



UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CEARÁ

MARCO ANTONIO BEZERRA DINIZ

**SOLUÇÕES ANALÍTICAS DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM
UM PROBLEMA DE MASSA DEPENDENTE DA POSIÇÃO**

**FORTALEZA – CEARÁ
2011**

MARCO ANTONIO BEZERRA DINIZ

SOLUÇÕES ANALÍTICAS DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UM
PROBLEMA DE MASSA DEPENDENTE DA POSIÇÃO

Monografia apresentada ao Curso de Graduação Física do Centro de Ciências e Tecnologia da Universidade Estadual do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Licenciado em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcony Silva Cunha.

FORTALEZA – CEARÁ
2011

D585s Diniz, Marco Antonio Bezerra
Soluções analíticas da equação de Schrödinger em um problema de massa dependente da posição / Marco Antonio Bezerra Diniz. — 2011.
81 f. : il., enc. ; 30 cm.

Monografia (Graduação) – Universidade Estadual do Ceará, Centro de Ciências e Tecnologia, Curso de Licenciatura em Física, Fortaleza, 2011.

Orientação: Prof. Dr. Marcony Silva Cunha.

1. Equação de Schrödinger. 2. Massa dependente da posição. 3. Equação de Henn. 4. Ben-Daniel-Duke. I. Título.

CDD: 530

MARCO ANTONIO BEZERRA DINIZ

**SOLUÇÕES ANALÍTICAS DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UM
PROBLEMA DE MASSA DEPENDENTE DA POSIÇÃO**

Monografia apresentada ao Curso de Graduação Física do Centro de Ciências e Tecnologia da Universidade Estadual do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Licenciado em Física.

Aprovada em: ____/____/____.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Marcony Silva Cunha (Orientador)
Universidade Estadual do Ceará – UECE

Prof. Dr. Hugo R. Christiansen
Universidade do Vale do Acaraú - UVA

Prof. Dr. Ricardo Renan Landim de Carvalho
Universidade Federal do Ceará – UFC

Aos meus Pais Cícero Batista
Diniz e Antonia Bezerra de
Morais Diniz.

DEDICO

AGRADECIMENTOS

A Deus, por ter me amparado em todos os momentos da minha vida, me ajudando, orientando e incentivando a seguir. A Ele meus eternos agradecimentos.

Ao meu pai Cícero Batista Diniz e minha mãe Antonia Bezerra de Moraes Diniz, que tanto contribuíram com a minha formação, se fazendo presente em todos os momentos e vibrando pelo meu sucesso. Obrigado por tudo.

Ao meu irmão José Nilo Bezerra Diniz e minha irmã Maria Isabel Bezerra Diniz que tantas vezes me apoiaram para seguir em frente.

Ao meu orientador, professor Dr. Marcony Silva Cunha, pelo tema desse trabalho, e por me ajudar me direcionando com um plano de estudo que segui a risca. Pela paciência, atenção e dedicação oferecidas durante a construção deste trabalho e em suas aulas.

Ao professor Silas Lenz pelas preciosas aulas de alto nível de Eletricidade e magnetismo I, Eletromagnetismo I e II que cursei que abriram meus olhos de como é realmente a Física.

Ao professor Kleiton do Carmo por suas excelentes aulas ajudando-me a crescer como aluno.

Aos meus grandes amigos André Victor, Bruno Abreu, Cícero Arthur, Daniel Alves, Kilvia Ávila, Maurício Soares, Samuel Nogueira, Thiago Moratti e Whallen Serra e a todas as pessoas que contribuíram para a concretização desta vitória. Muito obrigado!

“De tudo ficaram três coisas...
A certeza de que estamos começando...
A certeza de que é preciso continuar...
A certeza de que podemos ser interrompidos
antes de terminar...
Façamos da interrupção um caminho novo...
Da queda, um paço de dança...
Do medo, uma escada...
Do sonho, uma ponte...
Da procura, um encontro!”

Fernando Sabino.

RESUMO

Na equação de Schrödinger, a massa é geralmente tratada como constante. Contudo, há diversas situações onde a matéria se comporta como se efetivamente a massa dependesse da posição. Inicialmente proposta para descrever impurezas em cristais, a teoria de massa efetiva tem sido um componente relevante para o estudo de propriedades eletrônicas de portadores de carga em semicondutores, para o estudo de pontos quânticos, de líquidos quânticos, clusters de ^3He etc. Em geral, essas teorias transformam uma interação potencial complicada em problemas onde a massa (de maneira efetiva) depende da posição. Neste trabalho, mostra-se que a equação de Schrödinger unidimensional estacionária que descreve interações tais que a massa pode ser considerada dependente da posição na forma $m(x) = m \operatorname{sech}^2(x)$, sujeita a um potencial nulo, pode ser transformada em uma equação equivalente a equação de Schrödinger estacionária, em um novo sistema de coordenadas onde a massa pode ser vista como constante e sujeita a um potencial efetivo não nulo \mathcal{V} . Encontra-se então uma solução analítica para o problema em termos de uma função de Heun local. Em seguida mostra-se que, para este problema em particular, a solução encontrada pode ser transformada em uma função hipergeométrica de Gauss por meio de uma transformação direta na variável independente da solução local de Heun.

Palavras-chave: Equação de Schrödinger. Massa dependente da posição. Equação de Heun. BenDaniel-Duke.

ABSTRACT

In the Schrödinger equation, the mass is usually treated as constant. However, there are many situations in which the mass effectively is position dependent. Initially proposed to describe impurities in crystals, the effective mass theory has been an essential component for the study of electronic properties of charge carriers in semiconductor hetero-structures, in the study of quantum dots, quantum liquids, clusters of ^3He , etc. In general, these theories seek to address a complex (potential) interaction in a manner equivalent to a problem where the mass (effectively) depends on the position. In this work, one shows that one-dimensional stationary Schrödinger equation that describes a interaction where mass can be considered spatially dependent, such that $m(x) = m \operatorname{sech}^2(x)$, subject to a null potential, can be transformed into an equation similar to the stationary Schrödinger equation via coordinate transformations where an effective constant mass is now subject to a nonzero potential V . One finds an analytical solution to the problem in terms of a local Heun's function. Then one shows that, for this particular problem, the solution can be transformed into a Gauss hypergeometric function by a direct transformation of the independent variable

Key words: Schrödinger's equation. Position dependent mass. Heun's equation. BenDaniel-Duke.

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1	Estados de energia possíveis confinados no potencial.....	41
Gráfico 2	Soluções (simétricas) da Eq. (84) para $n = 1$ (linha contínua), $n = 3$ (linha tracejada) e $n = 5$ (linha pontilhada).....	42
Gráfico 3	Soluções (simétricas) normalizadas da Eq. (86) para $n = 1$ (linha contínua), $n = 3$ (linha tracejada) e $n = 5$ (linha pontilhada).....	42
Gráfico 4	Soluções (antissimétricas) da Eq. (85) para $n = 2$ (linha contínua), $n = 4$ (linha tracejada) e $n = 6$ (linha pontilhada).....	43
Gráfico 5	Soluções (antissimétricas) normalizadas da Eq. (87) para $n = 2$ (linha contínua), $n = 4$ (linha tracejada) e $n = 6$ (linha pontilhada).....	43

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO.....	11
2.	EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER.....	13
2.1	INTRODUÇÃO.....	13
2.2	FUNDAMENTOS DA MECÂNICA QUÂNTICA.....	14
2.3	CARACTERÍSTICAS DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER.....	15
2.4	DENSIDADES DE CORRENTE DE PROBABILIDADE DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER.....	17
2.5	OBTENDO A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO.....	19
3	EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER COM MASSA DEPENDENTE DA POSIÇÃO.....	24
3.1	ASPECTOS GERAIS.....	24
3.2	OBTENDO A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER DE MASSA CONSTANTE..	28
4	UM PROBLEMA DE PDM.....	30
4.1	INTRODUÇÃO AO PROBLEMA.....	30
4.2	SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER DOM PDM PARA O CASO $V(z) = 0$	33
4.2.1	SOLUÇÕES DE PARIDADE PAR.....	34
4.2.2	SOLUÇÕES DE PARIDADE ÍMPAR.....	36
4.3	REDUZINDO A SOLUÇÃO A UMA FUNÇÃO HIPERGEOMÉTRICA.....	37
4.4	DETERMINANDO A QUANTIZAÇÃO DA ENERGIA.....	39
5	CONCLUSÕES.....	45
	REFERÊNCIAS.....	46
	APÊDICE A- CARACTERÍSTICAS DE UMA EQUAÇÃO HIPERGEOMÉTRICA DE GAUSS.....	51
	APÊDICE B- EQUAÇÃO DE HEUN.....	56
	APÊDICE C.....	63

1. INTRODUÇÃO

A Mecânica Quântica é uma teoria que se encontra bastante consolidada. Esta é hoje um dos pilares da física moderna. Muitos fenômenos microscópicos e alguns macroscópicos só foram explicados com o desenvolvimento da Mecânica Quântica. Contudo, mesmo com os diversos frutos tecnológicos do seu sucesso, esta apresenta algumas divergências de interpretações. Um estudo mais detalhado das diversas interpretações associadas a ela pode ser encontrado em PINTO NETO (2010). Este trabalho utiliza-se da interpretação mais difundida, conhecida como interpretação de Copenhague.

Em Mecânica Clássica as equações de movimento de Hamilton determinam todas as informações associadas a uma dada partícula. O análogo quântico destas equações é conhecido como equação de Schrödinger. Dela, pode-se obter todas as informações de um estado. Diferentemente de sistemas clássicos, onde uma partícula possui uma trajetória bem definida no espaço, um estado quântico é descrito por uma evolução temporal de uma função de onda (solução da equação de Schrödinger).

A equação de Schrödinger descreve uma partícula de massa constante como uma onda de matéria. Esta tem sido útil para explicar diversos problemas em Mecânica Quântica, como a descrição do átomo de hidrogênio. Contudo, ao longo dos anos, surgiram problemas que levaram a escrever a equação de Schrödinger com uma dependência (efetiva) da massa com a posição. Em particular, sistemas de massa dependente da posição são de longa data na física, veja SHEWELL (1959).

Inicialmente proposta para descrever impurezas em cristas, a equação de Schrödinger com massa dependente da posição (PDM, do inglês *Position Dependent Mass*) tem sido uma importante ferramenta para explicar propriedades eletrônicas de portadores de carga em semicondutores (BASTARD, 1988), para o estudo de pontos quânticos (SERRA e LIPPARINI, 1997), de líquidos quânticos (ARIAS DE SAAVEDRA et al., 1994), além de problemas da dependência de forças nucleares com a velocidade relativa de dois núcleos (ROJO e LEVINGER, 1961; RAZAVY, FIELD e LEVINGER, 1962).

Este trabalho, mesmo que incipiente, tem como objetivo introduzir o leitor à idéia de sistemas de massa dependente da posição na mecânica quântica. Pode-se encontrar um breve comentário, no capítulo 2, sobre o problema de ordenamento do operador energia cinética, e a ambigüidade gerada na quantização canônica do operador clássico.

Aqui, propõe-se solucionar um sistema quântico com PDM no qual a massa possua uma dependência espacial do tipo $m(x) = m_0 \operatorname{sech}^2(x/a)$ para o ordenamento proposto por BENDANIEL e DUKE (1966). Mostra-se uma equivalência entre um sistema com PDM e outro de massa constante. Para se averiguar as soluções, deste problema, transforma-se a equação de Schrödinger em uma equação geral de Heun a fim de obter as soluções mais gerais possíveis, expressando as soluções em termos de funções locais de Heun (RONVEAUX, 1995). Em particular, as soluções apresentam-se passíveis de uma transformação polinomial na variável independente, podendo expressar esta em termos de funções hipergeométricas (MAIER, 2006).

Este trabalho organiza-se da seguinte forma: (i) no segundo capítulo, encontra-se inicialmente uma rápida revisão sobre Mecânica Quântica ondulatória; (ii) no terceiro são introduzidos os conceitos de sistemas onde a massa (de maneira efetiva) dependa da posição; apresenta-se o problema de ordenamento do operador energia cinética; constrói-se uma forma de relacionar a equação de Schrödinger com PDM e uma de massa constante; (iii) por fim, no capítulo quatro apresenta-se o problema que se pretende solucionar; suas soluções e condições de quantização da energia. Nos apêndices A e B encontram-se os conceitos sobre equação Hipergeométrica e de Heun, necessários para realizar a análise proposta no último capítulo.

2. EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Neste capítulo, encontra-se uma breve discussão relacionada ao surgimento da Física Quântica, em particular ao desenvolvimento da equação de Schrödinger. Apresenta-se um conjunto de características matemáticas, e sua interpretação física mais aceita.

2.1 INTRODUÇÃO

No final do século XIX, podia-se encontrar na Física Clássica dois problemas que afligiam os pesquisadores. Problemas estes que levaram o grande físico a dizer

“No céu azul da física clássica existem apenas duas nuvens a serem dirimidas...”

Lorde Kelvin.

Esta frase aparece frequentemente em livros, palestras e em textos publicados na internet, na maioria das vezes sendo interpretada de maneira errada. A primeira nuvem refere-se ao desenvolvimento da teoria ondulatória e ao experimento de Michelson e Morley. Já a segunda, refere-se à equipartição da energia proposta por Maxwell-Boltzmann. Essas nuvens mais tarde deram origem a Teoria da Relatividade e a Mecânica Quântica.

Estando ciente da importância e das possíveis implicações que as respostas destes problemas trariam para a Física Clássica, Lorde Kelvin dedicou algumas palestras e um artigo inteiro na discussão destes problemas (KELVIN, 1900). Informações relacionadas a autenticidade da frase citada anteriormente podem ser encontradas em SCHULZ (2007) .

A solução do problema da radiação do corpo negro por Planck marcou, para muitos, o início da Teoria Quântica. É a partir dela que surge a noção de pacotes de energia para explicar o espectro da radiação do corpo negro.

Posteriormente, idéias como a de Louis De Broglie¹ lançadas em 1924 (DE BROGLIE, 1949), experimentos como de DAVISSON e GERMER (1927), onde feixes de elétrons são difratados por um cristal de níquel, e o experimento de Stern-Gerlach (GERLACH e STERN, 1922) forneceram suporte para o desenvolvimento da mecânica quântica (principalmente para a mecânica ondulatória).

2.2 FUNDAMENTOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

Em Mecânica Quântica, uma partícula em um sistema fechado pode ser descrito por um estado $|\Psi\rangle$ que evolui no tempo obedecendo a equação de Schrödinger (isso ocorre de maneira determinista). Diferentemente da Mecânica Clássica, um dado estado $|\Psi\rangle$ não é um objeto bem definido no tempo e no espaço, este fornece apenas a amplitude de probabilidade de se obter diferentes resultados ao se efetuar uma medida.

Suponha que um estado $|\Psi\rangle$ possa ser expresso em termos da combinação linear de dois auto-estados, ou seja, $|\Psi\rangle = a_1|\phi_1\rangle + a_2|\phi_2\rangle$ ². Antes de um observador externo inferir algo sobre o estado $|\Psi\rangle$, tanto $|\phi_1\rangle$ como $|\phi_2\rangle$ existem simultaneamente. Contudo, no momento em que um dado observador externo efetua a medida sobre o estado $|\Psi\rangle$, este observará ou o autovalor a_1 para $|\phi_1\rangle$ ou a_2 para $|\phi_2\rangle$. Isso é conhecido como colapso da função de onda.

A influência do observador na medida e a incerteza associada a qual autovalor dos possíveis estados a medida irá assumir tem sido alvo de estudos filosóficos da Mecânica Quântica. Esta é conhecida como problema da medida e foi primeiramente estudada por von NEUMANN (1932). Este problema é discutido com uma abordagem mais contemporânea em PESSOA JR (1992).

Além da interpretação do colapso da função de onda existem muitas outras que são discutidas na literatura. Caso o leitor se interesse por este

¹ Em setembro de 1924 De Broglie publicou um artigo na revista inglesa *Philosophical Magazine*, no qual apresentava algumas partes de sua tese de doutorado, com vista a fundamentar a possível existência de ondas de matéria.

² Estes podem ser o spin up ou down de um elétron.

assunto, sugere-se a leitura de PINTO NETO (2010). Esta obra trata de algumas das mais famosas interpretações da Mecânica Quântica, podendo ser citado a interpretação de Copenhague, emaranhamento, interpretação de vários mundos, dentre outras. Esta monografia não se prende a discussão de tais interpretações. Aqui se utiliza a mais difundida, conhecida como interpretação de Copenhague.

Sabendo da influência do observador no estado ao realizar a medida, ou seja, gera-se sempre uma ligeira mudança (perturbação) no estado, HEISENBERG (1927) introduziu o princípio da incerteza. Este prediz a relação entre duas medidas simultâneas. O princípio da incerteza impõe que ao se realizar medidas simultâneas entre a posição e o momento linear de uma partícula, o produto das incertezas associadas às medidas não deve assumir valor inferior a $\hbar/2$, ou seja,

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1)$$

A mecânica quântica é desenvolvida no espaço de Hilbert (espaço complexo de dimensão geralmente infinita). Neste, estão contidos os possíveis estados que descrevem uma partícula, os quais são representados por vetores kets $|\psi\rangle$ (para cada vetor ket existe um vetor bra, $\langle\psi|$, associado a este). Para uma maior compreensão dos aspectos da mecânica quântica é sugerido à leitura dos seguintes livros textos adotado em muitos cursos de graduação e pós-graduação: GRIFFITHS (2005), de TOLEDO PIZA (2009), COHEN (1977), DIRAC (1996) e SKURAI (2010).

2.3 CARACTERÍSTICAS DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

No ano de publicação da tese de De Broglie, em 1924, Schrödinger era professor da Universidade de Zurique (nesta época trabalhava com Física Estatística e das Radiações). Cerca de dois anos depois, Schrödinger teve conhecimento da tese de de Broglie o que o incentivou a buscar uma equação de movimento para as ondas de matéria. Nesta época, Schrödinger participava de um ciclo de seminários na Universidade de Zurique, organizado por Peter Debye, onde foi incumbido de apresentar a tese de de Broglie. Posteriormente,

Schrödinger publicou uma série de sete artigos contendo aspectos fundamentais da teoria quântica não relativística (ROCHA, 2002).

Uma das mais famosas equações da mecânica quântica, ou até mesmo da Física, a equação de Schrödinger é uma equação diferencial parcial linear contendo uma derivada temporal de primeira ordem e uma espacial de segunda ordem. Esta tem como solução a função de onda (comumente chamada de Ψ) que representa a descrição ondulatória de uma partícula material. A função de onda determina o estado de uma partícula, ou seja, contém todas as informações necessárias que se pode obter desta.

Apresenta-se abaixo o conjunto de características ondulatórias que descrevem uma partícula material:

- (i) Deve-se substituir o conceito clássico de trajetória por uma evolução temporal de um estado. O estado de uma partícula deve ser representado por uma função de onda $\Psi(r, t)$, e deve conter todas as informações associadas a este (exceto o spin).
- (ii) $\Psi(r, t)$ é uma função complexa definida no espaço de Hilbert e interpretada como amplitude de probabilidade.
- (iii) A equação de Schrödinger é escrita da seguinte forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \mathbf{H}\Psi(r, t) \quad (2)$$

Onde \mathbf{H} representa o operador hamiltoniano e é dado por

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + V \quad (3)$$

- (iv) A probabilidade de se encontrar uma partícula em todo o espaço deve ser um, e é escrita como

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(r, t) \Psi(r, t) dr^3 = 1 \quad (4)$$

Assim, $\langle \psi | \varphi \rangle$ é dito ser o produto interno no espaço de Hilbert e definido como

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(r, t) \varphi(r, t) dr^3 \quad (5)$$

Uma vez que se define $\Psi(r, t)$ como amplitude de probabilidade, deve-se encontrar a representação da densidade de corrente de probabilidade associada a esta. Isto se encontra feito na próxima seção. Por simplicidade, adota-se aqui um tratamento unidimensional da equação de Schrödinger.

2.4 DENSIDADES DE CORRENTE DE PROBABILIDADE DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Deve-se ter em mente que a equação de Schrödinger é a representante quântica das equações de movimento de Hamilton. Isso nos diz que todas as informações associadas à dinâmica de um sistema quântico podem ser encontradas na solução desta equação. Como já foi mencionado, o produto interno de uma dada função de onda com ela mesma deve assumir valor igual a um (quando normalizada)

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \Psi^* dx = 1$$

Isto deve-se ao fato de que a função de onda representa a amplitude de probabilidade de se encontrar uma partícula em uma determinada posição do espaço (o produto interno está diretamente relacionado com a probabilidade em se).

Deve-se lembrar que a onda aqui é uma onda de matéria. Estas ondas dão a probabilidade de se encontrar uma partícula material no espaço em um determinado tempo. Uma vez que esta probabilidade flui como uma onda pode-se associar a esta uma densidade de corrente de probabilidade. Nomeia-se aqui a densidade de probabilidade dada por $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ e deve-se buscar a equação da continuidade para esta. Para isto escreve-se a equação de Schrödinger e sua conjugada da seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right] \Psi(x, t) \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x, t) = -\frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right] \Psi^*(x, t) \quad (7)$$

Como $\rho(x, t)$ é a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula em um dado tempo t e posição x , têm-se

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} [\Psi^*(x, t) \Psi(x, t)]$$

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} \Psi(x, t) + \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \Psi^*(x, t) \quad (8)$$

Substituem-se as derivadas parciais com relação ao tempo pelas das Eq. (6) e (7) é possível facilmente obtido

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \right] \quad (9)$$

Assim a Eq. (9) pode ser escrita da seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} J(x, t) = 0 \quad (10)$$

Onde defini-se $J(x, t)$ por

$$J(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(x, t) - \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right] \quad (11)$$

$J(x, t)$ é denominada *densidade de corrente de probabilidade* pois representa a taxa com que a probabilidade flui por um ponto x , ou seja, dá o aumento ou diminuição, em um dado ponto do espaço e instante do tempo, da probabilidade de se encontrar uma partícula massiva neste.

2.5 OBTENDO A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO

A equação de Schrödinger é, originalmente, dependente do tempo. Contudo, existem determinadas situações na qual se pode obter uma equação independente do tempo. Para o caso de potenciais que sejam funções apenas da posição, ou seja, $V(r)$, pode-se utilizar o método de separação de variáveis na equação de Schrödinger e obter sua equação independente do tempo. Para isto deve-se supor que a função de onda possa ser escrita como

$$\Psi(r, t) = \psi(r)\varphi(t) \quad (12)$$

Feito isto, deve-se implementar a mudança proposta para a função de onda diretamente na Eq. (2), a fim de obter o seguinte resultado

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi(r)\varphi(t)] = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 [\psi(r)\varphi(t)] + V(r)\psi(r)\varphi(t) \quad (13)$$

$$i\hbar\psi(r) \frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi(t) \nabla^2 \psi(r) + V(r)\psi(r)\varphi(t) \quad (14)$$

Divide-se ambos os lados por $\psi(r)\varphi(t)$ obtêm-se

$$i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(r)} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \quad (15)$$

Uma vez que o lado direito é função apenas da posição, e o lado esquerdo, do tempo, tal igualdade só poderá ser possível caso ambos os lados assumam um valor constante. Sabendo disto, pode-se assumir que este valor seja $\hbar\omega$ onde ω tem dimensão de frequência angular. Feito isto pode-se obter as duas equações abaixo

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = -i\omega\varphi(t) \quad (16)$$

$$\varphi(t) = e^{-i\omega t} \quad (17)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + V(r)\psi(r) = \hbar\omega\psi(r) \quad (18)$$

A Eq. (18) é a equação de Schrödinger independente do tempo ou equação estacionária. No caso estacionário, encontra-se presente apenas uma frequência angular ω . Pode-se recorrer à fórmula de Einstein-Planck onde $E = \hbar\omega$ e reescrever as Eqs. (17) e (18) em termos da energia.

$$\varphi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (19)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r) \quad (20)$$

Na Eq. (20) o termo que antecede $\psi(r)$ do lado esquerdo é o hamiltoniano \mathbf{H} e E corresponde a seu autovalor. Para sistemas estacionários, a função de onda representativa é agora dada por

$$\Psi(r, t) = \psi(r)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (21)$$

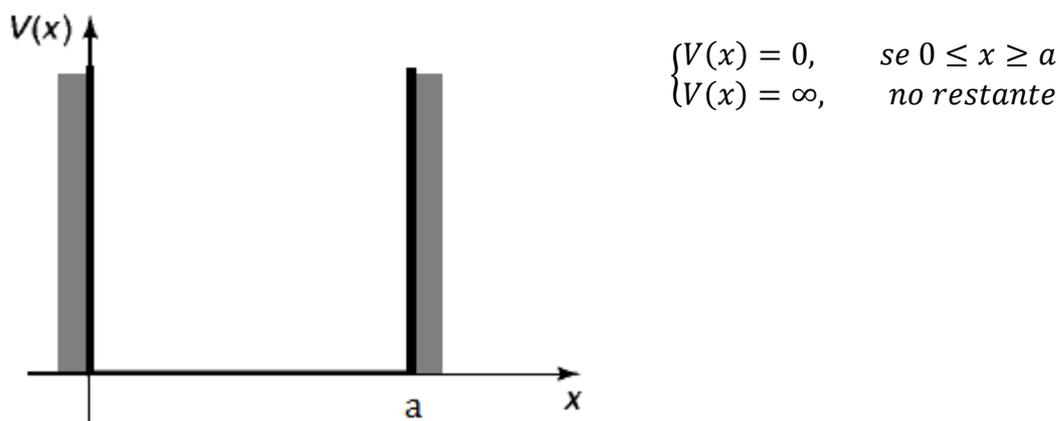
É fácil notar que a densidade probabilidade $\rho(x, t) = |\Psi(r, t)|^2$ é, neste caso, independente do tempo. A equação de onda pode também ser construída como a combinação linear de diversas soluções da equação de Schrödinger estacionária, de modo que

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(r) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (22)$$

onde c_n é o peso estatístico associado a cada solução $\psi_n(r)$ da equação de Schrödinger estacionária. Esta superposição de estados pode gerar padrões de interferência como os presentes no experimento da fenda dupla de Young.

Por questões didáticas, apresenta-se aqui uma aplicação da equação de Schrödinger. Considere um poço quadrado infinito representado na figura 1. Este é o problema mais comum da mecânica quântica. Deve-se supor uma partícula confinada em um potencial deste tipo e esta não deve penetrar a barreira. Qual a função de onda que descreve uma partícula sujeita a este potencial? Como é descrita a relação da energia com os possíveis estados desta partícula?

Figura 1. Representação de um poço potencial com barreiras infinitas.



Fonte: Própria.

- (i) Para encontrar a função de onda deste problema pode-se supor que a função de onda pode ser escrita na forma $\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$, com isso nos resta apenas encontrar a solução da seguinte equação diferencial.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad (23)$$

Na região onde a partícula encontra-se confinada o potencial é nulo, assim

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \quad (24)$$

Definindo $k^2 = 2mE/\hbar^2$ pode-se verificar que a solução matemática para este problema pode ser escrita como:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (25)$$

Contudo, a função de onda deve se anular nas extremidades do poço, isto é, $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Na primeira condição a função $\cos(kx)$ não se anula o que indica que B deve ser zero. Fazendo $x = a$ pode-se verificar que $ka = \pm\pi, \pm 2\pi, \pm 3\pi \dots$, ou $k_n = n\pi/a$, k não deve assumir valor igual a zero para que $\psi(x) \neq 0$. Com isso temos que a função de onda é representada por

$$\Psi_n(x, t) = A \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (26)$$

- (ii) Para determinar as possíveis energias deve-se lembrar que a constante k está relacionada com esta por meio de $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Feito isto é de fácil verificação que

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (27)$$

- (iii) Por fim, pode-se determinar a constante A por meio da condição $\langle \Psi(x, t) | \Psi(x, t) \rangle = 1$, o que fornece

$$\langle \Psi(x, t) | \Psi(x, t) \rangle = A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx$$

$$\therefore A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Assim $\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-iE_n t/\hbar}$ é a função de onda associada a uma partícula presa em um poço potencial infinito, e a Eq.(27) nos diz quais as possíveis energias para um dado estado n de uma partícula (nota-se que a energia não é contínua, esta apresenta-se quantizada para certos valores de n).

3. EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER COM MASSA DEPENDENTE DA POSIÇÃO

Discute-se as principais características da equação de Schrödinger com massa dependente da posição, (PDM, do inglês Position Dependent Mass), bem como o problema da ambigüidade que surge na quantização canônica do operador hamiltoniano. Apresenta-se uma forma de se transformar uma equação de Schrödinger com PDM em uma equação equivalente de massa constante.

3.1 ASPECTOS GERAIS

Na equação de Schrödinger, a massa é geralmente tratada como constante. Contudo, há diversas situações onde a matéria se comporta como se efetivamente a massa dependesse da posição. Inicialmente proposta para descrever impurezas em cristais, a teoria de massa efetiva tem sido um componente relevante para o estudo de propriedades eletrônicas de portadores de carga em semicondutores (BASTARD, 1988), para o estudo de pontos quânticos (SERRA e LIPPARINI, 1997), de líquidos quânticos (ARIAS DE SAAVEDRA et al., 1994), clusters de ^3He (BARRANCO et al., 1997), etc. Em geral, essas teorias transformam uma interação potencial complicada em problemas onde a massa (de maneira efetiva) dependa da posição.

A busca por sistemas analíticos onde a massa dependa da posição tem despertado o interesse de muitos autores. Em situações onde se considera a massa efetiva dependente da posição, há reconhecidamente certa ambigüidade de ordenamento do operador energia cinética na equação de Schrödinger. O problema surge a partir da quantização canônica do hamiltoniano clássico. Este é um problema de longa data na mecânica quântica tendo sido discutido inclusive pelos seus fundadores, que realizaram estudos nesta direção, [veja por exemplo SHEWELL (1959)]. A grande questão é: como deve ser escrito este operador?

Na tentativa de generalizar o problema, von ROOS (1983) introduziu uma forma genérica de se encontrar o operador energia cinética, o qual deve ser dado por

$$\hat{T} = \frac{1}{4} [m^\alpha(x) \mathbf{p} m^\beta(x) \mathbf{p} m^\gamma(x) + m^\gamma(x) \mathbf{p} m^\beta(x) \mathbf{p} m^\alpha(x)] \quad (28)$$

Aqui \hat{T} é um operador hermitiano, $m(x)$ é função da posição, α, β, γ são constantes arbitrárias tais que $\alpha + \beta + \gamma = -1$ e \mathbf{p} é o operador momento linear. Contudo, isto não resolve o problema, uma vez que é possível obter diversos operadores diferentes a partir deste. Alguns tipos de operador energia cinética, utilizados na literatura, construídos a partir do ordenamento proposto por von Roos, podem ser encontrados em KOÇ e SAYIN (2010). Estes são listados na Tabela-1 (daqui em diante o termo de dependência da posição encontra-se suprimido de modo que escreve-se $m(x) = m$).

Tabela-1: Alguns Operadores Energia Cinética

Valores de $\alpha; \beta; \gamma;$	Operador energia cinética
$\alpha = -1; \beta = 0; \gamma = 0$	$\hat{T} = \frac{1}{4} \left[\frac{1}{m} \mathbf{p}^2 + \mathbf{p}^2 \frac{1}{m} \right]$
$\alpha = -\frac{1}{2}; \beta = -\frac{1}{2}; \gamma = 0$	$\hat{T} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{m}} \mathbf{p}^2 \frac{1}{\sqrt{m}} \right]$
$\alpha = -\frac{1}{2}; \beta = 0; \gamma = -\frac{1}{2}$	$\hat{T} = \frac{1}{2} \left[\mathbf{p} \frac{1}{\sqrt{m}} \mathbf{p} \frac{1}{\sqrt{m}} + \frac{1}{\sqrt{m}} \mathbf{p} \frac{1}{\sqrt{m}} \mathbf{p} \right]$

Fonte: Própria.

Em alguns casos, opta-se por incluir no ordenamento de von Roos algum ordenamento já conhecido. Escolhas deste tipo podem ser encontradas em de SOUZA DUTRA e ALMEIDA (2000) onde o operador energia cinética é escrito incluindo a possibilidade do ordenamento de Weyl.

$$\hat{T} = \frac{1}{4(a+1)} [a(m^{-1} \mathbf{p}^2 + \mathbf{p}^2 m^{-1}) + m^\alpha \mathbf{p} m^\beta \mathbf{p} m^\gamma + m^\gamma \mathbf{p} m^\beta \mathbf{p} m^\alpha] \quad (29)$$

A partir deste pode-se facilmente recuperar a forma do ordenamento proposto por von Roos fazendo a simples escolha de parâmetro $a = 0$.

A ambigüidade indica que a equação de Schrödinger não é rigorosamente adequada para uma aproximação de massa efetiva, no caso de dependência com a posição. Com o intuito de encontrar uma equação que represente a mesma física como a equação de Schrödinger no caso limite de baixas energias, RENAN, PACHECO e ALMEIDA (2000) propuseram o uso da Equação de Dirac³ para contornar esse problema. Constatou-se que os resultados obtidos com a equação de Dirac corroboram com o ordenamento proposto por BENDANIEL e DUKE (1966) para o operador energia cinética, no formalismo de Schrödinger.

O problema da ambigüidade pode ser melhor compreendido quando escreve-se o operador energia cinética de uma forma diferente. Através das relações de comutação canônicas, pode-se tentar colocar o operador momento do lado direito da equação a fim de melhor observar sua atuação na função de onda, separando os termos ambíguos dos não ambíguos. Primeiramente, deve-se ter em mente que

$$\begin{cases} m^\gamma \mathbf{p} m^\beta \mathbf{p} m^\alpha = \frac{\mathbf{p}^2}{m} - i\hbar(\beta + 2\alpha) \frac{m'}{m^2} \mathbf{p} - \hbar^2 \alpha(\alpha + \beta - 1) \frac{(m')^2}{m^3} - \hbar^2 \alpha \frac{m''}{m^2} \\ m^\alpha \mathbf{p} m^\beta \mathbf{p} m^\gamma = \frac{\mathbf{p}^2}{m} - i\hbar(\beta + 2\gamma) \frac{m'}{m^2} \mathbf{p} - \hbar^2 \gamma(\gamma + \beta - 1) \frac{(m')^2}{m^3} - \hbar^2 \gamma \frac{m''}{m^2} \end{cases} \quad (30)$$

Usando a relação $\alpha + \beta + \gamma = -1$ pode-se escrever o operador hamiltoniano, agora sem o termo β , como

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + \frac{i\hbar m'}{2 m^2} \mathbf{p} + U_{\alpha\beta\gamma}(x) + V(x) \quad (31)$$

Onde $V(x)$ é um potencial referente ao problema, e $U_{\alpha\beta\gamma}(x)$ é um potencial efetivo dado por

³ Uma das vantagens de usar a equação de Dirac é contornar o problema do ordenamento dos operadores massa e momento, pois nesta equação o termo de massa encontra-se separado do operador momento.

$$U_{\alpha\beta\gamma}(x) = -\frac{\hbar^2}{4m^3} \left[(\alpha + \gamma)m \frac{d^2m}{dx^2} - 2(\alpha + \gamma + \alpha\gamma) \left(\frac{dm}{dx} \right)^2 \right] \quad (32)$$

O mesmo pode ser feito para o ordenamento proposto na Eq. (29) incluindo o ordenamento de Weyl, obtendo-se a seguinte expressão

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + \frac{i\hbar m'}{2m^2} \mathbf{p} + U_{\alpha\beta\gamma a}(x) + V(x) \quad (33)$$

Aqui $U_{\alpha\beta\gamma a}(x)$ representa

$$U_{\alpha\beta\gamma a}(x) = -\frac{\hbar^2}{4m^3(a+1)} \left[(\alpha + \gamma - a)m \frac{d^2m}{dx^2} + 2(a - \alpha\gamma - \alpha - \gamma) \left(\frac{dm}{dx} \right)^2 \right] \quad (34)$$

É fácil notar que para um hamiltoniano não ambíguo deve-se impor uma escolha de parâmetros que obedeça as seguintes relações

$$\begin{cases} \alpha + \gamma - a = 0 \\ a - \alpha\gamma = \alpha + \gamma \end{cases} \quad (35)$$

Deve-se ter em mente que os termos $U_{\alpha\beta\gamma}(x)$ e $U_{\alpha\beta\gamma a}(x)$ carregam toda a ambigüidade relacionada ao operador energia cinética uma vez que estes possuem termos de derivada da massa e não carrega nenhum operador momento para atuar na função de onda. Existem diversos sistemas físicos onde a questão da ambigüidade torna-se bastante relevante, podendo-se citar, por exemplo, a dependência de forças nucleares da velocidade relativa de dois núcleos (ROJO e LEVINGER, 1961; RAZAVY, FIELD e LEVINGER, 1962).

Na tentativa de se obter um operador energia cinética não ambíguo (a partir do proposto por von Roos), pode-se impor uma escolha de parâmetros, para α e γ , com a finalidade de evitar o potencial efetivo. Isto é feito assumindo $\alpha = \gamma = 0$ o que torna $U_{\alpha\beta\gamma}(x) = 0$. Uma vez que o potencial efetivo é nulo, perdem-se todos os termos que geravam a ambigüidade. Agora, torna-se possível escrever um operador energia cinética não ambíguo. É importante notar que o hamiltoniano agora carrega um termo de derivada de primeira

ordem. Da relação $\alpha + \beta + \gamma = -1$ encontra-se facilmente que $\beta = -1$. Por meio disto, o hamiltoniano deve ser escrito da seguinte maneira

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar^2}{2} \left[\mathbf{p} \frac{1}{m} \mathbf{p} + V \right] \quad (36)$$

Este é o conhecido ordenamento de BenDaniel e Duke. Opta-se por trabalhar com este ordenamento para evitar a ambigüidade e por corroborar com a equação de Dirac no limite de baixas energias, como indicado por Renan e colaboradores.

Na Eq.(36) os potenciais reais, do sistema estudado, encontram-se descritos na dependência da massa com a posição e V refere-se a um potencial externo ao sistema estudado. A partir da relação (36) torna-se possível escrever a equação de Schrödinger com massa dependente da posição (PDM), agora com a dependência da posição explícita, para o caso estacionário unidimensional⁴ [esta também pode ser encontrada em ARDA, AYDOĞDU e SEVER (2010)] da seguinte forma:

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{m(x)} \frac{dm(x)}{dx} \frac{d}{dx} + \frac{2m(x)}{\hbar^2} [E - V(x)] \right\} \psi(x) = 0 \quad (37)$$

3.2 OBTENDO A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER DE MASSA CONSTANTE

Por meio de transformações apropriadas na função de onda, sempre é possível descrever uma equação de Schrödinger de massa dependente da posição em termos de uma de massa constante. Uma forma bastante comum encontrada na literatura é tomando a transformação dada por

$$\psi(x) = m^{\frac{1}{2}}(x)\varphi(x) \quad (38)$$

⁴ Opta-se aqui por um tratamento unidimensional da equação de Schrödinger com massa dependente da posição, mas pode ser encontrado em de SOUZA DUTRA e DE OLIVEIRA (2009) um tratamento bidimensional da equação para uma partícula na presença de um campo magnético.

Este tipo de transformação pode ser encontrado, por exemplo, em de SOUZA DUTRA e ALMEIDA (2000) e de SOUZA DUTRA e de OLIVEIRA (2009). Nos trabalhos citados é considerado o termo de ambigüidade, e pode-se verificar, implementando a mudança (38), que

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + (U_{ef} - E)\varphi(x) = 0 \quad (39)$$

Onde se defini como potencial efetivo U_{ef} o termo

$$U_{ef} = V(x) + U_{\alpha\beta\gamma\alpha}(x) + \frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{3}{2} \left(\frac{dm/dx}{m} \right)^2 - \frac{d^2m/dx^2}{m} \right] \quad (40)$$

É importante, neste ponto do trabalho, mencionar algo a respeito da solubilidade exata da Eq. (39). Quando o termo $U_{ef} - E$ pode ser escrito como $U_{ef} - E = V_n(x) - \mathcal{E}$, onde $V_n(x)$ é um potencial exatamente, quase-exatamente ou condicionalmente solúvel, e \mathcal{E} é uma constante, então a equação de Schrödinger com PDM pode ser considerada solúvel. O estudo das condições de solubilidade de uma equação de Schrödinger pode ser encontrado em trabalhos como COOPER, KHARE e SUKHATME (1995), de SOUZA DUTRA (1993) e em BOSCHI-FILHO e VAIDYA (1991).

4. UM PROBLEMA DE PDM

Propõe-se solucionar um sistema quântico no qual a massa tenha uma dependência espacial do tipo $m(x) = m_0 \operatorname{sech}^2(x/a)$. Encontrar-se soluções analíticas para este problema em termos de funções locais de Heun. Posteriormente, verifica-se tais soluções, em particular, admitem uma redução a funções hipergeométrica. É exposto também as condições de quantização da energia e os gráficos das funções de onda.

4.1 INTRODUÇÃO AO PROBLEMA

Tendo em mãos a representação da equação de Schrödinger para massa dependente da posição, Eq. (37), propõe-se agora analisar um sistema quântico deste tipo. Estuda-se aqui um sistema físico onde a massa de uma partícula tem uma dependência espacial (efetiva) na forma

$$m(x) = m_0 \operatorname{sech}^2(x/a), \quad (41)$$

no qual a é uma constante que introduziu-se para tornar adimensional o argumento da secante e tem, por sua vez, uma relação direta com a distribuição da massa ao longo de x . Para um dado potencial $V(x)$, pode-se facilmente verificar que a equação que descreve o comportamento dessa partícula é

$$\psi''(x) + \frac{2}{a} \tanh(x/a) \psi'(x) + \frac{2m_0}{\hbar^2} \operatorname{sech}^2(x/a) [E - V(x)] \psi(x) = 0 \quad (42)$$

Aqui $\psi'(x)$ e $\psi''(x)$ são as derivadas primeira e segunda de ψ em relação a x respectivamente. Para absorver a constante a da equação acima, é útil redefinir a variável $x \rightarrow ax$ tal que se chega a uma equação ligeiramente diferente,

$$\psi''(x) + 2 \tanh(x) \psi'(x) + \frac{2m_0 a^2}{\hbar^2} \operatorname{sech}^2(x) [E - V(x)] \psi(x) = 0 \quad (43)$$

Na seção posterior, o leitor poderá encontrar uma forma de construir a equação de Schrödinger de massa constante para representar o um sistema quântico com PDM.

Em sistemas deste tipo, sempre é possível supor uma transformação adequada na função de onda, de modo que se possa obter uma representação do sistema em termos de uma equação de Schrödinger de massa constante. Para este problema em particular, usa-se a seguinte transformação

$$\psi(x) = \cosh^{\nu}(x) \varphi(x) \quad (44)$$

Esta transformação fornece as relações abaixo

$$\psi'(x) = \nu \cosh^{\nu}(x) \tanh(x) \varphi(x) + \cosh^{\nu}(x) \varphi'(x) \quad (45)$$

$$\begin{aligned} \psi''(x) = & \nu \cosh^{\nu}(x) [\nu \tanh^2(x) + \operatorname{sech}^2(x)] \varphi(x) + \\ & + 2\nu \cosh^{\nu}(x) \tanh(x) \varphi'(x) + \cosh^{\nu}(x) \varphi''(x) \end{aligned} \quad (46)$$

Substituindo as Eqs. (45) e (46) em (43) encontra-se

$$\begin{aligned} & \varphi''(x) + 2(\nu + 1) \tanh(x) \varphi'(x) + \\ & + \left\{ \nu(\nu + 2) \tanh^2(x) + \left(\nu + \frac{2m_0 a^2}{\hbar^2} \right) \operatorname{sech}^2(x) [E - V(x)] \right\} \varphi(x) = 0 \end{aligned} \quad (47)$$

Para prosseguir deve-se adotar uma transformação na variável independente de modo que $\left\{ x \rightarrow z \mid \frac{dz}{dx} = \operatorname{sech}(x) \right\}$. Como se pode ver, resolvendo a equação diferencial para z , a solução é dada por $\cos(z) = \operatorname{sech}(x)$. Esta transformação de coordenadas implica em um mapeamento $(-\infty, \infty) \rightarrow \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$. De fato, chega-se facilmente à seguinte equação diferencial

$$\begin{aligned} & \varphi''(z) + (2\nu + 1) \tan(z) \varphi'(z) + \\ & + \left\{ \nu + \nu(\nu + 2) \tan^2(z) + \frac{2m_0 a^2}{\hbar^2} [E - V(z)] \right\} \varphi(z) = 0 \end{aligned} \quad (48)$$

Uma vez que foi efetuada uma transformação genérica (44) para Eq. (43) pode-se particularizá-la escolhendo-se $\nu = -1/2$ a fim de obter uma equação similar a equação de Schrödinger estacionária com massa constante, eliminando-se o termo de derivada primeira. Feito isto, é de fácil constatação que

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{1}{2} + \frac{3}{4} \tan^2(z) + V(z) \right] \varphi(z) = a^2 E \varphi(z) \quad (49)$$

Em termos da dependência da massa com a posição, isto equivale a ter sido efetuada uma transformação, na função de onda, da seguinte forma

$$\psi(x) = m^{\frac{1}{4}}(x) \varphi(x) \quad (50)$$

A expressão (49) é uma equação de autovalores similar a uma equação de Schrödinger estacionária para o caso de uma partícula de massa constante, com energia potencial (efetiva) dada por

$$\mathcal{V}(z) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{1}{2} + \frac{3}{4} \tan^2(z) + V(z) \right] \quad (51)$$

Assim a Eq. (49) pode ser interpretada como uma equação que descreve o movimento de uma partícula de massa constante sujeita a um potencial confinante $\mathcal{V}(z)$ o que restringe seu movimento.

Por meio de transformações deste tipo, se pode compreender a equação de Schrödinger com PDM em termos de outra equação de Schrödinger com massa constante, porém de mesmo espectro de energia, evidenciando-se então a importância de transformações deste tipo.

Caso o leitor não tenha conhecimento das equações hipergeométricas e de Heun, recomenda-se a leitura dos Apêndices A e B.

4.2 SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER COM PDM PARA O CASO $V(z) = 0$

Apresenta-se aqui a análise de um sistema quântico mais simples. Este é obtido tomando $V(z) = 0$ o que gera um potencial confinante de

$$V(z) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{1}{2} + \frac{3}{4} \tan^2(z) \right] \quad (52)$$

Neste caso, tem-se uma equação de Schrödinger de massa constante

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{1}{2} + \frac{3}{4} \tan^2(z) \right] \varphi(z) = a^2 E \varphi(z) \quad (53)$$

Interessante comentar que uma equação equivalente à Eq. (53) apareceu em contextos completamente diferentes do problema aqui tratado (TAŞELI, 2003 e CHRISTIANSEN; CUNHA; TAHIM, 2010).

Uma maneira (geral) de se resolver a equação de Schrödinger [Eq. (53)], é introduzindo-se a transformação de coordenadas $y = \cos(z)$, onde $0 < y < 1$ (desde que $-\pi/2 < z < \pi/2$). Uma vez que $E > 0$ pode-se definir $k^2 = 2m_0 a^2 E / \hbar^2$. Feito isto, pode-se implementar a mudança de variável em (53) e obtem-se

$$\varphi''(y) + \frac{y}{y^2 - 1} \varphi'(y) + \left(\frac{1/2 - k^2}{y^2 - 1} - \frac{3/4}{y^2} \right) \varphi(y) = 0 \quad (54)$$

Pode-se escrever a equação acima em uma forma mais adequada, definindo-se a transformação $\varphi(y) = y^{-1/2} h_1(y)$. Neste caso, encontra-se a seguinte equação para a função transformada $h_1(y)$

$$h_1''(y) + \left[\frac{-1}{y} + \frac{1/2}{y-1} + \frac{1/2}{y+1} \right] h_1'(y) + \frac{-k^2 y}{y(y-1)(y+1)} h_1(y) = 0 \quad (55)$$

A despeito do intervalo de interesse ($0 < y < 1$), a equação acima possui formalmente quatro pontos singulares regulares em $y = (-1; 0; 1; \infty)$. Equações deste tipo pertencem a uma classe de equações diferenciais lineares de segunda ordem, definidas na esfera de Riemann, com quatro pontos singulares regulares ou pontos fuchsianos (HILLE, 1997). Esta é uma equação de Heun geral, e suas principais características encontram-se no Apêndice B

$$H''(z) + \left(\frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z-1} + \frac{\varepsilon}{z-d} \right) H'(z) + \frac{\alpha\beta z - q}{z(z-1)(z-d)} H(z) = 0$$

E suas soluções em torno da singularidade igual a 1, $z = 1$,

$$H = Heun(1-d, -q + \alpha\beta, \alpha, \beta, \delta, \gamma; 1-z)$$

$$H = (1-y)^{1-\delta} Heun[1-d, -q + (\delta-1)\gamma d + (\alpha-\delta+1)(\beta-\delta+1), \beta-\delta+1, \alpha-\delta+1, 2-\delta, \gamma; 1-z]$$

É fácil visualizar que o parâmetro acessório $q = 0$, e que $\gamma = -1$ e $\delta = \varepsilon = 1/2$. Os valores de α e β podem ser obtidos a partir da relação de Fuchs Eq. (B - 3)

$$\alpha + \beta + 1 = \gamma + \delta + \varepsilon$$

e sabendo que $\alpha\beta = -k^2$.

A Eq. (53) possui dois tipos de soluções, uma de paridade par e outra ímpar. Na próxima subseção apresenta-se as soluções de paridade par, e na posterior, as de paridade ímpar (estas requerem uma transformação na função de onda para serem encontradas).

4.2.1 SOLUÇÕES DE PARIDADE PAR

Ao compara a Eq. (55) com (B - 1), tem-se os seguintes valores para os parâmetros da equação de Heun: $d_1 = -1$; $q_1 = 0$; $\alpha_1 = 1/2 (-1 + \sqrt{1 + 4k^2})$;

$\beta_1 = -1/2 (1 + \sqrt{1 + 4k^2})$; $\gamma_1 = -1$; $\delta_1 = \varepsilon_1 = 1/2$. Com isso as soluções em termos de funções locais de Heun são tais que

$$h_1^{(1)}(y) = Heun\left(2, -k^2; \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{-1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{1}{2}, -1; 1 - y\right) \quad (56)$$

$$h_1^{(2)}(y) = (1 - y)^{-\frac{1}{2}} Heun\left(2, -\frac{3 + 4k^2}{4}; -\frac{\sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{\sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{3}{2}, -1; 1 - y\right) \quad (57)$$

Como se pode ver através das transformações de coordenadas, as soluções em torno de $y = 1$ correspondem a $z = 0$ ou $x = 0$. Assim, as soluções com $0 < y \leq 1$ cobrem o intervalo $(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ em z e $(-\infty, \infty)$ em x .

Através da transformação das variáveis dependente e independente, é fácil escrever as equações acima em termos da variável z , uma vez que $y = \cos(z)$. Neste caso, tem-se

$$\varphi^{(1,2)}(z) = \sec^{\frac{1}{2}}(z) h_1^{(1,2)}(\cos(z)) \quad (58)$$

As equações acima representam as soluções analíticas em torno da origem $z = 0$ para o problema quântico de uma partícula de massa m sujeita ao potencial \mathcal{V} [Eq. (52)], onde o módulo quadrado da função de onda representa, como é usual, a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula em uma determinada posição do eixo z .

Analogamente, levando-se em conta a respectiva transformação inversa de coordenadas, as soluções no espaço x escrevem-se como:

$$\psi^{(1,2)}(x) = h_1^{(1,2)}(\operatorname{sech}(x)) \quad (59)$$

Matematicamente, estas são as soluções mais gerais para o problema de massa variável na forma da Eq. (53). As soluções fisicamente aceitáveis devem, porém ser encontradas obedecendo às condições de contorno adequadas. No espaço z é mais fácil determinar quais são essas soluções

observando-se que o potencial é infinito em $z = \pm \frac{\pi}{2}$. Portanto, as funções de onda devem se anular nestes pontos, ou seja, $\varphi\left(z = \pm \frac{\pi}{2}\right) = 0$.

As soluções acima são ambas de paridade par, sendo a segunda solução fisicamente inaceitável por não ser diferenciável em $z = 0$. Como se verá mais adiante, a primeira solução converge apenas para valores de k naturais, ou melhor, $k^2 = n(n+1)$, sendo n um número inteiro ímpar ($n = 1, 3, 5 \dots$).

4.2.2 SOLUÇÕES DE PARIDADE ÍMPAR

Para se determinar as soluções ímpares, é necessário voltar a Eq. (53). Propõe-se então uma mudança na variável independente tal que

$$\varphi(z) = \text{sen}(z) \phi(z) \quad (60)$$

Esta mudança leva a seguinte equação para $\phi(z)$:

$$\phi''(z) + 2 \cotg(z) \phi'(z) - \left[\frac{3}{2} + \frac{3}{4} \tan^2(z) \right] \phi(z) = -k^2 \phi(z) \quad (61)$$

Utilizando novamente a mudança de variável $y = \cos(z)$, fica-se com uma equação semelhante a Eq. (54),

$$\phi''(y) + \frac{3y}{y^2 - 1} \phi'(y) + \left(\frac{3/2 - k^2}{y^2 - 1} - \frac{3/4}{y^2} \right) \phi(y) = 0, \quad (62)$$

o que sugere, como antes, a mudança de variáveis $\phi(y) = y^{-\frac{1}{2}} h_2(y)$. Feito isto, pode-se uma nova equação de Heun descrita abaixo

$$h_2''(y) + \left(\frac{-1}{y} + \frac{3/2}{y-1} + \frac{3/2}{y+1} \right) h_2'(y) + \frac{-k^2 y}{y(y-1)(y+1)} h_2(y) = 0 \quad (63)$$

Como na seção anterior, as soluções para $h_2(y)$ são funções locais de Heun em torno de $y = 1$, com seus respectivos parâmetros $\alpha_2 = \frac{1+\sqrt{1+4k^2}}{2}$; $\beta_2 = \frac{1-\sqrt{1+4k^2}}{2}$; $\gamma_2 = -1$; $\delta_2 = \varepsilon_2 = \frac{3}{2}$. Explicitamente, tem-se então

$$h_2^{(1)}(y) = Heun\left(2, -k^2; \frac{1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{3}{2}, -1; 1 - y\right) \quad (64)$$

$$h_2^{(2)}(y) = Heun\left(2, \frac{1}{4} - k^2; -\frac{1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{1}{2}, -1; 1 - y\right) \quad (65)$$

Como antes, as soluções em torno de $y = 1$ correspondem a $z = 0$ ou $x = 0$. Assim, as soluções com $0 < y \leq 1$ cobrem o intervalo $\left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ em z e $(-\infty, \infty)$ em x . As soluções em z e em x são, respectivamente,

$$\varphi^{(1,2)}(z) = \text{sen}(z) \sec^{\frac{1}{2}}(z) h_2^{(1,2)}(\cos(z)) \quad (66)$$

$$\psi^{(1,2)}(x) = \tanh(x) h_2^{(1,2)}(\text{sech}(x)) \quad (67)$$

A segunda solução $\varphi^{(2)}(z) [\psi^{(2)}(x)]$ é fisicamente inaceitável por não ser diferenciável na origem $z = 0$ ($y = 0$) e a primeira solução $\varphi^{(1)}(z) [\psi^{(1)}(x)]$ converge apenas para valores de k naturais, ou melhor, $k^2 = n(n + 1)$ com $n > 0$ par. A análise dos valores que n devem assumir encontra-se na seção 3.4.

4.3 REDUZINDO AS SOLUÇÕES A UMA FUNÇÃO HIPERGEOMÉTRICA

Existem alguns casos onde pode-se reduzir a equação de Heun (quatro pontos singulares) a uma equação hipergeométrica (três pontos singulares). Estes casos especiais foram estudados por MAIER (2005) para uma equação de Heun não trivial, ou seja, para $\alpha\beta \neq 0$ ou $q \neq 0$ a solução local de Heun

$Heun(d, q; \alpha, \beta, \gamma, \delta; t)$ pode ser reduzida a uma solução hipergeométrica de Gauss ${}_2F_1(a, b; c; t)$ através da relação $H(z) \rightarrow {}_2F_1(R(t))$, onde $R(t)$ é uma função racional. Neste caso, as relações entre os parâmetros $d, q; \alpha, \beta$ da equação de Heun são tais que $q = \alpha\beta p$, onde o par (d, p) pode assumir 23 valores distintos, com as respectivas $R(t)$ funções polinomiais racionais de até sexto grau. Particularmente, o caso $(d, p) = (2, 1)$ permite uma transformação $H(z) \rightarrow {}_2F_1(R(t))$ para um polinômio $R(t)$ de grau 2 ou quatro.

Este teorema encontra-se presente no Apêndice B e será feito uso deste aqui.

Neste contexto, escreve-se as soluções locais de Heun da seguinte forma

$$h_{fis}^{(1)}(t) = Heun(2, \alpha_1\beta_1; \alpha_1, \beta_1, \gamma'_1, \delta'_1; t) \quad (68)$$

$$h_{fis}^{(1)}(t) = Heun(2, \alpha_2\beta_2; \alpha_2, \beta_2, \gamma'_2, \delta'_2; t) \quad (69)$$

onde α_1 e β_1 são os mesmos definidos na secção anterior e $\gamma'_1 = 1/2$, $\delta'_1 = -1$, $\gamma'_2 = 3/2$, $\delta'_2 = -1$ e $t = 1 - y$. As equações acima descrevem então soluções de equações de Heun com seus respectivos parâmetros redefinidos. Além disso, essas soluções inserem-se no contexto discutido acima com $(d, p) = (2, 1)$. Uma vez conhecido o teorema de Maier, pode-se expressar uma solução local de Heun em termos de funções hipergeométricas, neste caso, através de uma transformação polinomial de grau dois na variável independente. Assim, escrevem-se as novas representações como:

$$h_{fis}^{(1)}(t) = Heun(2, \alpha_1\beta_1; \alpha_1, \beta_1, \gamma'_1, \delta'_1; t) = {}_2F_1\left(\frac{\alpha_1}{2}, \frac{\beta_1}{2}; \gamma'_1; t(2-t)\right) \quad (70)$$

$$h_{fis}^{(1)}(t) = Heun(2, \alpha_2\beta_2; \alpha_2, \beta_2, \gamma'_2, \delta'_2; t) = {}_2F_1\left(\frac{\alpha_2}{2}, \frac{\beta_2}{2}; \gamma'_2; t(2-t)\right) \quad (71)$$

Por meio destas, pode-se escrever as funções de onda fisicamente aceitáveis em termos das variáveis z e x . Em termos da variável z , tem-se:

$$\varphi_{fis}^{(1)}(z) = \sec^{\frac{1}{2}}(z) {}_2F_1\left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{4}, \frac{-1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{4}; \frac{1}{2}; \sen^2(z)\right) \quad (72)$$

$$\varphi_{fis}^{(2)}(z) = \sen(z) \sec^{\frac{1}{2}}(z) {}_2F_1\left(\frac{1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{4}, \frac{1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{4}; \frac{3}{2}; \sen^2(z)\right) \quad (73)$$

Para as soluções em termos da variável x ,

$$\psi_{fis}^{(1)}(x) = {}_2F_1\left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{4}, \frac{-1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{4}; \frac{1}{2}; \tanh^2(x)\right) \quad (74)$$

$$\psi_{fis}^{(2)}(x) = \tanh(x) {}_2F_1\left(\frac{1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{4}, \frac{1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{4}; \frac{3}{2}; \tanh^2(x)\right) \quad (75)$$

4.4 DETERMINANDO A QUANTIZAÇÃO DA ENERGIA

Considerando que as soluções da equação de Schrödinger [Eq. (53)] devem se anular nos extremos ($z = \pm \frac{\pi}{2}$) ou que as soluções no espaço x devem ir à zero no infinito, podem-se averiguar as condições de existência para estas soluções. Tomando-se, primeiramente, a Eq. (72) para as soluções simétricas, deve-se impor que a função hipergeométrica seja nula no limite $z = \pm \frac{\pi}{2}$, isto porque $\sec(z)$ diverge nesse limite. Matematicamente tem-se

$$\lim_{z \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} \varphi_{fis}^{(1)}(z) = \lim_{z \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} {}_2F_1\left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{4}, \frac{-1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{4}; \frac{1}{2}; \sen^2(z)\right) = 0 \quad (76)$$

Este limite existe e deve ser igual a

$$\lim_{z \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} \varphi_{fis}^{(1)}(z) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{4}\sqrt{1 + 4k^2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{4} + \frac{1}{4}\sqrt{1 + 4k^2}\right)} \quad (77)$$

A condição necessária para que este limite seja nulo é tal que a função gama deve divergir para que isto ocorra. Sabendo disto pode-se dizer que

$$\frac{3}{4} - \frac{1}{4}\sqrt{1+4k^2} = -p, \quad p = 0, 1, 2 \dots \quad (78)$$

Reagrupando os termos encontra-se a seguinte relação

$$k^2 = (2p+1)^2 + (2p+1) \quad (79)$$

Neste caso, fica evidente que se pode substituir $2p+1 = n$, onde n é um número ímpar. Assim, $k^2 = n(n+1)$.

De maneira análoga, pode-se obter as condições de quantização para k^2 para a função de onda antissimétrica. Usando a Eq. (73)

$$\lim_{z \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} \varphi_{fis}^{(2)}(z) = \frac{2\sqrt{\pi}}{k^2 \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\sqrt{1+4k^2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4}\sqrt{1+4k^2}\right)} = 0 \quad (80)$$

O que gera a condição

$$\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\sqrt{1+4k^2} = -q, \quad q = 0, 1, 2 \dots \quad (81)$$

Novamente, reagrupando os termos

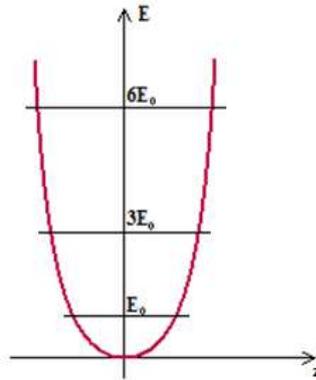
$$k^2 = 2q(2q+1) \quad (82)$$

Sendo $2q$ um número par, podemos considerar $2q = n$, onde agora n é um número par ($n = 0, 2, 4, \dots$). Assim, novamente $k^2 = n(n+1)$. Desta forma a mesma expressão para k^2 é válida para soluções simétricas ($n = 1, 3, 5, \dots$) e antissimétricas ($n = 0, 2, 4, \dots$), como antecipado nas seções anteriores. Importante ressaltar que este resultado define a quantização da energia para o problema, ou seja,

$$E_n = \frac{\hbar^2}{m_0 a^2} \frac{n(n+1)}{2} = E_0 \frac{n(n+1)}{2} \quad (83)$$

onde agora ($n = 1, 2, 3 \dots$) por causa da condição física sobre a energia, ou seja, quaticamente a energia mínima não pode ser zero. O gráfico abaixo apresenta a disposição das três primeiras energias possíveis deste sistema.

Gráfico-1. Estados de energia possíveis confinados no potencial.



Fonte: Própria

Pode-se agora escrever as expressões finais para as soluções simétricas e antissimétricas, na variável z (que representa o equivalente da equação Schrödinger para massa constante) e na variável x para a massa dependente da posição. Em termos dessas variáveis, as soluções são

$$\varphi_{fis}^{(1)}(z) = \sec^{\frac{1}{2}}(z) {}_2F_1\left(\frac{n}{2}, -\frac{n+1}{2}; \frac{1}{2}; \sec^2(z)\right) \quad (84)$$

$$\varphi_{fis}^{(2)}(z) = \sen(z) \sec^{\frac{1}{2}}(z) {}_2F_1\left(\frac{n+1}{2}, -\frac{n}{2}; \frac{3}{2}; \sec^2(z)\right) \quad (85)$$

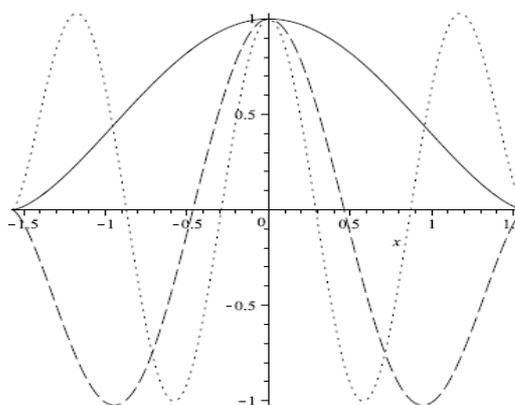
e

$$\psi_{fis}^{(1)}(x) = {}_2F_1\left(\frac{n}{2}, -\frac{n+1}{2}; \frac{1}{2}; \tanh^2(x)\right) \quad (86)$$

$$\psi_{fis}^{(2)}(x) = \tanh(x) {}_2F_1\left(\frac{n+1}{2}, -\frac{n}{2}; \frac{3}{2}; \tanh^2(x)\right) \quad (87)$$

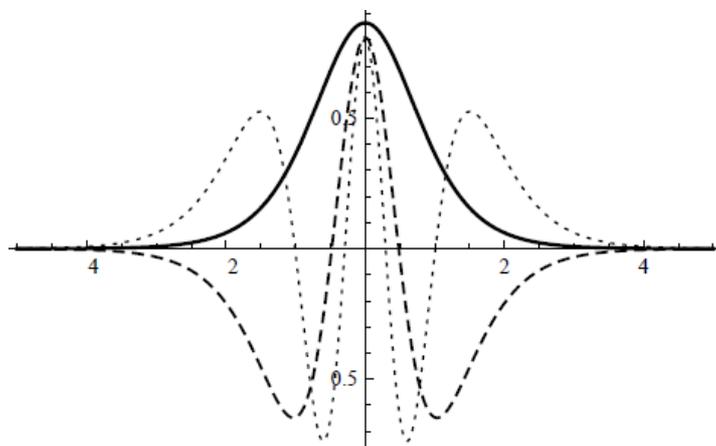
Abaixo, apresenta-se os gráficos das soluções de paridade par (simétricas) [Gráfico-2] para a coordenada z [Eq. (84)], que representa o análogo quântico de massa constante para $n = 1, 3$ e 5 . Logo abaixo, [Gráfico-3], o gráfico para função em termos da variável x [Eq. (86)], indicando que a partícula tem maior probabilidade de ser encontrada em regiões próximas à origem. Analogamente, o Gráfico-4 e Gráfico-5 representam as soluções de paridade ímpar (antissimétricas) para z [Eq. (85)] e para x [Eq. (87)], para $n = 2, 4$ e 6 .

Gráfico-2: Soluções (simétricas) da Eq. (84) para $n = 1$ (linha contínua), $n = 3$ (linha tracejada) e $n = 5$ (linha pontilhada).



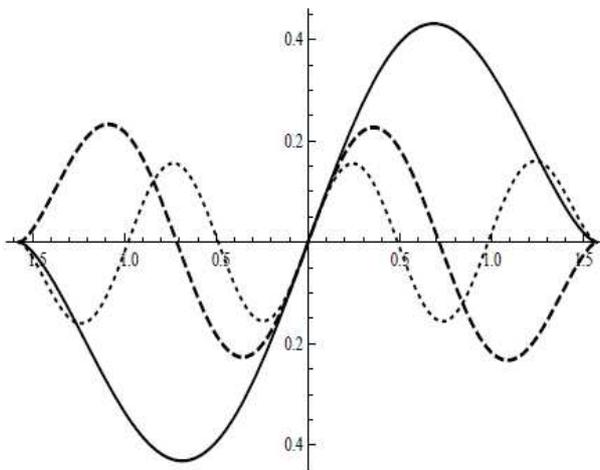
Fonte: (DINIZ, ÁVILA e COUNHA 2011)

Gráfico-3: Soluções (simétricas) normalizadas da Eq. (86) para $n = 1$ (linha contínua), $n = 3$ (linha tracejada) e $n = 5$ (linha pontilhada).



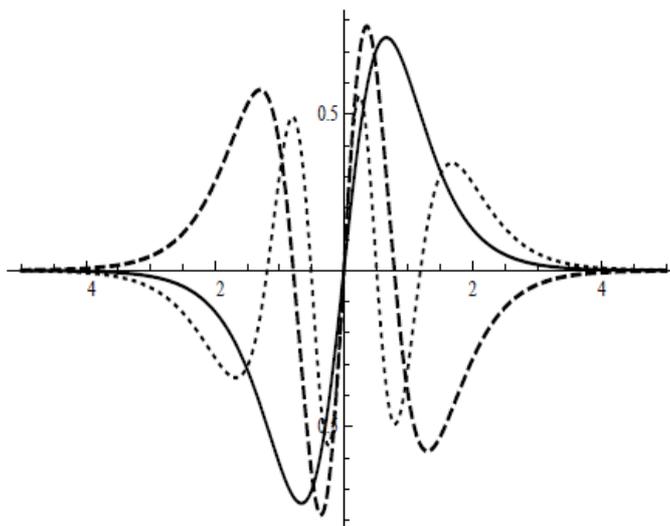
Fonte: (DINIZ, ÁVILA e COUNHA 2011)

Gráfico-4: Soluções (antissimétricas) da Eq. (85) para $n = 2$ (linha contínua), $n = 4$ (linha tracejada) e $n = 6$ (linha pontilhada).



Fonte: (DINIZ, ÁVILA e COUNHA 2011)

Gráfico-5: Soluções (antissimétricas) normalizadas da Eq. (87) para $n = 2$ (linha contínua), $n = 4$ (linha tracejada) e $n = 6$ (linha pontilhada).



Fonte: (DINIZ, ÁVILA e COUNHA 2011)

Em termos da variável original $ax \rightarrow x$, pode-se ver essa solução como se $a = 1$, muito embora a forma das soluções (simétricas ou antissimétricas) seja invariante se se escolher convenientemente a escala do gráfico.

Ao observar a representação gráfica das funções de onda, presente nas figuras acima, pode-se verificar facilmente que estas se anulam na extremidade do poço potencial determinado pela Eq. (52)

$$V(z) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{1}{2} + \frac{3}{4} \tan^2(z) \right]$$

Em termos de partícula material, uma partícula representada por esta função de onda estaria livre para se mover apenas na região limitada pelo potencial. Isso quer dizer que qualquer que seja a forma da medida em qualquer intervalo de tempo possível, a partícula sempre vai estar entre $\pm \frac{\pi}{2}$ (em termos da variável z).

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho, apresenta-se a solução analítica para o problema de massa dependente da posição sujeita a um potencial nulo, utilizando-se o ordenamento de BenDaniel-Duke (1996) para escrever a equação de Schrödinger adequada para esse tipo de problema. Utilizando-se transformações de coordenadas e transformações na própria função de onda, consegue-se reescrever o problema e reinterpretá-lo como uma equação que descreve uma partícula de massa constante sujeita a um potencial (efetivo) confinante.

As soluções mais gerais desse problema são funções de Heun locais, que se mostraram convergentes apenas para determinados valores (quantizados) do parâmetro relacionado à energia da partícula. Verifica-se, para este problema em particular, que as soluções encontradas para a função de onda, em termos de funções de Heun locais, admitem uma redução a uma função hipergeométrica de Gauss por meio de uma transformação polinomial de grau dois ou quatro. Esta, por sua vez, se mostra quantizada através da relação $E_n = \frac{\hbar^2}{m_0 a^2} \frac{n(n+1)}{2}$, onde $n = 1, 2, 3 \dots$

Por causa da paridade do potencial efetivo (ou da equação diferencial que descreve o problema), as soluções se apresentam com paridade par e ímpar (simétricas e antissimétricas). Para a visualização das soluções, da simetria presente na função de onda, apresentam-se alguns gráficos para determinados valores de n . Observa-se que a distribuição de massa, $m(x) = m \operatorname{sech}^2(x/a)$, determina aproximadamente a região onde a densidade de probabilidade é relevante.

BIBLIOGRAFIA

ARDA, A.; AYDOĞDU, O.; SEVER, R. **Scattering of the Woods-Saxon potential in the Schrödinger equation.** *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 43, p. 425204-425218, 2010.

ARIAS DE SAAVEDRA, F.; BORONAT, J.; POLLS, A.; FABROCINI, A. **Effective mass of one ^4He atom in liquid ^3He .** *Physics Review B*, v. 50, p. 4248-4251, 1994.

BARRANCO, M.; PI, M.; GATICA, S.M.; HERNANDEZ, E.S.; NAVARRO, J. **Structure and energetics of mixed ^4He - ^3He drops.** *Physics Review B*, v. 56, p. 8997-9003, 1997.

BASTARD, G. **Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures.** Courtaboeuf:Les Ulis: Editions de Physique, 1988.

BENDANIEL, D. J.; DUKE, C. B. **Space-Charge Effects on Electron Tunneling.** *Physical Review*, v. 152, p. 683-692, 1966.

BOSCHI-FILHO, H.; VAIDYA, A. N. **Green's functions through $so(2,1)$ Lie algebra in nonrelativistic quantum mechanics.** *Annals of Physics*, v. 212, n. 1, p. 1-27, 1991.

CHRISTIANSEN, H.R.; CUNHA, M. S.; TAHIM, M. K. **Exact solutions for a Maxwell-Kalb-Ramond action with dilaton: Localization of massless and massive modes in a sine-Gordon brane-world.** *Physical Review D*, v. 82, 085023, 2010.

COHEN, T. *Quantum Mechanics.* New Jersey: John Wiley, 1977. v.1-2.

COOPER, F.; KHARE, A.; SUKHATME, U. **Supersymmetry and quantum mechanics.** *Physics Reports*, v. 251, p- 267-385, 1995.

CUYT, A.; PETERSEN, BREVIK V.; VERDONK, B.; WAADELAND, H.; JONES, W. B. *Handbook of Continued Fractions for Special Functions*. Springer Science, 2008.

DAVISSON, C.; GERMER, L. H. **Diffraction of Electrons by a Crystal of Nickel**. *Physical Review*, v. 30, n. 6, p. 705-740, 1927.

de BROGLIE, L. *Ondas, Corpúsculos y Mecanica Ondulatória*. Madrid: Editora Esposa, 1949.

de SOUZA DUTRA, A. **Conditionally exactly soluble class of quantum potentials**. *Physical Review A*, v. 47, p. 2435-2437, 1993.

de SOUZA DUTRA, A.; ALMEIDA, C. A. S. **Exact solvability of potentials with spatially dependent effective mass**. *Physics Letter A*, v. 275, p. 25-30, 2000.

de SOUZA DUTRA, A.; DE OLIVEIRA, J. A. **Two-dimensional position-dependent massive particles in the presence of magnetic fields**. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. v. 42, 025304, 2009.

de TOLEDO PIZA, A. F. R. *Mecânica quântica*. 2ª Edição. São Paulo: EDUSP, 2009.

DINIZ, M. A. B.; ÁVILA, K. M. V.; CUNHA, M. S. **Equação de Schrödinger como uma equação geral de Heun para um problema de massa dependente da posição**. *XVI Semana Universitária (Inter)nacionalização da Ciência e da Educação*, 2011.

DIRAC, P. A. M. *Principles of Quantum Mechanics*. London: Oxford University Press, 1958.

DWORK, B. **On Kummer's Twenty-Four Solutions of the Hypergeometric Differential Equation.** *Transactions of the American Mathematical Society*, v. 285, n. 2, p. 497-521, 1984.

DWORK, B. *Generalized Hypergeometric Functions*. Oxford: Clarendon Press, 1990.

GERLACH, W.; STERN, O. **Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld.** *Zeitschrift für Physik a Hadrons and Nuclei*, v. 9, n. 1, p. 349-352, 1922.

GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. 2ª Edição. New Jersey: Prentice Hall, 2005.

HEISENBERG, W. **Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik.** *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, v. 43, n. 3-4, p.172-198, 1927.

KOÇ, R. SAYIN, S. **Remarks on the Solution of the Position Dependent Mass (PDM) Schrödinger Equation.** *Journal Physics A: Mathematical Theoretical*. v.43, 455203, 2010.

KELVIN, L. *Philosophical Magazine series 6*, v. 2, n. 8, p. 161-177, 1901.

LEBEDEV, N. N. *Special functions & their applications*. New York: Dover Publications, 1972.

MAIER, R. S. **On reducing the Heun equation to the hypergeometric equation.** *Journal of Differential Equations*, v. 213, p. 171 – 203, 2005.

PESSOA JR, O. **O problema da medição em mecânica quântica: um exame atualizado.** *Cadernos de História e Filosofia da Ciência*, v. 3, p. 177-217, 1992

PINTO NETO, N. *Teorias e interpretações da Mecânica Quântica*. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2010.

POOLE, E. G. C. *Introduction to the Theory of Linear Differential Equations*. Oxford: Oxford at the Clarendon Press, 1936.

PROSSER, R. T. **On the Kummer Solutions of the Hypergeometric Equation**. *The American Mathematical Monthly*, v. 101, n. 6, p. 535-543, 1994.

RAZAVY, M.; FIELD, G.; LEVINGER, J. S. **Analytical Solutions for Velocity-Dependent Nuclear Potential**. *Physical Review*, v. 125, n. 1, p. 269-272, 1962.

RENAN, R.; PACHECO, M. H.; ALMEIDA, C. A. S. **Treating some solid state problems with the Dirac equation**. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 33, p. 509-514, 2000.

ROCHA, J. F. M. *Origens e Evoluções das Idéias da Física*. Salvador: EDUFBA, 2002.

ROJO, O.; LEVINGER, J. S. **Integrated Cross Section for a Velocity-Dependent Potential**. *Physical Review*, v. 123, n. 6, p. 2177-2179, 1961.

RONVEAUX, A. *Heun's Differential Equations*. Oxford: Oxford University Press, 1995.

SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. New York: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.

SERRA, L.; LIPPARINI, E. **Spin response of unpolarized quantum dots**. *Europhysics Letters*, v. 40, p. 667-672, 1997.

SCHULZ, P. A. **Dois nuvens ainda fazem sombra na reputação de Lorde Kelvin**. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 29, n. 4, p. 509-512, 2007.

SHEWELL, J. R. **On the Formation of Quantum-Mechanical Operators**. *American Journal of Physics*, v.27, n. 1, p.16, 1959.

SLAVYANOV, S. Y.; LAY, W. *Special Functions a Unified Theory Based on Singularities*. Oxford: Oxford University Press, 2000.

von NEUMANN, J. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Berlin: Springer, 1932. Tradução em inglês: *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. Princeton: Princeton University Press, 1955.

von ROOS, O. **Position-dependent effective masses in semiconductor theory**. *Physics Review B*, v. 27, n. 12, p. 7547-7552, 1983.

APÊNDICE A - CARACTERÍSTICAS DE UMA EQUAÇÃO HIPERGEOMÉTRICA DE GAUSS

1.1 INTRODUÇÃO

O estudo das equações diferenciais teve início com Newton e Leibnitz, e muito dos métodos de soluções foram estudados no século XVIII. Neste período, quando os problemas não podiam ser solucionados em termos finitos, expansões em séries de potência eram um dos métodos tentados por Newton. Contudo a teoria não se encontrava em uma base lógica satisfatória até metade do século XIX, quando Cauchy distinguiu entre sistemas analíticos e não-analíticos além de construir rigorosos teoremas de existência para cada tipo (POOLE, 1936). Com o passar do tempo, muitos outros importantes homens contribuíram para o desenvolvimento do estudo e formulação da teoria de equações diferenciais lineares como Riemann, Kummer, Fuchs, etc.

A equação hipergeométrica tornou-se importante devido ao fato de muitas funções especiais estudadas na física estarem presente nesta equação. As funções de Bessel, Legendre, Laguerre, Weber-Hermite, e muitas outras, todas aparecem como casos particulares ou confluentes de equação hipergeométrica. Uma análise da equação hipergeométrica de Gauss é melhor desenvolvido e pode ser bem compreendida em muitas obras presentes na literatura (SLAVYANOV; LAY, 2000; DWORK, 1990; POOLE, 1936; CUYT *et al*, 2008). Apresentam-se aqui apenas alguns aspectos desta equação. O estudo destas funções torna-se importante, pois muitas delas aparecem em problemas físicos (ou até mesmo tiveram sua origem nestes).

1.2 ASPECTOS GERAIS DA EQUAÇÃO

Considere a classe de equações diferenciais ordinária, lineares, homogênea e de segunda ordem fuchsianas definida na esfera de Riemann. Qualquer equação pertencente a este grupo contendo até três pontos singulares

regulares pode ser transformada em uma equação hipergeométrica de Gauss por mudanças apropriadas na variável dependente e independente (RONVEAUX, 1995; SLAVYANOV; LAY, 2000). Pode-se escrevê-la na forma geral apresentada abaixo

$$\frac{d}{dz^2} y(z) + \left(\frac{c}{z} + \frac{a+b-c+1}{z-1} \right) \frac{d}{dz} y(z) + \frac{ab}{z(z-1)} y(z) = 0 \quad (\text{A1} - 1)$$

Aqui, a, b, c são parâmetros que podem ser complexos. Suas singularidades em $(0, 1, \infty)$ são regulares, ou seja, fuchsianas. Para verificar a singularidade no infinito, é feita uma transformação f-homotópica⁵ do tipo $z \rightarrow \frac{1}{\xi}$ e analisado a singularidade em $\xi = 0$ o que equivale fazer $z = \infty$. Seu espaço de soluções é escrito na forma de símbolo-P como

$$P \left\{ \begin{array}{ccc} 0 & 1 & \infty \\ 0 & 0 & a; z \\ 1-c & c-a-b & b \end{array} \right\} \quad (\text{A1} - 2)$$

Cada coluna, exceto a última, relaciona cada ponto singular com seus respectivos expoentes característico.

O método de Frobenius garante que dada uma equação diferencial do tipo

$$p(z)y'' + q(z)y' + r(z)y = 0 \quad (\text{A1} - 3)$$

Caso z_0 seja um ponto singular regular da equação, então existe na vizinhança do mesmo ao menos uma solução da forma:

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} A_n (z - z_0)^{n+s} \quad (\text{A1} - 4)$$

Com $A_n \neq 0$ e s não necessariamente um inteiro.

⁵ É uma transformação que preserva as características da equação bem como seu espaço de soluções.

Assim as soluções são tomadas em torno de suas singularidades por meio do método de Frobenius e representadas como $F = {}_2F_1(a, b; c; z)$, que é uma forma compacta de expressar uma série do tipo

$$\begin{aligned}
 F = {}_2F_1(a, b; c; z) &= 1 + \frac{ab}{1!c}z + \frac{a(a+1)b(a+1)}{2!c(c+1)}z^2 + \dots \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n(b)_n}{(c)_n} \frac{z^n}{n!} = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{z^n}{n!} \quad (A1 - 5)
 \end{aligned}$$

Aqui $(a)_n = a(a+1)(a+2)(a+3)(a+4)\dots(a+n-1)$ representa o símbolo de Pochhammer e $(a)_0 = 1$. As soluções convergem na vizinhança das singularidades. Por meio desta representação fica claro o motivo de se colocar os números 2 e 1 (contém dois símbolos de Pochhammer no numerador e um no denominador). Nota-se que os parâmetros a e b podem permutar suas posições sem haver alteração no modo em que é escrito a série hipergeométrica de Gauss. Cada ponto singular possui duas soluções linearmente independentes (L. I.) isto gera um conjunto de $2 \times 3 = 6$ soluções L. I. para Eq. (A1 - 1).

As soluções podem ser reduzidas a polinômios para determinados valores de a ou b , ou seja, quando na Eq. (A1 - 5) a ou b assume um valor inteiro negativo. Seja $m = 1, 2, 3 \dots$ então

$$\rightarrow {}_2F_1(-m, b; c; z) = \sum_{n=0}^m \frac{(-m)_n(b)_n}{(c)_n} \frac{z^n}{n!} \quad (A1 - 6)$$

Equações diferenciais deste tipo geralmente possuem grupos de simetria associados a elas. Por meio destes pode-se construir equações equivalentes a de origem através de transformações f-homotópicas. Estas transformações fazem com que a nova equação possua um conjunto de soluções equivalentes a da primeira. O grupo associado à equação hipergeométrica de Gauss é denominado de grupo de Kummer, e é representado por seis transformações descritas abaixo

$$z \rightarrow \frac{az + b}{cz + d}$$

$$z; \frac{z}{z-1}; 1-z; \frac{z-1}{z}; \frac{1}{z}; \frac{1}{1-z}; \quad (A1-7)$$

As transformações apresentadas acima encontram-se entre as mais importantes na teoria da função hipergeométrica, e são conhecidos como transformações linear da função hipergeométrica. Em particular, estas relações permitem realiza a continuação analítica⁶ de $F = {}_2F_1(a, b; c; z)$ em qualquer parte do plano de corte $[1, \infty]$ (LEBEDEV, 1972).

Deve-se questionar o motivo de se dar importância a soluções que são linearmente dependentes (L. D.) já que estas são meras extensões das L. I., contudo, as novas soluções não podem ser encontradas por meras combinações lineares das antigas o que as tornam especiais. Com isso esta equação possui 24 soluções sendo 6 L. I. e 18 L. D. Apresenta-se abaixo o conjunto das seis soluções L. I., as demais podem ser encontradas na literatura (DWORK, 1984; PROSSER, 1994; POOLE, 1936; MAIER, 2007).

$$[0, 0] \rightarrow {}_2F_1(a, b; c; z).$$

$$[0, 1-c] \rightarrow z^{1-c} {}_2F_1(b-c+1, a-c+1; 2-c; z).$$

$$[1, 0] \rightarrow {}_2F_1(a, b; a+b-c+1; 1-z).$$

$$[1, -a-b+c] \rightarrow (z-1)^{-a-b+c} {}_2F_1(c-a, c-b; -a-b+c+1; 1-z).$$

$$[\infty, a] \rightarrow z {}_2F_1\left(a, a-c+1; a-b+1; \frac{1}{z}\right).$$

$$[\infty, b] \rightarrow z^{-b} {}_2F_1\left(b-c+1, b; -a+b+1; \frac{1}{z}\right).$$

Representa-se aqui $[A, B]$, A sendo uma singularidade e B seu respectivo expoente característico.

Uma importante propriedade das funções hipergeométricas está relacionada com suas derivadas.

⁶ Uma solução é dita ser continuada analiticamente quando esta deixa de ser válida apenas na vizinhança da singularidade e passa a ser válida em todo o espaço.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dz} [{}_2F_1(a, b; c; z)] &= \frac{d}{dz} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n z^n}{(c)_n n!} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n z^{n-1}}{(c)_n (n-1)!} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_{n+1} (b)_{n+1} z^n}{(c)_{n+1} n!} = \frac{ab}{c} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a+1)_n (b+1)_n z^n}{(c+1)_n n!} \\
&= \frac{ab}{c} \cdot {}_2F_1(a+1, b+1; c+1; z) \tag{A1-8}
\end{aligned}$$

Isso pode ser estendido para o caso da enésima derivada da função, ou seja,

$$\frac{d^n}{dz^n} [{}_2F_1(a, b; c; z)] = \frac{(a)_m (b)_m}{(c)_m} \cdot {}_2F_1(a+m, b+m; c+m; z) \tag{A1-9}$$

Com apenas estas informações o leitor deve ser capaz de prosseguir a análise do problema. Sabendo disto, no próximo capítulo o leitor encontrará as informações necessárias que serão utilizadas para a solução do problema introduzido no capítulo anterior.

APÊNDICE B - EQUAÇÃO DE HEUN

1. CARACTERÍSTICAS DA EQUAÇÃO DE HEUN

Antes de expor as características de equação, deve ser dito algo sobre o seu criador. O que se segue pode ser encontrado em RONVEAUX (1995). Karl Heun nasceu em 3 abril de 1859 na cidade de Wiesbaden, e faleceu em 10 de janeiro de 1929 na cidade de Karlsruhe, Alemanha. Heun frequentou a universidade de Halle e Göttingen onde estudou física e matemática durante os anos de 1878 a 1881. Trabalhou com Eduard Heine no campo de harmônicos esféricos na universidade de Halle. Em Göttingen Heun estudou sob direção de Ernst Schering e Hermann Amandus Schwarz e obteve o doutorado em 1881 no campo de harmônicos esféricos e funções de Lamé.

Casou-se com Henriette Jatho em 1883. Henriette era 14 anos mais velha que Heun e já possuía dois filhos, Alfred e Paul, frutos de um casamento que a deixara viúva. Já com Heun, ela teve dois filhos, Howard nascido em 1884 na cidade de Uppingham e Charlotte em 1891 em Berlim.

Trabalhou de 1881-1889 em Privatdozent em Munique. Lá, escreveu 12 artigos, dos quais, os três primeiros estavam relacionados com sua tese e os nove restantes relacionados a equações diferenciais no domínio complexo, esta área teve início com o trabalho de Riemann em séries hipergeométricas e posteriormente melhor desenvolvido por Lazarus Fuchs. No período em que Heun trabalhou nesta foram publicados mais de cinquenta artigos por ano. O fato de existir muita concorrência nesse campo pode ter contribuído para a mudança de área de interesse.

No período de 1890-1902 trabalhou como professor de uma escola em Berlim. Nesta época publicou nove artigos, dois tratavam de integrações numéricas da equação diferencial $y' = f(x, y)$. Os outros sete tratam de mecânica. Nessa época se fez conhecido, principalmente, pelo seu discurso de 1899 em o DVM (*Deutsche-Mathematiker-Vereinigung*) uma versão completa foi publicada como "*Die kinetischen Probleme der wissenschaftlichen Technik*"

(LANG, 2006). Este trabalho foi, presumivelmente, a razão principal pela qual ele assumiu a cadeira de mecânica teórica em Karlsruhe.

De 1902-1922 trabalhou como professor em Karlsruhe onde publicou cinco artigos e dois livros de mecânica. O que se refere aos artigos, com exceção de um ou outro, não eram trabalhos de pesquisa em si, e sim direcionados ao público em geral. Com relação aos livros, o primeiro é uma reunião de formulas de mecânica, já o segundo, elaborado para a primeira parte de um livro texto planejado sobre mecânica. Apenas a primeira parte da obra apareceu e o restante do livro permaneceu inacabado.

2. EQUAÇÃO DE HEUN

A equação de Heun geral é uma equação diferencial ordinária, linear, homogênea e de segunda ordem fuchsiana com quatro pontos singulares. Esta inicialmente proposta como uma generalização deliberada da equação hipergeométrica encontra-se definida na esfera de Rimann. Tem-se que qualquer equação diferencial linear de segunda ordem contendo três pontos singulares regulares pode ser transformada em uma equação hipergeométrica (POOLE, 1936), o mesmo pode ser estendido a fim de obter a seguinte relação: qualquer equação diferencial linear de segunda ordem contendo quatro pontos singulares regulares pode ser transformada em uma equação de Heun (RONVEAUX, 1995).

Na sua forma geral, a equação de Heun pode ser escrita como se segue:

$$\frac{d^2}{dz^2}y(z) + \left(\frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z-1} + \frac{\varepsilon}{z-d}\right)\frac{d}{dz}y(z) + \frac{\alpha\beta z - q}{z(z-1)(z-d)}y(z) = 0 \quad (B-1)$$

Nela, os parâmetros $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon$ são parâmetros complexos e estão relacionados com os expoentes característicos das soluções, d ($d \neq 0, 1, \infty$) localiza o quarto ponto singular da equação que pode ser ou não complexo, e por fim, q é comumente chamado de parâmetro acessório e este também pode

ou não ser complexo. Das suas singularidades, três podem ser vistas diretamente da equação diferencial $(0, 1, d)$, e a última, no infinito, pode ser observada tomando uma transformação f-homotópica ao fazer $z \rightarrow \frac{1}{\xi}$ (com isso torna-se possível mapear a equação diferencial nela mesma) assim fazendo a análise em $\xi = 0$ pode-se observar que esta é uma singularidade na nova equação diferencial e equivale a fazer $z = \infty$.

Suas soluções são tomadas localmente no plano complexo por meio de expansões em séries através do método de Frobenius (soluções em torno de cada singularidade) e podem ser representadas por $Heun(d, q; \alpha, \beta, \gamma, \delta; z)$. Cada ponto singular possui duas soluções linearmente independentes (L. I.) que são diferenciadas por seus expoentes característicos, com isso, esta possui um conjunto de 4×2 soluções L. I. Seu espaço de soluções pode ser representado em termos de símbolo-P

$$P \left\{ \begin{array}{cccc} 0 & 1 & d & \infty \\ 0 & 0 & 0 & \alpha; z \\ 1 - \gamma & 1 - \delta & 1 - \varepsilon & \beta \end{array} \right\} \quad (B - 2)$$

A primeira linha está relacionada com as singularidades da equação, a segunda e terceira mostram os expoentes característicos do respectivo ponto singular, e por fim na última coluna encontra-se a variável independente. Os expoentes característicos estão ligados pela relação de Fuchs

$$\alpha + \beta + 1 = \gamma + \delta + \varepsilon \quad (B - 3)$$

Esta equação diferencial, como a hipergeométrica, também possui um grupo de transformações f-homotópicas. A equação de Heun possui um grupo de 24 transformações, estas geram novas soluções linearmente dependentes (L. D.) às anteriores. Novamente a importância destas soluções L. D. são devido ao fato de não serem geradas por meios combinações lineares das L. I. Assim, a equação de Heun possui $24 \times 8 = 192$ soluções, mas apenas oito são L. I. (MAIER, 2006).

O Grupo de transformações da equação de Heun, transformações de Möbius, $z \rightarrow f(z)$ pode ser obtido através de transformações lineares ou de Möbius

$$z \rightarrow f(z)$$

$$\begin{array}{l}
 z; \quad \frac{z}{z-1}; \quad \frac{z}{d}; \quad \frac{z}{z-d}; \quad \frac{(1-d)z}{z-d}; \quad \frac{(d-1)z}{d(z-1)}; \\
 1-z; \quad \frac{z-1}{z}; \quad \frac{z-1}{z-d}; \quad \frac{z-1}{d-1}; \quad \frac{d(z-1)}{z-d}; \quad \frac{d(z-1)}{(d-1)z} \\
 \frac{1}{z}; \quad \frac{1}{1-z}; \quad \frac{d}{z}; \quad \frac{d}{d-z}; \quad \frac{d-1}{z-1}; \quad \frac{1-d}{z-d}; \\
 \frac{z-d}{d}; \quad \frac{1}{d}; \quad \frac{z-d}{z-1}; \quad \frac{d-z}{d-1}; \quad \frac{z-d}{d(z-1)}; \quad \frac{d-z}{(d-1)z}
 \end{array} \tag{B-4}$$

As transformações são tais que as linhas apresentadas acima estão relacionadas com as respectivas singularidades $0, 1, \infty, d$. Este é grupo hiper-Kummer de 4 pontos, isomórfico a S_4 , que foi trabalhado por Heun (1889) e pode ser chamado de grupo de Heun (RONVEAUX, 1995).

3. CASOS CONFLUENTES

Para uma melhor compreensão confluências de equações diferenciais, é recomendável que o leitor busque Ince (1926) onde pode-se encontrar uma estudo de processos gerais de confluências. Em essência, o processo de confluência envolve duas singularidades de uma equação diferencial, no qual é feito coincidirem por meio de um limite que leva as duas singularidades em uma nova, esta, de natureza um pouco mais complicada. A equação de Heun possui quatro tipos de confluência (encontra-se presente neste texto apenas o caso da equação de Heun confluyente caso haja interesse do leitor, sugiro que leia RONVEAUX (1995) para uma melhor compreensão dos demais casos).

O primeiro, a equação de Heun confluyente é obtida quando a singularidade

$z = 0$ é fundida com a $z = \infty$, o que resulta em uma equação com três pontos singulares, dois regulares $(0, 1)$ e um irregular (∞) de classe um (é uma forma de classificar singularidades irregulares). Este caso pode ser obtido ao fazer na Eq. (B - 1) $d \rightarrow \infty$, e simultaneamente $\beta, \epsilon, q \rightarrow \infty$ tal que

$$\frac{\beta}{d} \rightarrow \frac{\epsilon}{d} \rightarrow -\nu, \quad \frac{q}{d} \rightarrow -\sigma, \quad (B - 5)$$

onde a equação de Heun confluyente que é representada por

$$\frac{d^2}{dz^2} y(z) + \left[\nu + \frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z-1} \right] \frac{d}{dz} y(z) + \left[\frac{\alpha\nu z - \sigma}{z(z-1)} \right] y(z) = 0 \quad (B - 6)$$

Aqui, α, γ, ϵ são os mesmos parâmetros da equação original e σ, ν são parâmetros novos.

Outro caso é o da equação de Heun duplamente confluyente. Nesta, é feito $z = 1$ ir para $z = b$ e posteriormente se faz $d \rightarrow \infty, b \rightarrow 0$ o que resulta em uma equação com duas singularidades irregulares de classe um $(0, \infty)$.

O terceiro, chamada de equação de Heun bi-confluyente. Fazendo $z = 1$ ir para $z = b$ e posteriormente se faz $d \rightarrow \infty, b \rightarrow \infty$ fazendo com que a nova equação tenha duas singularidades, uma regular (0) e uma irregular de classe dois (∞) . Você pode se questionar se ao invés de mapear d e b no infinito optasse por mapear-los na origem não geraria um novo tipo de confluência? A resposta é não. Uma vez que você pode fazer $z \rightarrow \frac{1}{\xi}$ na sua nova equação diferencial recupera-se o caso acima, o que não gera um novo tipo de confluência.

Por fim, pode-se obter a equação de Heun tri-confluyente fazendo cada singularidade coincidir no infinito. O resultado é uma equação com um ponto singular de classe três.

4. REDUÇÃO DE UMA EQUAÇÃO DE HEUN GERAL A UMA HIPERGEOMÉTRICA

O estudo das soluções da equação de Heun é bem menos desenvolvido que as da hipergeométrica, elas não possuem, ainda, uma representação integral para suas soluções, diferentemente das funções hipergeométricas (soluções da equação hipergeométrica). Encontrar quais soluções de equação de Heun são expressas em termos de funções mais familiares seria obviamente importante. Um resultado expressivo nesse sentido foi obtido por KUIKEN (1979). Em alguns casos torna-se possível, através de uma mudança quadrática da variável independente, reduzir a equação de Heun em uma equação hipergeométrica, e assim expressar suas soluções em termos de funções hipergeométricas.

Transformações quadráticas Kuiken não são tão conhecidas como deveriam ser. O teorema principal do trabalho realizado por Kuiken encontra-se, infelizmente, enunciado de maneira errada. A fim de corrigir e expressar soluções da equação de Heun com funções hipergeométricas, MAIER (2005) criou uma forma de reduzir uma equação de Heun em uma equação hipergeométrica.

Este teorema encontra-se enunciado em seu trabalho, e pode ser expresso da seguinte maneira:

Teorema de Maier: *Suponha a equação de Heun [eq. (B - 1)] tenha quatro pontos singulares e seja não trivial ($\alpha\beta \neq 0$ ou $q \neq 0$). Então a solução local Heun ($d, q; \alpha, \beta, \gamma, \delta; t$) pode ser reduzida para a função hipergeométrica $F = {}_2F_1(a, b; c; z)$ por uma fórmula do tipo $\text{Heun}(t) = {}_2F_1(R(t))$, com $R(t)$ uma função racional, apenas se seus parâmetros $d, q; \alpha, \beta$ satisfaz $q = \alpha\beta p$, com (d, p) igual a um dos seguintes 23 pares. Se uma redução desse tipo existe, $R(t)$ será um polinômio de grau declarado.*

1- $R(t)$ tem grau 2 ou 4.

$(-1, 0), (1/2, 1/2), (2, 1)$.

2- $R(t)$ tem grau 3.

$$(-3, 0), (-1/3, 0), (1/4, 1/4), (3/4, 3/4), (4/3, 1), (4, 1).$$

3- $R(t)$ tem grau 3 ou 6.

$$\left(\frac{1}{2} \pm i \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \pm i \frac{\sqrt{3}}{6}\right).$$

4- $R(t)$ tem grau 4.

$$\left(\frac{1}{2} \pm i \frac{5\sqrt{2}}{4}, \frac{1}{2} \pm i \frac{\sqrt{2}}{4}\right), \left(\frac{4}{27} \pm i \frac{10\sqrt{2}}{27}, \frac{7}{27} \pm i \frac{4\sqrt{2}}{27}\right), \left(\frac{23}{27} \pm i \frac{10\sqrt{2}}{27}, \frac{20}{27} \pm i \frac{4\sqrt{2}}{27}\right).$$

5- $R(t)$ tem grau 5.

$$\left(\frac{1}{2} \pm i \frac{11\sqrt{15}}{90}, \frac{1}{2} \pm i \frac{\sqrt{15}}{18}\right), \left(\frac{135}{128} \pm i \frac{33\sqrt{15}}{128}, \frac{95}{128} \pm i \frac{9\sqrt{15}}{128}\right), \left(\frac{-7}{128} \pm i \frac{33\sqrt{15}}{128}, \frac{33}{128} \pm i \frac{9\sqrt{15}}{128}\right).$$

Por meio deste, qualquer equação de Heun que satisfaça um destes 23 pares pode ser levada a uma equação hipergeométrica.

Pode-se ainda, verificar se uma dada transformação pode ou não reduzir a equação de Heun. Seja $R(t)$ uma suposta transformação de grau apropriado para um dos 23 pares descritos acima, fazendo

$$\frac{d^2y}{dt^2} + \left\{ -\frac{\ddot{R}}{\dot{R}} + \frac{\dot{R}}{R(1-R)} [c - (a+b+1)R] \right\} \frac{dy}{dt} - \frac{ab\dot{R}^2}{R(1-R)} y = 0, \quad (B-7)$$

deve-se recuperar a forma da equação de Heun. Aqui, \dot{R} e \ddot{R} são as derivadas de $R(t)$ com respeito à t .

APÊNDICE C

Esta monografia é fruto de um trabalho que encontra-se publicado nos anais da XVI SEMANA UNIVERSITÁRIA (Inter)nacionalização da Ciência e da Educação realizada durante o período de 21 a 25 de novembro de 2011. Apresenta-se abaixo o trabalho na íntegra

Equação de Schrödinger como uma equação geral de Heun para um problema de massa dependente da posição

Schrödinger equation as a general Heun's equation in a position dependent mass problem

Marco Antonio Bezerra Diniz^{7*}; Marcony Silva Cunha*

Resumo: Na equação de Schrödinger, a massa é geralmente tratada como constante. Contudo, há diversas situações onde a matéria se comporta como se efetivamente a massa dependesse da posição. Inicialmente proposta para descrever impurezas em cristais, a teoria de massa efetiva tem sido um componente relevante para o estudo de propriedades eletrônicas de portadores de carga em semicondutores, para o estudo de pontos quânticos, de líquidos quânticos, clusters de ³He etc. Em geral, essas teorias transformam uma interação potencial complicada em problemas onde a massa (de maneira efetiva) depende da posição. Neste trabalho, mostra-se que a equação de Schrödinger unidimensional estacionária que descreve interações tais que a massa pode ser considerada dependente da posição na forma $m(x) = m \operatorname{sech}^2(x)$, sujeita a um potencial nulo, pode ser transformada em uma equação equivalente a equação de Schrödinger estacionária, em um novo sistema de coordenadas onde a massa pode ser vista como constante e sujeita a um potencial efetivo não nulo \mathcal{V} . Encontra-se então uma solução analítica para o problema em termos de uma função de Heun local. Em seguida mostra-se que, para este problema em particular, a solução encontrada pode ser transformada em uma função hipergeométrica de Gauss por meio de uma transformação direta na variável independente da solução local de Heun.

Palavras-Chave: Massa dependente da posição. Equação de Heun. BenDaniel-Duke.

Abstract: In the Schrödinger equation, the mass is usually treated as constant. However, there are many situations in which the mass effectively is position dependent. Initially proposed to describe impurities in crystals, the effective mass

⁷ Bolsista ICT-FUNCAP. *Grupo de Física Teórica - GFT, Centro de Ciências e Tecnologia. Universidade Estadual do Ceará (UECE), Av. Paranjana 1700, 60740-903, Fortaleza-CE

theory has been an essential component for the study of electronic properties of charge carriers in semiconductor hetero-structures, in the study of quantum dots, quantum liquids, etc. In general, these theories seek to address an complex (potential) interaction in a manner equivalent to a problem where the mass (effectively) depends on the position. In this work, one shows that one-dimensional stationary Schrödinger equation that describes such interactions where mass can be considered spatially dependent such that $m(x) = m \operatorname{sech}^2(x)$, subject to a null potential, can be transformed into an equation similar to the stationary Schrödinger equation via coordinate transformations where an effective constant mass is now subject to a nonzero potential \mathcal{V} . One finds an analytical solution to the problem in terms of a local Heun's function. Then one shows that, for this particular problem, the solution can be transformed into a Gauss hypergeometric function by a direct transformation of independent variable in the local Heun's solution.

Key words: Position dependent mass. Heun's equation. BenDaniel-Duke.

1. INTRODUÇÃO

O uso da equação de Schrödinger com a massa dependente da posição (PDM) tem crescido nos últimos anos devido a sua aplicabilidade em diversas áreas da Física, e em particular na Matéria Condensada, no estudo de semicondutores (BASTARD, 1988), pontos quânticos (SERRA e LIPPARINI, 1997), líquidos quânticos (ARIAS DE SAAVEDRA et al., 1994), clusters de ^3He (BARRANCO et al., 1997) etc. Porém, em situações onde se considera a massa efetiva dependente da posição, há reconhecidamente certa ambigüidade de ordenamento do operador energia cinética na equação de Schrödinger. Recentemente, alguns autores propuseram o uso da Equação de Dirac para contornar esse problema (RENAN; PACHECO; ALMEIDA, 2000). Constatou-se que os resultados obtidos com a equação de Dirac corroboram com o ordenamento proposto por BENDANIEL e DUKE (1966) para o operador energia cinética, no formalismo de Schrödinger. Assim, adota-se esse ordenamento para a equação de Schrödinger como dado por ARDA, AYDOĞDU e SEVER (2010) para analisar a equação resultante para caso em que uma partícula, caracterizada pela função de massa $m(x) = m \operatorname{sech}^2(x/a)$, está livre, ou seja, o potencial que atua sobre ela é nulo, $V(x) = 0$.

Através de uma mudança na função de onda ($\psi(x)$), será mostrado que a nova equação obtida tem forma equivalente à equação de Schrödinger, onde um termo constante faz o papel da massa sujeita a um potencial efetivo não

nulo \mathcal{V} . Através de uma mudança de variáveis, a equação de Schrödinger resultante será transformada em uma equação geral de Heun (RONVEAUX, 1995). Esta equação que caracteriza-se por ser uma equação fuchsiana (HILLE, 1997) com quatro pontos singulares regulares, $(0; 1; d; 1)$, definida na esfera de Riemann.

2. MATERIAL E MÉTODOS

Sendo essa uma pesquisa teórica, os materiais e métodos utilizados são essencialmente a pesquisa bibliográfica, que fornece elementos para realização da mesma, sem a necessidade de recursos estatísticos ou coleta de dados. Podendo ser desenvolvida apenas com o auxílio de softwares de matemática.

3. METODOLOGIA

Para tratar um problema particular de uma partícula de massa dependente da posição, sujeita a um potencial nulo, utilizamos o ordenamento de BenDaniel Duke para o operador energia cinética, no formalismo de Schrödinger. A partir de uma transformação na função de onda (variável dependente) chegamos a uma equação similar a equação de Schrödinger que descreve, neste caso, um problema equivalente a uma partícula de massa (constante) sujeita a um potencial confinante. A seguir, realizamos uma transformação de coordenadas na variável independente e chegamos a uma equação conhecida como equação geral de Heun. Finalmente, a solução do problema é dada em termos de uma função de Heun local. Em seguida, pode-se mostrar que a solução pode ser escrita como uma função hipergeométrica de Gauss.

4. RESULTADOS

4.1 PDM E ORDENAMENTO DE BENDANIEL-DUKE

Considerando-se o ordenamento de BenDaniel-Duke, a equação de Schrödinger para o caso de uma partícula com massa dependente da posição é dada por

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{m(x)} \frac{dm(x)}{dx} \frac{d}{dx} + \frac{2m(x)}{\hbar^2} [E - V(x)] \right\} \psi(x) = 0 \quad (C - 1)$$

Estudando-se um sistema físico onde a massa de uma partícula tem uma dependência espacial (efetiva) na forma

$$m(x) = m \operatorname{sech}^2(x/a), \quad (C - 2)$$

no qual a é uma constante que introduziu-se para tornar adimensional o argumento da secante e tem, por sua vez, uma relação direta com a distribuição da massa ao longo de x . Em uma situação onde o potencial $V(x)$, pode-se facilmente verificar que a equação que descreve o comportamento dessa partícula é

$$\psi''(x) + \frac{2}{a} \tanh(x/a) \psi'(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \operatorname{sech}^2(x/a) [E - V(x)] \psi(x) = 0 \quad (C - 3)$$

onde $\psi'(x)$ e $\psi''(x)$ são as derivadas primeira e segunda de ψ em relação a x respectivamente. Para absorver a constante a da equação acima, é útil redefinir a variável $x \rightarrow ax$ tal que se chega a uma equação ligeiramente diferente,

$$\psi''(x) + 2 \tanh(x) \psi'(x) + \frac{2ma^2}{\hbar^2} \operatorname{sech}^2(x) [E - V(x)] \psi(x) = 0 \quad (C - 4)$$

Para se averiguar as soluções da Eq. (C - 4), é conveniente utilizar transformações sobre suas variáveis dependentes e independentes. A partir de uma transformação na função de onda dada por

$$\psi(x) = \cosh^{\nu}(x) \varphi(x) \quad (C - 5)$$

a Eq. (C - 4) pode ser escrita como

$$\varphi''(x) + 2(\nu + 1) \tanh(x) \varphi'(x) + \left[\nu(\nu + 2) \tanh^2(x) \left(\nu + \frac{2ma^2E}{\hbar^2} \right) \operatorname{sech}^2(x) \right] \varphi(x) = 0 \quad (C - 6)$$

Nota-se que a transformação (C - 5) preservou a paridade da Eq. (C - 4), isto é, também a equação acima admite soluções simétricas e antissimétricas.

Para a mudança na variável independente utiliza-se a transformação $\{x \rightarrow z \mid \frac{dz}{dx} = \operatorname{sech}(x)\}$. Como se pode ver, resolvendo a equação diferencial para z , cuja solução é dada por $\cos(z) = \operatorname{sech}(x)$, esta transformação de coordenadas implica em um mapeamento $(-\infty, \infty) \rightarrow \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$.

4.2 ANÁLOGO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA MASSA CONSTANTE

Através da mudança de variáveis proposta na seção anterior, a função de onda satisfaz agora a seguinte equação diferencial em termos da variável z , a saber,

$$\varphi''(z) + (2\nu + 1) \tan(z) \varphi'(z) + \left\{ \nu + \nu(\nu + 2) \tan^2(z) + \frac{2ma^2}{\hbar^2} [E - V(z)] \right\} \varphi(z) = 0 \quad (C - 7)$$

Quando $\nu = -1/2$, a equação acima perde o termo de derivada primeira. Fica-se então com a seguinte equação diferencial

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{2} + \frac{3}{4} \tan^2(z) + V(z) \right] \varphi(z) = a^2E\varphi(z) \quad (C - 8)$$

A expressão anterior é uma equação de autovalores similar a uma equação de Schrödinger estacionária para o caso de uma partícula de massa constante, com energia potencial (efetiva) dada por

$$\mathcal{V}(z) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{2} + \frac{3}{4} \tan^2(z) + V(z) \right] \quad (C - 9)$$

A Eq. (C - 8) pode ser então interpretada como uma equação que descreve o movimento de uma partícula de massa constante sujeita a um potencial confinante $\mathcal{V}(z)$, o que restringe seu movimento ao intervalo $z = (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$. Como a energia total da partícula, quanticamente, não pode ser menor que o mínimo do potencial, espera-se que $2ma^2E/\hbar^2 > 1/2$, com a condição de contorno $\varphi(\pm \frac{\pi}{2}) = 0$.

Interessante comentar que uma equação equivalente à Eq. (C - 8) apareceu em contextos completamente diferentes do problema aqui tratado (TAS, ELI, 2003 e CHRISTIANSEN; CUNHA; TAHIM, 2010).

4.3 EQUAÇÃO GERAL DE HEUN

Uma maneira (geral) de resolver a equação de Schrödinger acima é introduzindo-se a transformação de coordenadas $y = \cos(z)$, onde $0 < y < 1$ (desde que $-\pi/2 < z < \pi/2$). Uma vez que $E > 0$ pode-se definir $k^2 = 2m_0 a^2 E / \hbar^2$, implementar a mudança de variável e obter

$$\varphi''(y) + \frac{y}{y^2 - 1} \varphi'(y) + \left(\frac{1/2 - k^2}{y^2 - 1} - \frac{3/4}{y^2} \right) \varphi(y) = 0 \quad (C - 10)$$

Pode-se reescrever a equação acima em uma forma mais adequada, definindo-se a transformação $\varphi(y) = y^{-1/2} h_1(y)$. Neste caso, fica-se com a seguinte equação para a função transformada $h_1(y)$:

$$h_1''(y) + \left[\frac{-1}{y} + \frac{1/2}{y-1} + \frac{1/2}{y+1} \right] h_1'(y) + \frac{-k^2 y}{y(y-1)(y+1)} h_1(y) = 0 \quad (C-11)$$

A despeito do intervalo de interesse ($0 < y < 1$), a equação acima possui formalmente quatro pontos singulares regulares em $y = (0; -1; 1; \infty)$. Equações deste tipo pertencem a uma classe de equações diferenciais lineares de segunda ordem, definidas na esfera de Riemann, com quatro pontos singulares regulares ou pontos fuchsianos (HILLE, 1997).

A forma mais geral de se escrever uma equação com quatro pontos singulares é:

$$H''(y) + \left(\frac{\gamma}{y} + \frac{\delta}{y-1} + \frac{\varepsilon}{y-d} \right) H'(y) + \frac{\alpha\beta y - q}{y(y-1)(y-d)} H(y) = 0 \quad (C-12)$$

A equação acima é conhecida como equação geral de Heun (RONVEAUX, 1995), sendo seus quatro pontos singulares regulares $(0; 1; d; \infty)$, com $d \neq (0; 1; \infty)$. Os parâmetros equação de Heun guardam entre si a relação fuchsiana $\alpha + \beta + 1 = \gamma + \delta + \varepsilon$. Tomam-se as soluções (locais) de Heun em torno dos pontos singulares, sendo que para cada ponto singular existem duas soluções locais linearmente independentes (L.I.) identificadas pelos seus expoentes característicos.

Calculando-se os expoentes (dois para cada solução local) a partir de uma série de Frobenius para as soluções, fica-se com um conjunto de 4×2 soluções localmente L. I. De fato, através de transformações automórficas nas soluções, que preservam a forma da equação de Heun, mostra-se que a equação geral de Heun possui 192 soluções distintas (MAIER, 2007).

Para as soluções L.I. pode-se utilizar o símbolo-P de Riemann dado por

$$P \left\{ \begin{array}{cccc} 0 & 1 & d & \infty \\ 0 & 0 & 0 & \alpha; y \\ 1-\gamma & 1-\delta & 1-\varepsilon & \beta \end{array} \right\}$$

De acordo com as transformações de coordenadas utilizadas, a solução em termos da variável y deve estar confinada ao intervalo $(0,1)$, em torno de $y = 1$, com seus respectivos expoentes característicos, a saber, 0 e $1 - \delta$. Portanto, as soluções L.I. locais para a equação geral de Heun em torno de $y = 1$ são escritas como

$$H = H(1 - d, -q + \alpha\beta, \alpha, \beta, \delta, \gamma; 1 - y) \quad (C - 13)$$

$$H = (1 - y)^{1-\delta} H[1 - d, -q + (\delta - 1)\gamma d + (\alpha - \delta + 1)(\beta - \delta + 1), \beta - \delta + 1, \alpha - \delta + 1, 2 - \delta, \gamma; 1 - y] \quad (C - 14)$$

4.3.1 Soluções de paridade par

Ao compara a Eq. (C - 11) com (C - 12), tem-se os seguintes valores para os parâmetros da equação de Heun: $d_1 = -1$; $q_1 = 0$; $\alpha_1 = 1/2(-1 + \sqrt{1 + 4k^2})$, $\beta_1 = -1/2(1 + \sqrt{1 + 4k^2})$, $\gamma_1 = -1$; $\delta_1 = \varepsilon_1 = 1/2$. Calculam-se os valores de α_1 e β_1 através da relação fuchsiana entre os parâmetros, juntamente com a relação $\alpha_1\beta_1 = -k^2$. Assim as soluções para $h_1(y)$ são:

$$h_1^{(1)}(y) = H\left(2, -k^2; \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{-1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{1}{2}, -1; 1 - y\right) \quad (C - 15)$$

$$h_1^{(2)}(y) = (1 - y)^{-\frac{1}{2}} H\left(2, -\frac{3 + 4k^2}{4}; -\frac{\sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{\sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{3}{2}, -1; 1 - y\right) \quad (C - 16)$$

Como se pode ver através das transformações de coordenadas, as soluções em torno de $y = 1$ correspondem a $z = 0$ ou $x = 0$. Assim, as soluções com $0 < y \leq 1$ cobrem o intervalo $\left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ em z e $(-\infty, \infty)$ em x .

Através da transformação das variáveis dependente e independente, é fácil escrever as equações acima em termos da variável z , uma vez que $y = \cos(z)$. Neste caso, tem-se

$$\varphi^{(1,2)}(z) = \sec^{\frac{1}{2}}(z) h_1^{(1,2)}(\cos(z)) \quad (C - 17)$$

As equações acima representam as soluções analíticas em torno da origem $z = 0$ para o problema quântico de uma partícula de massa m sujeita ao potencial \mathcal{V} [Eq. (C - 9)], onde o módulo quadrado da função de onda representa, como é usual, a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula em uma determinada posição do eixo z .

Analogamente, levando-se em conta a respectiva transformação inversa de coordenadas, as soluções no espaço x escrevem-se como:

$$\psi^{(1,2)}(x) = h_1^{(1,2)}(\operatorname{sech}(x)) \quad (C - 18)$$

Matematicamente, estas são as soluções mais gerais para o problema de massa variável na forma da Eq. (C - 2). As soluções fisicamente aceitáveis devem, porém ser encontradas obedecendo às condições de contorno adequadas. No espaço z é mais fácil determinar quais são essas soluções observando-se que o potencial é infinito em $z = \pm \frac{\pi}{2}$. Portanto, as funções de onda devem se anular nestes pontos, ou seja, $\varphi\left(z = \pm \frac{\pi}{2}\right) = 0$.

As soluções acima são ambas de paridade par, sendo a segunda solução fisicamente inaceitável por não ser diferenciável em $z = 0$. Como se verá mais adiante, a primeira solução converge apenas para valores de k naturais, ou melhor, $k^2 = n(n + 1)$, sendo n um número inteiro ímpar ($n = 1, 3, 5 \dots$).

4.3.2 Soluções de paridade ímpar

Para se determinar as soluções ímpares, é necessário voltar a Eq. (C - 8). Propõe-se então uma mudança na variável independente tal que

$$\varphi(z) = \operatorname{sen}(z) \phi(z) \quad (C - 19)$$

Esta mudança leva a seguinte equação para $\phi(z)$:

$$\phi''(z) + 2 \cotg(z) \phi'(z) - \left[\frac{3}{2} + \frac{3}{4} \tan^2(z) \right] \phi(z) = -k^2 \phi(z) \quad (C - 20)$$

Utilizando novamente a mudança de variável $y = \cos(z)$, fica-se com uma equação semelhante a Eq. (54),

$$\phi''(y) + \frac{3y}{y^2 - 1} \phi'(y) + \left(\frac{3/2 - k^2}{y^2 - 1} - \frac{3/4}{y^2} \right) \phi(y) = 0, \quad (C - 21)$$

o que sugere, como antes, a mudança de variáveis $\phi(y) = y^{-\frac{1}{2}} h_2(y)$. Feito isto, pode-se uma nova equação de Heun descrita abaixo

$$h_2''(y) + \left(\frac{-1}{y} + \frac{3/2}{y-1} + \frac{3/2}{y+1} \right) h_2'(y) + \frac{-k^2 y}{y(y-1)(y+1)} h_2(y) = 0 \quad (C - 22)$$

Como na seção anterior, as soluções para $h_2(y)$ são funções locais de Heun em torno de $y = 1$, com seus respectivos parâmetros $\alpha_2 = \frac{1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{2}$; $\beta_2 = \frac{1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{2}$; $\gamma_2 = -1$; $\delta_2 = \varepsilon_2 = \frac{3}{2}$. Explicitamente, tem-se então

$$h_2^{(1)}(y) = Heun \left(2, -k^2; \frac{1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{3}{2}, -1; 1 - y \right) \quad (C - 23)$$

$$h_2^{(2)}(y) = Heun \left(2, \frac{1}{4} - k^2; -\frac{1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{2}, \frac{1}{2}, -1; 1 - y \right) \quad (C - 24)$$

Como antes, as soluções em torno de $y = 1$ correspondem a $z = 0$ ou $x = 0$. Assim, as soluções com $0 < y \leq 1$ cobrem o intervalo $\left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ em z e $(-\infty, \infty)$ em x . As soluções em z e em x são, respectivamente,

$$\varphi^{(1,2)}(z) = \sen(z) \sec^{\frac{1}{2}}(z) h_2^{(1,2)}(\cos(z)) \quad (C - 25)$$

$$\psi^{(1,2)}(x) = \tanh(x) h_2^{(1,2)}(\operatorname{sech}(x)) \quad (C - 26)$$

A segunda solução $\varphi^{(2)}(z) [\psi^{(2)}(x)]$ é fisicamente inaceitável por não ser diferenciável na origem $z = 0$ ($y = 0$) e a primeira solução $\varphi^{(1)}(z) [\psi^{(1)}(x)]$ converge apenas para valores de k naturais, ou melhor, $k^2 = n(n + 1)$ com $n > 0$ par.

4.4 REDUÇÃO PARA A EQUAÇÃO HIPERGEOMÉTRICA

Existem alguns casos onde pode-se reduzir a equação de Heun (quatro pontos singulares) a uma equação hipergeométrica (três pontos singulares). Estes casos especiais foram estudados por MAIER (2005) para uma equação de Heun não trivial, ou seja, para $\alpha\beta \neq 0$ ou $q \neq 0$ a solução local de Heun $H(d, q; \alpha, \beta, \gamma, \delta; t)$ pode ser reduzida a uma solução hipergeométrica

${}_2F_1(a, b; c; t)$ através da relação $H(z) \rightarrow {}_2F_1(R(t))$, onde $R(t)$ é uma função racional. Neste caso, as relações entre os parâmetros $d, q; \alpha, \beta$ da equação de Heun são tais que $q = \alpha\beta p$, onde o par (d, p) pode assumir 23 valores distintos, com as respectivas $R(t)$ funções polinomiais racionais de até sexto grau. Particularmente, o caso $(d, p) = (2, 1)$ permite uma transformação $H(z) \rightarrow {}_2F_1(R(t))$ para um polinômio $R(t)$ de grau 2 ou quatro.

Levando-se em conta o contexto acima, pode-se reescrever as soluções pares e ímpares fisicamente aceitáveis [Eqs. (C - 15) e (C - 23)] respectivamente como

$$h_{fis}^{(1)}(t) = H(2, \alpha_1\beta_1; \alpha_1, \beta_1, \gamma'_1, \delta'_1; t) \quad (C - 27)$$

$$h_{fis}^{(1)}(t) = H(2, \alpha_2\beta_2; \alpha_2, \beta_2, \gamma'_2, \delta'_2; t) \quad (C - 28)$$

onde α_1 e β_1 são os mesmos definidos na secção anterior e $\gamma'_1 = 1/2$, $\delta'_1 = -1$, $\gamma'_2 = 3/2$, $\delta'_2 = -1$ e $t = 1 - y$. As equações acima descrevem então soluções de equações de Heun com seus respectivos parâmetros redefinidos. Além disso, essas soluções inserem-se no contexto discutido acima com

$(d, p) = (2, 1)$. Portanto pode-se reduzir as soluções acima em funções hipergeométricas como abaixo

$$h_{fis}^{(1)}(t) = Heun(2, \alpha_1 \beta_1; \alpha_1, \beta_1, \gamma'_1, \delta'_1; t) = {}_2F_1\left(\frac{\alpha_1}{2}, \frac{\beta_1}{2}; \gamma'_1; t(2-t)\right) \quad (C-29)$$

$$h_{fis}^{(2)}(t) = Heun(2, \alpha_2 \beta_2; \alpha_2, \beta_2, \gamma'_2, \delta'_2; t) = {}_2F_1\left(\frac{\alpha_2}{2}, \frac{\beta_2}{2}; \gamma'_2; t(2-t)\right) \quad (C-30)$$

Assim, pode-se escrever as funções de onda fisicamente aceitáveis em termos das variáveis z e x . Em termos da variável z , tem-se:

$$\varphi_{fis}^{(1)}(z) = \sec^{\frac{1}{2}}(z) {}_2F_1\left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{4}, \frac{-1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{4}; \frac{1}{2}; \sen^2(z)\right) \quad (C-31)$$

$$\varphi_{fis}^{(2)}(z) = \sen(z) \sec^{\frac{1}{2}}(z) {}_2F_1\left(\frac{1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{4}, \frac{1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{4}; \frac{3}{2}; \sen^2(z)\right) \quad (C-32)$$

Para as soluções em termos da variável x ,

$$\psi_{fis}^{(1)}(x) = {}_2F_1\left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{4}, \frac{-1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{4}; \frac{1}{2}; \tanh^2(x)\right) \quad (C-33)$$

$$\psi_{fis}^{(2)}(x) = \tanh(x) {}_2F_1\left(\frac{1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{4}, \frac{1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{4}; \frac{3}{2}; \tanh^2(x)\right) \quad (C-34)$$

Pode-se mostrar que as funções $\psi_{fis}^{(1,2)}(x)$ são ortogonais e formam um conjunto completo de soluções para o problema. Expressa-se a ortogonalidade através da expressão:

$$\langle \psi_n^{(i)} | \psi_m^{(j)} \rangle = \delta_{nm} \delta_{ij} \quad (C-35)$$

onde $i, j = 1, 2$ e n e m representam a ordem da solução.

5. DISCUSSÃO

Considerando que as soluções da equação de Schrödinger devem se anular nos extremos ($z = \pm \frac{\pi}{2}$) ou que as soluções no espaço x devem ir à zero no infinito, podem-se averiguar as condições de existência para estas soluções. Tomando-se, primeiramente, a Eq. (C - 31) para as soluções simétricas, deve-se impor que a função hipergeométrica seja nula no limite $z = \pm \frac{\pi}{2}$, isto porque $\sec(z)$ diverge nesse limite. Matematicamente,

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} \varphi_{fis}^{(1)}(z) &= \lim_{z \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} {}_2F_1 \left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 4k^2}}{4}, \frac{-1 - \sqrt{1 + 4k^2}}{4}; \frac{1}{2}; \sec^2(z) \right) \\ &= 0 \quad (C - 36) \end{aligned}$$

Este limite existe e deve ser igual a

$$\lim_{z \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} \varphi_{fis}^{(1)}(z) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{4}\sqrt{1 + 4k^2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{4} + \frac{1}{4}\sqrt{1 + 4k^2}\right)} \quad (C - 37)$$

A condição necessária para que este limite seja nulo é tal que a função gama deve divergir para que isto ocorra. Sabendo disto pode-se dizer que

$$\frac{3}{4} - \frac{1}{4}\sqrt{1 + 4k^2} = -p, \quad p = 0, 1, 2 \dots \quad (C - 38)$$

Reagrupando os termos encontra-se a seguinte relação

$$k^2 = (2p + 1)^2 + (2p + 1) \quad (C - 39)$$

Neste caso, fica evidente que se pode substituir $2p + 1 = n$, onde n é um número ímpar. Assim, $k^2 = n(n + 1)$.

De maneira análoga, pode-se obter as condições de quantização para as soluções antissimétrica [Eq. (C - 32)], a saber,

$$\lim_{z \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} \varphi_{fis}^{(2)}(z) = \frac{2\sqrt{\pi}}{k^2 \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\sqrt{1+4k^2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4}\sqrt{1+4k^2}\right)} = 0 \quad (C-40)$$

sendo agora

$$\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\sqrt{1+4k^2} = -q, \quad q = 0, 1, 2 \dots \quad (C-41)$$

Reagrupando os termos, tem-se:

$$k^2 = 2q(2q + 1) \quad (C-42)$$

Sendo $2q$ um número par, podemos considerar $2q = n$, onde agora n é um número par ($n = 0, 2, 4, \dots$). Assim, novamente $k^2 = n(n + 1)$. Desta forma a mesma expressão para k^2 é válida para soluções simétricas ($n = 1, 3, 5, \dots$) e antissimétricas ($n = 0, 2, 4, \dots$), como antecipado nas seções anteriores. Importante ressaltar que este resultado define a quantização da energia para o problema, ou seja,

$$E = \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{n(n + 1)}{2} \quad (C-43)$$

onde agora ($n = 1, 2, 3, \dots$) por causa da condição física sobre a energia, ou seja, quaticamente a energia mínima não pode ser zero.

Pode-se agora escrever as expressões finais para as soluções simétricas e antissimétricas, na variável z (que representa o equivalente da equação Schrödinger para massa constante) e na variável x para a massa dependente da posição. Em termos dessas variáveis, as soluções são

$$\varphi_{fis}^{(1)}(z) = \sec^{\frac{1}{2}}(z) {}_2F_1\left(\frac{n}{2}, -\frac{n+1}{2}; \frac{1}{2}; \sin^2(z)\right) \quad (C-44)$$

$$\varphi_{fis}^{(2)}(z) = \sin(z) \sec^{\frac{1}{2}}(z) {}_2F_1\left(\frac{n+1}{2}, -\frac{n}{2}; \frac{3}{2}; \sin^2(z)\right) \quad (C-45)$$

e

$$\psi_{fis}^{(1)}(x) = {}_2F_1\left(\frac{n}{2}, -\frac{n+1}{2}; \frac{1}{2}; \tanh^2(x)\right) \quad (C - 46)$$

$$\psi_{fis}^{(2)}(x) = \tanh(x) {}_2F_1\left(\frac{n+1}{2}, -\frac{n}{2}; \frac{3}{2}; \tanh^2(x)\right) \quad (C - 47)$$

Abaixo, apresenta-se os gráficos das soluções de paridade par (simétricas) [Fig. (1)] para a coordenada z [Eq. (C - 44)], que representa o análogo quântico de massa constante para $n = 1, 3$ e 5 . Logo abaixo, [Fig. (2)], o gráfico para função em termos da variável x [Eq. (C - 46)], indicando que a partícula tem maior probabilidade de ser encontrada em regiões próximas à origem. Analogamente, a Fig. (3) e Fig. (4) representam as soluções de paridade ímpar (antissimétricas) para z [Eq. (C - 45)] e para x [Eq. (C - 47)], para $n = 2, 4$ e 6 .

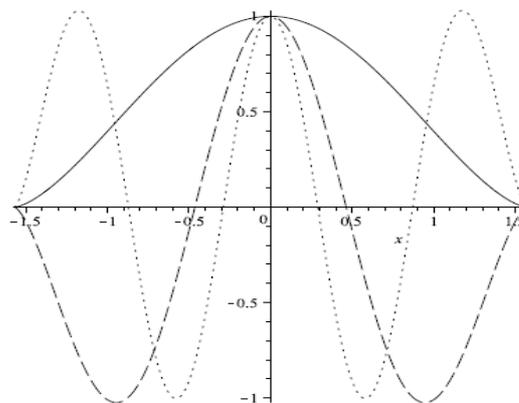


Figura 1: Soluções (simétricas) da Eq. (C - 44) para $n = 1$ (linha contínua), $n = 3$ (linha tracejada) e $n = 5$ (linha pontilhada).

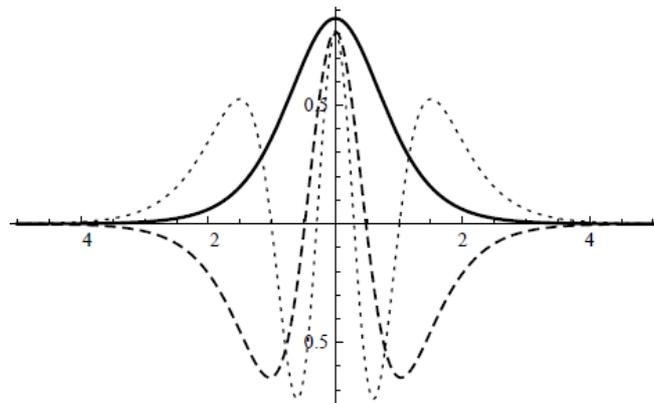


Figura 2: Soluções (simétricas) normalizadas da Eq. (C - 46) para $n = 1$ (linha contínua), $n = 3$ (linha tracejada) e $n = 5$ (linha pontilhada).

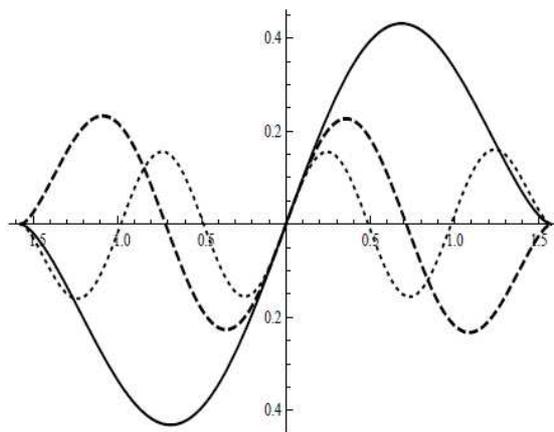


Figura 3: Soluções (antissimétricas) da Eq. (C - 47) para $n = 2$ (linha contínua), $n = 4$ (linha tracejada) e $n = 6$ (linha pontilhada).

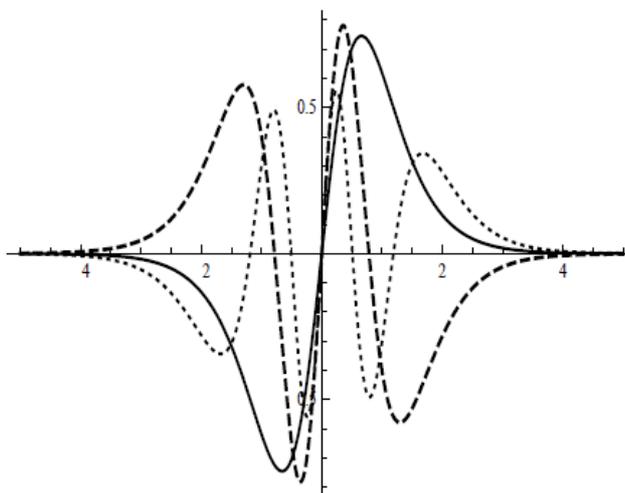


Figura 4: Soluções (antissimétricas) normalizadas da Eq. (C - 47) para $n = 2$ (linha contínua), $n = 4$ (linha tracejada) e $n = 6$ (linha pontilhada).

Em termos da variável original $ax \rightarrow x$, pode-se ver essa solução como se $a = 1$, muito embora a forma das soluções (simétricas ou antissimétricas) seja invariante se se escolher convenientemente a escala do gráfico.

6. CONCLUSÃO

Neste trabalho, apresenta-se a solução analítica para o problema de massa dependente da posição sujeita a um potencial nulo, utilizando-se o ordenamento de BenDaniel-Duke (1996) para escrever a equação de Schrödinger adequada para esse tipo de problema. Utilizando-se transformações de coordenadas e transformações na própria função de onda,

consegue-se reescrever o problema e reinterpretá-lo como uma equação que descreve uma partícula de massa constante sujeita a um potencial (efetivo) confinante.

As soluções mais gerais desse problema são funções de Heun locais, que se mostraram convergentes apenas para determinados valores (quantizados) do parâmetro relacionado à energia da partícula. Verifica-se, para este problema em particular, que as soluções encontradas para a função de onda, em termos de funções de Heun locais, admitem uma redução a uma função hipergeométrica de Gauss por meio de uma transformação polinomial de grau dois ou quatro. Esta, por sua vez, se mostra quantizada através da relação $E = \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{n(n+1)}{2}$, onde $n = 1, 2, 3 \dots$

Por causa da paridade do potencial efetivo (ou da equação diferencial que descreve o problema), as soluções se apresentam com paridade par e ímpar (simétricas e antissimétricas). Para a visualização das soluções, da simetria presente na função de onda, apresentam-se alguns gráficos para determinados valores de n . Observa-se que a distribuição de massa, $m(x) = m_0 \operatorname{sech}^2(x/a)$, determina aproximadamente a região onde a densidade de probabilidade é relevante.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ARDA, A.; AYDOG˘ DU, O.; SEVER, R. **Scattering of the Woods-Saxon potential in the Schrödinger equation.** *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 43, p. 425204-425218, 2010.

ARIAS DE SAAVEDRA, F.; BORONAT, J.; POLLS, A.; FABROCINI, A. **Effective mass of one 4He atom in liquid 3He .** *Physics Review B*, v. 50, p. 4248-4251, 1994.

BARRANCO, M.; Pi, M.; GATICA, S.M.; HERNANDEZ, E.S.; NAVARRO, J. **Structure and energetics of mixed 4He - 3He drops.** *Physics Review B*, v. 56, p. 8997-9003, 1997.

BASTARD, G. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures.* Courtaboeuf: Les Ulis: Editions de Physique, 1988.

BENDANIEL, D. J.; DUKE, C. B. **Space-Charge Effects on Electron Tunneling.** *Physical Review*, v. 152, p. 683-692, 1966.

CHRISTIANSEN, H.R.; CUNHA, M. S.; TAHIM, M. K. **Exact solutions for a Maxwell-Kalb-Ramond action with dilaton: Localization of massless and massive modes in asine-Gordon brane-world.** *Physical Review D*, v. 82, 085023, 2010.

HILLE, E. **Ordinary Differential Equations in the Complex Domain.** 1st Ed. New York: DOVER SCIENCE, 1997. 496 p.

MAIER, R. S. **On reducing the Heun equation to the hypergeometric equation.** *Journal of Differential Equations*, v. 213, p. 171-203, 2005.

MAIER, R. S. **The 192 solutions of Heun equation.** *Mathematical of Computation*, v. 76, n. 258, p. 811-843, 2007.

RENAN, R.; PACHECO, M. H.; ALMEIDA, C. A. S. **Treating some solid state problems with the Dirac equation.** *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 33, p. 509-514, 2000.

RONVEAUX, A. *Heun's differential equations*. Oxford: Oxford University Press, 1995. 384 p.

SERRA, L.; LIPPARINI, E. **Spin response of unpolarized quantum dots.** *Europhysics Letters*, v. 40, p. 667-672, 1997.

TAŞELI, H. **Exact analytical solutions of the Hamiltonian with a squared tangent potential.** *Journal Mathematical Chemistry*, v. 34, p. 243-251, 2003.