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0. \quad (2.8)$$

Interpretando a equação da continuidade vemos que a probabilidade de encontrarmos a partícula em certo sistema deve ser conservada.

Na mecânica quântica, operadores correspondentes a grandezas físicas devem ser hermitianos, dessa forma os autovalores que correspondem a estes operadores serão reais. A definição de operador hermitiano é escrita como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \mathcal{O} \Psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\mathcal{O} \Psi_1)^* \Psi_2 dx, \quad (2.9)$$

onde Ψ_1 e Ψ_2 são funções de onda quaisquer.

2.2 ESTADOS ESTACIONÁRIOS

Como dito anteriormente temos a intenção de trabalhar com os estados estacionários da equação de Schrödinger, estes são os estados que possuem densidade de probabilidade independente do tempo. Em diversos problemas físicos os potenciais de interesse são funções apenas da coordenada, quando isso acontece é possível usar o método de separação de variáveis para resolver a equação (2.1). Escrevemos então a função de onda da seguinte maneira:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t). \quad (2.10)$$

Substituindo a separação acima na equação de Schrödinger obtemos a equação separada:

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x). \quad (2.11)$$

Podemos perceber que o lado esquerdo da equação acima depende apenas do tempo enquanto o lado direito depende apenas da coordenada. A única maneira de satisfazer essa igualdade é se cada lado da equação for igual a uma constante. Sugestivamente escolhemos a letra E para denotar esta constante, a qual é conhecida como constante de separação. Dessa forma, a equação do lado esquerdo, conhecida como equação temporal, é dada por:

$$i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt} = E. \quad (2.12)$$

A equação acima não depende da forma do potencial, além disto, é uma equação de primeira ordem, logo podemos simplesmente resolvê-la por integração direta. Sua solução é:

$$\phi(t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t}, \quad (2.13)$$

onde deixamos que a constante arbitrária, resultante da integração, seja compensada pela constante que aparecerá quando solucionarmos a equação que depende apenas das coordenadas. Dessa forma, temos uma solução particular para a função de onda dada por:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}. \quad (2.14)$$

Em geral tanto a energia E quanto a autofunção ψ dependem, pelo menos, de um número quântico n , chamado de número quântico principal. Dessa forma teremos várias soluções particulares para a equação de Schrödinger, cada uma delas caracterizada pelo

número n que a acompanha, assim a solução geral é dada por uma combinação linear dessas soluções:

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-\frac{iE_n}{\hbar} t}, \quad (2.15)$$

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

Dediquemos agora nossa atenção ao membro direito da equação (2.11):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (2.16)$$

Podemos simplificar a equação acima definindo a constante $k = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$, com isso a equação é escrita como:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \left[k^2 + \frac{2mV(x)}{\hbar^2} \right] \psi(x) = 0. \quad (2.17)$$

Esta equação é conhecida como equação de Schrödinger independente do tempo. Como já conhecemos a solução da equação temporal (2.12), para obtermos a solução completa da equação de Schrödinger (2.1), devemos resolver a equação (2.17). O que caracterizará cada sistema é a forma do potencial V que será inserido na equação de Schrödinger independente do tempo.

A solução (2.10) caracteriza os chamados estados estacionários. Pode parecer estranho dizer que uma função dependente do tempo é estacionária, porém a grandeza de interesse na mecânica quântica não é a função Ψ em si, mas sim a densidade de probabilidade (2.3) e formas bilineares como $\Psi^* \hat{O} \Psi$. Nestes casos em que conseguimos usar separação de variáveis na equação de Schrödinger a densidade de probabilidade é dada por:

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \psi^*(x) e^{iEt/\hbar} \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2. \quad (2.18)$$

De fato, quando tratamos de estados estacionários, a densidade de probabilidade não depende do tempo. Vale chamar a atenção para o fato de que os estados estacionários são possíveis apenas quando o potencial na equação de Schrödinger não depende do tempo.

Uma importante consequência da conclusão acima é que, como a densidade de probabilidade não varia no tempo, a corrente de probabilidade será uniforme. Olhando para a equação (2.8), temos:

$$\frac{\partial J}{\partial x} = 0 \Rightarrow J = \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \text{uniforme}. \quad (2.19)$$

Logo, a corrente de probabilidade é a mesma em qualquer lugar do espaço.

Concluimos que para os casos em que o potencial depende apenas das coordenadas, a corrente de probabilidade é uniforme e estacionária, isto é, ela não muda de valor quando

o tempo ou o espaço são variados.

2.3 ESTADOS LIGADOS

Os estados ligados constituem uma importante classe de soluções da equação de Schrödinger. Este tipo de solução aparece quando o potencial possui a capacidade de confinar uma partícula em determinada região do espaço. Os estados ligados são importantes por descreverem o espectro discreto de átomos, moléculas, e etc. Para estes estados temos a seguinte condição de contorno:

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x) \rightarrow 0. \quad (2.20)$$

Já afirmamos, utilizando a equação (2.4), que as funções de onda devem ser quadrado-integráveis para que possuam significado físico. Agora, além da finitude da integral de $\rho(x)$ em todo espaço, iremos exigir também que esta integral seja igual a um:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1. \quad (2.21)$$

A exigência acima é chamada de normalização da função de onda.

2.4 POTENCIAIS PARES

Um potencial é par quando $V(x) = V(-x)$. Quando uma partícula está sujeita a um potencial deste tipo, aparece uma interessante particularidade a respeito de sua autofunção. Se fizermos a troca de $x \rightarrow -x$ na equação (2.17) vamos obter a seguinte equação:

$$\frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} - \left[k^2 + \frac{2mV(x)}{\hbar^2} \right] \psi(-x) = 0. \quad (2.22)$$

Isso significa que tanto $\psi(x)$ quanto $\psi(-x)$ satisfazem a equação (2.17) com o mesmo autovalor.

Vale lembrar que, como a equação (2.17) é linear, a soma de duas soluções também é solução. Então podemos escrever:

$$\begin{aligned} \psi^+(x) &= \psi(x) + \psi(-x) \\ \psi^-(x) &= \psi(x) - \psi(-x). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Fazendo a troca $x \rightarrow -x$ em (2.23) temos:

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

$$\psi^-(x) = -\psi^-(-x) \Rightarrow \psi^-(x) \text{ é função ímpar.} \quad (2.24)$$

Portanto, quando lidamos com potenciais pares, podemos buscar autofunções apenas para o semieixo positivo e posteriormente, analisando as condições de continuidade na origem, encontrar as extensões apropriadas para o semieixo negativo (par, ímpar ou ambas). Caso as autofunções aceitem ambas as extensões (pares e ímpares) para uma mesma energia, teremos duas autofunções distintas para um único autovalor de energia, neste caso dizemos que a energia é duplamente degenerada.

2.5 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM TRÊS DIMENSÕES

A generalização da equação de Schrödinger para três dimensões é simples, ela fica escrita como:

$$\mathcal{H}\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (2.25)$$

Agora o operador hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t), \quad (2.26)$$

onde ∇^2 é o operador laplaciano. Em coordenadas cartesianas este operador é:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2.27)$$

Se o potencial ao qual a partícula está sujeita depender apenas das coordenadas teremos como solução os seguintes estados estacionários.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-\frac{iE}{\hbar} t}. \quad (2.28)$$

Novamente nossa tarefa é solucionar a equação de Schrödinger independente do tempo.

Como normalmente o potencial é uma função somente da distância até a origem costuma-se adotar coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) . Nestas coordenadas o operador laplaciano é:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \quad (2.29)$$

Para solucionar a equação de Schrödinger começamos procurando por soluções separáveis da seguinte forma:

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y(\theta, \phi). \quad (2.30)$$

Inserindo este *Ansatz* na equação de Schrödinger, temos:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{Y}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \frac{u}{r} \right) + \frac{u}{r^3 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) \right. \\ \left. + \frac{u}{r^3 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] + V(r) \frac{u}{r} Y = E \frac{u}{r} Y. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Dividindo a equação acima por Ψ e multiplicando por $-\frac{2mr^2}{\hbar^2}$, a equação será dada por:

$$\frac{r^2}{u} \frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] + \frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = 0. \quad (2.32)$$

Os primeiros dois termos da equação acima dependem apenas da variável r , enquanto o terceiro termo depende apenas de θ e ϕ , assim cada um dos termos deve ser constante. Para separarmos essas equações iremos usar convenientemente a constante de separação $l(l+1)$. Assim temos:

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -l(l+1) \sin^2 \theta Y, \quad (2.33)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u(r) = E u(r). \quad (2.34)$$

A equação (2.33) é chamada de equação angular. As soluções regulares desta equação são os conhecidos harmônicos esféricos, os quais são mostrados no apêndice A. A equação (2.34) é chamada de equação de Schrödinger radial. Ela é uma equação de autovalor, portanto para que possamos considerar esta equação solucionada precisamos encontrar o par característico u e E , onde E caracteriza a energia da partícula estudada.

A normalização da função de onda para o caso tridimensional é dada por:

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dr |\psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta = 1, \\
\Rightarrow & \int_0^\infty |u(r)|^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta |Y(\theta, \phi)|^2 \sin \theta = 1.
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Usando os harmônicos esféricos normalizados, a normalização da autofunção radial fica definida como:

$$\int_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1. \tag{2.36}$$

A autofunção ψ é uma função que depende de três números quânticos, o número quântico principal n , número quântico azimutal l e o magnético m_l , onde $l = 0, 1, 2, \dots$ e $-l < m_l < l$. Em geral o par característico, isto é, a função radial u e a energia E , dependem dos números quânticos n e l e os harmônicos esféricos dependem dos números quânticos l e m_l . Assim, levando em conta estes números, a separação de variáveis (2.30) fica escrita como:

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^{(m_l)}(\theta, \phi). \tag{2.37}$$

Como a energia depende apenas de n e l , isto é, E_{nl} , quando o número m_l nos harmônicos esféricos é mudado a energia continua a mesma. Assim, teremos mais de uma autofunção para uma mesma energia, isso caracteriza a chamada degenerescência essencial. Levando em conta a variação do número quântico magnético em relação ao número quântico azimutal, podemos afirmar que: nos casos em que temos potenciais que, expressos em coordenadas esféricas são funções apenas da coordenada r , podemos fazer a separação de variáveis em função radial e harmônicos esféricos e assim iremos ter degenerescência essencial de ordem $2l + 1$.

3 SOLUÇÃO DO OSCILADOR HARMÔNICO UNIDIMENSIONAL VIA TRANSFORMADA UNILATERAL DE FOURIER

3.1 INTRODUÇÃO

O método de transformada integral é um método útil e poderoso para resolver equações diferenciais lineares ordinárias, porque ele pode converter a equação original em uma equação diferencial mais simples ou até mesmo em uma equação algébrica. No entanto, os cálculos para obter a inversão da transformada podem ser bastante complicados. Se este for o caso, e as integrais não puderem ser encontradas em tabelas, o método se torna inútil.

O oscilador harmônico quântico é um dos modelos mais importantes na mecânica quântica, ele é o análogo quântico do oscilador harmônico clássico. Assim como no caso clássico, também na mecânica quântica uma grande variedade de potenciais podem ser aproximados por um potencial harmônico nas proximidades do ponto de equilíbrio estável. Esse potencial pode ser utilizado para tratar de problemas de vibrações de átomos individuais em moléculas e em cristais, de moléculas diatômicas, etc. Além disto, o oscilador harmônico é um sistema que pode ser resolvido analiticamente por uma grande variedade de métodos. Geralmente ele é resolvido pelo método de séries de potência [5], pelo método de operadores algébricos [6], ou pelo método de integrais de caminho [7]. Recentemente, o oscilador harmônico unidimensional foi também solucionado pelo método de transformada exponencial de Fourier [8]-[11] e pelo método da transformada de Laplace [12].

O método da transformada exponencial de Fourier tem sido aplicado ao problema do oscilador harmônico unidimensional, no entanto descobrimos que a literatura que aborda este método apresenta afirmações falsas.

Muñoz [8] observou que as autofunções e suas transformadas de Fourier satisfazem, formalmente, equações diferenciais e condições de contorno idênticas, isso o levou a concluir erroneamente que a autofunção e sua transformada diferem no máximo por uma constante de proporcionalidade. Apontamos que o erro de Muñoz foi não considerar que a autofunção e sua correspondente transformada são funções de variáveis diferentes, inter-relacionadas pela propriedade de escalonamento $\mathcal{F}\{f(cx)\} = F(k/c)/|c|$, onde x é a variável original, k é a variável da transformada e c é uma constante.

Ponomarenko [9], a fim de determinar os estados ligados do oscilador harmônico,

afirmou que a condição necessária e suficiente para a autofunção possuir paridade definida pode ser expressa em termos da solução de $(-1)^w = \pm 1$, onde w é a constante a ser determinada. Para Ponomarenko a solução da equação é $w \in \mathbb{Z}$, dessa forma ele concluiu que as autofunções poderiam ser pares ou ímpares. Porém, alegamos que ele não atentou ao fato que a equação em questão possui muitas outras soluções além daquelas em que w é um valor inteiro, de forma que, a equação não é suficiente para afirmarmos qual é a paridade das soluções transformadas do oscilador harmônico.

Engel [10] concluiu que, para que o método de Ponomarenko possa ser aplicado, é preciso substituir o argumento da paridade definida da autofunção pelo de normalização. Ele argumentou que, como a origem é um ponto singular na equação de Schrödinger transformada, Ponomarenko falhou ao considerar que a função transformada é válida em todo o eixo. Apontamos que o argumento de Engel é falho, pois a equação transformada possui soluções com paridade definida, apesar da singularidade mencionada. Assim, para $a \in \mathbb{R}$, $k^a = |k^a|e^{ia(\arg k + 2\pi m)}$, com $m \in \mathbb{Z}$, se mudarmos $k \rightarrow -k$, k^a será par ou ímpar se a for par ou ímpar, respectivamente. Isso acontece porque o módulo ao quadrado da função de onda independe do fator de fase. É importante mencionar que Engel percebeu que a relação entre o m -ésimo momento da função e a m -ésima derivada de sua transformada exponencial de Fourier na origem é indispensável na determinação da solução dos estados ligados para o oscilador harmônico.

Além disto, Palma e Raff [11] desenvolveram uma estratégia para solucionar os estados estacionários da equação de Schrödinger independente do tempo para uma grande classe de potenciais, porém não podemos deixar de mencionar que eles erraram ao utilizar o argumento de univocidade do valor da autofunção. Quando a univocidade da autofunção não é imposta, esta será uma função plurívoca, porém dois ramos quaisquer da autofunção diferem entre si apenas por um fator de fase, o que não traz consequência para a determinação das observáveis, o que torna este argumento falacioso.

Neste capítulo iremos revisitar o problema do oscilador harmônico unidimensional utilizando a transformada unilateral de Fourier. Excetuando o caso do potencial delta duplo unidimensional [13], esse método não tem sido aplicado à equação de Schrödinger. Mostraremos que a transformada unilateral de Fourier aplicada ao oscilador harmônico é um método simples e eficiente com que os estados ligados podem ser tratados na mecânica quântica não relativística. A relação entre o n -ésimo momento da função transformada com a derivada n -ésima da função original se mostra inapta para encontrar uma única solução para os estados ligados do oscilador harmônico quântico unidimensional. Tanto a paridade definida quanto a integrabilidade da autofunção ao quadrado são requisitos suficientes para determinar a solução adequada do problema em questão.

Na próxima seção apresentaremos uma breve revisão de algumas propriedades da transformada unilateral de Fourier, para que em seguida possamos partir para o problema do oscilador harmônico em si.

3.2 TRANSFORMADA UNILATERAL DE FOURIER

A transformada exponencial de Fourier e sua transformada inversa são, respectivamente, definidas como [14]-[16]:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\{\phi(x)\} &= \Phi(\kappa) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(x) e^{i\kappa x}, \\ \mathcal{F}^{-1}\{\Phi(\kappa)\} &= \phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \Phi(\kappa) e^{-i\kappa x}.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Para funções pares ($\phi_c(-x) = \phi_c(x)$) e ímpares ($\phi_s(-x) = -\phi_s(x)$) existem duas modificações necessárias nas transformadas exponenciais de Fourier. Definindo, $z = |x|$ e $k = |\kappa|$, as transformadas seno e cosseno de Fourier para as funções ϕ_s e ϕ_c são expressas, respectivamente, da seguinte forma:

$$\mathcal{F}_s\{\phi_s(z)\} = \Phi_s(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} dz \phi_s(z) \sin kz, \tag{3.2}$$

$$\mathcal{F}_c\{\phi_c(z)\} = \Phi_c(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} dz \phi_c(z) \cos kz \tag{3.3}$$

e as transformadas inversas são:

$$\mathcal{F}_s^{-1}\{\Phi_s(z)\} = \phi_s(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} dk \Phi_s(k) \sin kz, \tag{3.4}$$

$$\mathcal{F}_c^{-1}\{\Phi_c(z)\} = \phi_c(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} dk \Phi_c(k) \cos kz. \tag{3.5}$$

Para que a existência da transformada unilateral seja assegurada é necessário que as funções ϕ_s e ϕ_c sejam absolutamente integráveis no intervalo $[0, \infty)$. Em particular ϕ_s e ϕ_c devem se anular no infinito, isto é, quando $z \rightarrow \infty$ temos que ter $\phi_s \rightarrow 0$ e $\phi_c \rightarrow 0$, o mesmo deve acontecer para as funções transformadas Φ_s e Φ_c quando $k \rightarrow \infty$. Além disso, o par das transformadas de Fourier unilaterais satisfaz o teorema de Parseval

$$\int_0^\infty dz |\phi_s(z)|^2 = \int_0^\infty dk |\Phi_s(z)|^2,$$

$$\int_0^\infty dz |\phi_c(z)|^2 = \int_0^\infty dk |\Phi_c(z)|^2. \quad (3.6)$$

É importante notarmos que as transformadas inversas de Fourier possuem diferentes condições de contorno na origem. Para ϕ_s temos a condição de contorno homogênea de Dirichlet, e para ϕ_c temos a condição de contorno homogênea de Neumann. Isto é:

$$\lim_{z \rightarrow 0} \phi_s(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow 0} \frac{d\phi_c(z)}{dz} = 0. \quad (3.7)$$

Outra relação importante aparece quando aplicamos sucessivas derivadas nas equações (3.4) e (3.5) próximo à origem. Com isso encontramos a relação entre o momento da função transformada e as derivadas da função original na origem. Essas relações são dadas por:

$$\lim_{z \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1} \phi_s(z)}{dz^{2n+1}} = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk k^{2n+1} \Phi_s(k),$$

$$\lim_{z \rightarrow 0} \frac{d^{2n} \phi_c(z)}{dz^{2n}} = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk k^{2n} \Phi_c(k),$$

$$\lim_{z \rightarrow 0} \frac{d^{2n} \phi_s(z)}{dz^{2n}} = \lim_{z \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1} \phi_c(z)}{dz^{2n+1}} = 0. \quad (3.8)$$

Fazendo o mesmo para as equações (3.2) e (3.3), encontramos relações semelhantes para as derivadas das funções transformadas na origem e o momento da função original.

$$\begin{aligned}
\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1}\Phi_s(k)}{dk^{2n+1}} &= (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dz z^{2n+1} \phi_s(z), \\
\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n}\Phi_c(k)}{dk^{2n}} &= (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dz z^{2n} \phi_c(z), \\
\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n}\Phi_s(k)}{dk^{2n}} &= \lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1}\Phi_c(k)}{dk^{2n+1}} = 0.
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Em aplicações para equações diferenciais é necessário saber como expressar as transformadas para as funções que envolvem as derivadas de ϕ em termos de Φ . As transformadas unilaterais de Fourier possuem as seguintes propriedades:

$$\mathcal{F} \left\{ z \frac{d\phi(z)}{dz} \right\} = -\Phi(k) - k \frac{d\Phi(k)}{dk}, \tag{3.10}$$

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} \right\} = -k^2 \Phi(k), \tag{3.11}$$

onde o operador $\mathcal{F}$ e a função Φ referem-se tanto à transformada seno quanto a transformada cosseno de Fourier da função ϕ , que satisfaz as condições de contorno adequadas para assegurar a existência da transformada inversa.

3.3 O OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO UNIDIMENSIONAL

3.3.1 O problema de autovalor

O potencial do oscilador harmônico unidimensional é $V(y) = m\omega^2 y^2/2$, onde m é a massa da partícula, ω é a frequência angular e $y \in (-\infty, \infty)$. Assim, a equação de Schrödinger independente do tempo para o oscilador harmônico unidimensional é dada por:

$$\frac{d^2\psi(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m\omega^2 y^2 \right) \psi(y) = 0. \tag{3.12}$$

Buscando simplificar a equação acima, substituamos as seguintes constantes: $A = \sqrt{\hbar/m\omega}$ e $\epsilon = E/\hbar\omega$. Dessa forma, temos a equação:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (2\epsilon - x^2)\psi(x) = 0, \tag{3.13}$$

onde $x = y/A$. Como a constante A possui dimensão de comprimento, x é adimensional.

A equação acima é uma equação de autovalor para o par característico (ϵ, ψ) com $\epsilon \in \mathbb{R}$ e com a condição de contorno:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 < \infty, \quad (3.14)$$

isto é, a autofunção deve ser quadrado integrável. Buscaremos, a partir de agora, as soluções dessa equação.

Como $x = 0$ é um ponto regular da equação (3.13), ψ é analítica na origem, ou seja, $|d^n \psi / dx^n|_{x=0} < \infty$ para todo $n \in \mathbb{N}$. Como o potencial do oscilador harmônico tem paridade par, temos que $\psi(-x)$ também é solução da equação em questão, dessa forma podemos construir combinações lineares de autofunções com paridade bem definidas: $\psi(x) \pm \psi(-x)$. Assim, podemos concentrar nossa atenção apenas ao semieixo positivo de x e, após obtermos a solução do oscilador harmônico neste semieixo, utilizar condições de contorno apropriadas na origem de ψ para encontrarmos a extensão correta para a solução, simétrica ou antissimétrica. As combinações $\psi(x) \pm \psi(-x)$ compartilham o mesmo autovalor, de modo que devemos esperar uma dupla degenerescência, porém podemos mostrar que a exigência da continuidade da função e de suas primeiras derivadas invalida uma das duas combinações para um dado autovalor, o que é consistente com o teorema da não degenerescência [2].

Quando $x \rightarrow 0$ o termo 2ϵ é dominante sobre x^2 em (3.13), temos então a seguinte equação aproximada:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + 2\epsilon \psi(x) = 0. \quad (3.15)$$

Supondo $\psi \rightarrow x^\delta$, onde δ é uma constante arbitrária, temos que ψ é solução de (3.15) somente se

$$\frac{\delta(\delta - 1)}{x^2} + 2\epsilon = 0. \quad (3.16)$$

Como $x \rightarrow 0$, o termo que acompanha x^{-2} domina, então:

$$\delta(\delta - 1) = 0. \quad (3.17)$$

Logo, a solução da equação será x^δ , com δ igual à 0 ou 1, isto é, duas soluções linearmente independentes, uma par (x^0) e uma ímpar (x^1), independentes da magnitude de ϵ . Com o resultado próximo à origem podemos antecipar que a condição homogênea de Dirichlet ($\psi|_{x=0} = 0$) se aplica apenas para $\delta = 1$, de forma que, nesta condição, ψ deverá ser ímpar. Já a condição homogênea de Neumann ($d\psi/dx|_{x=0} = 0$) se aplica apenas para $\delta = 0$, portanto, para esta condição, ψ será par. Logo, para $\delta = 0$ teremos soluções pares

e para $\delta = 1$ teremos soluções ímpares.

Analisemos agora o comportamento assintótico da equação em questão. Quando $|x| \rightarrow \infty$ o termo que irá dominar será x^2 . Assim temos:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - x^2\psi(x) = 0. \quad (3.18)$$

Usando o *Ansatz* $\psi \rightarrow e^{\gamma x^2}$ na equação (3.18), vemos que γ é solução de

$$2\gamma + (4\gamma^2 - 1)x^2 = 0. \quad (3.19)$$

Como $|x| \rightarrow \infty$, o termo que acompanha x^2 domina sobre o termo 2γ . Assim temos:

$$\gamma = \pm 1/2. \quad (3.20)$$

Logo, $\psi(|x| \rightarrow \infty) \simeq e^{\pm x^2/2}$. Porém, a função ψ deve ser quadrado integrável, o que nos faz escolher o sinal negativo da exponencial. Mais ainda, como a exponencial domina sobre qualquer potência de x , podemos afirmar que o comportamento assintótico de ψ é dado por $\psi(|x| \rightarrow \infty) \simeq x^\alpha e^{-x^2/2}$, com α arbitrário.

Com isso podemos pensar em fatorar a autofunção na forma

$$\psi(x) = \phi(x)e^{x^2/2}. \quad (3.21)$$

Observemos que na fatoração acima escolhemos o sinal positivo para o expoente. Com essa escolha garantimos que $\phi \rightarrow 0$ quando $|x| \rightarrow \infty$, pois, como já conhecemos o comportamento de ψ nesta situação, podemos afirmar que o comportamento de ϕ será $\phi(|x| \rightarrow \infty) \sim x^\alpha e^{-x^2}$. Assim, fica assegurado a existência da transformada unilateral de Fourier pra $\phi(x)$.

Inserindo (3.21) na equação (3.13), encontramos a seguinte equação:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + 2x\frac{d\phi(x)}{dx} + (2\epsilon + 1)\phi(x) = 0. \quad (3.22)$$

Notemos que na equação acima ϕ tem paridade bem definida e $x = 0$ é um ponto regular. Além disso, nas vizinhanças da origem, ϕ se comporta como x^δ , com δ igual à zero ou um, e para valores muito grandes de $|x|$, ϕ se comporta como $x^\alpha e^{-x^2/2}$. Estas condições, juntamente com a regularidade em $x = 0$, asseguram a existência da transformada seno e cosseno de Fourier para a função ímpar e par, respectivamente.

3.3.2 Transformadas seno e cosseno de Fourier

Convém agora restringir nossa atenção ao semieixo positivo de x , fazemos então $z = |x|$. Aplicando a transformada unilateral de Fourier (3.11) na equação (3.22), a

transformada unilateral de Fourier estabelece um mapeamento da equação de segunda ordem para $\phi(x)$ em uma equação de primeira ordem para $\Phi_c(k)$ ou $\Phi_s(k)$:

$$\frac{d\Phi(k)}{dk} + \left(\frac{k}{2} + \frac{1-2\epsilon}{2k} \right) \Phi(k) = 0, \quad (3.23)$$

onde $\Phi(k)$ denota $\Phi_s(k)$ ou $\Phi_c(k)$. Esta equação pode ser resolvida por integração direta e sua solução é dada por:

$$\Phi(k) = A^{(a)} k^a e^{-k^2/4}, \quad (3.24)$$

onde $A^{(a)}$ é a constante de integração e $a = \epsilon - 1/2 \in \mathbb{R}$ é ainda indeterminado.

Como $k^a = e^{a \log k}$ e $\log k$ é uma função plurívoca, a solução (3.24) pode também ser escrita como:

$$\Phi(k) = A^{(a)} |k^a| e^{-k^2/4} e^{2i\pi m a}, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (3.25)$$

Quando a solução é escrita da maneira acima, se vê claramente que ela possui infinitos ramos se a for um número irracional e q ramos se $a = p/q$, onde p e q são inteiros com $q \neq 0$. Porém, os ramos de $\Phi(k)$ diferem entre si apenas por um fator de fase ($e^{2im\pi a}$) que independe da variável k , de forma que, graças à condição de normalização e ao teorema de Parseval, não possui consequência física. Logo, os fatores podem ser absorvidos na constante de integração.

Como $k = 0$ é um ponto singular da equação (3.23), a vizinhança de $k = 0$ na função Φ deve ser manipulada cuidadosamente, pois, para certos valores do expoente de k , a solução pode apresentar singularidade na origem. Inserindo a solução (3.24) na fórmula de Parseval (3.6), concluímos que, para que a autofunção seja quadrado-integrável, devemos ter $a > -1/2$.

Sabemos que as derivadas de ϕ_c e de ϕ_s são finitas quando z se aproxima da origem. Assim, as duas primeiras linhas da (3.8) exigem que o $2n$ -ésimo momento de Φ_c e o $(2n+1)$ -ésimo momento de Φ_s sejam números finitos, exigindo que $a > -1$. Esta é uma condição mais fraca do que aquela que vem do teorema de Parseval. A última linha da (3.8) também não impõe restrições suficientes para que possamos encontrar valores para a .

Restrições maiores sobre os valores permitidos para a são encontradas utilizando as derivadas da função transformada Φ próximo à origem. Para analisar estas propriedades apliquemos a derivada n na função Φ , com a propriedade da função gama, $\Gamma(w+1) = w\Gamma(w)$ (Apêndice B), encontramos:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^n \Phi(k)}{dk^n} = A^{(a)} \frac{\Gamma(a+1)}{\Gamma(a+1-n)} \lim_{k \rightarrow 0} k^{a-n} \quad (3.26)$$

Observemos que para grandes valores de z a exponencial decrescente em ϕ_s e em

ϕ_c sempre predomina sobre qualquer outro fator com potência crescente, dessa forma o $2n$ -ésimo momento de ϕ_c e o $(2n+1)$ -ésimo momento de ϕ_s são números finitos. Neste caso, as propriedades da transformada unilateral de Fourier, expressas nas duas primeiras linhas de (3.9), implicam que:

$$\begin{aligned}\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n} \Phi_c(k)}{dk^{2n}} &= A^{(a)} \frac{\Gamma(a+1)}{\Gamma(a+1-2n)} \lim_{k \rightarrow 0} k^{a-2n} = \text{finito} \\ \lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1} \Phi_s(k)}{dk^{2n+1}} &= A^{(a)} \frac{\Gamma(a+1)}{\Gamma(a-2n)} \lim_{k \rightarrow 0} k^{a-2n-1} = \text{finito}\end{aligned}\quad (3.27)$$

Para que as condições de finitude acima sejam satisfeitas podemos fazer o uso dos polos simples da função gama no denominador da equação, exigindo que seu argumento seja igual a $-\tilde{n}$, com $\tilde{n} \in \mathbb{N}$. Outra maneira é exigir que o expoente de k seja maior ou igual a zero. Assim, podemos concluir que para Φ_c temos as condições $a \leq 2n-1$ (com $n \neq 0$) e $a \geq 2n$, e para Φ_s temos $a \leq 2n$ e $a \geq 2n+1$. Neste caso, $a = n$ tanto para Φ_c quanto para Φ_s .

Para as propriedades expressas na terceira linha de (3.9), temos que:

$$\begin{aligned}\lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n} \Phi_s(k)}{dk^{2n}} &= A^{(a)} \frac{\Gamma(a+1)}{\Gamma(a+1-2n)} \lim_{k \rightarrow 0} k^{a-2n} = 0 \\ \lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^{2n+1} \Phi_c(k)}{dk^{2n+1}} &= A^{(a)} \frac{\Gamma(a+1)}{\Gamma(a-2n)} \lim_{k \rightarrow 0} k^{a-2n-1} = 0\end{aligned}\quad (3.28)$$

Estas condições de nulidade, assim como no caso da finitude, são satisfeitas quando o argumento da função gama no denominador da equação é um número não positivo, o que nos leva à $a \leq 2n-1$ (com $n \neq 0$) para Φ_c e $a \leq 2n$ para Φ_s . A outra possibilidade é exigir que o expoente de k seja maior que zero, o que nos fornece $a > 2n$ para Φ_c e $a > 2n+1$ para Φ_s . Estas últimas são restrições mais fortes que aquelas encontradas quando tratamos do expoente de k nas relações de finitude, e nos levam a concluir que: $a = n$ com n par para a função Φ_c e com n ímpar para função Φ_s . Portanto, em princípio temos o espectro de autovalores determinado: $\epsilon_n = n + 1/2$, com n par para Φ_c e n ímpar para Φ_s .

3.3.3 A inversão das transformadas

Precisamos, por fim, determinar as autofunções. Para encontrarmos as autofunções no semieixo positivo precisamos calcular as integrais relacionadas com as transformadas inversas de Fourier:

$$\begin{aligned}\phi_c^{(n)}(z) &= A^{(n)} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk k^n e^{-k^2/4} \cos(kz), \\ \phi_s^{(n)}(z) &= A^{(n)} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dk k^n e^{-k^2/4} \sin(kz).\end{aligned}\tag{3.29}$$

Utilizando (3.952.7) e (3.952.8) da referência [17], encontramos para as integrais acima:

$$\begin{aligned}\phi_c(z) &= A_c^{(n)} e^{-z^2} M(-n/2, 1/2, z^2), \\ \phi_s(z) &= A_s^{(n)} e^{-z^2} z M(-n/2 + 1/2, 3/2, z^2),\end{aligned}\tag{3.30}$$

onde $M(a, b, w)$ é a função hipergeométrica confluyente (Apêndice C).

$M(-\tilde{n}, b, w)$ é proporcional ao polinômio associado de Laguerre $L_{\tilde{n}}^{(b-1)}(w)$ com $w \in [0, \infty)$ (Apêndice C.1.1), de forma que, quando $b = 1/2$, temos:

$$M(-\tilde{n}, 1/2, w) \propto L_{\tilde{n}}^{(-1/2)}(w)\tag{3.31}$$

e quando $b = 3/2$, temos:

$$M(-\tilde{n}, 3/2, w) \propto L_{\tilde{n}}^{(1/2)}(w).\tag{3.32}$$

Mais ainda, os polinômios de Laguerre estão associados com os polinômios de Hermite, da seguinte forma (Apêndice C.1.2):

$$\begin{aligned}L_{\tilde{n}}^{(-1/2)} &\propto H_{2\tilde{n}}(\sqrt{w}), \\ L_{\tilde{n}}^{(1/2)} &\propto \sqrt{w} H_{2\tilde{n}+1}(\sqrt{w}).\end{aligned}\tag{3.33}$$

Portanto, podemos relacionar as funções hipergeométricas confluentes que aparecem na solução (3.30) com os polinômios de Hermite:

$$M(-n/2, 1/2, z^2) \propto H_{2n}(z),$$

$$M(-n/2 + 1/2, 3/2, z^2) \propto H_{2n+1}(z). \quad (3.34)$$

Então as soluções são dadas por:

$$\begin{aligned} \phi_c^{(2n)} &= A_{2n} e^{-z^2} H_{2n}(z), \\ \phi_s^{(2n+1)} &= A_{2n+1} e^{-z^2} H_{2n+1}(z). \end{aligned} \quad (3.35)$$

É importante notar que a última linha de (3.9) impõe restrições mais fortes para os valores permitidos de a , sem que precisemos postular a convergência do momento de ϕ . Com isso, vemos que o expoente de k faz a equação (3.28) se anular para valores reais de a sujeito a condição $a > 2n$ para Φ_c , e $a > 2n + 1$ para Φ_s fazendo $a = n$, com n par para Φ_c e n ímpar para Φ_s . Utilizando as fórmulas (3.952.9) e (3.952.10) da referência [17], obtemos as soluções das integrais para ϕ_c e ϕ_s expressa por (3.29) em termos da função hipergeométrica confluyente. Finalmente relacionando as equações hipergeométrica confluyente com o polinômio de Hermite obtemos as soluções ϕ_c e ϕ_s .

3.3.4 Solução completa do problema

É importante perceber que extensões simétricas não são permitidas para a função $\phi_s^{(2n+1)}$, assim como as extensões antissimétricas não são permitidas para ϕ_c^{2n} , isso acontece por causa da diferenciabilidade infinita na origem. Essa restrição adicional faz ψ_n ter paridade par para n par e paridade ímpar para n ímpar, implicando na não degenerescência do espectro. A ausência de degenerescência está de acordo com o teorema da não degenerescência [2]. Portanto, usando a propriedade do polinômio de Hermite, $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$, a solução do problema original em todo eixo é expressa por:

$$\begin{aligned} \epsilon_n &= n + 1/2, \\ \psi_n(x) &= N_n e^{-x^2/2} H_n(x), \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde N_n são constantes de normalização.

Em suma, mostramos que a solução completa do oscilador harmônico quântico unidimensional pode ser abordada via transformada unilateral de Fourier. A exigência da

univocidade da autofunção não é um bom argumento por causa de fatores de fase irrelevantes. A convergência dos momentos da transformada unilateral de Fourier não é suficiente para obter as soluções de interesse, porém a nulidade das derivadas $2n$ -ésima de ϕ_s e $(2n+1)$ -ésima de ϕ_c são essenciais para encontrarmos o espectro de autovalores para o oscilador harmônico. Felizmente, a inversão das transformadas seno e cosseno de Fourier resultam em integrais tabeladas e a solução dos estados ligados pode ser diretamente obtida somente exigindo paridade definida e funções quadrado-integráveis.

4 O POTENCIAL DE MORSE UNIDIMENSIONAL

4.1 INTRODUÇÃO

Muitas vezes para descrever a interação entre moléculas diatômicas usa-se o potencial do oscilador harmônico, porém sabe-se que as vibrações de moléculas diatômicas não são harmônicas. Com a finalidade de descrever vibrações inarmônicas Phillip M. Morse propôs em 1929 o que conhecemos hoje como o potencial de Morse [19]. Desde então este potencial tem possuído um papel importante na mecânica quântica, ele foi usado para descrever estados vibracionais de moléculas diatômicas [20], a absorção de átomos e moléculas por superfícies sólidas [21], a deformação de metais cúbicos [22], e etc. Grande parte da importância desse potencial se deve a possibilidade de obter sua solução exata analiticamente [23], [24]. O potencial de Morse pode ser solucionado pelo método de séries [25], via transformada de Laplace [26], pelo método variacional [27] e por integral de caminho [28].

Neste capítulo, iremos solucionar a equação de Schrödinger independente do tempo para o potencial de Morse generalizado. Este potencial é dito generalizado por possuir parâmetros arbitrários. Soluções do potencial de Morse desse tipo podem ser encontradas na literatura sobre mecânica quântica (veja e. g. [29]-[31]).

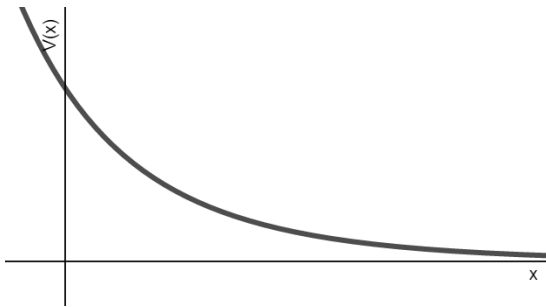
4.2 ANÁLISE QUALITATIVA DO POTENCIAL DE MORSE

O potencial de Morse generalizado é escrito como:

$$V(x) = V_1 e^{-\alpha x} + V_2 e^{-2\alpha x}, \quad \alpha > 0. \quad (4.1)$$

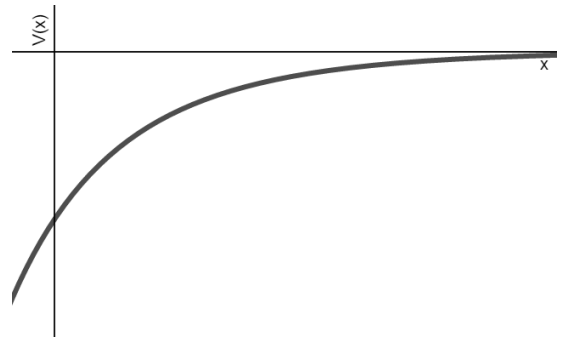
Olhemos primeiramente os esboços gráficos de V para os diversos casos de V_1 e V_2 .

Figura 4.1: Esboço gráfico do potencial de Morse com $V_2 > 0$ e $V_1 \geq 0$.



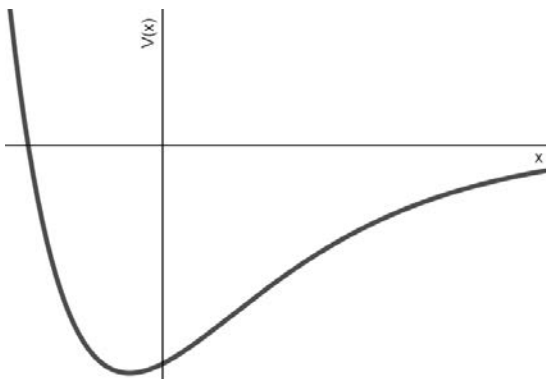
Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Figura 4.2: Esboço gráfico do potencial de Morse com $V_2 < 0$ e $V_1 \leq 0$.



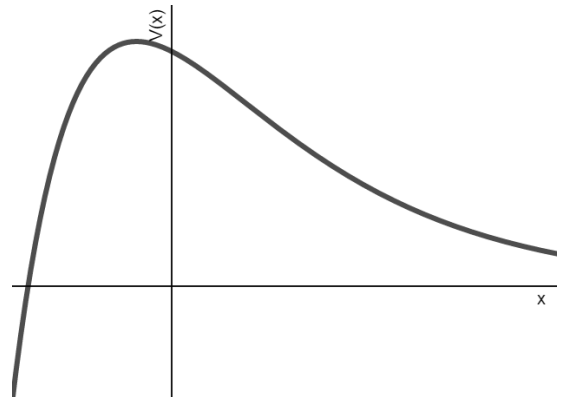
Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Figura 4.3: Esboço gráfico do potencial de Morse com $V_2 > 0$ e $V_1 < 0$.



Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Figura 4.4: Esboço gráfico do potencial de Morse com $V_2 < 0$ e $V_1 > 0$.



Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Graficamente vemos que os estados ligados são possíveis apenas para o caso ilustrado na figura 4.3. Pois, neste caso, a partícula pode ter seu movimento restrito a uma região do espaço, desde que sua energia seja maior que o potencial mínimo e menor do que o ponto ordenado em que passa a assíntota horizontal do potencial.

Fazendo uma análise qualitativa mais completa vamos verificar o comportamento assintótico e o ponto crítico para o potencial em questão. Na análise da espectroscopia molecular, Morse utilizou apenas o caso de $V_1 < 0$, com $V_2 = -2V_1$.

O comportamento deste potencial na origem e no infinito é:

$$V(0) = V_1 + V_2,$$

$$V(x \rightarrow +\infty) = 0,$$

$$V(x \rightarrow -\infty) = \begin{cases} +\infty & \text{se } V_2 > 0, \\ -\infty & \text{se } V_2 < 0. \end{cases} \quad (4.2)$$

A derivada primeira do potencial é zero para x igual a x_0 , com

$$x_0 = -\frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{-V_1}{2V_2} \right). \quad (4.3)$$

Isso significa que existe um ponto crítico apenas se o sinal de V_2 for diferente do sinal de V_1 .

Como estamos interessados nos estados ligados para o potencial de Morse, queremos que o ponto crítico encontrado seja um ponto de mínimo. Inserindo o ponto x_0 na derivada segunda do potencial de Morse encontramos:

$$V''(x_0) = \frac{\alpha^2 V_1^2}{2V_2}. \quad (4.4)$$

Portanto, x_0 será um ponto de mínimo se $V_2 > 0$, implicando que $V_1 < 0$. Assim, encontramos o menor valor do potencial na ordenada do ponto de mínimo:

$$V(x_0) = \frac{-V_1^2}{4V_2}. \quad (4.5)$$

Logo, pela análise qualitativa, podemos afirmar que os estados ligados só acontecem para o potencial de Morse se tivermos $V_2 > 0$ e $V_1 < 0$.

4.3 POTENCIAL DE MORSE NA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Consideremos a equação de Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = 0. \quad (4.6)$$

Inserindo o potencial de Morse (4.1) na equação de Schrödinger, temos:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_1 e^{-\alpha x} - V_2 e^{-2\alpha x}) \psi(x) = 0. \quad (4.7)$$

Introduzindo a nova variável ξ , na forma

$$\xi = \frac{2\sqrt{2mV_2}}{\hbar\alpha} e^{-\alpha x}. \quad (4.8)$$

A equação (4.7) torna-se:

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{d\psi(\xi)}{d\xi} + \left(\frac{2mE}{\alpha^2\hbar^2\xi^2} - \frac{1}{4} - \frac{mV_1}{\alpha\hbar\sqrt{2mV_2}\xi} \right) \psi(\xi) = 0. \quad (4.9)$$

Note que

$$\begin{aligned} x \rightarrow -\infty &\Rightarrow \xi \rightarrow +i\infty \quad \text{se } V_2 < 0, \\ x \rightarrow -\infty &\Rightarrow \xi \rightarrow +\infty \quad \text{se } V_2 > 0, \\ x \rightarrow +\infty &\Rightarrow \xi \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Vamos agora, convenientemente, introduzir as seguintes constantes adimensionais:

$$S = \frac{\sqrt{-2mE}}{\alpha\hbar}, \quad n = -\frac{mV_1}{\alpha\hbar\sqrt{2mV_2}} - \left(S + \frac{1}{2} \right). \quad (4.11)$$

Aqui, n não é necessariamente um número natural. Chegamos então na seguinte equação:

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{d\psi(\xi)}{d\xi} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{n + S + \frac{1}{2}}{\xi} - \frac{S^2}{\xi^2} \right) \psi(\xi) = 0. \quad (4.12)$$

Analisando o comportamento assintótico da equação acima, podemos ver que:

$$\begin{aligned} \xi \rightarrow 0 &\Rightarrow \psi(\xi) \sim \xi^{\pm S}, \\ \xi \rightarrow \infty &\Rightarrow \psi(\xi) \sim e^{\pm \frac{|\xi|}{2}}, \\ \xi \rightarrow i\infty &\Rightarrow \psi(\xi) \sim e^{\pm i \frac{|\xi|}{2}}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Como buscamos estados ligados devemos considerar a condição $\int_0^\infty d|\xi| |\Psi(\xi)|^2 / |\xi| =$ finito. Logo, devemos excluir o caso em que $\xi = i|\xi|$. Levando em conta que as autofunções da equação de Schrödinger devem ser quadrado integráveis, devemos exigir que $\psi(\xi \rightarrow \infty) \sim e^{-\xi/2}$ com $\xi \in \mathbb{R}$ ($V_2 > 0$) e $\psi(\xi \rightarrow 0) \sim \xi^S$, com $S > 0$ e $V_1, 0$. Pela (4.11) vemos que $S > 0$ implica em um limite superior para energia E e para a constante n , estes limites são:

$$E < 0, \quad n < -\frac{mV_1}{\alpha\hbar\sqrt{2mV_2}} - \frac{1}{2}. \quad (4.14)$$

Fatorando a autofunção $\psi(\xi)$ na equação (4.12):

$$\psi(\xi) = \xi^S - \frac{\xi}{2} e^{-\frac{\xi}{2}} W(\xi). \quad (4.15)$$

Somos levados à equação hipergeométrica confluyente:

$$\xi W''(\xi) + (2S + 1 - \xi)W'(\xi) + nW(\xi) = 0. \quad (4.16)$$

As soluções desta equação são bem conhecidas, elas são as funções de Kummer (Apêndice C). A solução completa da equação (4.16) é:

$$W(\xi) = AM(-n, 2S + 1, \xi) + BU(-n, 2S + 1, \xi). \quad (4.17)$$

Para $\xi \rightarrow 0$ a função $M(-n, 2S + 1, \xi) \rightarrow 1$, portanto esta solução tem bom comportamento próximo à origem. Já a função $U(-n, 2S + 1, \xi)$ tem o seguinte comportamento:

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} U(-n, 2S + 1, \xi) = \frac{\Gamma(2S)}{\Gamma(-n)} \xi^{-2S}. \quad (4.18)$$

Como já sabemos que $S > 0$, para garantir o bom comportamento de W próximo à origem, somos levados a fazer $B = 0$. Dessa forma a solução particular fica sendo:

$$W(\xi) = AM(-n, 2S + 1, \xi). \quad (4.19)$$

Para $\xi \rightarrow \infty$, temos:

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} \frac{M(-n, 2S + 1, \xi)}{\Gamma(2S + 1)} \rightarrow \frac{e^{-i\pi n} \xi^n}{\Gamma(2S + 1 + n)} + \frac{e^\xi \xi^{-n-2S-1}}{\Gamma(-n)}. \quad (4.20)$$

No segundo termo do limite acima aparece a exponencial e^ξ , esta exponencial faz com que a solução $\psi(\xi)$ divirja quando $\xi \rightarrow \infty$, assim a solução não será quadrado integrável. Para que este segundo termo seja igual a zero devemos usar os polos da função gama fazendo $n \in \mathbb{N}$.

O resultado $n = 0, 1, 2, \dots$, nos leva a algumas importantes conclusões. Observando a segunda equação da (4.11), concluimos que de fato, $V_1 < 0$, o que comprova nossa análise qualitativa feita na seção anterior. Com isto, daqui em diante usaremos $V_1 = -|V_1|$. Outro fato importante aparece quando igualamos $n = 0$ na segunda inequação da (4.14), encontramos a condição para que exista pelo menos um estado ligado:

$$\frac{m|V_1|^2}{\hbar\alpha\sqrt{2mV_2}} > \frac{1}{2}. \quad (4.21)$$

Por último, como $n \geq 0$, a partir da definição de n na equação (4.11), podemos concluir que:

$$S \leq \frac{m|V_1|}{\alpha\hbar\sqrt{2mV_2}} - \frac{1}{2}. \quad (4.22)$$

Como $S = \sqrt{-2mE}/(\alpha\hbar)$ encontramos um limite inferior para a energia:

$$E \geq -\frac{1}{2m} \left(\frac{m|V_1|}{\sqrt{2mV_2}} - \frac{\alpha\hbar}{2} \right)^2. \quad (4.23)$$

Substituindo S na segunda expressão de (4.11) obtemos o espectro de energia discreto do potencial de Morse generalizado:

$$E_n = -\frac{V_1^2}{4V_2} \left[1 - \frac{\alpha\hbar\sqrt{2mV_2}}{m|V_1|}(n + 1/2) \right]^2. \quad (4.24)$$

Deve ser observado que a menor energia é maior que o potencial mínimo ditado por (4.5). Finalmente, utilizando o caso especial 13.6.9 da Ref. [18], temos:

$$W(\xi) \propto L_n^{(2S)}(\xi), \quad (4.25)$$

onde $L_n^{(2S)}$ é o polinômio associado de Laguerre (Apêndice C.1.1).

Assim, temos que a autofunção da equação de Schrödinger independente do tempo é dada por:

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\xi/2} \xi^S L_n^{(2S)}(\xi), \quad (4.26)$$

onde A_n é uma constante de normalização.

Vamos listar abaixo os resultados importantes encontrados nessa seção. Esses resultados serão importantes para o mapeamento do potencial que será explorado no próximo capítulo.

$$\xi = \frac{2\sqrt{2mV_2}}{\alpha\hbar} e^{-\alpha x} \quad (4.27)$$

$$S = \frac{\sqrt{-2mE}}{\alpha\hbar} \quad (4.28)$$

$$n < \frac{m|V_1|}{\alpha\hbar\sqrt{2mV_2}} - \frac{1}{2} \quad (4.29)$$

$$E_n = -\frac{V_1^2}{4V_2} \left[1 - \frac{\alpha\hbar\sqrt{2mV_2}}{m|V_1|}(n + 1/2) \right]^2 \quad (4.30)$$

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\xi/2} \xi^S L_n^{(2S)}(\xi) \quad (4.31)$$

5 MAPEAMENTO DE UM PAR DE POTENCIAIS TRIDIMENSIONAIS NO POTENCIAL DE MORSE UNIDIMENSIONAL

5.1 INTRODUÇÃO

O mapeamento do potencial de Morse em outros potenciais não é uma novidade na literatura sobre mecânica quântica. Na Ref. [32], Lee utilizou o mapeamento do potencial de Coulomb no potencial de Morse com a finalidade de resolver a equação radial de Schrödinger para o átomo de hidrogênio. Bagchi e Gorain [33] mostraram que o potencial de Morse com a massa dependente da posição possui solução exata, para isso mapearam este potencial no potencial de Coulomb na presença de massa dependente da posição. Na Ref. [34], Singh e Devi, conhecendo os operadores escada do potencial de Kratzer, mapearam equação para este potencial na equação do potencial de Morse, e assim conseguiram obter os operadores escada para o potencial de Morse. Na Ref. [35], Montemayor e Urrutia, também encontraram os operadores escada para o potencial de Morse, porém fizeram isso mapeando este no potencial do oscilador harmônico bidimensional.

Neste capítulo iremos manipular a equação de Schrödinger para o potencial potência com singularidade inversamente quadrática, a fim de mapear esta equação na equação do potencial de Morse. Com isso, pretendemos obter as soluções do potencial pseudo-harmônico e do potencial de Kratzer, ambos tridimensionais. Os potenciais pseudo-harmônico e de Kratzer são mais dois exemplos de potenciais inarmônicos.

O potencial pseudo-harmônico é a soma do oscilador harmônico mais um termo inversamente quadrático. O potencial de interação inversamente quadrático $1/x^2$ foi introduzido em 1956 por Post para estudar o problema de muitas partículas em uma dimensão interagindo aos pares [36]. Porém, o termo pseudo-harmônico foi utilizado a primeira vez no início dos anos sessenta por Goldman e Krivchenkov [37]. O potencial pseudo-harmônico pode ser encontrado em muitos textos sobre mecânica quântica. Por exemplo, Landau e Lifshitz determinaram a solução exata da equação de Schrödinger tridimensional para uma partícula [2]. Calogero abordou o problema de N corpos interagindo através de um potencial pseudo-harmônico [38]. Hurley, utilizou este potencial para abordar o problema de três corpos em uma dimensão [39]. O potencial de Kratzer é o potencial de Coulomb (átomo de hidrogênio) mais um termo inversamente quadrático. Este é um potencial também importante na descrição de moléculas diatômicas (veja e. g. [40]), assim como para descrever interações e estruturas moleculares [41].

Além dos potenciais pseudo-harmônico e de Kratzer queremos obter também a solução dos casos particulares destes potenciais, o oscilador harmônico e potencial de Coulomb, respectivamente.

5.2 POTENCIAL POTÊNCIA COM SINGULARIDADE INVERSAMENTE QUADRÁTICA

O potencial potência com singularidade inversamente quadrática tem a seguinte forma:

$$V(r) = Ar^\delta + \frac{\hbar^2\beta}{2mr^2}, \quad (5.1)$$

onde A e β são constantes arbitrárias. O termo quadrático singular no potencial acima foi convenientemente escolhido para que possamos uní-lo à barreira de potencial.

Nesta seção vamos explorar este potencial com a intenção de mapeá-lo no potencial de Morse generalizado. Mostraremos que com as mudanças de variáveis apropriadas não precisamos nem mesmo resolver a equação de Schrödinger. O potencial potência com singularidade inversamente quadrática é um potencial central tridimensional, portanto sua solução possuirá ao menos a degenerescência de ordem $2l + 1$, a chamada degenerescência essencial. Trabalharemos daqui em diante com a equação de Schrödinger radial:

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left[\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2} - \frac{2mA}{\hbar^2}r^\delta - \frac{\beta + l(l+1)}{r^2} \right] u(r) = 0. \quad (5.2)$$

Introduzamos a nova variável $r = r_0 e^{-\gamma x}$, com $r_0 > 0$ e $\gamma > 0$. Verificando o comportamento desta variável temos:

$$\begin{aligned} r \rightarrow 0 &\Rightarrow x \rightarrow \infty, \\ r \rightarrow \infty &\Rightarrow x \rightarrow -\infty. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Dessa forma, a equação (5.2) é escrita como:

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \gamma \frac{du}{dx} + \left\{ \frac{2mr_0^2\gamma^2\mathcal{E}}{\hbar^2} e^{-2\gamma x} - \frac{2m\gamma^2 A r_0^{\delta+2}}{\hbar^2} e^{-\gamma(2+\delta)x} - \gamma^2[\beta + l(l+1)] \right\} u(x) = 0. \quad (5.4)$$

A fim de eliminar a derivada primeira da equação acima fazemos $u = e^{-\gamma x/2}\Phi$. Dessa forma, a equação se torna:

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ r_0^2\gamma^2 [\mathcal{E}e^{-2\gamma x} - r_0^\delta A e^{-\gamma(2+\delta)x}] - \frac{\gamma^2\hbar^2}{2m} [\beta + (l+1/2)^2] \right\} \Phi(x) = 0. \quad (5.5)$$

Comparando a equação acima com a equação (4.7), podemos concluir que os valores possíveis para a constante δ , sem que precisemos impor valor para γ , podem ser: $\delta = 0$, com $V_1 = 0$ ou $\delta = -2$, com $V_2 = 0$, porém nestes dois casos o potencial (5.1) será inversamente quadrático, e assim, não ocorrerão estados ligados. As duas outras possibilidades, as quais possuem estados ligados, são $\delta = 2$ (potencial pseudo-harmônico) e $\delta = -1$ (potencial de Kratzer). Exploremos cada uma dessas possibilidades.

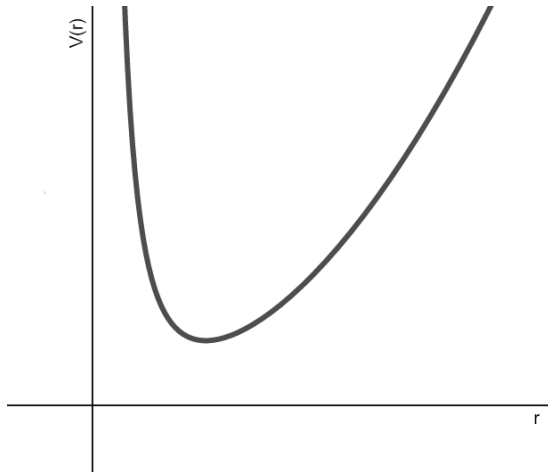
5.2.1 Potencial pseudo-harmônico

Para $\delta = 2$ o potencial se torna o potencial pseudo-harmônico:

$$V(r) = Ar^2 + \frac{\hbar^2 \beta}{2mr^2}. \quad (5.6)$$

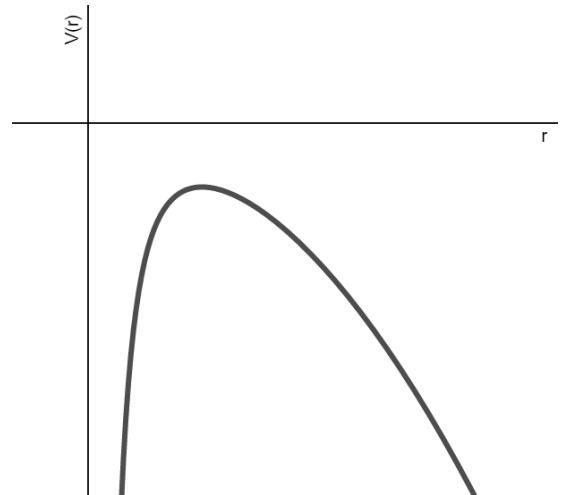
Olhemos para os gráficos de V dos diversos casos de A e β .

Figura 5.1: Esboço gráfico do potencial pseudo-harmônico com $A > 0$ e $\beta > 0$.



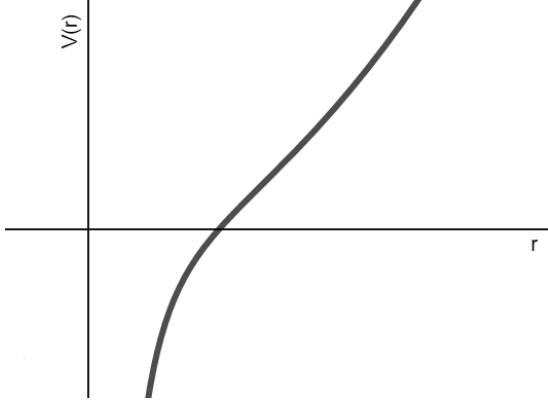
Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Figura 5.2: Esboço gráfico do potencial pseudo-harmônico com $A < 0$ e $\beta < 0$.



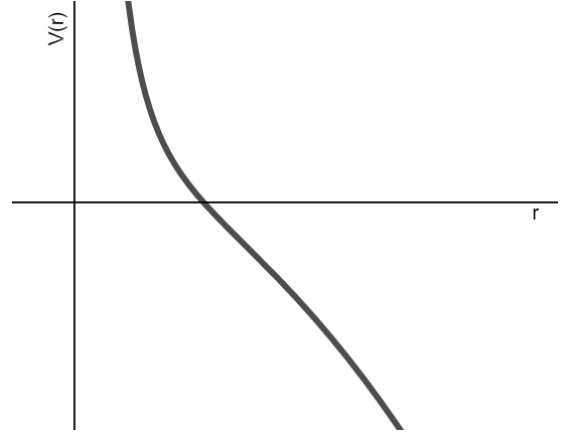
Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Figura 5.3: Esboço gráfico do potencial pseudo-harmônico com $A > 0$ e $\beta < 0$.



Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Figura 5.4: Esboço gráfico do potencial pseudo-harmônico com $A < 0$ e $\beta > 0$.



Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Qualitativamente podemos concluir que os possíveis estados ligados acontecem quando $A > 0$, conforme as figuras 5.1 e 5.3.

A equação de Schrödinger para este caso é dada por:

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ r_0^2 \gamma^2 [\mathcal{E} e^{-2\gamma x} - r_0^2 A e^{-4\gamma x}] - \frac{\gamma^2 \hbar^2}{2m} [\beta + (l + 1/2)^2] \right\} \Phi(x) = 0. \quad (5.7)$$

Comparando a equação acima com a equação (4.7), impomos:

$$\alpha = 2\gamma, \quad (5.8)$$

$$V_1 = -r_0^2 \gamma^2 \mathcal{E}, \quad (5.9)$$

$$V_2 = r_0^4 \gamma^2 A, \quad (5.10)$$

$$E = -\frac{\gamma^2 \hbar^2}{2m} [\beta + (l + 1/2)^2]. \quad (5.11)$$

Olhando para as correspondências acima podemos ver que a condição $V_1 < 0$ implica que $\mathcal{E} > 0$ e a condição $V_2 > 0$ implica $A > 0$. Utilizando a equação (4.28), temos que:

$$S = \frac{\sqrt{\beta + (l + 1/2)^2}}{2}. \quad (5.12)$$

Como $S > 0$, podemos concluir que $\beta > -1/4$, como tem que ser para evitar o famoso colapso para o centro [2]. Para encontrarmos a energia para o caso em que $\delta = 2$ igualamos (5.11) à (4.30). Assim temos:

$$\mathcal{E}_{nl} = 2\hbar\sqrt{\frac{2A}{m}}(n + 1/2 \pm S). \quad (5.13)$$

Na equação acima aparece uma ambiguidade de sinais, porém podemos excluir esta ambiguidade utilizando a equação (4.29). Com isso, temos:

$$\mathcal{E}_{nl} > 2\hbar\sqrt{\frac{2A}{m}}(n + 1/2). \quad (5.14)$$

Logo:

$$\mathcal{E}_{nl} = 2\hbar\sqrt{\frac{2A}{m}}(n + 1/2 + S). \quad (5.15)$$

O mapeamento da autofunção fica sendo:

$$\Phi_n(\xi) = A_n e^{-\xi/2} \xi^S L_n^{(2S)}(\xi). \quad (5.16)$$

Por último falta encontrar a relação da variável ξ com r . Para isso usamos a equação (4.27) e nesta substituímos (4.8) e (5.10). Assim, temos:

$$\xi = \frac{\sqrt{2mA}}{\hbar} r^2. \quad (5.17)$$

Assim, temos que $\Phi(r)$ para $\delta = 2$ é dado por:

$$\Phi_{nl}(r) = \hat{A}_{nl} e^{-\frac{\sqrt{2mA}}{2\hbar} r^2} r^{2S} L_n^{(2S)}\left(\frac{\sqrt{2mA}}{\hbar} r^2\right). \quad (5.18)$$

A fim de voltarmos a variável original r , substituímos $x = -\ln(r/r_0)/\gamma$ em $u = e^{-\gamma x/2} \Phi$. Assim, encontramos que $u(r) = \sqrt{r/r_0} \Phi(r)$. Portanto:

$$u_{nl}(r) = B_{nl} e^{-\frac{\sqrt{2mA}}{2\hbar} r^2} r^{2S+1/2} L_n^{(2S)}\left(\frac{\sqrt{2mA}}{\hbar} r^2\right). \quad (5.19)$$

Note que $u(0) = 0$ é uma condição de contorno que surge naturalmente como decorrência do mapeamento, e não imposta a priori.

Com isto, temos o par característico da equação de Schrödinger para o potencial singular com $\delta = 2$, isto é, temos a solução completa para este caso:

$$\Psi_{nlm_l}(\vec{r}) = C_{nl} e^{-\frac{\sqrt{2mA}}{2\hbar} r^2} r^{2S-1/2} L_n^{(2S)}\left(\frac{\sqrt{2mA}}{\hbar} r^2\right) Y_l^{(m_l)}(\theta, \phi), \quad (5.20)$$

$$\mathcal{E}_{nl} = 2\hbar\sqrt{\frac{2A}{m}}(n + 1/2 + S). \quad (5.21)$$

Com $S = \sqrt{\beta + (l + 1/2)^2}/2$.

Oscilador harmônico

Um caso particular do potencial pseudo-harmônico é o potencial do oscilador harmônico. Para encontrarmos a solução para o oscilador harmônico fazemos $A = m\omega^2/2$ e $\beta = 0$. Com isso o potencial se torna:

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2. \quad (5.22)$$

Novamente $\sqrt{2mA}/\hbar = m\omega/\hbar$, porém com $S = (l + 1/2)/2$. Logo, a solução para o oscilador harmônico é:

$$u_{nl}(r) = N_{n,l} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2} r^{l+1} L_n^{(l+1/2)} \left(\frac{m\omega}{\hbar} r^2 \right), \quad (5.23)$$

$$\mathcal{E}_{nl} = \hbar\omega(2n + l + 3/2). \quad (5.24)$$

Podemos ainda fazer $N = 2n + l$. Assim temos:

$$\Psi_{Nlm_l}(\vec{r}) = C_{Nl} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2} r^l L_{\frac{N-l}{2}}^{(l+1/2)} \left(\frac{m\omega}{\hbar} r^2 \right) Y_l^{(m_l)}(\theta, \phi), \quad (5.25)$$

$$\mathcal{E}_N = (N + 3/2)\omega\hbar. \quad (5.26)$$

Aqui, a energia $\mathcal{E}$ depende apenas do número quântico $N = 2n + l$, enquanto a função u depende de N e l . Note que $N = 0, 1, 2, \dots$ e que $l \leq N$, com l par (ímpar) se N for par (ímpar). Logo, mudando l na equação de onda teremos mais de uma função de onda para a mesma energia, o que caracteriza uma nova degenerescência além da degenerescência essencial. Esta degenerescência é chamada de acidental.

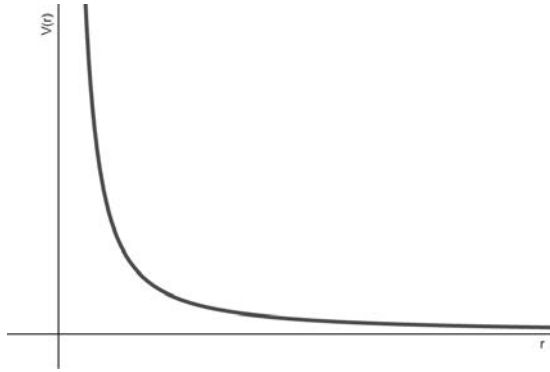
5.2.2 Potencial de Kratzer

Para $\delta = -1$ temos o potencial de Kratzer:

$$V(r) = \frac{A}{r} + \frac{\hbar^2\beta}{2mr^2}. \quad (5.27)$$

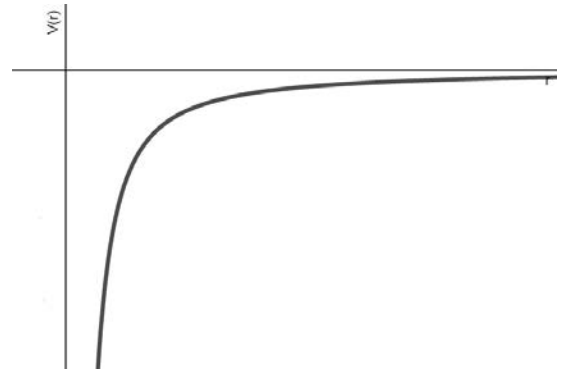
Olhemos para os esboços gráficos do potencial acima:

Figura 5.5: Esboço gráfico do potencial de Kratzer com $A > 0$ e $\beta \geq 0$.



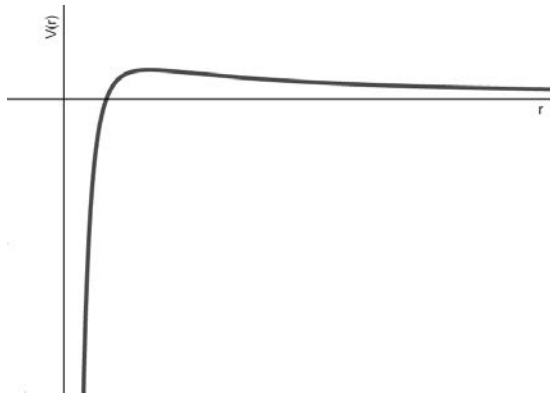
Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Figura 5.6: Esboço gráfico do potencial de Kratzer com $A < 0$ e $\beta \leq 0$.



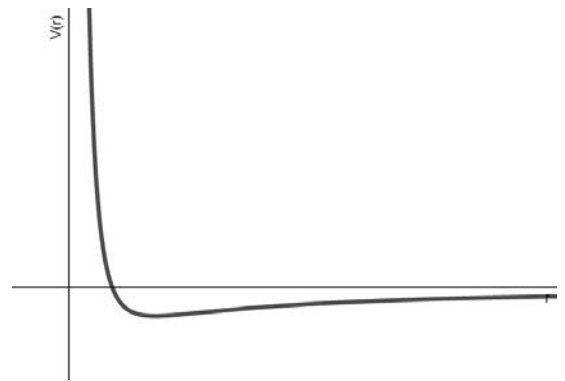
Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Figura 5.7: Esboço gráfico do potencial de Kratzer com $A > 0$ e $\beta < 0$.



Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Figura 5.8: Esboço gráfico do potencial de Kratzer com $A < 0$ e $\beta > 0$.



Fonte: Imagem elaborada pelo autor

Vemos que estados ligados são possíveis para os casos esboçados nas figuras 5.6 e 5.8.

Dessa forma, a equação fica escrita como:

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ r_0^2 \gamma^2 [\mathcal{E}e^{-2\gamma x} - r_0^{-1} A e^{-\gamma x}] - \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} [\beta + (l + 1/2)^2] \right\} \Phi(x) = 0. \quad (5.28)$$

Novamente, comparando a equação acima com a equação (4.7), encontramos uma similaridade se fizermos as seguintes identificações:

$$\alpha = \gamma, \quad (5.29)$$

$$V_1 = r_0 \gamma^2 A, \quad (5.30)$$

$$V_2 = -r_0^2 \gamma^2 \mathcal{E}, \quad (5.31)$$

$$E = -\frac{\gamma^2 \hbar^2}{2m} [\beta + (l + 1/2)^2]. \quad (5.32)$$

Porque $V_1 < 0$ e $V_2 > 0$, temos que $A < 0$ e $\mathcal{E} < 0$. Inserindo (5.32) na equação (4.28), temos:

$$S = \sqrt{\beta + (l + 1/2)^2}. \quad (5.33)$$

$S > 0$, implica que $\beta > -1/4$, e novamente surge naturalmente a condição para evitar o colapso para o centro.

Igualando (5.32) com (4.30), temos:

$$\mathcal{E}_{nl} = -\frac{mA^2}{2\hbar^2 (n + 1/2 \pm S)^2}. \quad (5.34)$$

Novamente para retirarmos a ambiguidade de sinais que aparecem na equação acima utilizamos a equação (4.29) com (5.30) e (5.31). Assim, temos que:

$$\mathcal{E}_{nl} > -\frac{mA^2}{2\hbar^2 (n + 1/2)^2}. \quad (5.35)$$

Logo:

$$\mathcal{E}_{nl} = -\frac{mA^2}{2\hbar^2 (n + 1/2 + S)^2}. \quad (5.36)$$

A autofunção é:

$$\Phi_{nl}(\xi) = A_n e^{-\xi/2} \xi^S L_n^{(2S)}(\xi). \quad (5.37)$$

Substituindo (5.31) na (4.27), temos:

$$\xi = \frac{2\sqrt{2m|\mathcal{E}|}}{\hbar} r. \quad (5.38)$$

Então, a autofunção fica sendo:

$$\Phi_{nl}(r) = \tilde{A}_n e^{-\frac{\sqrt{2m|\mathcal{E}|}}{\hbar} r} r^S L_n^{(2S)} \left(\frac{2\sqrt{2m|\mathcal{E}|}}{\hbar} r \right). \quad (5.39)$$

Usando $u(r) = \sqrt{r/r_0} \Phi(r)$, encontramos a solução geral do presente caso:

$$\Psi_{nlm_l}(\vec{r}) = C_{nl} e^{-\frac{\sqrt{2m|\mathcal{E}|}}{\hbar} r} r^{S-1/2} L_n^{(2S)} \left(\frac{2\sqrt{2m|\mathcal{E}|}}{\hbar} r \right) Y_l^{(m_l)}(\theta, \phi),$$

$$\mathcal{E}_{nl} = -\frac{mA^2}{2\hbar^2 (n + 1/2 + S)^2}, \quad (5.40)$$

com $S = \sqrt{\beta + (l + 1/2)^2}$. Olhando para a função radial vemos que a condição $u(0) = 0$ na origem surge naturalmente.

Potencial de Coulomb

Para o potencial de Coulomb fazemos $A = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0}$ e $\beta = 0$. O potencial é dado por:

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (5.41)$$

Solução geral:

$$u_{nl}(r) = N_{nl} e^{-\frac{\sqrt{2m|\mathcal{E}|}}{\hbar} r} r^{S+1/2} L_n^{(2l+1)} \left(\frac{2\sqrt{2m|\mathcal{E}|}}{\hbar} r \right), \quad (5.42)$$

$$\mathcal{E}_{nl} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2 (n + l + 1)^2}. \quad (5.43)$$

Com $N = n + l + 1$.

$$\Psi_{Nlm_l}(\vec{r}) = N_{Nl} e^{-\frac{\sqrt{2m|\mathcal{E}|}}{\hbar} r} r^l L_{N-l-1}^{(2l+1)} \left(\frac{2\sqrt{2m|\mathcal{E}|}}{\hbar} r \right) Y_l^{(m_l)}(\theta, \phi), \quad (5.44)$$

$$\mathcal{E}_N = -\frac{me^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2 N^2}. \quad (5.45)$$

Vemos que para este caso também temos uma degenerescência acidental, isso acontece devido à definição $N = n + l + 1$. Note que $N = 1, 2, 3, \dots$ e $l \leq N - 1$.

6 COMENTÁRIOS FINAIS

Nossa intenção neste trabalho foi a de propor uma forma alternativa para a resolução de problemas na mecânica quântica. Ainda que o método de transformadas integrais tenha aparecido em diversos trabalhos em mecânica quântica, o método específico da transformada unilateral de Fourier tem sido pouco explorado na resolução de problemas nessa área. O mesmo acontece para o método de mapeamento no potencial de Morse. Este método tem aparecido na mecânica quântica para potenciais específicos, porém não encontramos um trabalho sequer que apresentasse um tratamento tão geral quanto o que apresentamos aqui.

No Capítulo 3 utilizamos o método de transformada unilateral de Fourier para resolução do oscilador harmônico quântico. Este método é útil quando tratamos de potenciais pares, pois o domínio da transformada é o semieixo positivo. Como o potencial do oscilador harmônico é um potencial par, pudemos buscar soluções com paridade definida, sendo possível resolver o problema apenas para o semieixo positivo e depois analisar a continuidade (descontinuidade) da função e de sua derivada primeira a fim de encontrar a extensão adequada, ímpar, par, ou ambas. Mostramos que podemos encontrar o espectro do oscilador harmônico utilizando a nulidade e a finitude das derivadas n -ésimas das transformadas unilaterais de Fourier próximas à origem. Realizando a inversão das transformadas seno e cosseno de Fourier encontramos as autofunções em termos da equação hipergeométrica confluyente, já com um de seus parâmetros definido. Impondo as condições de contorno no infinito, encontramos o outro parâmetro da equação hipergeométrica confluyente, de forma que, com isto, conseguimos escrever as autofunções em termos dos polinômios de Hermite. Tendo encontrado as soluções no semieixo positivo, fizemos as extensões das soluções de acordo com as condições de continuidade na origem. Dessa forma, encontramos a solução completa do oscilador harmônico quântico.

É uma pena que a metodologia aplicada no Capítulo 3 só se mostrou útil para o potencial do oscilador harmônico quântico unidimensional. Quando tentamos aplicar o método da transformada unilateral de Fourier na equação de Schrödinger com outros potenciais encontramos equações contendo tanto a transformada seno quanto a transformada cosseno ou uma equação de ordem superior a dois. Nos dois casos o problema original se tornou mais complicado e assim o método se tornou inútil. Apesar dos transtornos, o caso do oscilador harmônico unidimensional foi proveitoso e resultou na publicação na *European Journal of Physics*.

No Capítulo 4 apresentamos o potencial de Morse generalizado unidimensional e fizemos uma breve análise qualitativa deste potencial. A equação com o potencial de Morse generalizado foi manipulada a fim de obtermos uma equação na forma da equação hipergeométrica confluyente. Aplicando as condições de contorno próximas à origem conseguimos eliminar uma das soluções de Kummer e aplicando a condição de normalizabilidade pudemos encontrar a condição de quantização do espectro do potencial de Morse. Com isso, encontramos o espectro para o potencial de Morse generalizado e encontramos a autofunção em termos do polinômio de Laguerre.

No Capítulo 5 apresentamos o potencial potência tridimensional com singularidade inversamente quadrática. A equação de Schrödinger para este potencial foi manipulada para obtermos uma equação semelhante à equação do potencial de Morse. Percebemos que para mapeamento da equação em questão na equação do potencial de Morse fosse possível só existem dois valores para o expoente δ no termo r^δ , esses valores são $\delta = 2$ e $\delta = -1$. Com $\delta = 2$ obtivemos o potencial pseudo-harmônico em uma equação semelhante a do potencial de Morse. Comparando as duas equações identificamos os parâmetros através daqueles encontrados no Capítulo 4 e assim encontramos a solução completa do potencial pseudo-harmônico, sem precisar resolver a equação deste potencial. Além das soluções do potencial pseudo-harmônico, nós obtivemos também a solução para o caso particular deste potencial, o oscilador harmônico quântico tridimensional. Com $\delta = -1$ obtivemos o potencial de Kratzer, também em uma equação semelhante a equação do potencial de Morse. Isso nos permitiu novamente identificar os parâmetros dessa equação com aqueles parâmetros da equação do potencial de Morse. Assim pudemos, de maneira simples, encontrar a solução para o potencial de Kratzer e para seu caso particular, o potencial de Coulomb. Vale pontuar também que a condição para evitar o colapso para o centro aparece naturalmente, apenas impondo a igualdade entre os parâmetros das equações, assim como a condição $u(0) = 0$. Mesmo obtendo sucesso ao mapear as equações do potencial potência tridimensional com singularidade inversamente quadrática no potencial de Morse, as normalizações não podem ser mapeadas, pois a variável da equação do Capítulo 5 é diferente da variável do potencial de Morse. Realmente, os resultados obtidos são extremamente interessantes, e um texto encontra-se em fase de redação para ser submetido à publicação.

Todos os potenciais tratados nesse trabalho possuem solução bem conhecida e pudemos comparar os resultados encontrados aqui com a literatura existente. Concluímos assim que os métodos descritos acima são bons métodos para a resolução dos problemas em questão.

Referências Bibliográficas

- [1] GASIOROWICZ, S. **Quantum Physics**. 3. ed., Hoboken: John Wiley and Sons, 2003.
- [2] LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. **Quantum Mechanics**. 1. ed., Nova Iorque: Pergamon, 1958.
- [3] GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**. 2. ed., São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.
- [4] DONG, S. H. **Factorization Method in Quantum Mechanics**. Springer Science and Business Media, 2007.
- [5] SOMMERFELD, A. **Wave Mechanics**. Nova Iorque: Academic, 1929.
- [6] SAKURAI, J. J. **Modern Quantum Mechanics**. Reading: Addison-Wesley, 1994.
- [7] FEYNMAN R. P.; HIBBS, A R. **Quantum Mechanics and Path Integrals**. Nova Iorque: McGraw-Hill, 1965.
- [8] MUÑOZ, G. Integral equations and the simple harmonic oscillator. **American Journal of Physics**, v. 66, p. 254–256, (1998). Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/66/3/10.1119/1.18855>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [9] PONOMARENKO, S. A. Quantum harmonic oscillator revisited: A Fourier transform approach. **American Journal of Physics**, v. 72, p. 1259–1260, (2004). Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/72/9/10.1119/1.1677395>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [10] ENGEL, A. Comment on Quantum harmonic oscillator revisited: A Fourier transform approach by S. A. Ponomarenko [Am. J. Phys. 72 (9) 1259–1260 (2004)]. **American Journal of Physics**, v. 74, p. 837, (2006). Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/74/9/10.1119/1.2221343>>. Acesso em: 10 Dez 2015.

- [11] PALMA, G.; RAFF, U. A novel application of a Fourier integral representation of bound states in quantum mechanics. **American Journal of Physics**, v. 79, p. 201–205, (2011). Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/79/2/10.1119/1.3531975>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [12] PIMENTEL, D. R. M.; de Castro, A. S. A Laplace transform approach to the quantum harmonic oscillator. **European Journal of Physics**, v. 34, p. 199–294, (2013). Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0143-0807/34/1/199/meta>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [13] DE CASTRO, A. S. Bound states in a double delta potential via Fourier sine and cosine transforms. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 36, p. 2307, (2014). Disponível em: <<http://www.scielo.br/pdf/rbef/v36n2/07.pdf>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [14] BUTKOV, E. **Física Matemática**. Rio de Janeiro: LTC, 1988.
- [15] BOAS, M. L. **Mathematical Methods in the Physical Sciences**. 2. ed., Nova Iorque: Wiley, 1966.
- [16] ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. **Mathematical Methods for Physicists**. 6th ed. Burlington: Elsevier, 2005.
- [17] GRADSHTEYN, I. S.; RYZHIK, I. M. **Table of Integrals, Series, and Products**. 4. ed. Nova Iorque: Academic Press, 1994.
- [18] ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. **Handbook of Mathematical Functions**. 1. ed., Toronto: Dover, 1965.
- [19] MORSE, M. P. Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels. **Physical Review**, v. 34, p. 57, (1929). Disponível em: <<http://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.34.57>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [20] DUNHAM, J. L. The Energy Levels of a Rotating Vibrator. **Physical Review**, v. 41, p. 721, (1932). Disponível em: <<http://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.41.721>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [21] LENNARD-JONES, J. E.; STRACHAN, C. The Interaction of Atoms and Molecules with Solid Surfaces. I. The Activation of Adsorbed Atoms to Higher Vibrational States. **Proceedings of the Royal Society of London A**, v. 150, p. 442, (1935). Disponível

- em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/150/870/442>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [22] GIRIFALCO, L. A.; WEIRZER, V. G. Application of the Morse Potential Function to Cubic Metals. **Physical Review**, v. 114, p. 687, (1959). Disponível em: <<http://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.114.687>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [23] WALLACE, R. Analytic quantum mechanics of the Morse oscillator. **Chemical Physics Letters**, v. 37, p. 115-118, (1976). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000926147680173X>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [24] TASELI, H. Exact solutions for vibrational levels of the Morse potential. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 31, n. 2, p. 779-788, (1998). Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/31/2/032?fromSearchPage=true>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [25] DONG, S. H.; SUN, G. H. The series solutions of the non-relativistic equation with the Morse potential. **Physics Letters A**, v. 314, p. 261-266, (2003). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960103008958>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [26] CHENG, G. The exact solutions of the Schrödinger equation with the Morse potential via Laplace transforms. **Physics Letters A**, v. 326, p. 55-57, (2004). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960104005493>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [27] FILHO, E. D.; RICOTTA, R. M. Morse potential energy spectra through the variational method and supersymmetry. **Physics Letters A**, v. 269, p. 269-276, (2000). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037596010000267X>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [28] DURU, I. H. Morse-potential Green's function with path integrals. **Physical Review D**, v. 28, p. 2689-2692, (1983). Disponível em: <<http://journals.aps.org/prd/abstract/10.1103/PhysRevD.28.2689>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [29] TEZCAN, C.; SERVER, R. A General Approach for the Exact Solution of the Schrödinger equation. **International Journal of Theoretical Physics**, v. 48, p. 337-350, (2009). Disponível em: <<http://link.springer.com/article/10.1007/s10773-008-9806-y>>. Acesso em: 10 Dez 2015.

- [30] BARUT, A. O.; INOMATA, A.; WILSON, R. The generalized Morse oscillator in the $SO(4,2)$ dynamical group scheme. **Journal of Mathematical Physics**, v. 28, p. 605-611, (1987). Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jmp/28/3/10.1063/1.527646>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [31] ARDA, A.; SERVER, R. Exact solutions of the Morse-like potential, step-up and step-down operators via Laplace transform approach. **Communications in Theoretical Physics**, v. 58, p. 27-30, (2012). Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0253-6102/58/1/05/pdf>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [32] LEE, S. Y. The hydrogen atom as a Morse oscillator. **American Journal of Physics**, v. 53, p. 753, (1985). Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/53/8/10.1119/1.14306>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [33] BAGCHI, B.; GORAIN, P. S. Morse potential and its relationship with the Coulomb in a position-dependent mass background. **Modern Physics Letters A**, v. 21, p. 2703-2708, (2006). Disponível em: <<http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217732306021888>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [34] SINGH, C. A.; DEVI, O. B. Ladder Operators for the Kratzer oscillator and the Morse potential. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 106, p. 415-425, (2006). Disponível em: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.20775/full>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [35] MONTEMAYOR, R.; URRUTIA, L. Ladder operators in the Morse potential obtained from a related harmonic oscillator. **American Journal of Physics**, v. 51, p. 641, (1983). Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/51/7/10.1119/1.13184>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [36] POST, H. R. Many-Particle Systems: II. **Proceedings of the Physical Society**, v. 69, n. 12, p. 936, (1956). Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0370-1298/69/12/409/pdf>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [37] GOLDMAN I.I.; KRIVCHENKOV V.D. **Problems in Quantum Mechanics**, Pergamon: London, 1961

- [38] CALOGERO, F. Solution of a three-body problem in one dimension. **Journal of Mathematical Physics**, v. 10, p. 2191, (1969). Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jmp/10/12/10.1063/1.1664820>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [39] Hurley, J. One-Dimensional Three-Body Problem. **Journal of Mathematical Physics**, v. 8, p. 813, (1967). Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jmp/8/4/10.1063/1.1705281>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [40] BAYRAK, O.; BOZTOZUN, I.; CIFTCI, H. Exact Analytical Solutions to the Kratzer Potential by the Asymptotic Iteration Method. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 107, p. 540, (2007). Disponível em: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.21141/full>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [41] LEROY, R. J.; BERNSTEIN, R. B. Dissociation Energy and Long-Range Potential of Diatomic Molecules from Vibrational Spacings of Higher Levels. **The Journal of Chemical Physics**, v. 52, n. 8, p. 3869, (1970). Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/52/8/10.1063/1.1673585>>. Acesso em: 10 Dez 2015.
- [42] LEBEDEV, N. N. **Special functions and their applications**, Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1965.
- [43] STRANGE, P. **Relativistic Quantum Mechanics: With Applications in Condensed Matter and Atomic Physics**, Cambridge: Cambridge University Press, 1998.

Apêndice A HARMÔNICOS ESFÉRICOS

Os harmônicos esféricos são soluções da seguinte equação diferencial:

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + l(l+1) \right] Y(\theta, \phi) = 0. \quad (\text{A.1})$$

Podemos escrever os harmônicos esféricos, já normalizados, como segue:

$$Y_l^{(m_l)}(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m_l|)!}{4\pi(l+|m_l|)!}} e^{im_l\phi} P_l^{(m_l)}(\cos\theta), \quad (\text{A.2})$$

onde $l = 0, 1, 2, \dots$ e $-l < m_l < l$. Para (A.2) temos também $\epsilon = (-1)^{m_l}$ para $m_l \geq 0$ e $\epsilon = 1$ se $m_l \leq 0$. $P_l^{(m_l)}(\cos\theta)$ são as funções associadas de Legendre, elas são definidas como:

$$P_l^{(m_l)}(x) \equiv (1-x^2)^{|m_l|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m_l|} P_l(x), \quad (\text{A.3})$$

onde $P_l(x)$ é o l -ésimo polinômio de Legendre.

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l. \quad (\text{A.4})$$

Para $m_l < 0$, os harmônicos esféricos se relacionam da seguinte forma:

$$Y_l^{(-m_l)}(\theta, \phi) = (-1)^{m_l} \left(Y_l^{(m_l)} \right)^* (\theta, \phi). \quad (\text{A.5})$$

Apêndice B FUNÇÃO GAMA

A função gama $\Gamma(x)$ é definida a partir da função $\Pi(x)$, a qual é uma generalização da representação integral para n fatorial, onde n é um número inteiro. Esta representação é dada por:

$$n! = \int_0^{\infty} t^n e^{-t} dt. \quad (\text{B.1})$$

De forma que pode ser generalizado para função $\Pi(x)$ da seguinte forma:

$$\Pi(x) = \int_0^{\infty} t^x e^{-t} dt, \quad (\text{B.2})$$

onde x não é necessariamente um número inteiro.

A integral acima converge para todos os valores de x no infinito, porém para que a integral convirja em $t = 0$ é preciso exigir que $x > -1$. Logo, a representação integral de $\Pi(x)$ está definida para todos os valores reais de $x > -1$. Podemos ver também que $\Pi(0) = 1$, que é a razão para a convenção $0! = 1$.

Como $\Pi(n) = n!$, temos que:

$$\Pi(n+1) = (n+1)\Pi(n). \quad (\text{B.3})$$

De forma que a fórmula acima pode ser generalizada para x e podemos escrever:

$$\Pi(x+1) = (x+1)\Pi(x). \quad (\text{B.4})$$

Assim, se tivermos uma tabela com o valor de x no intervalo $0 < x < 1$, a fórmula acima permite o cálculo de $\Pi(x)$ para qualquer $x > -1$. Além disso, permite uma extensão da definição de $\Pi(x)$ para a região $x < -1$.

Quando x tende para -1 a função $\Pi(x)$ tende para o infinito, dessa forma, a partir da fórmula de recorrência (B.4), concluímos que tal função possui descontinuidades infinitas para valores inteiros negativos de x . Tendo definido a função $\Pi(x)$ podemos definir agora a função $\Gamma(x)$. Esta função é relacionada com a função $\Pi(x)$ da seguinte forma:

$$\Gamma(x) = \Pi(x-1). \quad (\text{B.5})$$

De forma que $\Gamma(x)$ satisfaz as relação:

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad (x \text{ real}),$$

$$\Gamma(x) = (x-1)! \quad (x = \text{inteiro positivo}).$$

Com a representação integral:

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt \quad (x > 0). \quad (\text{B.6})$$

Evidentemente a representação $\Gamma(x)$ vai a infinito quando $x = 0, -1, -2, \dots$.

Apêndice C EQUAÇÃO HIPERGEOMÉTRICA CONFLUENTE

A equação hipergeométrica confluenta é de grande importância para a matemática em geral pois praticamente todas as funções que são estudadas são limites dela. As informações neste apêndice são as necessárias para o presente trabalho, uma discussão mais completa das propriedades da equação em questão podem ser encontradas na Ref. [18].

A equação hipergeométrica confluenta é dada por:

$$z \frac{d^2 \omega(z)}{dz^2} + (b - z) \frac{d\omega(z)}{dz} - a\omega(z) = 0. \quad (\text{C.1})$$

Esta é uma equação diferencial ordinária, homogênea de segunda ordem, ela possui uma singularidade regular em $z = 0$ e uma singularidade irregular em $z = \infty$. Suas duas soluções linearmente independentes são as funções de Kummer $M(a, b, z)$ e $U(a, b, z)$, de forma que sua solução geral fica escrita como:

$$\omega(z) = AM(a, b, z) + BU(a, b, z), \quad (\text{C.2})$$

onde A e B são constantes arbitrárias.

As funções de Kummer são dadas por:

$$M(a, b, z) = 1 + \frac{az}{b} + \frac{(a)_2 z^2}{2!(b)_2} + \dots + \frac{(a)_n z^n}{n!(b)_n} + \dots, \quad (\text{C.3})$$

onde $(a)_0 = 1$ e $(a)_n = a(a+1)(a+2) \cdots (a+n-1)$, e $(a)_0 = 1$.

$$U(a, b, z) = \frac{\pi}{\text{sen } \pi b} \left[\frac{M(a, b, z)}{\Gamma(1+a-b)\Gamma(b)} - z^{1-b} \frac{M(1+a-b, 2-b, z)}{\Gamma(a)\Gamma(2-b)} \right]. \quad (\text{C.4})$$

Atentemos para o comportamento próximo à origem das funções de Kummer.

Para $z \rightarrow 0$:

$$M(a, b, z) = 1 + \dots,$$

$$U(a, b, z) \rightarrow \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)} z^{1-b} + \dots, \quad b \neq 1. \quad (\text{C.5})$$

Para $|z| \rightarrow \infty$ (a, b fixos):

$$\frac{M(a, b, z)}{\Gamma(b)} \rightarrow \frac{e^{i\pi a} z^{-a}}{\Gamma(b-a)} + \frac{e^z}{\Gamma(b)} z^{a-b}, \quad -1/2\pi < \arg z < 3/2\pi,$$

$$U(a, b, z) \rightarrow z^{-a}, \quad -3/2\pi < \arg z < 3/2\pi. \quad (\text{C.6})$$

C.1 RELAÇÃO DAS FUNÇÕES DE KUMMER COM OS POLINÔMIOS DE LAGUERRE E DE HERMITE

C.1.1 Polinômios de Laguerre

Os polinômios de Laguerre aparecem como solução da equação de Laguerre:

$$x \frac{d^2 L_n^{(\alpha)}(x)}{dx^2} + (\alpha + 1 - x) \frac{dL_n^{(\alpha)}(x)}{dx} + n L_n^{(\alpha)}(x) = 0. \quad (\text{C.7})$$

Essa equação é definida no intervalo $[0, \infty)$.

Os polinômios de Laguerre são um caso especial da função de Kummer $M(a, b, z)$, eles ocorrem quando $a = -n$. Assim temos:

$$L_n^{(b-1)}(z) = \frac{b_n}{n!} M(-n, b, z). \quad (\text{C.8})$$

Os polinômios de Laguerre estão relacionados com os polinômios de Hermite, essa relação é dada por:

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

$$L_n^{(1/2)}(x) = \frac{(-1)^n}{2^{2n+1} n!} \frac{H_{2n+1}(\sqrt{x})}{\sqrt{x}}. \quad (\text{C.9})$$

C.1.2 Polinômios de Hermite

Os polinômios de Hermite são soluções da equação de Hermite. Esta equação é dada por:

$$\frac{d^2 H_n(x)}{dx^2} - 2x \frac{dH_n(x)}{dx} + 2n H_n(x) = 0. \quad (\text{C.10})$$

A equação acima é definida no intervalo $(-\infty, \infty)$.

Os polinômios de Hermite também são um caso especial da função de Kummer $M(a, b, z)$, eles são encontrados quando $a = -n/2$, $b = 1/2$ e a variável z aparece ao

quadrado, assim temos:

$$H_{2n}(z) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} M(-n, 1/2, z^2),$$

$$H_{2n+1}(z) = (-1)^n \frac{(2n+1)!}{n!} 2z M(-n, 3/2, z^2). \quad (\text{C.11})$$

A paridade dos polinômios de Hermite é dada de acordo com o grau do polinômio, se n for par o polinômio será par e se n for ímpar o polinômio será ímpar. O comportamento destes polinômios na origem é dado por: $dH_{2n}/dz|_{z \rightarrow 0} = 0$ e $H_{2n+1}|_{z \rightarrow 0} = 0$.