

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CEARÁ

PAULO VICENTE DE CASSIA LIMA PIMENTA

**SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER
PARA MASSA DEPENDENTE DA POSIÇÃO
 $m = m_0 \operatorname{sech}^2(x)$: CASOS $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}(x)$ E
 $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}^2(x)$**

FORTALEZA, CEARÁ

2012

PAULO VICENTE DE CASSIA LIMA PIMENTA

**SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA
MASSA DEPENDENTE DA POSIÇÃO $m = m_0 \operatorname{sech}^2(x)$:
CASOS $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}(x)$ E $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}^2(x)$**

Monografia apresentada ao Curso de Física do Centro de Ciência e Tecnologia da Universidade Estadual do Ceará, como requisito parcial para obtenção do grau de Bacharel em Física.

Orientador: Marcony Silva Cunha

FORTALEZA, CEARÁ

2012

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Estadual do Ceará
Biblioteca Central Prof. Antônio Martins Filho
Bibliotecária Responsável – Leila Sátiro – CRB-3 / 544

P644s Pimenta, Paulo Vicente de Cássia Lima.
Soluções da equação de Shrödinger para a massa dependente da posição $m = m_0 \operatorname{sech}^2(x)$: casos $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}(x)$ e $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}^2(x)$ / Paulo Vicente de Cássia Lima Pimenta. — 2012.
CD-ROM. 49f. il. (algumas color.) ; 4 $\frac{3}{4}$ pol.
“CD-ROM contendo o arquivo no formato PDF do trabalho acadêmico, acondicionado em caixa de DVD Slin (19 x 14 cm x 7 mm)”.
Monografia (graduação) – Universidade Estadual do Ceará, Centro de Ciências e Tecnologia, Curso de Física, Fortaleza, 2012.
Orientação: Prof. Dr. Marcony Silva Cunha.
1. Massa dependente da posição. 2. Equação confluyente de Heun. 3. Potencial tangente hiperbólica e tangente hiperbólica ao quadrado. I. Título.

CDD: 530



Universidade Estadual do Ceará

Centro de Ciências e Tecnologia
Coordenação do Curso de Física



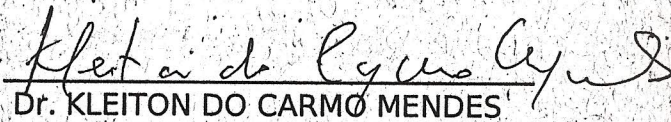
ATA DE APRESENTAÇÃO DE MONOGRAFIA

Em 20 de dezembro de 2012, PAULO VICENTE DE CASSIA LIMA PIMENTA, aluno(a) regularmente matriculado no Curso de Bacharelado em Física, matrícula número 1045160 apresentou a monografia intitulada SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA MASSA DEPENDENTE DA POSIÇÃO

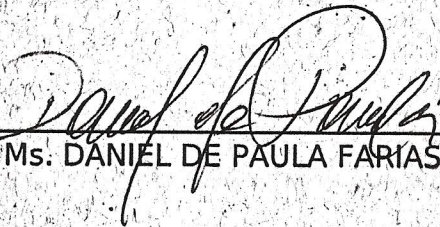
$M = M_0 \operatorname{sech}^2(x)$: CASOS $v(x) = V_0 \operatorname{tgh}(x)$ E $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}^2(x)$. A Banca de Defesa foi composta pelos professores: Dr. MARCONY SILVA CUNHA [Orientador(a)], Dr. KLEITON DO CARMO MENDES e Ms. DANIEL DE PAULA FARIAS RODRIGUES. Após a exposição, os professores da Banca fizeram suas observações e consideraram APROVADA a monografia apresentada. Eu, Dr. MARCONY SILVA CUNHA, presidi a Banca de Defesa de Monografia e assino a ata, juntamente com os demais membros.



Dr. MARCONY SILVA CUNHA [Orientador(a)]



Dr. KLEITON DO CARMO MENDES



Ms. DANIEL DE PAULA FARIAS RODRIGUES

*“De tudo o que se tem ouvido, a
suma é: Teme a Deus e guarda seus
mandamentos; porque este é o dever
de todo homem.”*

Eclesiastes 12:13

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus que plantou em mim um sonho que hoje se torna real.

A minha mãe Claudinete, a minha tia Justina e a minha namorada Ingrid pelo apoio para que eu chegasse até esta etapa de minha vida.

Ao Professor Marcony Silva Cunha pela paciência e empenho na orientação, que tornou possível a conclusão desta monografia.

A todos os professores do curso, que foram tão importantes na academia. Em especial, Marcony Silva Cunha, Kleiton do Carmo Mendes, Silas Lenz César e Francisco Cesar Aires.

Aos colegas do curso Física da UECE. Em particular, Kaio Bruno, Sullyandro Aguiar e Kílvia Maria.

RESUMO

A Mecânica Quântica é considerada como uma das teorias fundamentais para descrever a evolução dinâmica e compreender o comportamento ondulatório das partículas, principalmente no aspecto relativo à estrutura interna da matéria. A solução de problemas Quânticos em que a massa apresenta dependência espacial tem despertado interesse recentemente em várias áreas da Física, tanto pelo aspecto matemático quanto pelo aspecto fenomenológico. A importância dessas soluções esteve inicialmente relacionada à aplicações tais como, no estudo das propriedades eletrônicas de heteroestruturas semicondutoras. Atualmente, questões relacionadas à hermiticidade do operador hermitiano, a Física atômica e molecular, à supersimetria e a problemas relativísticos. Nesta monografia estuda-se a equação de Schrödinger e mostra que as soluções são as funções confluentes de Heun para dois problemas quânticos particulares no qual a partícula apresenta massa dependente da posição sujeita, no primeiro caso, ao potencial tangente hiperbólico e no segundo, ao potencial tangente hiperbólico ao quadrado. Para isso, escreve-se a equação de Schrödinger com massa variável através do ordenamento proposto por BenDaniel-Duke. Em seguida, através de mudanças na variável dependente e independente, o problema quântico onde a massa é dependente da posição é transformado em um problema equivalente de massa constante sujeita a um potencial efetivo. Por fim, investigam-se as soluções estacionárias da equação de Schrödinger para massa dependente da posição através de transformações inversas que levaram a equação de Schrödinger para massa constante. Representa-se graficamente as soluções de cada caso, tanto as funções no espaço das coordenadas, para o problema de massa dependente da posição, quanto no espaço transformado para o problema equivalente de massa constante.

Palavras-Chave: Massa dependente da posição. Equação confluyente de Heun. Potencial tangente hiperbólico e tangente hiperbólico ao quadrado.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Potencial do poço quadrado unidimensional infinito.	23
Figura 2	Níveis de energia do poço quadrado infinito.	27
Figura 3	As funções de onda do poço quadrado infinito no caso $a = 10$, para $n = 1, 2$ e 3	27
Figura 4	Gráfico da massa da partícula $m = m_0 \operatorname{sech}^2(ax)$. Para o gráfico adota-se $m_0 = 1$ e $a = 1$, onde a é uma constante arbitrária e tem a função de deixar o argumento da função secante adimensional.	30
Figura 5	Gráfico do potencial $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}(x)$, onde adota-se para $V_0 = 1$ e $a = 1$	32
Figura 6	Gráfico do potencial efetivo confinante, $U(z) = \frac{3}{4} \operatorname{tg}^2(z) + \frac{1}{2} + \kappa \operatorname{sen}(z)$, para valores particulares de κ : $\kappa = 3$ (linha contínua), $\kappa = 1$ (linha tracejada), $\kappa = -1$ (linha ponto tracejada) e $\kappa = -3$ (linha pontilhada). (PIMENTA; CUNHA, 2012)	33
Figura 7	Gráfico da solução dado pela Eq.(4.19), na variável z , para a equação de Schrödinger com massa constante, com $\kappa = 1$, onde os autovalores de energia são: $\varepsilon = 1,95$ (linha contínua), $\varepsilon = 6,01$ (linha tracejada), $\varepsilon = 12,01$ (linha ponto-tracejada) para a função $\varphi(z)$. (PIMENTA; CUNHA, 2012)	35
Figura 8	Gráfico da solução dado pela Eq.(4.20), na variável x , para a massa dependente da posição, com $\kappa = 1$, onde os autovalores de energia são: $\varepsilon = 1,95$ (linha contínua), $\varepsilon = 6,01$ (linha tracejada), $\varepsilon = 12,01$ (linha ponto-tracejada) para a função $\psi(x)$. (PIMENTA; CUNHA, 2012)	36
Figura 9	Gráfico do potencial simétrico $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}^2(ax)$, com $V_0 = 1$ e $a = 1$. (PIMENTA et al., 2012)	37

- Figura 10 Gráfico do potencial efetivo simétrico, equação (4.24) para valores particulares de κ : $\kappa = -50$ (linha contínua), $\kappa = -10$ (linha tracejada), $\kappa = 10$ (linha ponto tracejada) e $\kappa = 50$ (linha pontilhada). (PIMENTA et all., 2012) 38
- Figura 11 Gráfico da solução da equação (4.30) normalizada, com o potencial $\vartheta(z) = (\frac{3}{4}\text{tg}^2(z) + \frac{1}{2} - 50\text{sen}^2(z))$, onde os autovalores de energia são: $\varepsilon = -23,91$ (linha contínua), $\varepsilon = -4,48$ (linha tracejada), $\varepsilon = 8,82$ (linha pontotracejada) para a função $\varphi^{(1)}(z)$ 40
- Figura 12 Gráfico da solução da equação (4.39) normalizada, com os autovalores de energia: $\varepsilon = -23,91$ (linha contínua), $\varepsilon = -4,48$ (linha tracejada), $\varepsilon = 8,82$ (linha pontotracejada) para a função $\psi^{(1)}(x)$. (PIMENTA et all., 2010) 40
- Figura 13 Gráfico da solução dado pela equação anti-simétrica (4.38) normalizada, onde o potencial $\vartheta(z) = (\frac{3}{4}\text{tg}^2(z) + \frac{1}{2} - 50\text{sen}^2(z))$, onde os autovalores de energia são: $\varepsilon = -23,91$ (linha contínua), $\varepsilon = -4,48$ (linha tracejada), $\varepsilon = 8,82$ (linha ponto-tracejada) para a função $\varphi^{(2)}(z)$. (PIMENTA et all., 2010) 41
- Figura 14 Gráfico da solução dado pela equação (4.40) anti-simétrica, na variável x , onde os autovalores de energia: $\varepsilon = -23,91$ (linha contínua), $\varepsilon = -4,48$ (linha tracejada), $\varepsilon = 8,82$ (linha ponto-tracejada) para a função $\psi^{(2)}(x)$. (PIMENTA et all., 2010) 41

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	A MECÂNICA QUÂNTICA ONDULATÓRIA	13
2.1	As hipóteses de Louis de Broglie	13
2.2	Separação do mundo microscópico do mundo macroscópico	14
3	MECÂNICA QUÂNTICA DE SCHRÖDINGER	16
3.1	Introdução.....	16
3.2	Equação de Schrödinger	16
3.3	Equação de Schrödinger independente do tempo	16
3.4	Os estados estacionários	18
3.5	Os estados não-estacionários	18
3.6	A ortogonalidade dos autos estados	18
3.7	A equação da continuidade	19
3.8	Postulados da Mecânica Quântica.....	21
3.9	Operadores hermitianos	22
3.10	Poço quadrado unidimensional infinito.....	23
4	A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER E O PROBLEMA DE MASSA VARIÁVEL	28
4.1	Aspectos gerais.....	28
4.2	Massa dependente da posição	29
4.3	Solução da equação de Schrödinger para o problema de massa dependente da posição.....	30
4.3.1	Potencial $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}(ax)$	32
4.3.2	Potencial $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}^2(ax)$	35
5	CONCLUSÃO	42

Referências	43
Apêndice A - Equação confluyente de Heun	47

1 INTRODUÇÃO

A Mecânica Quântica é considerada uma das teorias fundamentais para descrever a evolução dinâmica e compreender o comportamento ondulatório da matéria, principalmente no aspecto relativo à estrutura da matéria. Até o início do século XX, a Mecânica Newtoniana, o eletromagnetismo e a termodinâmica, isto é, a Mecânica Clássica ocupavam esse lugar de destaque (PESSOA Jr, 2000; da SILVA, 2008). A Mecânica Clássica se baseia nas três leis de Newton em quanto que a Mecânica Quântica tem como base cinco postulados. Nessa nova teoria está a equação de Schrödinger que não é deduzida de outras equações mais fundamentais e desempenha um papel análogo à segunda lei de Newton.

Nos últimos anos, um grande número de trabalhos em sistemas quânticos, onde a massa da partícula apresenta dependência espacial, tem despertado o interesse de vários pesquisadores. A importância desta abordagem está relacionada às aplicações e ao estudo das propriedades eletrônicas de heteroestruturas de semicondutores (WEISBUCH; VINTER, 1993; BASTARD, 1988), além de descrever problemas experimentais relacionados a impurezas em cristais (SLATER, 1949; LUTTINGER; KOHN, 1955), e vários outros no âmbito da Matéria Condensada. Mais recentemente, encontra-se aplicações desses conceitos relacionados a física atômica e molecular (SEVER, 2008), bem como em Mecânica Quântica supersimétrica (PLASTINO, 1999).

O estudo desse problema revela em seu cerne uma ambiguidade devido ao ordenamento da massa com o operador momento e conseqüentemente na forma do operador hamiltoniano, para casos não-relativísticos. Existem na literatura vários ordenamentos para representar a massa com dependência espacial e o operador momento, observa-se em todas elas a hermiticidade do operador energia cinética (MAZHARIMOUSAVI; MUSTAFA, 2010). Na equação de Dirac por outro lado não há essa ambiguidade, uma vez que a massa e o operador momento linear estão desacoplados. Portanto, utiliza-se o ordenamento de BenDaniel-Duke(1966)¹ por estar de acordo com a equação de Dirac no limite de baixas energias (CAVALCANTE et al., 1997; RENAN et al., 2000) e também por manter a hermiticidade do operador hamiltoniano.

Incentivado por vários trabalhos na literatura que apresentam discussões sobre problemas quânticos em que a massa da partícula apresenta dependência espacial, o objetivo desta monografia é resolver a equação de Schrödinger, para dois problemas quânticos particulares no qual uma partícula apresenta massa dependente da posição e sujeita, no

¹BENDANIEL; DUKE (1966).

primeiro caso, ao potencial proporcional à tangente hiperbólica e, no segundo, ao potencial proporcional à tangente hiperbólica ao quadrado, e também mostrar nos dois casos que as soluções são as funções confluentes de Heun.

Para resolver a equação de Schrödinger com massa variável, primeiro se escreve o hamiltoniano com operador energia cinética proposto por BenDaniel-Duke. Uma vez representado o hamiltoniano, sugeriu-se mudanças na variável dependente e independente com a finalidade de obter uma equação análoga a de Schrödinger para massa constante. Submeteu-se a essa equação novas transformações de coordenadas com o objetivo de levar a equação análoga com massa constante a uma equação de Heun, e assim obter as soluções do problema de massa variável em termos das funções confluentes de Heun.

Por fim, investiga-se as soluções estacionárias da equação de Schrödinger para massa dependente da posição através de transformações de coordenadas que levam a uma equação de Schrödinger equivalente para massa constante e representam graficamente as soluções de cada caso, ou seja, as funções no espaço das coordenadas para o problema de massa dependente da posição, e no espaço transformado onde a partícula apresenta massa constante.

A monografia está organizada da seguinte forma: No capítulo 2, propõe-se uma breve discussão sobre o desenvolvimento da Mecânica Quântica ondulatória. No capítulo 3, apresenta-se uma sucinta discussão sobre os elementos fundamentais da Mecânica Quântica de Schrödinger e seus postulados. No capítulo 4, expõe conceitos de sistemas onde a massa apresenta distribuição espacial; comenta-se o fato do operador momento linear não comutar com a massa dependente da posição; estabeleceu-se uma forma de relacionar a equação de Schrödinger com massa variável em uma análoga com massa constante; apresenta-se os problemas que serão resolvidos; mostra-se as soluções das equações como funções confluentes de Heun. No capítulo 5, conclui-se o trabalho.

2 A MECÂNICA QUÂNTICA ONDULATÓRIA

Este capítulo propõe-se a discutir alguns aspectos essenciais da teoria Quântica de Schrödinger. Portanto não tem o propósito de levar ao leitor todas as informações quanto à construção da teoria Quântica. Porém, o mesmo é convidado a se aprofundar nas citações propostas ao longo do texto.

2.1 As hipóteses de Louis de Broglie

Com o fracasso da mecânica clássica em responder a uma série de questões relativas ao comportamento de partículas na escala atômica e subatômica, nasce a Mecânica Quântica. Neste capítulo será feita uma breve explanação sobre as hipóteses que se originam nos trabalhos do francês Louis de Broglie, e que a partir deles Schrödinger, em 1926, desenvolveu a formulação ondulatória da Mecânica Quântica.

A partir dos trabalhos de Planck sobre a radiação do corpo negro, nos quais é introduzida a constante fundamental $h (= 6,63 \cdot 10^{-34} \text{J.s})$, Einstein mostrou ser possível associar a uma onda eletromagnética plana monocromática, de frequência ν , um conjunto de partículas, os fótons; e para cada fóton, um quantum de energia,

$$E = h\nu \quad (2.1)$$

proporcional a frequência da radiação. Assim, considerou que a energia luminosa é distribuída descontinuamente no espaço, sendo constituída de corpúsculos de energia sem massa que transportam momento p (NUSSENZVEIG, 2002; CARUSO; OGURI, 2006). Assim, para um fóton com energia $E_0 = h\nu_0$, com $\nu_0 = c/\lambda_0$, para o momento tem-se:

$$p_0 = \frac{h}{\lambda_0} \quad (2.2)$$

Para L. de Broglie, se um conjunto de fótons corresponde a uma onda eletromagnética, então se pode associar a um feixe de partículas livres de massa m e mesma velocidade um comportamento ondulatório. A equação (2.2) escrita na forma

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (2.3)$$

é conhecida como equação de L. de Broglie e prevê o comprimento de onda para uma partícula com momento linear p (EISBERG; RESNICK, 1979).

Entretanto, a hipótese de L. de Broglie trouxe problemas no fato de que a velocidade de fase da onda plana associada a partículas seria maior do que a velocidade da luz no vácuo, violando assim a relatividade de Einstein e portanto não, poderia estar envolvida com o transporte de energia associada a partículas materiais. Para resolver esse paradoxo, de Broglie admitiu que, ao invés de associar uma única onda plana monocromática ao movimento de uma partícula, representa-se o processo ondulatório pela superposição de várias ondas planas monocromáticas, isto é, um pacote de ondas que interferem destrutivamente em todo espaço, exceto na região em torno das partículas (CARUSO; OGURI, 2006).

A luz das idéias de L. de Broglie, Davisson e Germer, em 1927, demonstram a natureza ondulatória do elétron¹. A partir desse trabalho não restavam mais dúvidas, a dualidade onda-partícula é confirmada (DAVISSON; GERMER, 1927; CARUSO; OGURI, 2006).

Essas evidências serviram de inspiração para os trabalhos de Erwin Schrödinger que em 1925 propôs um novo formalismo para a teoria Quântica, tendo como base experimentos que associavam ao movimento das partículas de sistemas microscópicos as leis do movimento ondulatório e não as leis de Newton. De fato, a generalização da teoria ondulatória de Schrödinger inclui a teoria de Newton como caso particular no limite macroscópico.

2.2 Separação do mundo microscópico do mundo macroscópico

A introdução da teoria ondulatória da matéria teve consequências epistemológicas que os criadores da teoria Quântica não avaliaram a longo prazo. Nos anos da terceira década do século XX, os fundadores da Mecânica Quântica tiveram que enfrentar um das mais duras batalhas, o determinismo.

Discussões a respeito de como interpretar² a Mecânica Quântica surgiram tão logo esta teoria foi formulada, a partir de junho de 1925. Até 1964, quando John Bell efetivamente eliminou o agnosticismo, havia três proposições: *realista*, *ortodoxa* e *agnóstica* que tinham seus seguidores (GRIFFITHS, 1995). Esta monografia assume o ponto de

¹Fato que consagrou a mais intrigante das simetrias da natureza: a dualidade onda-partícula. De Broglie foi condecorado com o prêmio Nobel em 1929.

²Para melhor entender as questões filosóficas referentes a interpretação da mecânica quântica, sugere-se ao leitor: (PESSOA Jr. 2008).

vista da interpretação ortodoxa³, por ser a mais difundida. Este trabalho não entra no mérito filosófico quanto à interpretação da teoria Quântica.

A associação de partículas massivas na escala atômica a pacotes de ondas implica a posição e o momento não são mutuamente determinados. Segundo Heisenberg, em qualquer medida física, o produto da medida da incerteza associada ao valor da coordenada x_i , Δx_i , e a medida da incerteza associada ao seu correspondente momento linear, Δp_i , não pode ser inferior em grandeza, à constante de Planck normalizada (LESTIENNE; de BARROS, 2008), isto é;

$$\Delta x_i \Delta p_i \geq \frac{h}{4\pi} \equiv \frac{\hbar}{2} \approx 10^{-26} \text{kg.m/s} \quad (2.4)$$

em outras palavras, os valores da medida da incerteza da posição e do momento são sempre maiores do que o valor da constante \hbar , portanto se a posição da partícula for determinada precisamente, o momento aumenta drasticamente de modo que o produto da incerteza apresentado em (2.4) se mantenha constante. Devido à ordem de grandeza da constante \hbar , esses efeitos são observados somente no mundo microscópico (CHESMAN; MACEDO; CARLOS ANDRE; 2004).

Outra relação de incerteza na medida pode ser verificada pela associação das medidas da energia e do tempo, ou seja:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.5)$$

As relações apresentadas acima são conhecidas como relações de incerteza de Heisenberg.

³Esta visão também é conhecida como *interpretação de Copenhagen*.

3 MECÂNICA QUÂNTICA DE SCHRÖDINGER

3.1 Introdução

A Mecânica Clássica está fundamentada nas três leis de Newton e a Mecânica Quântica está apoiada em cinco postulados¹. Na nova teoria, está a equação de Schrödinger que não pode ser deduzida de outras equações mais fundamentais. As várias tentativas encontradas para a sua dedução são apenas argumentos plausíveis de se ilustrar essa equação.

3.2 Equação de Schrödinger

Schrödinger obteve sua equação por meio de conjecturas heurísticas bem sucedidas chegando a uma equação diferencial para a onda ψ de L. de Broglie, que associa essa função ao movimento do elétron de baixa energia:

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

onde H é o operador hamiltoniano que, para o caso de sistemas conservativos representa a energia do sistema. Essa equação utiliza no seu formalismo a equação de Hamilton, de 1835 e descrevem com sucesso partículas massivas.

3.3 Equação de Schrödinger independente do tempo

Para campos conservativos, a equação de Schrödinger dependente do tempo, em particular o caso unidimensional que pode ser escrito como:

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

Pode ser resolvida pelo uso do método de separação de variáveis, no qual se escreve a solução como o produto de funções que dependem de variáveis distintas,

¹Os Posulados serão apresentados na seção (4.5).

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t) \quad (3.3)$$

Então, para soluções separáveis tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) = \psi(x)\frac{d}{dt}\varphi(t) \quad \text{e} \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x, t) = \varphi(t)\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \quad (3.4)$$

Substituído-se a eq. (3.4) na eq. (3.2) tem-se:

$$i\hbar\psi(x)\frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi(t)\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x)\varphi(t) \quad (3.5)$$

Dividindo-se por $\psi(x)\varphi(t)$ e reescrevendo a eq.(3.5),

$$i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x) \quad (3.6)$$

O primeiro termo depende somente de t e o segundo somente de x . Desse modo, existe apenas uma forma para que isso aconteça, se ambos os termos forem constantes.

Denota-se por E a constante de separação, tal que;

$$i\hbar\frac{d\varphi(t)}{dt} = E \quad (3.7)$$

e

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) \quad (3.8)$$

A separação de variáveis transformou uma equação diferencial parcial em duas equações diferenciais ordinárias. Resolvendo a equação (3.7) e suprimindo a constante, pois o que interessa é a solução para $\Psi(x, t)$,

$$\varphi(t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (3.9)$$

A equação (3.8) é conhecida como equação de Schrödinger independente do tempo e constitui um problema de autovalores tal que, dependendo das condições impostas à função de onda $\Psi(x, t)$, o autovalor E (ou seja, E denomina-se a energia da partícula), pode assumir valores discretos ou contínuos. As soluções, $\Psi(x, t)_n$, associadas ao seu correspondente autovalor E_n (para estados não degenerados), são chamadas de autofunções de energia (GRIFFITHS, 1995; CARUSO; OGURI, 2006).

3.4 Os estados estacionários

A solução da equação de Schrödinger, $\Psi(x, t)$, que representa o estado da partícula em um instante t , pode ser escrito como:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (3.10)$$

A equação (3.10) corresponde aos estados estacionários, pois a densidade de probabilidade de presença², ρ , associada as soluções que evoluem de um auto estado de energia (CARUSO; OGURI, 2006), não depende do tempo.

$$|\Psi(x, t)|^2 = \left(\psi(x)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\right)^* \left(\psi(x)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\right) = |\psi(x)|^2 \quad (3.11)$$

3.5 Os estados não-estacionários

Uma vez que a equação de Schrödinger é linear e homogênea a solução geral para uma partícula, em campo conservativo, é uma combinação linear das soluções separáveis;

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi(x)_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}. \quad (3.12)$$

Note-se que neste caso, a densidade de probabilidade de presença,

$$|\Psi(x, t)|^2 = \sum_{m,n}^{\infty} \left(c_m \psi(x)_m e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}\right)^* \left(c_n \psi(x)_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}\right) \quad (3.13)$$

depende do tempo e o estado $\Psi(x, t)$ é dito não-estacionário.

3.6 A ortogonalidade dos autos estados

As soluções estacionárias da equação de Schrödinger apresentam uma propriedade muito importante, a ortogonalidade.

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = 0 \quad (m \neq n) \quad (3.14)$$

Como as autofunções $\psi_m(x)$ e $\psi_n(x)$ satisfazem a equação de Schrödinger independente do tempo, Eq.(3.8),

²O termo densidade de probabilidade de presença será definido na seção (3.7).

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi_m(x) + V(x)\psi_m(x) = \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_m(x) \quad (3.15)$$

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(x) + V(x)\psi_n(x) = \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_n(x) \quad (3.16)$$

Pode-se multiplicar a Eq.(3.15) por $\psi_n(x)^*$ e a eq.(3.16) por $\psi_m(x)^*$, e subtrai-las obtendo-se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi_n^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_m - \psi_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_n^* \right) = (E_m - E_n) \psi_n^* \psi_m. \quad (3.17)$$

Integrando a equação acima, tem-se:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x) \psi_n^*(x) dx = -\frac{\hbar^2}{2m(E_m - E_n)} \int_{+\infty}^{-\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi_n^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_m(x) - \psi_m(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_n^*(x) \right) dx \quad (3.18)$$

A integral do lado esquerdo se anula, porque as autofunções se anulam a medida que os limites de integração são arbitrariamente grandes. Assim se, $\psi_m(x)$ e $\psi_n(x)$ são autofunções que pertencem a autovalores distintos de energia, $E_m - E_n \neq 0$, então obedecem a relação de ortogonalidade mostrada em (3.14) (CARUSO; OGURI, 2006). Portanto pode-se escrever,

$$\int_{+\infty}^{-\infty} \psi_m(x) \psi_n^*(x) dx = \delta_{mn} \quad (3.19)$$

em que δ_{mn} é conhecido como delta de Kronecker e é definido da seguinte forma:

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases}$$

Diz-se então, que as autofunções distintas pertencentes ao espaço de soluções (espaço de Hilbert) são ortogonais.

3.7 A equação da continuidade

A função de onda ψ associada a uma partícula é complexa e representa um vetor de estado. Essa função é a descrição mais completa possível de um sistema Quântico e o quadrado complexo, $|\psi(x)|^2$, é interpretado como densidade de probabilidade associado a posição da partícula. Na Mecânica Newtoniana para descrever um sistema clássico de partículas completamente e até mesmo prever todas as grandezas associadas ao movimento, faz-se necessário apenas conhecer a posição e a velocidade de todas as partículas.

Em Mecânica Quântica, a descrição de um sistema quântico termina quando se conhece as funções de onda e suas probabilidades.

Segundo a interpretação probabilística de Max Born, a probabilidade dP de uma partícula associada a uma função de onda Ψ ser encontrada, em um dado instante t , no interior de um elemento de volume $d^3\mathbf{r}$ em torno do ponto (x, y, z) é igual a $|\Psi|^2 d^3\mathbf{r}$ (CARUSO; OGURI, 2006), isto é,

$$|\Psi|^2 d^3\mathbf{r} = dP \quad (3.20)$$

Para verificar o que ocorre quando o movimento de uma partícula Quântica é levado em conta, deriva-se $|\Psi|^2$ em relação ao tempo

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left[\Psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi^* - \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi \right] \quad (3.22)$$

De

$$\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* = \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (3.23)$$

tem-se

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (3.24)$$

Considera-se $\mathbf{J} \equiv -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$ e $\rho \equiv |\Psi|^2$ de modo que:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (3.25)$$

Observa-se que ρ e \mathbf{J} , da equação acima, obedece a uma equação análoga à equação da continuidade conhecida na Mecânica dos Fluidos, onde explicita a conservação da massa do fluido e também no eletromagnetismo, que faz o mesmo para a conservação da carga. Em Mecânica Quântica essa expressão é conhecida como conservação de probabilidade (GRIFFITHS, 1995).

Born interpretou³ ρ como sendo uma densidade de probabilidade de presença e \mathbf{J} de corrente de probabilidade. Neste sentido apesar de não haver uma denominação equivalente na teoria de probabilidades, a função de onda Ψ é conhecida também como amplitude de probabilidade de presença (GRIFFITHS, 1995).

É conveniente adotar uma linguagem mais usual do que a que se usou até agora.

³BORN, M.; JORDAN, 1925.

Considera-se um conjunto de réplicas da partícula idênticas, ou seja, com a mesma função de onda, que não interagem entre si. Assim, denota-se por N essas réplicas e normalizando a função de onda, tem-se:

$$\int |\Psi|^2 d^3\mathbf{r} = N \quad (3.26)$$

Estendendo a integral a todo o espaço e tomando um volume V delimitado por uma superfície S fechada, observa-se:

$$N_V = \int_V |\Psi|^2 d^3\mathbf{r} \quad (3.27)$$

Tem-se desse modo, com a relação (3.27), não mais a probabilidade de uma só partícula estar no volume V , mas um número N_V de partículas das N existentes e que estão dentro de V . Denota-se \mathbf{n} com sendo o campo das normais externas à superfície S . Assim, tem-se:

$$\frac{dN_V}{dt} = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} d^3\mathbf{r} = - \int_V \nabla \cdot \mathbf{J} d^3\mathbf{r} = - \int_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS \quad (3.28)$$

Supondo que N_V diminua com o tempo, obtém-se:

$$\frac{dN_V}{dt} < 0 \quad (3.29)$$

tal que:

$$\int_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS > 0 \quad (3.30)$$

A equação (3.30) mede o número de partículas que saem do volume V por unidade de tempo e que atravessam a superfície S com o sentido indicado pelo vetor normal.

3.8 Postulados da Mecânica Quântica

A questão de como interpretar a função de onda ψ , foi objeto de discussão nos primeiros anos da Mecânica Quântica. Entretanto, a função de onda ψ não apresenta em si mesma uma grandeza mensurável, todas as grandezas mensuráveis como a energia e o momento da partícula podem ser calculadas a partir do conhecimento dessa função. A ligação de ψ com o mundo real é estabelecida pelos dois últimos dos cinco postulados⁴ que serão apresentados na sequência (SAKURAI, 1994; GRIFFITHS, 1995).

Postulado 1. (Estado de um sistema) Em cada instante t , o estado de um sistema físico é representado por uma função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, no espaço vetorial dos

⁴Este texto foi traduzido do livro: Modern Quantum Mechanics - J.J. Sakurai (Revised Edition), 1994.

estados, espaço de Hilbert que contém toda a informação que podemos conhecer sobre o sistema (exceto o spin).

Postulado 2. (Quantidades físicas) Qualquer quantidade física mensurável é descrita matematicamente por um operador \hat{O} , que atua sobre os estados. Este operador é um observável.

$$\langle \hat{O} \rangle = \int \psi^* \hat{O} \psi dx \quad (3.31)$$

Postulado 3. (Medidas de quantidades físicas) O único resultado possível da medida de quantidade física \hat{O} é um dos autovalores λ_n do correspondente operador O .

Postulado 4. (Decomposição espectral) A probabilidade de se obter o autovalor λ_n (não degenerado) numa medida de um observável \hat{O} sobre o sistema no estado normalizado $\Psi(\mathbf{r}, t)$ é:

$$\int \psi^* \psi dx = 1 \quad (3.32)$$

Postulado 5. (Evolução temporal) A evolução temporal de um sistema Quântico é determinada pelo operador Hamiltoniano ou energia total, $H(x, t)$, através da equação de Schrödinger

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

3.9 Operadores hermitianos

Os operadores hermitianos são definidos tal que se $f(\mathbf{r})$ e $g(\mathbf{r})$ pertencem ao espaço de Hilbert então o operador \hat{O} é hermitiano se, e somente se

$$\langle O \rangle = \int f^* \hat{O} g d\mathbf{r} = \int (\hat{O} f)^* g d\mathbf{r} = \left[\int f^* (\hat{O} g) d\mathbf{r} \right]^* = \langle O \rangle^* \quad (3.33)$$

onde \hat{O} é o operador que está relacionado ao observável O .

Nota-se que a relação (3.33) determina o valor médio de O (representa-se o operador por uma função operador $O(\mathbf{r}, \mathbf{p})$), que deve ser real. De maneira geral, considerando U e W dois conjuntos de funções e definindo o mapeamento $\hat{O}: U \rightarrow W$ com $\hat{O}(u) = w (u \in U : w \in W)$. Simbolicamente se pode escrever esta relação como um produto do operador \hat{O} com a função u :

$$\hat{O}(u) = \hat{O}u = w \quad (3.34)$$

Um operador com a propriedade

$$\hat{O}(\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2) = \alpha_1 \hat{O}u_1 + \alpha_2 \hat{O}u_2 \quad (3.35)$$

onde u_1, u_2 são funções arbitrária e α_1, α_2 são constantes arbitrárias, é chamado operador linear.

É importante ressaltar que a classe de operadores hermitianos são lineares e podem ser aplicados tanto no primeiro membro de um produto interno quanto no segundo apresentando sempre o mesmo resultado. Em Mecânica Quântica estes operadores surgem naturalmente, pois seus valores esperados são reais.

3.10 Poço quadrado unidimensional infinito

Esta seção é uma aplicação dos conceitos apresentados até aqui. Assim, considere-se uma partícula movendo-se livremente ao longo do eixo x , exceto pelo fato de que nas posições $x = -a/2$ e $x = a/2$, existem paredes impenetráveis, isto é, a probabilidade da partícula ser encontrada fora do intervalo é estritamente nula. Deste modo, a função de onda $\psi(x)$, fora do poço é igual a zero. Matematicamente, define-se então o potencial [Fig. (1)].

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } -a/2 \leq x \leq a/2 \\ \infty, & \text{nos outros casos} \end{cases} \quad (3.36)$$

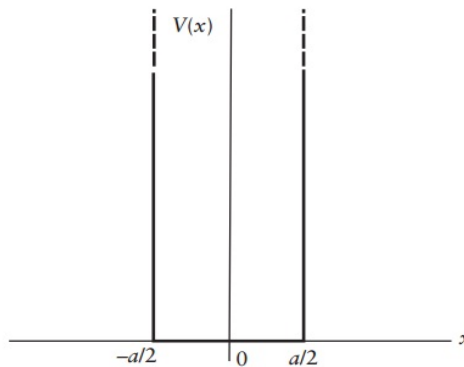


Figura 1: Potencial do poço quadrado unidimensional infinito.

As soluções do poço quadrado infinito unidimensional são confinadas no interior do mesmo, pois seria necessária uma força infinita para romper a barreira de potencial. Assim, considera-se apenas a equação de Schrödinger independente do tempo na região $-a/2 \leq x \leq a/2$, ou seja,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (3.37)$$

ou

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad (3.38)$$

onde $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ com $E > 0$.

A solução geral da equação acima é:

$$\psi(x) = A\text{sen}(kx) + B\text{cos}(kx), \quad (3.39)$$

em que A e B são constantes arbitrárias.

No caso das regiões externas, como já foi dito o potencial é infinito e a probabilidade de se encontrar a partícula fora do poço é necessariamente nula. Assim, as condições de contorno sobre a função de onda impõe que:

$$\psi(-a/2) = \psi(a/2) = 0 \quad (3.40)$$

Destas condições, tem-se:

$$\psi(-a/2) = -A\text{sen}(ka/2) + B\text{cos}(ka/2) = 0 \quad (3.41)$$

e

$$\psi(a/2) = A\text{sen}(ka/2) + B\text{cos}(ka/2) = 0 \quad (3.42)$$

Somando e subtraindo as relações (3.41) e (3.42), obtém-se:

$$A\text{sen}(ka/2) = 0 \quad (3.43)$$

$$B\text{cos}(ka/2) = 0 \quad (3.44)$$

Tomando-se as equações (3.43) e (3.44), as soluções possíveis são:

$$A \neq 0, \quad \text{sen}(ka/2) = 0 \quad (3.45)$$

ou

$$B \neq 0, \quad \text{cos}(ka/2) = 0 \quad (3.46)$$

Como as constantes A e B não podem ser simultaneamente nulas, pois isto levaria novamente a $\psi(x) = 0$ para todo valor de x . No primeiro caso as soluções serão da forma $\psi(x) = A\text{sen}(kx)$, onde $A \neq 0$, $B = 0$ e $\text{sen}(ka/2) = 0$, que resulta:

$$ka/2 = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots \quad (3.47)$$

No entanto, se descarta $k = 0$, pois $\psi(x) = 0$ (todo valor de x). Nota-se também que as soluções negativas não geram nada de novo, pois, como se sabe $-\sin(\theta) = \sin(-\theta)$ e pode associar o sinal a constante A . Então, as soluções distintas são:

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad \text{onde } n = 2, 4, 6, \dots \quad (3.48)$$

Com esse resultado se pode encontrar os valores possíveis de energia E :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (3.49)$$

ou ainda,

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \text{com } n = 2, 4, 6, \dots \quad (3.50)$$

Para encontrar a valor da constante A , normaliza-se $\psi(x)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-a/2}^{a/2} A^2 \sin^2(kx) dx \quad (3.51)$$

Assim, resolvendo a integral

$$\int_0^a A^2 \sin^2(kx) dx = |A|^2 \frac{a}{2} \Rightarrow |A| = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (3.52)$$

Portanto dentro do poço as soluções são:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (3.53)$$

Para o segundo caso as soluções serão da forma $\psi(x) = B \cos(kx)$, onde $B \neq 0$, $A = 0$ e $\cos(ka/2) = 0$, que resulta:

$$ka/2 = \pm \frac{\pi}{2}, \pm \frac{3\pi}{2}, \pm \frac{5\pi}{2}, \dots \quad (3.54)$$

Novamente se percebe que as soluções negativas não geram nada de novo pois, como se sabe, $\cos(\theta) = \cos(-\theta)$. Então, as soluções distintas são:

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad \text{onde } n = 1, 3, 5, \dots \quad (3.55)$$

Com isso, os valores possíveis para os autovalores de energia E são:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (3.56)$$

ou ainda,

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \text{com } n = 1, 3, 5, \dots \quad (3.57)$$

Para o cálculo da constante B , normaliza-se $\psi(x)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-a/2}^{a/2} A^2 \cos^2(kx) dx \quad (3.58)$$

Assim, resolvendo a integral

$$\int_0^a A^2 \cos^2(kx) dx = |A|^2 \frac{a}{2} \Rightarrow |A| = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (3.59)$$

Portanto dentro do poço as soluções são:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (3.60)$$

Agora, tomando os dois tipos de soluções e observando que os valores de $k_n = \frac{n\pi}{a}$ são quantizados, pois o número inteiro n é um exemplo de número Quântico que desempenha o papel de rotular as diferentes soluções do problema, observa-se que os comprimentos de onda de L. de Broglie correspondentes apresentam os valores:

$$\lambda_n = \frac{2\pi}{k_n} = \frac{2a}{n} \quad \text{onde } n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.61)$$

Portanto, as funções de onda que satisfazem o problema são aquelas para as quais se tem um número inteiro ou semi-inteiro de comprimentos de onda de L. de Broglie dentro do intervalo $[-a/2, a/2]$. Note também que em Mecânica Clássica uma partícula pode se mover dentro do poço com qualquer valor de energia, porém, em um sistema Quântico, a energia está quantizada tendo apenas os seguintes valores possíveis:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \text{onde } n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.62)$$

Os níveis de energia do poço infinito ilustrados na figura [Fig. (2)] mostram que o espectro de energias permitidas consiste em um número infinito de níveis discretos. Observa-se também que as energias dos estados aumentam com o quadrado do valor dado a n . Note que, como existe apenas uma função de onda para cada autovalor de energia, esses níveis de energia são chamados não-degenerados. Por outro lado, para uma dada função de onda, havendo mais de um autovalor de energia, esses níveis se chamam degenerados.

As soluções correspondentes as funções de onda associadas aos três níveis de ener-

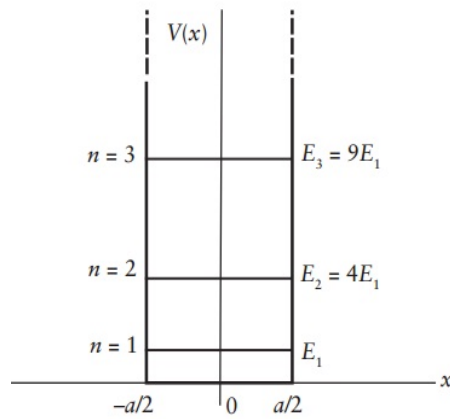


Figura 2: Níveis de energia do poço quadrado infinito.

gia mais baixa do poço quadrado infinito estão ilustradas na figura [Fig. (3)]. Tomando-se as equações (3.53) e (3.60), nota-se que a n -ésima função de onda, $\psi_n(x)$, tem $(n - 1)$ nodos na região interna do poço. Desta forma, percebe-se que o número de nodos está relacionado a energia associada a partícula, isto é, quanto maior for número de nodos da função de onda, maior será a energia do sistema. Também verifica-se que as funções de onda ψ_n e ψ_m são ortogonais e estão associadas a energias diferentes, E_n e E_m , ou seja,

$$\int_{-a/2}^{a/2} \psi_n(x)^* \psi_m dx = 0 \quad \text{se } n \neq m \quad (3.63)$$

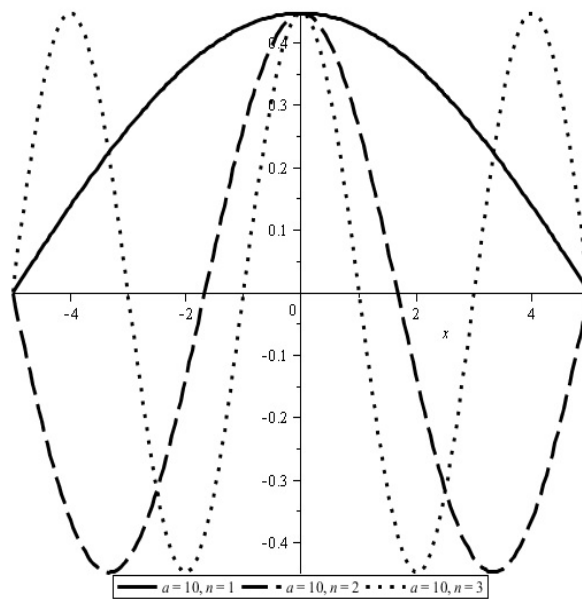


Figura 3: As funções de onda do poço quadrado infinito no caso $a = 10$, para $n = 1, 2$ e 3 .

4 A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER E O PROBLEMA DE MASSA VARIÁVEL

Apresenta-se aspectos gerais que são importantes para a compreensão quanto à forma do operador hamiltoniano quando a massa assume dependência espacial. Em seguida, sugere-se uma forma de se transformar a equação de Schrödinger com massa variável em uma equação análoga à equação de Schrödinger com massa constante.

4.1 Aspectos gerais

Atualmente a Mecânica Quântica desempenha papel fundamental na descrição e compreensão dos fenômenos naturais que ocorrem em escala atômica e subatômica (LANDAU; LIFSHITZ, 1991). A Equação de Schrödinger, proposta pelo físico austríaco Erwin Schrödinger em 1925, descreve a evolução temporal de um estado quântico de um dado sistema físico. Essa equação tem importância na teoria quântica similar ao da segunda Lei de Newton na Mecânica Clássica.

A descrição física da natureza tem como linguagem básica a matemática. Na formulação matemática da Mecânica Quântica, todo sistema é associado a um espaço de Hilbert complexo, tal que cada estado instantâneo do sistema é descrito por um vetor unitário nesse espaço. Este vetor de estados guarda as probabilidades para os resultados de todas as possíveis medições aplicadas ao sistema. Em geral, o estado de um sistema varia no tempo e o vetor de estados é uma função do tempo. A equação de Schrödinger é responsável por uma descrição quantitativa da taxa de variação deste vetor (GRIFFITHS, 1995).

Em Mecânica Quântica, o Hamiltoniano \hat{H} é um observável¹ e, para uma partícula sujeita a um campo conservativo, correspondente à energia total do sistema. O espectro do Hamiltoniano é o conjunto de possíveis resultados quando se mede a energia total de um sistema e pode ser decomposto via suas medidas espectrais, em pontos “puros”, absolutamente contínuos, e partes singulares. O espectro de pontos puros pode ser associado à autovetores, os quais são estados ligados do sistema. Os espectros absolutamente contínuos correspondem aos estados livres. O espectro singular compreende resultados fisicamente impossíveis (RICHMYER, 1978).

¹Os observáveis são representados por operadores lineares conhecidos como operadores hermitiano.

4.2 Massa dependente da posição

Na formulação do operador hamiltoniano a massa é geralmente constante, porém soluções de problemas quânticos em que a massa apresenta distribuição espacial têm despertado interesse recentemente em várias áreas da Física, tanto pelo aspecto matemático quanto pelo aspecto fenomenológico. A importância dessas soluções esteve inicialmente relacionada à aplicações tais como no estudo das propriedades eletrônicas de heteroestruturas semicondutoras (BASTARD, 1988, WEISBUCH; VINTER, 1993). Atualmente, questões relacionadas à hermiticidade do operador hermitiano, a Física atômica e molecular (SEVER; TEZCAN, 2008), a supersimetria (PLASTINO; RIGO, 1999) e a problemas relativísticos (CAVALCANTE, 1997; RENAN et al., 2000) são temas mais atuais relacionados à massa dependente da posição. Os problemas quânticos onde a massa apresenta variação espacial trazem a tona o fato do operador momento não comutar com a massa dependente da posição, que resulta na ambiguidade de ordenamento da representação do operador energia cinética e por conseguinte, no operador Hamiltoniano para casos não-relativísticos. A equação de Dirac por outro lado, não apresenta essa ambiguidade, uma vez que a massa e o operador momento linear estão desacoplados (RENAN et al., 2000). Para representar o operador energia cinética ambíguo, considera-se o ordenamento geral proposto por von Roos (1983):

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{4} [m(\vec{r})^\alpha \nabla m(\vec{r})^\beta \nabla m(\vec{r})^\gamma + m(\vec{r})^\gamma \nabla m(\vec{r})^\beta \nabla m(\vec{r})^\alpha]$$

onde α , β e γ são constantes e recebem o nome de parâmetro de ordenamento ambíguo de von Roos. Estes parâmetros satisfazem a relação $\alpha + \beta + \gamma = -1$.

A escolha destes parâmetros está relacionada a questão quanto à hermiticidade do operador energia cinética. Considerações físicas e matemáticas também são adotadas para a escolha de um dado conjunto de parâmetros de ordenamento, e deve levar em conta não somente as condições de continuidade com os limites de heterojunção abrupta, mas também a massa dependente da posição e a forma do potencial. Assim, não existe um consenso geral para a escolha destes parâmetros de ambiguidade (MAZHARIMOUSAVI; MUSTAFA, 2010).

Encontra-se atualmente na literatura cinco formas de ordenamento do operador energia cinética e todos são casos particulares do ordenamento geral proposto por von Roos. Os autores destes ordenamentos são Gora e William ($\beta = \gamma = 0$, $\alpha = -1$), BenDaniel e Duke ($\alpha = \gamma = 0$, $\beta = -1$), Zhu e Kroemer ($\alpha = \gamma = -1/2$, $\beta = 0$) Li e Kuhn ($\beta = \gamma = -1/2$, $\alpha = 0$) e Mustafa e Mazharimousavi ($\alpha = \gamma = -1/4$, $\beta = -1/2$).

Utilizou-se nesta monografia o ordenamento de BenDaniel-Duke (1966) por estar de acordo com a equação de Dirac no limite de baixas energias (CAVALCANTE, 1997; RENAN et al., 2000).

4.3 Solução da equação de Schrödinger para o problema de massa dependente da posição

Para resolver o problema quântico de massa variável proposto nesta monografia escreve-se a equação de Schrödinger para o caso particular unidimensional, independente do tempo e descrito pelo ordenamento do operador energia cinética proposto por BenDaniel-Duke:

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2} \left[-\frac{1}{m^2(x)} \frac{dm(x)}{dx} \frac{d}{dx} + \frac{1}{m(x)} \frac{d^2}{dx^2} \right] \psi + V(x)\psi. \quad (4.1)$$

Este trabalho representa a massa por uma função contínua proporcional à secante hiperbólica ao quadrado, tal que:

$$m = m_0 \operatorname{sech}^2(ax). \quad (4.2)$$

Abaixo [Fig. (4)] representa-se graficamente a massa da partícula.

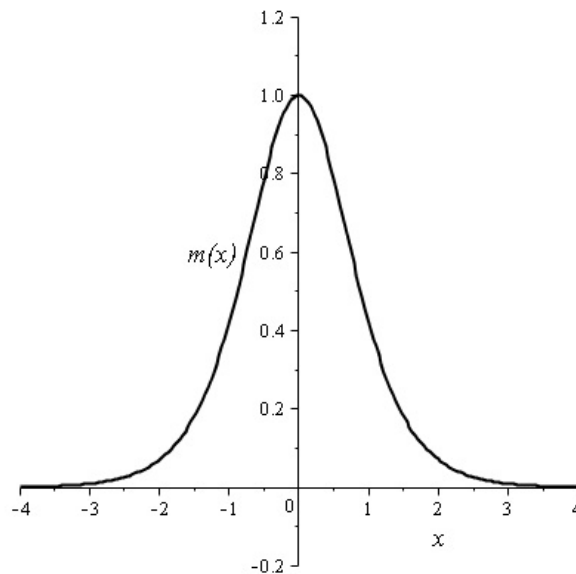


Figura 4: Gráfico da massa da partícula $m = m_0 \operatorname{sech}^2(ax)$. Para o gráfico adota-se $m_0 = 1$ e $a = 1$, onde a é uma constante arbitrária e tem a função de deixar o argumento da função secante adimensional.

Quanto ao potencial $V(x)$, investiga-se as soluções analíticas em termos da função confluyente de Heun² para dois casos. No primeiro [Subseção 4.3.1], analisa-se as soluções para o potencial proporcional a tangente hiperbólica. No segundo [Subseção 4.3.2], o potencial proporcional a tangente hiperbólica ao quadrado.

Substituindo a equação (4.2) na equação diferencial (4.1), obtém-se:

²veja Apêndice A.

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0 \operatorname{sech}^2(ax)} 2a \operatorname{tgh}(ax) \frac{d}{dx} - \frac{\hbar^2}{2m_0 \operatorname{sech}^2(ax)} \frac{d^2}{dx^2} \right] \psi + V(x)\psi = E\psi \quad (4.3)$$

Nesta representação, observa-se um elemento diferencial de primeira ordem que é consequência do ordenamento proposto. Esse fator descaracteriza a forma usual da equação de Schrödinger. Por comodidade, sugere-se neste trabalho a mudança no argumento da função (4.3), tal que $ax \rightarrow x$. Deste modo, tem-se:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + 2 \operatorname{tgh}(x) \frac{d}{dx} \right] \psi + \frac{2m_0}{\hbar^2 a^2 \cosh^2(x)} [E - V(x)] \psi = 0 \quad (4.4)$$

Em problemas como este, onde a massa apresenta dependência espacial, é sempre possível estabelecer uma relação de transformação de coordenadas por meio da qual se possa obter uma equação análoga a equação de Schrödinger com massa constante e potencial efetivo.

Portanto, para o problema proposto nesta monografia, sugere-se a transformação na variável dependente $\psi(x) = \cosh^\nu(x)\varphi(x)$. Substituindo-se em (4.4), tem-se:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + 2(\nu + 1) \operatorname{tgh}(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} \\ & + \left\{ (\nu - 1)\nu \operatorname{tgh}^2(x) + 2 \operatorname{tgh}^2(x)\nu + \frac{2m_0}{\hbar^2 a^2 \cosh^2(x)} [E - V(x)] \right\} \varphi(x) = 0 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Considerando-se agora a transformação na variável independente de modo que $x \rightarrow z$ tal que $\frac{dz}{dx} = \operatorname{sech}(x)$, o que resulta em:

$$\cos(z) = \operatorname{sech}(x) \quad (4.6)$$

Essa mudança na variável independente representa portanto o mapeamento tal que $(-\infty, \infty) \rightarrow (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$. Substituindo-se a relação (4.6) na equação (4.5), obtém-se:

$$\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + (2\nu + 1) \operatorname{tg}(z) \frac{d\varphi(z)}{dz} + \left\{ (\nu + 2)\nu \operatorname{tg}^2(z) + \nu + \frac{2m_0}{\hbar^2 a^2} [E - V(z)] \right\} \varphi(z) = 0 \quad (4.7)$$

Com o objetivo de obter uma equação similar a equação de Schrödinger com massa constante, elimina-se o termo de primeira ordem, isto é, define-se $(2\nu + 1) = 0$, ou seja, $\nu = -\frac{1}{2}$ na equação (4.7), o que resulta em:

$$-\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + U(z)\varphi(z) = \varepsilon\varphi(z). \quad (4.8)$$

Interpreta-se a equação (4.8) como uma equação de Schrödinger para massa constante, onde $\varepsilon = \frac{2m_0}{\hbar^2 a^2} E$, e sujeita ao potencial efetivo $U(z)$, dado por:

$$U(z) = \frac{3}{4} \operatorname{tg}^2(z) + \frac{1}{2} + \kappa V(z) \quad (4.9)$$

com $\kappa = \frac{2m_0}{\hbar^2 a^2} V_0$.

O potencial $V(z)$ é aquele ao qual a partícula de massa variável está sujeita. Nas próximas subseções, investiga-se as soluções para essa equação levando em consideração dois potenciais, um antissimétrico proporcional a tangente hiperbólica e outro simétrico proporcional a tangente hiperbólica ao quadrado.

4.3.1 Potencial $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}(ax)$

Considera-se então o potencial antissimétrico e não confinante $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}(ax)$, cuja representação gráfica [Fig.(5)] pode ser vista mais adiante. Como sugerido anteriormente, pode-se reescrever o potencial alterando a forma do argumento de $ax \rightarrow x$ e assim obter $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}(x)$. Tomando-se a mudança na variável independente (4.6), pode-se mostrar facilmente que:

$$\operatorname{sen}(z) = \operatorname{tgh}(x). \quad (4.10)$$

Com isso, obtém-se:

$$V(z) = V_0 \operatorname{sen}(z) \quad (4.11)$$

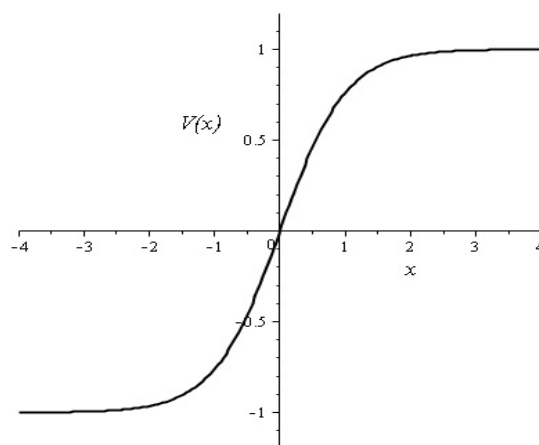


Figura 5: Gráfico do potencial $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}(x)$, onde adota-se para $V_0 = 1$ e $a = 1$.

Portanto, substituindo-se a equação (4.11) na relação do potencial efetivo (4.9), tem-se:

$$U(z) = \frac{3}{4}\text{tg}^2(z) + \frac{1}{2} + \kappa \text{sen}(z) \quad (4.12)$$

Evocando a equação (4.8) e a substituindo na relação (4.12), tem-se:

$$-\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + \left(\frac{3}{4}\text{tg}^2(z) + \frac{1}{2} + \kappa \text{sen}(z) \right) \varphi(z) = \varepsilon\varphi(z) \quad (4.13)$$

Apresenta-se [Fig.(6)] o gráfico do potencial efetivo Eq.(4.9) para alguns valores de κ .

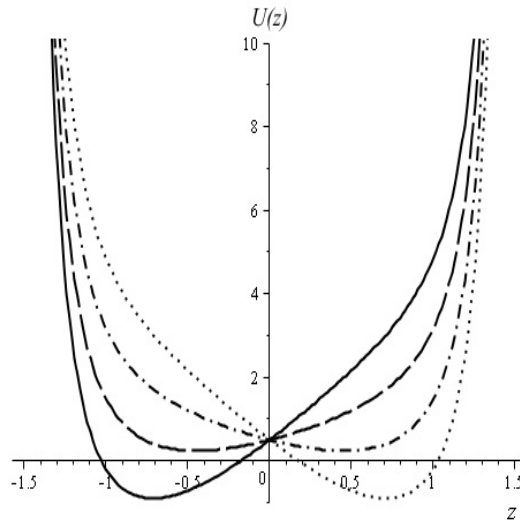


Figura 6: Gráfico do potencial efetivo confinante, $U(z) = \frac{3}{4}\text{tg}^2(z) + \frac{1}{2} + \kappa \text{sen}(z)$, para valores particulares de κ : $\kappa = 3$ (linha contínua), $\kappa = 1$ (linha tracejada), $\kappa = -1$ (linha ponto tracejada) e $\kappa = -3$ (linha pontilhada). (PIMENTA; CUNHA, 2012)

Neste ponto, serão adotadas novas transformações nas variáveis dependente e independente na equação (4.13) a fim de obter a equação diferencial confluyente de Heun. Portanto, considera-se a mudança na coordenada dependente:

$$\varphi(z) = \sec^{\frac{1}{2}}(z)h(z) \quad (4.14)$$

Substituindo a relação (4.14) em (4.13), obtém-se:

$$\frac{d^2h(z)}{dz^2} + \frac{dh(z)}{dz} \text{tg}(z) + h(z) [\varepsilon - \kappa \text{sen}(z)] = 0 \quad (4.15)$$

Agora, admitindo $y = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\text{sen}(z)$, onde $0 < y < 1$ desde que $z \rightarrow \pm\frac{\pi}{2}$, conclui-se que:

$$\frac{d^2h(y)}{dy^2} + \left[\frac{\varepsilon + 2y\kappa - \kappa}{y(y-1)} \right] h(z) = 0. \quad (4.16)$$

A equação acima é um caso particular da equação confluyente de Heun descrita em Ronveaux (1995) e Hounkonnou e Ronveaux (2009). Então relacionando as equações (A.8) e (4.16), tem-se:

$$\sigma = 0, \quad \rho = \gamma = -1, \quad \delta = 2\kappa, \quad \eta = \frac{1}{2} - \kappa - \varepsilon$$

As soluções locais para a equação (4.16) para $y \rightarrow 0$ são dadas por:

$$h^{(1)}(y) = y^{-\rho} Hc(\sigma, -\rho, \gamma, \delta, \eta; y) \quad (4.17)$$

$$h^{(2)}(y) = Hc^\dagger(\sigma, \rho, \gamma, \delta, \eta; y) \quad (4.18)$$

onde Hc^\dagger é a segunda solução independente, também chamada de função de Heun *concomitante confluyente*, pois $\rho = -1$ (FIZIEV, 2010). Uma vez que a segunda solução diverge logaritmicamente quando $y \rightarrow 0$ as soluções fisicamente aceitáveis são descritas apenas por $h^{(1)}(y)$. Assim, em termos da coordenada z , pode-se escrever:

$$\varphi(z) = \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\text{sen}(z)}{\sqrt{\cos(z)}} Hc\left(0, 1, -1, 2\kappa, \frac{1}{2} - \kappa - \varepsilon; \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\text{sen}(z)\right) \quad (4.19)$$

Em termos da variável x , tem-se:

$$\psi(x) = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\text{tgh}(x)\right) Hc\left(0, 1, -1, 2\kappa, \frac{1}{2} - \kappa - \varepsilon; \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\text{tgh}(x)\right) \quad (4.20)$$

Aplicando as condições de contorno para $\varphi(z = \pm\frac{\pi}{2}) = 0$, obtém-se numericamente os autovalores de energia que satisfazem a $Hc(z = \pm\frac{\pi}{2}) = 0$ e, assim, caracteriza a forma final das soluções para as funções $\varphi(z)$ [Fig.(7)] e, por conseguinte, determina a forma final das soluções para $\psi(x)$ [Fig.(8)].

Portanto, partindo do problema de uma partícula quântica com massa dependente da posição proporcional à secante hiperbólica ao quadrado, equação (4.2), e sujeita ao potencial proporcional à tangente hiperbólica e das mudanças de coordenadas sugeridas ao longo deste trabalho, isto é, transformações nas coordenadas dependente e independente, de modo que ao final observou-se um caso particular da equação de Schrödinger para uma partícula com massa constante e sujeita a um potencial efetivo dado pela relação (4.12). Através de novas transformações, encontrou-se as soluções analíticas da função $\varphi(z)$, para onde a partícula apresenta massa constante. A partir destes resultados, retomase a variável original para função $\psi(x)$ e obtém-se as soluções estacionárias da equação de Schrödinger para massa dependente da posição em termos das soluções da equação confluyente Heun, para alguns valores de energia ε .

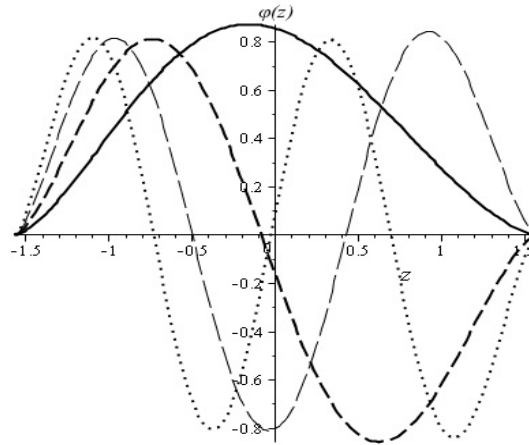


Figura 7: Gráfico da solução dado pela Eq.(4.19), na variável z , para a equação de Schrödinger com massa constante, com $\kappa = 1$, onde os autovalores de energia são: $\varepsilon = 1,95$ (linha contínua), $\varepsilon = 6,01$ (linha tracejada), $\varepsilon = 12,01$ (linha ponto-tracejada) para a função $\varphi(z)$. (PIMENTA; CUNHA, 2012)

4.3.2 Potencial $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}^2(ax)$

Esta subseção assume a sequência das idéias e se propõem a resolver o problema de massa variável, agora com o potencial confinante proporcional a tangente hiperbólica ao quadrado [Fig.(9)].

Considerando o fato do argumento poder ser escrito como $ax \rightarrow x$, tem-se:

$$V = V_0 \operatorname{tgh}^2(x) \quad (4.21)$$

Tomando a transformação na variável independente dada em (4.11), escreve-se o potencial, equação (4.21), como:

$$V = V_0 \operatorname{sen}^2(z) \quad (4.22)$$

Então, substituindo (4.22) na equação (4.8), observa-se que:

$$-\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + \left(\frac{3}{4} \operatorname{tg}^2(z) + \frac{1}{2} + \kappa \operatorname{sen}^2(z) \right) \varphi(z) = \varepsilon \varphi(z) \quad (4.23)$$

A equação (4.23) é análoga a equação de Schrödinger estacionária para uma partícula com massa constante e sujeita ao potencial

$$\vartheta(z) = \left(\frac{3}{4} \operatorname{tg}^2(z) + \frac{1}{2} + \kappa \operatorname{sen}^2(z) \right) \quad (4.24)$$

caracterizado pelo gráfico [Fig.(10)], para alguns valores de κ .

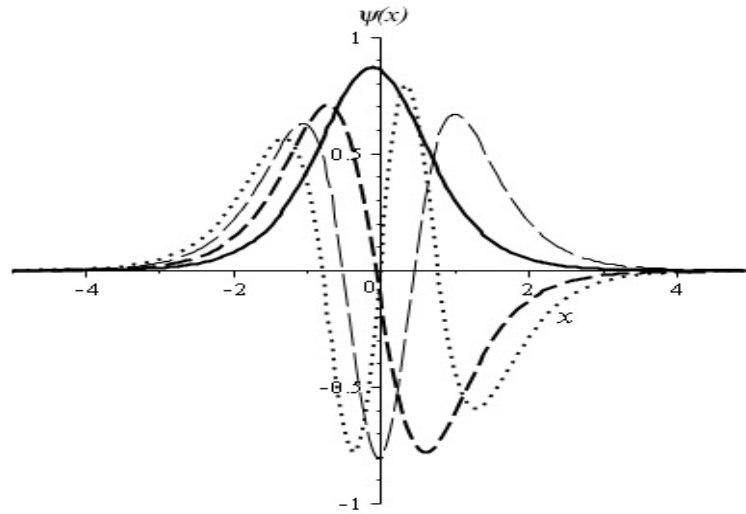


Figura 8: Gráfico da solução dado pela Eq.(4.20), na variável x , para a massa dependente da posição, com $\kappa = 1$, onde os autovalores de energia são: $\varepsilon = 1,95$ (linha contínua), $\varepsilon = 6,01$ (linha tracejada), $\varepsilon = 12,01$ (linha ponto-tracejada) para a função $\psi(x)$. (PIMENTA; CUNHA, 2012)

Admitindo-se na equação (4.23) a mudança na variável $\varphi(z) = \cos^\mu(z)h(z)$, tal que:

$$\frac{d^2h(z)}{dz^2} - 2\mu \operatorname{tg}(z) \frac{d}{dz}h(z) + [\mu(\mu - 1) \operatorname{tg}^2(z) - \mu - \vartheta(z) + \varepsilon] h(z) = 0 \quad (4.25)$$

Para $\mu(\mu - 1) = \frac{3}{4} \Rightarrow \mu = \frac{3}{2}$ ou $\mu = -\frac{1}{2}$. Escolhe-se $\mu = \frac{3}{2}$. Então:

$$\frac{d^2h(z)}{dz^2} + 3 \operatorname{tg}(z) \frac{d}{dz}h(z) + [2 - \kappa \operatorname{sen}^2(z) + \varepsilon] h(z) = 0 \quad (4.26)$$

onde $\kappa = \frac{2m_0}{\hbar^2 a^2} V_0$. Admitindo-se a transformação na coordenada independente $y = \operatorname{sen}^2(z)$, onde $0 < y < 1$, desde que $z \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}$, tem-se:

$$\frac{d^2h(y)}{dy^2} + \left(\frac{2}{y-1} + \frac{1}{2y} \right) \frac{dh(y)}{dy} + \left(\frac{1}{2} + \frac{\kappa}{4}y - \frac{\varepsilon}{4} \right) \frac{h(y)}{y(y-1)} = 0 \quad (4.27)$$

Note que a equação (4.27) apresenta os pontos singulares $(0, 1, \infty)$ e portanto este formato pertence a uma classe de equações diferenciais lineares de segunda ordem, definidas na esfera de Riemann (HILLE, 1997) e se classifica como equação confluyente de Heun. Então, comparando as equações (A.1) e a equação (4.27), conclui-se:

$$\sigma = 0, \quad \rho = -\frac{1}{2}, \quad \gamma = 1, \quad \delta = \frac{\kappa}{4}, \quad \eta = \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}$$

Assim, as soluções da equação (4.27) em torno de $y \rightarrow 0$, são dadas por:

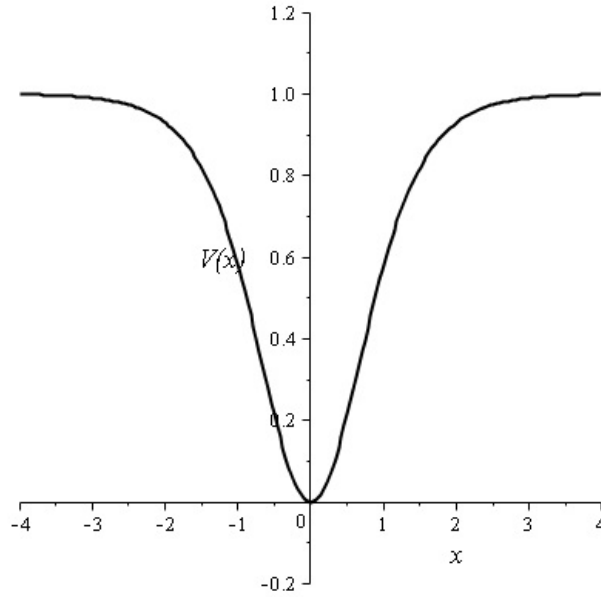


Figura 9: Gráfico do potencial simétrico $V(x) = V_0 \text{tgh}^2(ax)$, com $V_0 = 1$ e $a = 1$. (PIMENTA et al., 2012)

$$h^{(1)}(y) = Hc \left(0, -\frac{1}{2}, 1, \frac{\kappa}{4}, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}; y \right) \quad (4.28)$$

$$h^{(2)}(y) = y^{\frac{1}{2}} Hc \left(0, \frac{1}{2}, 1, \frac{\kappa}{4}, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}; y \right) \quad (4.29)$$

Com esses resultados, em termos da coordenada z , tem-se:

$$\varphi^{(1)}(z) = \cos^{\frac{3}{2}}(z) Hc \left(0, -\frac{1}{2}, 1, \frac{\kappa}{4}, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}; \text{sen}^2(z) \right) \quad (4.30)$$

$$\varphi^{(2)}(z) = \cos^{\frac{3}{2}}(z) |\text{sen}(z)| Hc \left(0, \frac{1}{2}, 1, \frac{\tilde{V}}{4}, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}; \text{sen}^2(z) \right) \quad (4.31)$$

Verifica-se que a equação (4.31) não é fisicamente aceitável, pois não é diferenciável na origem. Portanto, adota-se uma nova transformação na variável independente na relação com massa constante, equação (4.23), com o objetivo de obter a segunda solução da equação diferencial. Então:

$$\varphi(z) = \text{sen}(z)\phi(z) \quad (4.32)$$

Tomando a equação (4.32) e substituindo em (4.23), obtém-se:

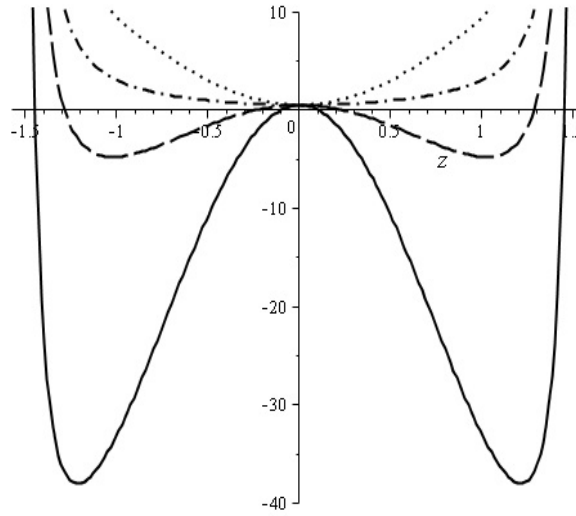


Figura 10: Gráfico do potencial efetivo simétrico, equação (4.24) para valores particulares de κ : $\kappa = -50$ (linha contínua), $\kappa = -10$ (linha tracejada), $\kappa = 10$ (linha ponto tracejada) e $\kappa = 50$ (linha pontilhada). (PIMENTA et all., 2012)

$$-\frac{d^2\phi(z)}{dz^2} - 2\cotg(z)\frac{d\phi(z)}{dz} + \left(\frac{3}{2} + \frac{3}{4}\text{tg}^2(z) + \kappa\text{sen}^2(z)\right)\phi(z) = \varepsilon\phi(z) \quad (4.33)$$

Como no caso anterior, pode-se usar o mapeamento $\phi(z) = \cos^{\frac{3}{2}}(z)H(z)$, o que resulta na seguinte equação

$$\frac{d^2H}{dz^2} + (2\cotg(z) - 3\text{tg}(z))\frac{dH}{dz} + (\varepsilon - 6 - \kappa \text{sen}^2(z))H(z) = 0 \quad (4.34)$$

Para obter a equação Heun a partir da relação (4.34), usa-se o recurso matemático anteriormente sugerido, a transformação na coordenada independente, $y = \text{sen}^2(z)$. Assim, tem-se:

$$\frac{d^2H(y)}{dy^2} + \left(\frac{3/2}{y} + \frac{2}{y-1}\right)\frac{dH(y)}{dy} + \frac{1}{y(y-1)}\left(\frac{3}{2} - \frac{\varepsilon}{4} + \frac{\kappa}{4}y\right)H(y) = 0 \quad (4.35)$$

cujas soluções são:

$$H^{(1)} = Hc\left(0, \frac{1}{2}, 1, \frac{\kappa}{4}, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}; y\right) \quad (4.36)$$

$$H^{(2)} = y^{-\frac{1}{2}}Hc\left(0, -\frac{1}{2}, 1, \frac{\kappa}{4}, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}; y\right) \quad (4.37)$$

Novamente, a segunda solução $H^{(2)}$ não é fisicamente aceitável pelo fato de não

ser diferenciável na origem. Portanto, a segunda solução linearmente independente da equação diferencial (4.23) em termos de z , fica:

$$\varphi^{(2)}(z) = \text{sen}(z)\cos^{\frac{3}{2}}(z)Hc\left(0, \frac{1}{2}, 1, \frac{\kappa}{4}, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}; \text{sen}^2(z)\right) \quad (4.38)$$

Note que a transformação dada pela equação (4.32) mostra que a relação (4.31) é, na realidade, salvo as condições de diferenciabilidade, a segunda solução da equação diferencial (4.23). Com isso, as soluções são:

$$\begin{aligned} \varphi^{(1)}(z) &= \cos^{\frac{3}{2}}(z)Hc\left(0, -\frac{1}{2}, 1, \frac{\kappa}{4}, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}; \text{sen}^2(z)\right) \\ \varphi^{(2)}(z) &= \text{sen}(z)\cos^{\frac{3}{2}}(z)Hc\left(0, \frac{1}{2}, 1, \frac{\kappa}{4}, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}; \text{sen}^2(z)\right) \end{aligned}$$

Isto posto, fica fácil perceber que, em termos de x , as soluções são:

$$\psi^{(1)}(x) = \text{sech}^2(x)Hc\left(0, -\frac{1}{2}, 1, \frac{\kappa}{4}, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}; \text{tgh}^2(x)\right) \quad (4.39)$$

$$\psi^{(2)}(x) = \text{tgh}(x)\text{sech}^2(x)Hc\left(0, \frac{1}{2}, 1, \frac{\kappa}{4}, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{4}; \text{tgh}^2(x)\right) \quad (4.40)$$

Aplicando as condições de contorno para φ , tal que $\lim_{z \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} \varphi(z) = 0$, determina-se numericamente os autovalores para os parâmetros de energia que satisfazem do mesmo modo, às condições de contorno para a função Heun, $Hc(z)$, tal que $\lim_{z \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} Hc(z) = 0$ e, assim, determina-se a forma final das soluções para $\varphi(z)$ e conseqüentemente, para a função $\psi(x)$. Representa-se graficamente as soluções das funções simétricas [Fig.(11)] e [Fig.(12)] e antissimétricas [Fig.(13)] e [Fig.(14)], respectivamente, na variável z para a equação de Schrödinger com massa constante e na variável x para o problema de massa variável.

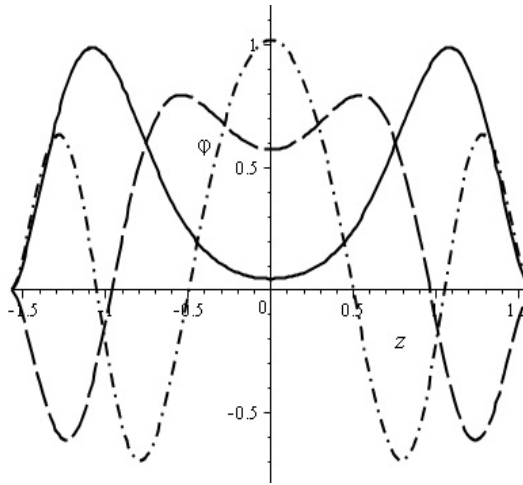


Figura 11: Gráfico da solução da equação (4.30) normalizada, com o potencial $\vartheta(z) = (\frac{3}{4}\text{tg}^2(z) + \frac{1}{2} - 50\text{sen}^2(z))$, onde os autovalores de energia são: $\varepsilon = -23,91$ (linha contínua), $\varepsilon = -4,48$ (linha tracejada), $\varepsilon = 8,82$ (linha pontotracejada) para a função $\varphi^{(1)}(z)$.

(PIMENTA et all., 2012)

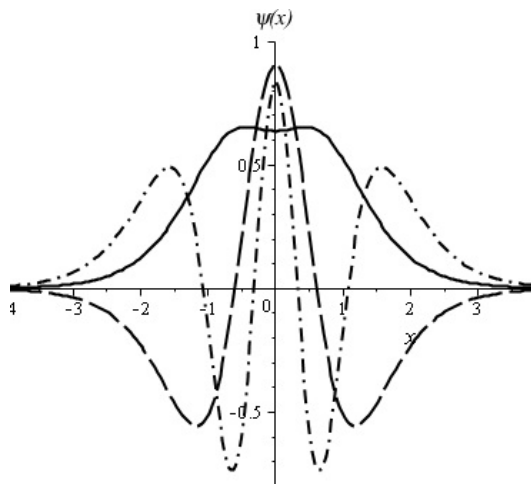


Figura 12: Gráfico da solução da equação (4.39) normalizada, com os autovalores de energia: $\varepsilon = -23,91$ (linha contínua), $\varepsilon = -4,48$ (linha tracejada), $\varepsilon = 8,82$ (linha pontotracejada) para a função $\psi^{(1)}(x)$. (PIMENTA et all., 2010)

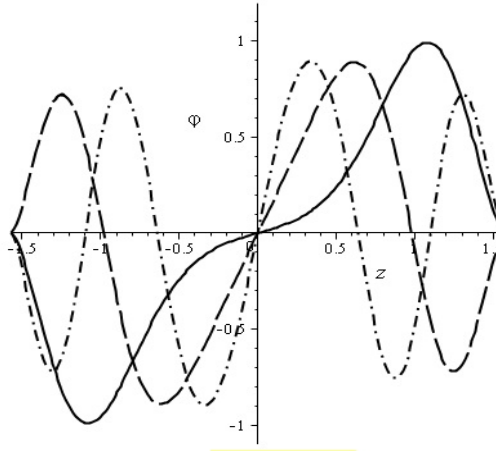


Figura 13: Gráfico da solução dado pela equação anti-simétrica (4.38) normalizada, onde o potencial $\vartheta(z) = (\frac{3}{4}\text{tg}^2(z) + \frac{1}{2} - 50\text{sen}^2(z))$, onde os autovalores de energia são: $\varepsilon = -23,91$ (linha contínua), $\varepsilon = -4,48$ (linha tracejada), $\varepsilon = 8,82$ (linha ponto-tracejada) para a função $\varphi^{(2)}(z)$. (PIMENTA et al., 2010)

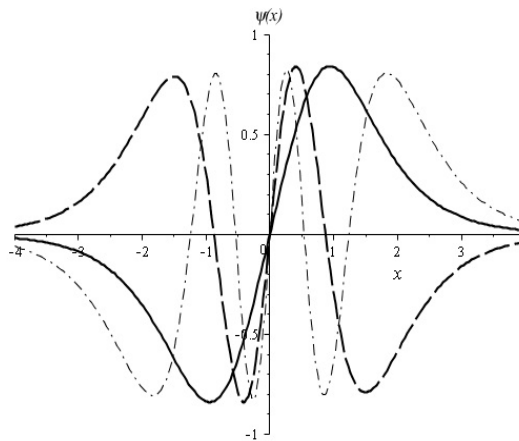


Figura 14: Gráfico da solução dada pela equação (4.40) anti-simétrica, na variável x , onde os autovalores de energia: $\varepsilon = -23,91$ (linha contínua), $\varepsilon = -4,48$ (linha tracejada), $\varepsilon = 8,82$ (linha ponto-tracejada) para a função $\psi^{(2)}(x)$. (PIMENTA et al., 2010)

5 CONCLUSÃO

Motivado por várias publicações que apresentam discussões sobre problemas quânticos com massa dependente da posição (SLATER, 1949; LUTTINGER; KOHN, 1955, SEVER; TEZCAN, 2008, PLASTINO; RIGO, 1999; MAZHARIMOUSAVI, 2007), o objetivo desta monografia foi o de resolver um problema quântico unidimensional de baixa energia, no qual a massa apresenta dependência espacial e que seja caracterizada por uma função contínua proporcional à secante hiperbólica ao quadrado. Resolve-se esse problema para dois potenciais particulares, um deles o potencial proporcional a tangente hiperbólica e o outro o potencial proporcional a tangente hiperbólica ao quadrado.

Utilizou-se para escrever o hamiltoniano devido à ambiguidade do operador energia cinética, o ordenamento proposto por BenDaniel-Duke, por está de acordo com a equação de Dirac no limite de baixas energias (CAVALCANTE et al., 1997; RENAN et al., 2000). A equação de Schrödinger com massa dependente da posição foi submetida a mudanças na variável dependente e independente com o propósito de obter uma equação análoga a equação Schrödinger com massa constante. A partir desta equação diferencial, o problema foi dividido em duas subseções. Na primeira, analisou-se as soluções da equação diferencial com o potencial $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}(x)$ (espaço das coordenadas) para o problema de massa variável o qual submetido a transformações de coordenadas, apresenta a forma $V(z) = V_0 \operatorname{sen}(z)$ (espaço transformado) para o problema onde massa se mostra constante. Na segunda subseção, foi a vez do potencial $V(x) = V_0 \operatorname{tgh}^2(x)$ para o caso da massa dependente da posição e após a mudança de coordenadas, tornou-se $V(z) = V_0 \operatorname{sen}^2(z)$, onde partícula apresenta massa constante.

Submeti-se as equações no espaço transformado a novas transformações de coordenadas com o objetivo de levar a equação análoga com massa constante a uma equação de Heun e assim, obter as soluções do problema. Por meio dessas soluções, investiga-se as soluções estacionárias da equação de Schrödinger para massa dependente da posição. Mostrou-se finalmente que as soluções analíticas e são apresentadas em termos das soluções da função confluyente de Heun.

REFERÊNCIAS

- A. F. R. de TOLEDO Piledo Piza, Mecânica Quântica: uma Nova Imagem do Mundo, *Ciência Hoje*, vol. 36, n. 213, p. 40-48, 2005.
- ALHAIDARI, A. D. Solutions of the nonrelativistic wave equation with position-dependent effective mass, *Physical review A*, v. 66, n. 042116, 2002.
- BASTARD, G. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures, *Les Editions de Physique, Les Ulis - France*, v. 66, n. 042116, p. 707, 1988.
- BENDANIEL, D. J.; DUKE, C. B. Space-Charge Effects on Electron Tunneling, *Physical Review A*, v. 152, p. 683-692, 1966.
- BORN, M.; JORDAN, P. – Zur Quantenmechanik, *in: Zeitschrift fuer Physik*, v. 34, Berlin, 1925.
- CARUSO F.; OGURI, V. Origens Clássicas e Fundamentos Quânticos. Rio de Janeiro: Elsevier, 2006.
- CAVALCANTE, F. S. A.; FILHO, R. N. C.; FILHO, H. R.; ALMEIDA, A. S.; FREIRE, V. N. Form of the quantum kinetic-energy operator with spatially varying effective mass, *Physics review B*, v. 55, n. 3, 1997.
- CHESMAN, C.; MACEDO, A.; ANDRE, C. Física Moderna Experimental e Aplicada, 2ªed, livraria da física, 2004.
- da SILVA, A. J. R. Mecânica quântica, ciência básica e geração de riqueza, *Revista USP*, São Paulo, n. 76, p. 88-95, 2008.
- DAVISSON, C.; GERMER, L. H. Diffraction of Electrons by a Crystal of Nickel, *Physical Review*, v. 30, n. 6, p. 705-740, 1927.
- DUTRA, A. S.; ALMEIDA, C. A. S. Exact solvability of potentials with spatially dependent effective masses, *Physics Letters A*, v. 275, p. 25-30, 2000.
- EISBERG, R.; RESNICK, R. Física quântica. Rio de Janeiro, Campus, 1979.
- EXTON, H. New solutions of the confluent Heun equation, *Le matematiche*, v. LIII, 1998.

FIZIEV, P. P. Classes of exact solutions to the teukolsky master equation. *Class. and Quantum Grav.*, v. 27, n. 135001, 2010

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

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

HORTAÇSU, M. Heun Functions and their uses in Physics, Istanbul: *Istanbul Technical university*. 2011.

HOUNKONNOU, M. N.; RONVEAUX, A. About derivatives of Heun's functions from polynomial transformations of hypergeometric equations, *Applied Mathematics and Computation*, n. 209, p. 421–424, 2009.

JACCOUD, L. EL-JAICK, D. B. Figueiredo Transformations of Heun's equation and its integral relations, *published in J. Physics A: Math. Theor.*, v. 44 , p. 075204, 2011.

LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. Course of Theoretical Physics, Vol.3: Quantum Mechanics, 3ª ed, *New York: Pergamon Press*, 1991.

LESTIENNE, R.; de BARROS, M. A. L., 2008, ACASO CRIADOR, O: O PODER CRIATIVO DO ACASO, *EdUSP*, 2008.

LUTTINGER J. M.; KOHN, W. Motions of electrons and holes in perturbed periodic cells, *Physical Review A*, v. 97, n. 4, p. 869-883, 1955.

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

MAZHARIMOUSAVI H. S.; MUSTAFA, O. Flatland position-dependent-mass: Polar coordinates, separability and exact solvability. *Physical Review A*, v. 088, p. 869-883, 2010.

MUSTAFA O., MAZHARIMOUSAVI S.H., Ordering ambiguity revisited via position dependent mass pseudo momentum operators, *International Journal of Theoretical Physics*, v. 373, p. 325–327, 2009.

MUSTAFA, O.; MAZHARIMOUSAVI S.H, A singular position-dependent mass particle in an infinite potential well, *Physical Letter A*, v. 373, p. 325–327, 2009.

NUSSENZVEIG, H. M. Curso de Física Básica. 4th. ed., vol. 3, São Paulo: *Edgard Blücher*, 2002.

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. 509514, 2000.

PESSOA Jr, O. As interpretações contemporâneas da mecânica quântica, *Ciência Hoje*, v. 42, n. 250, p. 33-38, 2008.

PESSOA Jr, O. Histórias contrafactuais: o surgimento da Física Quântica, *Estudos avançados*, v. 14, n. 39, p.175-204, 2000.

PIMENTA P. V. C. L.; CUNHA, M. S. A Função Confluyente de Heun como Solução Analítica da Equação de Schrödinger para um Problema de Massa Dependente da Posição. *XVIII ENCONTRO DE INICIACÃO À PESQUISA DA UNIFOR*, 2012.

PIMENTA, P. V. C. L.; TEIXEIRA, R. A. M.; COSMO, C. B.; CUNHA, M. S. Solução da Equação de Schrödinger para Massa Dependente da Posição Sujeita ao Potencial Tangente Hiperbólico ao Quadrado, *XVII Semana Universitária: Informação e Tecnologia para a Sustentabilidade*, 2012.

PLASTINO, A. R. ; RIGO, A.; CASAS, M.; GARCIAS, F.; PLASTINO, A. *Phys. Rev. A*, v. 60, n. 4318. (1999).

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, p. 384, 1995.

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

SEVER R.; TEZCAN, C. Exact solution of Schrodinger equation for modified kratzer's molecular potential with the position-dependent, *International Journal of Modern Physics E*, v. 17, 2008.

SLATER, J. C. Electrons in perturbed periodic lattices, *Physical Review*, v. 76, n. 3, p.1592-1601, 1949. University, 2011.v. 17, 2008.

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

WEISBUCH, C.; VINTER, B. Quantum semiconductor heterostructures, *New York: Academic Press*, 1993.

APÊNDICE A – EQUAÇÃO CONFLUENTE DE HEUN

O estudo da equação de Heun e suas formas confluentes tem despertado interesse crescente nos últimos anos devido a um grande número de aplicações em Mecânica Quântica, Relatividade e em Física Matemática. Além disso, esta equação aparece como uma generalização natural da equação hipergeométrica e seus casos especiais incluem a hipergeométrica de Gauss, hipergeométrica confluyente, Mathieu, Ince, Lamé, Bessel, Legendre e as equações de Laguerre (RONVEAUX, 2009).

A equação Geral de Heun, introduzida em 1889 por Karl MWL Heun, é uma classe de equação diferencial de segunda ordem fuchsiana definida na esfera de Riemann, isto é, possui apenas pontos singulares regulares (MAIER, 2005) e qualquer equação diferencial linear de segunda ordem que contenha quatro pontos singulares regulares pode ser transformada em uma equação de Heun por meio de mudança de variável. Essa equação pode ser escrita, na forma canônica, como segue (RONVEAUX, 2009):

$$\frac{d^2 H(z)}{dz^2} + \left(\frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z-1} + \frac{\varepsilon}{z-d} \right) \frac{dH(z)}{dz} + \frac{\sigma\rho z - q}{z(z-1)(z-d)} H(z) = 0 \quad (\text{A.1})$$

onde $\{\rho, \sigma, \gamma, \delta, \varepsilon, d, q\}$ com $(d \neq 0, -1)$ são parâmetros geralmente complexos e arbitrários, ligados pela restrição fuchsiana $\rho + \sigma + 1 = +\gamma + \delta + \varepsilon$. Esta equação possui quatro pontos singulares em $\{0, 1, d, \infty\}$ com os respectivos expoentes dessas singularidades sendo $\{0, 1, -\gamma\}$, $\{0, 1, \delta\}$, $\{0, 1, -\varepsilon\}$ e $\{\rho, \sigma\}$ (HOUNKONNOU; RONVEAUX, 2008).

Dos quatro pontos singulares que possui, três podem ser vistos facilmente na própria equação diferencial $(0, 1, d)$. O último no infinito pode ser obtido através de uma transformação f-homotópica considerando-se $z \rightarrow \frac{1}{\xi}$, e tomando-se o $\lim_{\xi \rightarrow 0}$.

A Equação Heun possui quatro formas confluentes¹ contendo pontos singulares irregulares em zero e/ou infinito. Estas formas são:

¹Esse trabalho apresenta apenas a forma confluyente para os demais casos veja RONVEAUX (2009).

1.Equação confluyente

$$\frac{d^2 H(z)}{dz^2} + \left(\xi + \frac{\gamma}{z} - \frac{\delta}{z-1} \right) \frac{dH(z)}{dz} + \frac{(\sigma \xi z - \tau)}{z(z-1)} H(z) = 0 \quad (\text{A.2})$$

2.Equação Duplamente Confluyente

$$\begin{aligned} \left(z \frac{d}{dz} \right)^2 H(z) + \rho \left(z + \frac{1}{z} \right) \left(z \frac{d}{dz} \right) H(z) \\ + \left[\left(\sigma + \frac{1}{2} \right) \rho z + \left(\frac{\rho^2}{2} - \gamma \right) + \left(\sigma - \frac{1}{2} \right) \frac{\rho}{z} \right] H(z) = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

3.Equação Bi-Confluyente

$$\begin{aligned} \frac{d^2 H(z)}{dz^2} + \left(\frac{\alpha + 1}{z} - \rho - 2z \right) \frac{dH(z)}{dz} \\ + \left(\gamma - \sigma - 2 - \frac{\delta + (\sigma + 1)\rho}{2z} \right) H(z) = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

4.Equação Tri-Confluyente

$$\frac{d^2 H(z)}{dz^2} - (\gamma + 3z^2) \frac{dH(z)}{dz} + [\sigma + (\rho - 3)z] H(z) = 0 \quad (\text{A.5})$$

O processo de confluência ocorre quando se “aglutina” um ponto singular regular no infinito e em seguida ajusta-se alguns parâmetros da equação. Apresenta-se nesta monografia a forma confluyente, que ocorre quando há duas singularidades regulares em $z = 0$, $z = 1$ e uma singularidade irregular em $z = \infty$ (HORTAÇSU, 2011). Isto é, uni-se $z = 0$ em $z \rightarrow \infty$ da seguinte forma: tomando a equação (A.1) e reescrevendo

$$\begin{aligned} (z-1) \left(\frac{z}{d} - 1 \right) \frac{d^2 H(z)}{dz^2} + \left[\gamma(z-1) \left(\frac{z}{d} - 1 \right) + \delta z \left(\frac{z}{d} - 1 \right) + \frac{\epsilon}{d} z(z-1) \right] \frac{dH(z)}{dz} \\ + \left(\sigma \frac{\rho}{d} z - \frac{q}{d} \right) H(z) = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Agora, considerando-se $d, \rho, q \rightarrow \infty$, tal que

$$\frac{\rho}{d} \rightarrow \frac{\epsilon}{d} \rightarrow -\xi, \quad \text{e} \quad \frac{q}{d} \rightarrow -\tau \quad (\text{A.7})$$

E assim, obtém-se a equação confluyente de Heun:

$$\frac{d^2 H(z)}{dz^2} + \left(\xi + \frac{\gamma}{z} - \frac{\delta}{z-1} \right) \frac{dH(z)}{dz} + \frac{(\sigma \xi z - \tau)}{z(z-1)} H(z) = 0$$

Uma das formas que se pode representar a forma confluyente de Heun, e que esta monografia adota, é apresentada abaixo:

$$\begin{aligned}
& Hc''(z) + \left(\sigma + \frac{\rho+1}{z} + \frac{\gamma+1}{z-1} \right) Hc'(z) \\
& + \left[\frac{[\delta + \frac{\sigma}{2}(\rho + \gamma + 2)]z + \eta + \frac{\rho}{2} + \frac{1}{2}(\gamma - \sigma)(\rho + 1)}{z(z-1)} \right] Hc(z) = 0
\end{aligned} \tag{A.8}$$

cujas soluções são dadas pelas relações:

$$h^{(1)}(z) = Hc(\sigma, \rho, \gamma, \delta, \eta; z) \tag{A.9}$$

$$h^{(2)}(z) = z^{-\rho} Hc(\sigma, -\rho, \gamma, \delta, \eta; z) \tag{A.10}$$

O conjunto de mudanças de variáveis que conduz a equação de Heun em alguma de suas formas confluentes foi inicialmente estabelecidas pelo próprio Heun e completamente explicadas por Maier, que escreveu em seus por menores e tabeladas as 192 substituições e as transformações de cada parâmetro de cada variável da equação (EL-JAICK; FIGUEIREDO, 2011). Para que o leitor possa se aprofundar, é recomendável MAIER, 2005.