



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

PEDRO DAVI MATOS PEREIRA

**A MECÂNICA QUÂNTICA NO ESPAÇO DE FASE E O
POTENCIAL DE YUKAWA**

Salvador

2021

PEDRO DAVI MATOS PEREIRA

**A MECÂNICA QUÂNTICA NO ESPAÇO DE FASE E O
POTENCIAL DE YUKAWA**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia como requisito para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. José David Manguiera Viana

Coorientadora: Profa. Dra. Maria das Graças R. Martins

Salvador

2021

Pedro Davi Matos Pereira

A Mecânica Quântica no Espaço de Fase e o Potencial de Yukawa/ Pedro Davi Matos Pereira. – Salvador, 2021-

127p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. José David Manguiera Viana

Coorientadora: Profa. Dra. Maria das Graças R. Martins

Dissertação de Mestrado – Universidade Federal da Bahia
Instituto de Física

Programa de Pós-Graduação em Física, 2021.

1. Mecânica Quântica no Espaço de Fase. 2. Potencial de Yukawa. 3. Função de Wigner. I. Orientador. II. Universidade Federal da Bahia. III. Instituto de Física. IV. A Mecânica Quântica no Espaço de Fase e o Potencial de Yukawa

PEDRO DAVI MATOS PEREIRA

**A MECÂNICA QUÂNTICA NO ESPAÇO DE FASE E O
POTENCIAL DE YUKAWA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia como requisito para obtenção do título de Mestre em Física.

Trabalho aprovado. Salvador, 07 de outubro de 2021.

Banca Examinadora

Prof. Dr. José David Manguiera Viana
Orientador

Profa. Dra. Maria das Graças R.
Martins
Coorientadora

Prof. Dr. Ademir Eugênio de Santana
UnB

Prof. Dr. Fernando de Brito Mota
UFBA

Salvador

2021

*À Valdelice e Valdice, minha mãe e minha avó,
por motivos que não caberiam em todas as
páginas deste trabalho.*

Agradecimentos

À minha mãe, Valdelice Matos dos Santos, pela base, momentos, palavras e conselhos. Por ter me apoiado mesmo diante de tantas dificuldades. Pela força e inspiração fundamentais para a minha formação e busca por um futuro melhor.

Ao meu pai, Antônio Santos Pereira, pelos valores ensinados e por ter aceitado de bom grado um filho físico, embora almejasse outra coisa.

Ao Prof^o Dr. José David Magueira Vianna, por ter aceitado orientar este trabalho, por toda liberdade e confiança que me foram concedidas, e pelos ensinamentos passados desde a época da iniciação científica.

À Prof^a Dra. Maria das Graças Reis Martins, pelos ensinamentos passados, sobre física e sobre a vida, pelo acolhimento, orientação e incentivo no crescimento pessoal e profissional desde a época da iniciação científica.

À Karla Pedroza, minha companheira da física e da vida, pelos momentos compartilhados, incentivo e motivação que contribuíram para a conclusão deste trabalho.

A todos os companheiros do grupo de pesquisa e, em especial, a Andréia Simões pelo acolhimento, orientação, conselhos e incentivo no crescimento desde a época da iniciação científica, quando foi minha tutora.

A todos os amigos da graduação e pós-graduação que compartilharam comigo momentos de aprendizado. Em especial à Tales Santos, João Bastos (Neskaw) e Arthur Césare (Thives).

A todos os funcionários do Instituto de Física da UFBA. Em especial, à Marcos Paulo, pelas palavras e ajuda concedida ao longo destes anos.

Aos amigos do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano - Campus Salgueiro. Em especial ao professor Marcelo Souza da Silva, pelo incentivo na conclusão deste trabalho.

A todos os meus alunos e ex-alunos que contribuíram na minha formação pessoal e profissional.

Aos criadores do pacote abn \TeX 2, que me pouparam um bom tempo com a formatação e organização desta dissertação nas normas ABNT.

À CAPES, pelo apoio financeiro concedido para a realização deste trabalho.

*“A tarefa não é tanto ver aquilo que ninguém viu,
mas pensar o que ninguém ainda pensou
sobre aquilo que todo mundo vê.
(Arthur Schopenhauer)*

*“Na ciência, não é a velocidade que é a mais importante.
É a dedicação, o compromisso, o interesse e a vontade de conhecer
algo e compreendê-lo - essas são as coisas que vêm primeiro.”
(Eugene Paul Wigner)*

Resumo

Neste trabalho apresentamos um estudo sobre o potencial de Yukawa na formulação da Teoria Quântica no Espaço de Fase e a determinação da Função de Wigner. Com esses objetivos consideramos o sistema formado por uma partícula sujeita a esse potencial e diferentes procedimentos. Inicialmente, com a Teoria Quântica usual e as soluções aproximadas obtidas por Garavelli e Oliveira e por Hamzavi et al. determinamos as correspondentes Funções de Wigner seguindo o processo baseado na transformação proposta por Wigner. Na sequência, com a Mecânica Quântica Simplética (MQS), analisamos o mesmo sistema usando a Equação de Schrödinger no Espaço de Fase (ESEF) característica da MQS e a correspondente Função de Wigner dela obtida, em duas situações: (i) no caso tridimensional, para comparar com os resultados obtidos na primeira parte, empregamos na resolução da ESEF o método de Nikiforov-Uvarov para resolver equações diferenciais, e o produto estrela para determinar a Função de Wigner; (ii) no caso bidimensional, devido à falta de resultados na literatura com o potencial de Yukawa, para comparar com o caso do potencial de Coulomb, o usamos aproximado por uma expansão até termos de terceira ordem no fator de atenuação μ , a transformação de Levi-Civita e a teoria de perturbação no Espaço de Fase. Em todos os casos o fator de não-classicalidade é determinado em função da atenuação e seu comportamento analisado na região do valor crítico μ_c .

Palavras-chave: Potencial de Yukawa. Função de Wigner. Mecânica Quântica Simplética.

Abstract

In this work we present a study on Yukawa's potential in the formulation of the Quantum Theory in Phase Space and the determination of the Wigner Function. With these aims, we consider the system formed by a particle subject to this potential and different procedures. Initially, with the usual Quantum Theory and the approximate solutions obtained by Garavelli and Oliveira and by Hamzavi et al. we determine the corresponding Wigner Functions following the process based on the transformation proposed by Wigner. Next, with Symplectic Quantum Mechanics (SQM), we analyze the system using the Schrödinger Equation in Phase Space (SEPS) characteristic of SQM and the corresponding Wigner Function obtained from it, in two situations: (i) in the three-dimensional case, to compare with the results obtained in the first part, we use the Nikiforov-Uvarov (NU) method to solve differential equations and the star product to determine the Wigner Function; (ii) in the two-dimensional case, due to the lack of results in the literature with this potential, to compare with the case of the Coulomb potential we use the Yukawa potential approximated by an expansion to third order terms in the attenuation factor μ , the Levi-Civita transformation and the phase space perturbation theory. In all cases, the non-classicality factor is determined as a function of attenuation and its behavior analyzed in the region of critical value μ_c .

Keywords: Yukawa Potential. Wigner's Function. Symplectic Quantum Mechanics.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Comparação entre a função de estado do oscilador, seu módulo quadrado e sua correspondente função de Wigner para $n = 0$	25
Figura 2 – Comparação entre a função de estado do oscilador, seu módulo quadrado e sua correspondente função de Wigner para $n = 1$	25
Figura 3 – Comparação entre a função de estado do oscilador, seu módulo quadrado e sua correspondente função de Wigner para $n = 2$	25
Figura 4 – Comparação entre a função de estado do oscilador, seu módulo quadrado e sua correspondente função de Wigner para $n = 3$	26
Figura 5 – Função de Wigner para o oscilador no primeiro estado excitado obtida experimentalmente por Leibfried et al. [1].	26
Figura 6 – Fluxograma para aplicação do método Nikiforov-Uvarov (NU).	55
Figura 7 – O potencial de Yukawa com $A = 1$ e diferentes valores para a atenuação μ	58
Figura 8 – Gráfico dos parâmetros iterativos e da energia: (a) $\alpha(\mu)$ e $\gamma(\mu)$; (b) $E(\mu)$	62
Figura 9 – O potencial de Yukawa e o potencial de Hulthén, com $A = \sqrt{2}$ e $\mu = 0,05A$	64
Figura 10 – Contorno utilizado na resolução da integral de resíduos.	68
Figura 11 – Função de Wigner normalizada do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,01$	71
Figura 12 – Função de Wigner normalizada do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,30$	72
Figura 13 – Função de Wigner normalizada do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,60$	72
Figura 14 – Função de Wigner normalizada do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,90$	73
Figura 15 – Função de Wigner normalizada do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=1,14$	73
Figura 16 – Função $r^2 p^2 W(r, p; \mu)$ do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,01$, em função das coordenadas radiais.	74
Figura 17 – Função $r^2 p^2 W(r, p; \mu)$ do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,30$, em função das coordenadas radiais.	74
Figura 18 – Função $r^2 p^2 W(r, p; \mu)$ do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,60$, em função das coordenadas radiais.	75
Figura 19 – Função $r^2 p^2 W(r, p; \mu)$ do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,90$, em função das coordenadas radiais.	75

Figura 20 – Função $r^2 p^2 W(r, p; \mu)$ do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=1,14$, em função das coordenadas radiais.	76
Figura 21 – Integral numérica da função de Wigner normalizada.	79
Figura 22 – Indicador de não classicalidade do sistema submetido ao potencial de Yukawa, obtido através do cálculo numérico das integrais (6.19) e (6.20), com $W(r, p)$ dada por (6.16).	79
Figura 23 – Indicador de não-classicalidade do potencial de Yukawa, em função da atenuação, com a função ajustada (6.26).	81
Figura 24 – Indicador de não-classicalidade do potencial de Yukawa, calculada pelas relações (6.21) e (6.25), em função da atenuação, apresentando comportamento assintótico próximo ao valor crítico μ_c e com erro estimado nas integrações numéricas.	81
Figura 25 – Valores da energia para o estado fundamental de uma partícula sujeita ao potencial de Yukawa em função de μ	91
Figura 26 – A carga efetiva e a carga dual em função da atenuação μ	93
Figura 27 – Comparando o potencial de Yukawa aproximado via expansão de Taylor com termos até a terceira ordem para diferentes valores de μ	96
Figura 28 – Energia fundamental em função da atenuação μ para duas dimensões. Em roxo, com a correção de ordem zero e, em verde, corrigida até a primeira ordem.	105
Figura 29 – A função quasi-amplitude de probabilidade do estado fundamental em duas dimensões para diferentes valores de μ	107
Figura 30 – Gráficos da função de Wigner para uma partícula sob a ação do potencial de Yukawa com diferentes valores de μ	109
Figura 31 – Indicador de não-classicalidade para um sistema sob o potencial de Yukawa em função da atenuação com a função de Wigner (8.73) expandida até o termo de 10^{a} ordem.	110
Figura 32 – Indicador de não-classicalidade do potencial de Yukawa em função da atenuação com a forma empírica (8.74).	112

Lista de tabelas

Tabela 1 – Geradores das transformações infinitesimais de \mathcal{G} [2].	31
Tabela 2 – Polinômios ortogonais presentes na literatura [3].	46
Tabela 3 – Parâmetros utilizados no cálculo numérico da integral.	78
Tabela 4 – Parâmetros da expressão (6.26).	80
Tabela 5 – Valores das integrais numéricas e seus erros associados.	82
Tabela 6 – Parâmetros utilizados no cálculo numérico das integrais.	110
Tabela 7 – Valores do índice de classicalidade para uma partícula sob o potencial de Yukawa num espaço bidimensional para diferentes valores de μ	111
Tabela 8 – Parâmetros da regressão não linear para o fator de não-classicalidade para o potencial de Yukawa $2D$	111

Lista de abreviaturas e siglas

EF	Espaço de Fase
ES	Equação de Schrödinger
ESEF	Equação de Schrödinger no Espaço de Fase
NU	Nikiforov-Uravov
SRS	Segunda Regra de Simpson

Sumário

1	Introdução	1
2	A Mecânica Quântica no Espaço de Fase: Função de Wigner e o Produto Estrela	5
2.1	Formulação estatística	5
2.1.1	O ensemble clássico	5
2.1.2	O ensemble quântico	6
2.2	A função de Wigner	8
2.3	Propriedades da função de Wigner	9
2.4	Representação de operadores no espaço de fase	12
2.5	O produto estrela	13
2.5.1	Propriedades do produto estrela	14
2.6	Evolução temporal da função de Wigner	18
2.6.1	Via expansão de Taylor	19
2.6.2	Via transformação de Wigner-Weyl	20
2.7	Equação de autovalor da função de Wigner	21
2.8	Utilização da função de Wigner	22
2.8.1	O oscilador harmônico no espaço de fase	23
2.8.2	Indicador de não-classicalidade	26
3	A Mecânica Quântica Simplética	29
3.1	Espaço de Hilbert e a estrutura simplética	29
3.2	A representação do grupo de Galilei no espaço de fase	30
3.2.1	As simetrias do espaço-tempo	30
3.2.2	Representação no espaço de fase	32
3.3	A dinâmica de funções e observáveis	34
3.3.1	Variação temporal de observáveis	34
3.3.2	A equação de Schrödinger no espaço de fase	36
3.3.3	O operador densidade	36
3.4	Conexão com o formalismo de Wigner	37
4	O Método Nikiforov–Uvarov (NU)	41
4.1	A equação hipergeométrica generalizada	41
4.2	A fórmula de Rodrigues	43
4.3	Aplicação do método: o oscilador harmônico unidimensional	46
4.3.1	Resumo do procedimento	47
4.3.2	Aplicação ao oscilador harmônico unidimensional	47
4.4	Forma paramétrica da Equação de Schrödinger	50
5	O Potencial de Yukawa no formalismo de Schrödinger	57

5.1	O Potencial de Yukawa	57
5.2	A estabilidade das soluções e a atenuação crítica μ_c	58
5.3	Soluções aproximadas	59
5.3.1	A solução analítica via método iterativo	61
5.3.2	Solução via método Nikiforov-Uravov	63
6	O Potencial de Yukawa no formalismo de Wigner	67
6.1	A função de Wigner do estado fundamental	67
6.2	Gráficos da função de Wigner	70
6.2.1	Função de Wigner em função de x e p_x	70
6.2.2	Função de Wigner em função dos parâmetros radiais	73
6.3	Análise de classicalidade do sistema	76
6.3.1	Descrição dos cálculos	77
6.3.2	Resultados numéricos	78
7	Descrição tridimensional via separação de variáveis	83
7.1	A Equação de Schrödinger no espaço de fase	83
7.1.1	A solução da equação angular	86
7.1.2	A solução da equação radial	87
7.1.3	A solução geral	89
7.2	Uma solução particular	90
7.3	Conexão com o formalismo usual	91
7.3.1	Os valores de energia	91
7.3.2	As funções de estado e os parâmetros	92
7.3.3	A função de Wigner	93
8	Descrição bidimensional via transformação de coordenadas	95
8.1	O potencial aproximado	95
8.2	A transformação de Levi-Civita	96
8.3	O Hamiltoniano clássico transformado	98
8.4	Aproximação via teoria de perturbação no espaço de fase	100
8.4.1	A solução não perturbada	101
8.4.2	Aproximação de primeira ordem	103
8.4.3	Gráficos da função quasi-amplitude de probabilidade corrigida	106
8.5	A função de Wigner	107
8.6	O indicador de não-classicalidade	109
9	Conclusões e perspectivas	113
	Referências	115

1 Introdução

Existem diferentes formulações da Teoria Quântica; são exemplos, o formalismo das integrais de trajetória de Feynman [4, 5], utilizado nas teorias de calibre e física de altas energias, e o formalismo normalmente apresentado nos livros texto [2, 6, 7], desenvolvido por Schrödinger, Heisenberg, Dirac, von Neumann [8], de largo uso em processos não relativísticos. Uma outra abordagem menos explorada é a quantização no espaço de fase baseada na função quasi-distribuição de Wigner [9] e na regra de quantização de Weyl [10], que trataremos neste trabalho.

O formalismo da Mecânica Quântica no Espaço de Fase (MQEF) é utilizado em diferentes áreas [11] como óptica e informação quântica, física da matéria condensada, eletrônica quântica e outras. Ele surge nos trabalhos de Wigner, em 1932, numa tentativa de correção da estatística quântica, e foi desenvolvida por Moyal [12], Groenewold [13], e vários outros autores [14–22]. A protagonista desta formulação é a função de Wigner $W(q, p, t)$, obtida através da aplicação da transformação de Wigner-Weyl e que obedece a equação de Liouville-von Neumann. Essa função é real mas, em contraste com a densidade de probabilidade ρ usual, pode apresentar valores negativos e, por isso, não representa uma distribuição de probabilidades; contudo, essas informações podem ser obtidas através das integrais $\rho(q; t) = \int dp W(q, p, t)$ e $\rho(p; t) = \int dq W(q, p, t)$ [23, 24].

Sabe-se, da literatura, que os valores negativos de $W(q, p, t)$ evidenciam características de sistemas quânticos como estados de superposição, caoticidade [25–28] e emaranhamento [29, 30], podendo ser utilizados como um parâmetro [31] para a compreensão do fenômeno de decoerência [32]. Além disso, $W(q, p, t)$ pode ser medida em laboratório através de técnicas de tomografia quântica [1, 29, 33–39] e utilizada na caracterização de estados de sistemas fotônicos de interesse na área de óptica e informação quântica.

Na formulação da MQEF os observáveis físicos representados por operadores no espaço de Hilbert \mathcal{H} , digamos \hat{A} , possuem correspondência única com funções reais $a_w(q, p)$ no espaço de fase Γ , tal que se tem $\Omega_w : A \rightarrow a_w(q, p)$ pelo mapeamento de Weyl. Este desenvolvimento induz uma álgebra associativa, mas não comutativa baseada no produto estrela, que influenciou o desenvolvimento da geometria não comutativa estudada por diferentes autores [40–48], e é dada por:

$$a_w \star b_w = a_w(q, p) \exp \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\partial} \overrightarrow{\partial} - \overleftarrow{\partial} \overrightarrow{\partial} \right) \right] b_w(q, p). \quad (1.1)$$

com a_w e b_w funções sobre o espaço de fase e as setas indicando a qual função a derivada é aplicada.

Muitos esforços foram empregados no desenvolvimento da Mecânica Quântica no

Espaço de Fase. No caso não relativístico, utilizando representações unitárias do grupo de Galilei, Oliveira et al. [49, 50] desenvolveram uma abordagem no espaço de fase munido por uma estrutura simplética e o produto de Weyl, denominada Mecânica Quântica Simplética (MQS). Esse formalismo auto-contido permite a obtenção da função de Wigner do sistema diretamente de uma Equação de Schrödinger no Espaço de Fase (ESEF), e foi aplicado no estudo de diferentes sistemas físicos [51–56]. No caso relativístico, através de representações unitárias do grupo de Poincaré e do produto de Weyl, Amorim et al. [57–60] desenvolveram uma abordagem relativística aplicada à Teoria de Campos, que também foi aplicada no estudo de diferentes sistemas [61, 62].

Um dos aspectos da MQS é que a solução da ESEF não é imediata para potenciais do tipo $\frac{1}{r}$ já que, nessa formulação, os operadores \hat{x}_i e \hat{p}_i são $\hat{x}_i = x_i + i\hbar\partial_{p_i}/2$ e $\hat{p}_i = p_i - i\hbar\partial_{x_i}/2$. Em trabalhos recentes Campos et al. [63–65] obtiveram a função de Wigner para o átomo de hidrogênio em duas e três dimensões utilizando a Mecânica Quântica Simplética e as transformações de Levi-Civita e Kustaanheimo-Stiefel [66]; seguindo esse desenvolvimento, Paiva et al. [67] estudaram o efeito Zeeman no espaço de fase e analisaram a classicalidade do mesmo sistema.

Um método útil para determinar solução de equações diferenciais de segunda ordem, como a equação de Schrödinger, é proposto por Nikiforov e Uravov [68]. Diferente da expansão em séries de potências, esse método permite a obtenção direta da fórmula de Rodrigues da solução procurada. Uma grande vantagem desse desenvolvimento é que permite parametrizar a equação de Schrödinger [69], possibilitando encontrar diretamente a solução para diferentes potenciais físicos de interesse [69, 70]. Esse método vem sendo utilizado na literatura no contexto da mecânica quântica na formulação usual [71–76]. No presente trabalho nós o usaremos na solução da ESEF.

Um potencial físico de interesse em diferentes áreas da física é o proposto inicialmente por Yukawa [77] no contexto da física nuclear e de altas energias, e empregado em diferentes outras áreas. Na física da matéria condensada e física dos plasmas, por exemplo, onde também é conhecido por potencial de Debye e Hückel [78], é utilizado como boa aproximação para descrever a blindagem do potencial coulombiano sentido por íons imersos num plasma; na física do estado sólido é conhecido como potencial de Thomas-Fermi, ou potencial de Coulomb blindado, e é utilizado na descrição aproximada de íons em um metal, considerando o modelo da nuvem eletrônica e descrevendo os elétrons como um gás [79]; em trabalhos na área de física atômica e molecular [80–84] é aplicado no estudo de sistemas confinados. Sua expressão é:

$$V(\vec{r}) = -A \frac{e^{-\mu r}}{r}, \quad (1.2)$$

em que A é uma constante, que nos modelos de Debye-Hückel e Thomas-Fermi toma a forma $A = -e^2$, sendo e a carga do elétron, e μ a atenuação do potencial.

Uma característica importante deste potencial surge ao analisarmos suas soluções. Por exemplo, o número de estados ligados de (1.2) está diretamente relacionado ao valor da atenuação μ [85–87] e torna-se zero a partir de um determinado valor crítico μ_c ; em particular, para o estado fundamental de uma partícula de massa m , seu valor mais preciso encontrado na literatura [88], em função de A e m , é dado por:

$$\frac{\mu_c}{Am} = 1,1906122105(5) \quad (1.3)$$

que, em unidades atômicas, isto é, com $A = 1$ e $m = 1$, resulta em

$$\mu_c = 1,1906122105(5). \quad (1.4)$$

Apesar da vasta aplicabilidade, não se tem obtido soluções exatas da equação de Schrödinger para este potencial [89]. Neste cenário, muitos métodos aproximados numéricos e analíticos têm sido desenvolvidos [88, 90–95]; dentre estes, podemos citar o método iterativo proposto por Garavelli e Oliveira [96], que fornece uma solução analítica para o estado fundamental com boa aproximação inclusive para valores da atenuação próximos ao valor crítico, e o procedimento proposto por Hamzavi et al. [76], baseado na aplicação do método Nikiforov-Uravov, e que fornece uma solução analítica aproximada [97, 98] com momento angular arbitrário, apresentando bons resultados especialmente para valores de $\mu \ll 1$.

No contexto do espaço de fase, a ausência de resultados envolvendo o potencial de Yukawa ainda é maior, havendo carência de função de Wigner para esse potencial: em um dos poucos trabalhos encontrados, Stanek [99] obteve uma função de Wigner do potencial de Hulthén aplicando a transformada de Wigner-Weyl numa solução analítica aproximada [100] da equação de Schrödinger usual.

No presente trabalho exploramos o potencial de Yukawa em duas e três dimensões dentro do formalismo no espaço de fase via formalismo de Wigner e via Mecânica Quântica Simplética. Apresentamos a função de Wigner em função do parâmetro de blindagem para uma partícula sob a ação do potencial de Yukawa tridimensional partindo da solução analítica na formulação usual e também resolvemos diretamente a ESEF com uso da Mecânica Quântica Simplética. Além disto, calculamos o indicador de não-classicalidade do estado fundamental mostrando que há um comportamento assintótico quando o parâmetro de blindagem tende ao valor crítico.

Este trabalho está dividido em nove capítulos, sendo o primeiro a introdução. Nos capítulos iniciais são apresentadas partes essenciais da teoria e dos métodos utilizados no trabalho. Do segundo ao quinto capítulo são apresentados a Mecânica Quântica no Espaço de Fase (MQEF) com formalismo de Weyl-Wigner, as ideias básicas da Mecânica Quântica Simplética (MQS), o método Nikiforov-Uvarov (NU) e o estudo do potencial de Yukawa na formulação usual da Mecânica Quântica. No [Capítulo 6](#) obtivemos a função de

Wigner para o estado fundamental de uma partícula submetida ao potencial de Yukawa utilizando o formalismo de Wigner da MQEF e uma solução analítica aproximada da formulação usual. No [Capítulo 7](#) solucionamos a Equação de Schrödinger no Espaço de Fase usando a Mecânica Quântica Simplética para uma partícula no espaço físico 3-dimensional submetida ao potencial de Yukawa. No [Capítulo 8](#) desenvolvemos, via Mecânica Quântica Simplética, a função de Wigner para o estado fundamental de uma partícula sob o potencial de Yukawa bidimensional usando a expansão aproximada desse potencial e a transformação de Levi-Civita. O [Capítulo 9](#) contém nossas conclusões e perspectivas.

2 A Mecânica Quântica no Espaço de Fase: Função de Wigner e o Produto Estrela

O formalismo da mecânica quântica no espaço de fase é uma alternativa à formulação de Schrödinger para quantizar sistemas, e é utilizada em diferentes áreas [11] como óptica e informação quântica, física da matéria condensada, eletrônica quântica e outras. Neste capítulo apresentaremos uma revisão da formulação da Mecânica Quântica no Espaço de Fase com base nas referências [8–10, 12, 13, 31, 40, 49, 50, 58, 101–107]

2.1 Formulação estatística

A formulação da mecânica estatística funciona em diferentes cenários. Para compreender melhor as motivações que levaram à formulação de Wigner da Mecânica Quântica no Espaço de Fase, nesta seção apresentaremos os formalismos estatísticos clássico e quântico de modo a evidenciar o papel do espaço de fase e a importância da função e do operador densidade.

2.1.1 O ensemble clássico

Na teoria estatística clássica o microestado de um sistema, num instante t , é representado por seus valores de posição e momento através de um ponto (q_i, p_i) no espaço de fase, onde $i = 1, 2, \dots, 3N$. Para um sistema com N partículas num espaço tridimensional, tem-se $3N$ coordenadas espaciais q_1, q_2, \dots, q_{3N} , e $3N$ coordenadas relativas aos momentos p_1, p_2, \dots, p_{3N} , totalizando $6N$ dimensões.

Para outros instantes de tempo, a dinâmica do sistema é governada pelas equações de Hamilton

$$\left. \begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H(q_i, p_i)}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H(q_i, p_i)}{\partial q_i} \end{aligned} \right\} \quad i = 1, 2, \dots, 3N, \quad (2.1)$$

em que $H(q_i, p_i)$ é a função hamiltoniana do sistema. Em particular, se o sistema possuir uma energia bem determinada E , o movimento do ponto no espaço de fase estará restrito à hipersuperfície

$$H(q_i, p_i) = E. \quad (2.2)$$

Ao considerar uma coleção de sistemas idênticos, isto é, um ensemble, o resultado é uma coleção de pontos que se movem nas regiões permitidas do espaço de fase. Esta distribuição de pontos é descrita pela função densidade $\rho(q, p; t)$, que simboliza a maneira como todos os componentes do ensemble estão distribuídos sobre todos os microestados

possíveis em diferentes instantes de tempo. Num instante t , o número de pontos dentro do hipervolume $d^{3N}q d^{3N}p$ é dado por $\rho(q, p; t) d^{3N}q d^{3N}p$. Para uma grandeza física $A(q, p)$, a média sobre o ensemble pode ser obtida através de

$$\langle A \rangle = \frac{\int A(q, p) \rho(q, p; t) d^{3N}q d^{3N}p}{\int \rho(q, p; t) d^{3N}q d^{3N}p}. \quad (2.3)$$

A evolução temporal da função densidade, no ensemble clássico, é descrita pela equação de Liouville

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}, \quad (2.4)$$

em que as chaves $\{\cdot, \cdot\}$ representam os parênteses de Poisson. Para sistemas em equilíbrio a função densidade não depende explicitamente do tempo, e a equação (2.4) admite como solução mais geral uma função do hamiltoniano

$$\rho(q, p) = \rho[H(q, p)]. \quad (2.5)$$

Uma solução possível da equação (2.5) é $\rho(q, p)$ constante, e todos os microestados são igualmente prováveis. Esta solução define o ensemble microcanônico da estatística clássica, ideal para sistemas fechados. Outra forma natural de expressar a função densidade é através do fator de Boltzman

$$\rho(q, p) \propto \exp[-H(q, p)/kT], \quad (2.6)$$

que define o ensemble canônico, ideal para sistemas que trocam energia. Este fator também surge na definição de outros ensembles estatísticos e significa que estados com menores energias são muito mais prováveis em sistemas estacionários.

2.1.2 O ensemble quântico

Em sistemas quânticos uma descrição estatística análoga à de um sistema clássico torna-se problemática uma vez que as partículas de um mesmo tipo são indistinguíveis. Além disto, pelo princípio de incerteza de Heisenberg, é impossível determinar com precisão posição e momento simultaneamente, dificultando a descrição no espaço de fase. Contudo, uma formulação estatística quântica foi desenvolvida por von Neumann em 1927 [8, 103] com base nos estados quânticos $|\psi^{(i)}\rangle$ oriundos da formulação de Schrödinger, que obedecem a (com $i = 1, 2, \dots$)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^{(i)}\rangle = \hat{H} |\psi^{(i)}\rangle. \quad (2.7)$$

No caso mais geral, uma coleção de cópias virtuais de sistemas quânticos, ou um ensemble quântico, é composto por diferentes estados $|\psi^{(i)}\rangle$. Neste caso, diz-se que se trata de um ensemble misto. O máximo de informação que se pode ter deste sistema é a probabilidade ω_i de estar no estado $|\psi^{(i)}\rangle$.

$$|\psi\rangle = \sum_i \omega_i |\psi^{(i)}\rangle \quad (2.8)$$

em que, devido à característica probabilística de ω_i , deve-se ter

$$\omega_i \geq 0 \quad \text{e} \quad \sum_i \omega_i = 1. \quad (2.9)$$

Cada estado $|\psi^{(i)}\rangle$ pode ser representado em termos de uma base completa $\{|\phi_n\rangle\}$ no espaço de Hilbert, através de uma combinação linear dos elementos que a compõe. Esta base obedecerá à relação de completude

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1. \quad (2.10)$$

O valor esperado de um observável físico \hat{A} , num estado $|\psi^{(i)}\rangle$ na mecânica quântica, é obtido através de

$$\langle\hat{A}\rangle^{(i)} = \langle\psi^{(i)}|\hat{A}|\psi^{(i)}\rangle \quad (2.11)$$

e, tomando-se diversas medidas sobre um estado misto, o valor mais provável será a média sobre o ensemble, definida por

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_i \omega_i \langle\hat{A}\rangle^{(i)} = \sum_i \omega_i \langle\psi^{(i)}|\hat{A}|\psi^{(i)}\rangle. \quad (2.12)$$

A equação (2.12) pode ser escrita em termos da base $\{|\phi_n\rangle\}$ através das relações de completude (2.10),

$$\begin{aligned} \langle\hat{A}\rangle &= \sum_i \omega_i \sum_n \sum_m \langle\psi^{(i)}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\hat{A}|\phi_m\rangle\langle\phi_m|\psi^{(i)}\rangle \\ &= \sum_n \sum_m \langle\phi_m| \left(\sum_i \omega_i |\psi^{(i)}\rangle\langle\psi^{(i)}| \right) |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\hat{A}|\phi_m\rangle. \end{aligned} \quad (2.13)$$

A relação (2.13) nos inspira a definir o operador densidade $\hat{\rho}$ para um estado misto na forma:

$$\hat{\rho} = \sum_i \omega_i |\psi^{(i)}\rangle\langle\psi^{(i)}|. \quad (2.14)$$

Com $\hat{\rho}$, a relação (2.13) pode ser representada, em termos dos elementos de matriz $\rho_{mn} = \langle\phi_m|\hat{\rho}|\phi_n\rangle$ e $A_{nm} = \langle\phi_n|\hat{A}|\phi_m\rangle$, como:

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_n \sum_m \rho_{mn} A_{nm} = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}). \quad (2.15)$$

Esta relação permite determinar o valor esperado de qualquer observável num sistema quântico. Duas propriedades muito importantes do operador densidade são:

$$\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \quad (\text{hermiticidade}) \quad (2.16)$$

e

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1 \quad (\text{normalização}). \quad (2.17)$$

Outra questão importante a se determinar é a evolução temporal do operador densidade. Partindo de sua definição (2.14), derivando parcialmente com relação ao tempo em ambos os lados e multiplicando por $i\hbar$, obtém-se:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} &= \sum_i \left[(i\hbar \partial_t |\psi^{(i)}\rangle) \langle \psi^{(i)}| + |\psi^{(i)}\rangle (\langle \psi^{(i)}| i\hbar \partial_t) \right] \\ &= \sum_i \left[(\hat{H} |\psi^{(i)}\rangle) \langle \psi^{(i)}| + |\psi^{(i)}\rangle (-\langle \psi^{(i)}| \hat{H}) \right] \\ &= \hat{H} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H}, \end{aligned}$$

originando a equação de Liouville-von Neumann:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (2.18)$$

em que os colchetes representam o comutador entre operadores, enquanto na equação de Liouville as chaves representam os parênteses de Poisson. A relação (2.18) é o análogo quântico da equação de Liouville clássica (2.4).

Nos casos em que o hamiltoniano independe do tempo, esta equação é solucionada em termos do operador densidade independente do tempo $\hat{\rho}$, e a solução possui a forma:

$$\hat{\rho}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\rho}(0) e^{i\hat{H}t/\hbar} = \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}(t)^\dagger, \quad (2.19)$$

em que o operador unitário $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ representa o operador de evolução temporal.

2.2 A função de Wigner

Buscando fazer correções na estatística quântica sem abandonar a ideia do espaço de fase, Wigner introduziu em 1932 [9] uma função de distribuição definida como uma transformação de Fourier envolvendo autofunções da equação de Schrödinger. Para um ensemble simples, representado pela função de estado na representação das posições $\psi(q)$, a função de Wigner é dada por:

$$W(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar} \right)^n \int dy \psi^*(q+y) \psi(q-y) e^{2ip \cdot y/\hbar} \quad (2.20)$$

em que, na notação, os entes q , y e p são definidos como:

$$\begin{aligned} q &\equiv (q_1, q_2, \dots, q_n), & y &\equiv (y_1, y_2, \dots, y_n), & p &\equiv (p_1, p_2, \dots, p_n), \\ dy &\equiv dy_1 dy_2 \dots dy_n, \\ p \cdot y &\equiv p_1 y_1 + p_2 y_2 + \dots + p_n y_n. \end{aligned}$$

No caso de um ensemble simples, representado pela função de estado na representação dos momenta $\phi(p)$, a função de Wigner pode ser obtida de forma análoga a (2.20) [21],

numa expressão onde a exponencial possuirá sinal negativo e a posição surge como a coordenada conjugada da transformação, ou seja:

$$W(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^n \int dy \phi^*(p+y)\phi(p-y)e^{-2iq\cdot y/\hbar}. \quad (2.21)$$

Para um ensemble misto, a função de Wigner total é composta pela soma das funções de Wigner $W_i(q, p)$ associadas aos estados simples $\psi_i(q)$, ponderadas pelo peso estatístico ω_i :

$$W(q, p) = \sum_i \omega_i W_i(q, p), \quad (2.22)$$

o que permite escrever, de forma geral, em termos do operador densidade $\hat{\rho}$, que pode ser simples ou misto:

$$W(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^n \int dy \langle q+y|\hat{\rho}|q-y\rangle e^{2ip\cdot y/\hbar}, \quad (2.23)$$

e de forma análoga para estados na representação dos momentos:

$$W(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^n \int dy \langle p+y|\hat{\rho}|p-y\rangle e^{-2iq\cdot y/\hbar}. \quad (2.24)$$

Diferentemente da função densidade, esta distribuição não representa uma probabilidade pois pode assumir valores negativos. De fato, sejam W_α e W_β as funções de Wigner associadas aos estados $|\psi^\alpha\rangle$ e $|\psi^\beta\rangle$, respectivamente. O produto interno entre estes estados será

$$|\langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle|^2 = \int dq dp W_\alpha(q, p; t) W_\beta(q, p; t) \geq 0. \quad (2.25)$$

A única forma dessa desigualdade ser nula é se alguma das funções de Wigner adquirir valores nulos ou negativos no domínio de integração. Nota-se que essa desigualdade não impede que a função seja totalmente positiva. Na verdade, os valores negativos estão associados à não classicalidade do sistema, o que será discutido na [subseção 2.8.2](#).

Distribuições desses tipos são denominadas distribuições quasiprobabilidade e são muito utilizadas no estudo de sistemas quânticos no espaço de fase. A função de Wigner foi a primeira proposta mas, posteriormente, surgiram outras como as funções de Husimi [108] e de Glauber–Sudarshan [103].

Muitas informações do sistema podem ser obtidas da função de Wigner. Além disto, com essa formulação faz-se uma conexão com o formalismo clássico permitindo estudar, de forma direta, os limites de classicalidade da teoria. A seção seguinte mostrará algumas propriedades dessa função.

2.3 Propriedades da função de Wigner

Propriedade 2.3.1. *A integral da função de Wigner, nas coordenadas de posição q , resulta na densidade de probabilidade de encontrar a partícula numa região entre p e $p + dp$, ou*

seja:

$$\int dq W(q, p) = \langle p | \hat{\rho} | p \rangle = |\phi(p)|^2. \quad (2.26)$$

Demonstração. Partindo da definição da função de Wigner com o autoestado na representação dos momenta, isto é (2.24), e realizando a integração na posição, obtém-se diretamente o resultado através da função delta no formato integral e da propriedade de filtragem:

$$\begin{aligned} \int dq W(q, p) &= \int dq \left(\frac{1}{\pi \hbar} \right)^n \int dy \langle p + y | \hat{\rho} | p - y \rangle e^{-2iq \cdot y / \hbar} \\ &= \int dy \langle p + y | \hat{\rho} | p - y \rangle \left[\left(\frac{1}{\pi \hbar} \right)^n \int dq e^{-2iq \cdot y / \hbar} \right] \\ &= \int dy \langle p + y | \hat{\rho} | p - y \rangle \delta(y) \\ &= \langle p | \hat{\rho} | p \rangle = |\phi(p)|^2. \end{aligned}$$

Vimos que a função de Wigner não representa diretamente uma probabilidade devido aos valores negativos que pode assumir. Contudo, através da integração na posição é possível resgatar informação probabilística do sistema na representação dos momenta.

Propriedade 2.3.2. *A integral da função de Wigner, nas coordenadas de posição p , resulta na densidade de probabilidade de encontrar a partícula numa região entre q e $q + dq$:*

$$\int dp W(q, p) = \langle q | \hat{\rho} | q \rangle = |\psi(q)|^2. \quad (2.27)$$

Demonstração. De forma análoga à propriedade anterior, i.e., partindo da definição da função de Wigner com o autoestado na representação das posições, isto é (2.23), e realizando a integração nos momenta, obtém-se diretamente o resultado através da função delta no formato integral e da propriedade de filtragem:

$$\begin{aligned} \int dp W(q, p) &= \int dp \left(\frac{1}{\pi \hbar} \right)^n \int dy \langle q + y | \hat{\rho} | q - y \rangle e^{2ip \cdot y / \hbar} \\ &= \int dy \langle q + y | \hat{\rho} | q - y \rangle \left[\left(\frac{1}{\pi \hbar} \right)^n \int dp e^{2ip \cdot y / \hbar} \right] \\ &= \int dy \langle q + y | \hat{\rho} | q - y \rangle \delta(y) \\ &= \langle q | \hat{\rho} | q \rangle = |\psi(p)|^2. \end{aligned}$$

Mais uma vez, a função de Wigner não representa diretamente uma probabilidade devido aos valores negativos que pode assumir. Contudo, através da integração nos momenta é possível resgatar informação probabilística do sistema na representação das posições.

Propriedade 2.3.3. *A função de Wigner é normalizada.*

$$\int dqdp W(q, p) = \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1. \quad (2.28)$$

Demonstração. A demonstração dessa propriedade é feita realizando a integração direta. Para isso, aproveitaremos os resultados da propriedade 2.3.2, ou seja,

$$\begin{aligned} \int dpdq W(q, p) &= \int dq \int dp W(q, p) \\ &= \int dq \langle q | \hat{\rho} | q \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}), \end{aligned}$$

e por (2.17) temos o resultado (2.28).

Como o traço independe da representação, o mesmo resultado teria sido obtido realizando primeiramente a integração nas posições e utilizando a propriedade 2.3.1.

Propriedade 2.3.4. *A função de Wigner para estados puros normalizáveis é limitada por valores máximo e mínimo.*

$$|W(q, p)| \leq \frac{1}{\pi\hbar} \quad (2.29)$$

Demonstração. Para demonstrar essa propriedade, utilizaremos a definição da função de Wigner para estados puros. Da relação (2.20),

$$W(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dy \psi^*(q+y)\psi(q-y)e^{2ip\cdot y/\hbar},$$

observamos que ela pode ser reescrita como o produto interno entre duas funções normalizadas

$$\eta_1(y) = \psi(q-y)e^{2ip\cdot y/\hbar} \quad \text{e} \quad \eta_2(y) = \psi(q+y)$$

associadas aos estados $|\eta_1\rangle$ e $|\eta_2\rangle$. Desta forma, tem-se:

$$W(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar} \right) \int dy \eta_1^*(y)\eta_2(y) = \left(\frac{1}{\pi\hbar} \right) \langle \eta_1 | \eta_2 \rangle.$$

Pela desigualdade de Cauchy-Schwarz, o produto interno entre dois vetores obedece à relação

$$|\langle \eta_1 | \eta_2 \rangle| \leq 1. \quad (2.30)$$

Aplicando o módulo na definição da função de Wigner, obtemos a desigualdade procurada, como queríamos demonstrar.

$$|W(q, p)| \leq \frac{1}{\pi\hbar}. \quad (2.31)$$

2.4 Representação de operadores no espaço de fase

Na formulação usual da mecânica quântica os observáveis físicos são representados por operadores hermitianos que atuam sobre vetores no espaço de Hilbert \mathcal{H} , cujo autovalor real está associado ao valor da grandeza que pode ser medido no laboratório. Em geral, o operador quantizado depende das coordenadas e momenta, \hat{q} e \hat{p} . Seja o observável $\hat{A} = \hat{A}(\hat{q}, \hat{p})$ atuando num estado $|\psi\rangle$. O valor esperado desta grandeza física é obtido através da relação

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (2.32)$$

Na formulação da mecânica quântica no espaço de fase cada operador $\hat{A}(\hat{q}, \hat{p})$, atuando no espaço de Hilbert \mathcal{H} , possui um único correspondente c-número $a_w(q, p)$, no espaço de fase Γ , relacionados pela transformação $\mathcal{W}[a_w] : a_w \rightarrow \hat{A}$, chamada mapeamento de Weyl [10, 12, 101]

$$\mathcal{W}[a_w] = \hat{A}(\hat{q}, \hat{p}) := \frac{1}{(2\pi)^2} \iiint d\sigma d\tau dq dp a_w(q, p) e^{i\sigma(\hat{q}-q) + i\tau(\hat{p}-p)}. \quad (2.33)$$

Através do mapeamento é possível quantizar a função clássica do observável $a_w(q, p)$ seguindo a regra de quantização de Weyl, proposta em 1927 pelo matemático alemão Weyl na obra intitulada “Teoria de grupos e mecânica quântica” [10]. Neste trabalho, anterior ao de Wigner, Weyl propõe uma estruturação do formalismo usual utilizando a teoria de grupos. O mapeamento surge com o objetivo de simetrizar as teorias quântica e clássica.

A transformação de Weyl é inversível e sua inversa é dada por [102]

$$\mathcal{W}^{-1}[\hat{A}] = a_w(q, p) = \int dy \langle q + y | \hat{A}(\hat{q}, \hat{p}) | q - y \rangle e^{2ipy/\hbar}. \quad (2.34)$$

A inversa também é denominada transformação de Wigner, pela semelhança com a definição (2.23), e permite encontrar a função c-número no espaço de fase associada ao operador q-número no espaço de Hilbert. Neste cenário, a função proposta por Wigner está inserida no formalismo de Weyl e corresponde ao operador densidade quântico transformado pela regra de quantização (2.33).

Estas transformações também são citadas na literatura [101, 103] como transformação de Wigner-Weyl. Elas são úteis no desenvolvimento da mecânica quântica na representação de Wigner proposta por Moyal [12] e Gronewood [13], de forma independente, com o objetivo de obter a mecânica quântica como uma teoria estatística no espaço de fase e com operadores c-números. Neste contexto o valor médio do observável \hat{A} pode ser calculado com base no correspondente $a_w(q, p)$ e na função de Wigner $W(q, p)$ do sistema, através da integral:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dq dp a_w(q, p) W(q, p) = Tr(\hat{\rho} \hat{A}). \quad (2.35)$$

Com uso da transformação inversa (2.34), pode-se demonstrar outras propriedades dos operadores na representação de Wigner [40, 49, 50, 58]:

1. Se $\hat{A} = \text{constante}$, então $a_w(q, p) = \hat{A}$;
2. Se $\hat{A} = \hat{A}(\hat{q})$, então $a_w(q, p) = A(q)$ mantendo a mesma forma funcional;
3. Se $\hat{A} = \hat{A}(\hat{p})$, então $a_w(q, p) = A(p)$ mantendo a mesma forma funcional;
4. $\int dq dp a_w(q, p) = \text{Tr}(\hat{A})$;
5. $\int dq a_w(q, p) = \langle p | \hat{A} | p \rangle$;
6. $\int dp a_w(q, p) = \langle q | \hat{A} | q \rangle$.

2.5 O produto estrela

Como vimos na seção anterior, o mapeamento de Weyl conecta cada operador q-número do espaço de Hilbert a uma função c-número no espaço de fase. Ao aplicar a transformação sobre o produto de operadores, surge uma importante propriedade nesta formulação. Sejam os operadores \hat{A} , \hat{B} associados às funções a_w e b_w , respectivamente, e o operador $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$, associado à função c_w . Aplicando a transformação (2.33) sobre o operador \hat{C} e utilizando as relações de Baker-Campbell-Hausdorff pode-se mostrar que [102]:

$$c_w(q, p) = a_w(q, p) \exp \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \right) \right] b_w(q, p). \quad (2.36)$$

onde as setas indicam sobre qual função o operador deve atuar e estamos considerando um espaço de fase bidimensional.

Este produto de operadores é definido como o produto de Weyl, ou produto estrela, representado como:

$$c_w(q, p) = a_w(q, p) \star b_w(q, p), \quad (2.37)$$

onde o símbolo \star foi introduzido por Groenwold [13]. Note que o mapeamento do produto de operadores do espaço de Hilbert leva a uma relação especial entre as funções correspondentes no espaço de fase, ou seja, como uma deformação que depende de todas as ordens do termo \hbar , e é introduzida pelo operador diferencial

$$\star := \exp \left(\frac{i\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} \right), \quad (2.38)$$

com $\overleftrightarrow{\Lambda}$ definido como:

$$\overleftrightarrow{\Lambda} = \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}}, \quad (2.39)$$

Este operador bi-diferencial define uma estrutura não comutativa que será discutida no [Capítulo 3](#).

A expressão (2.36) pode ser generalizada para funções num espaço de fase $2N$ dimensional [104]. Sejam duas funções $f(\vec{q}, \vec{p})$ e $g(\vec{q}, \vec{p}) \in C^\infty(\mathbb{R}^{2N})$, o produto estrela será dado por:

$$f \star g = f e^{\frac{i\hbar}{2} \sum_{j=1}^N (\overleftarrow{\partial}_{q_j} \overrightarrow{\partial}_{p_j} - \overleftarrow{\partial}_{p_j} \overrightarrow{\partial}_{q_j})} g. \quad (2.40)$$

2.5.1 Propriedades do produto estrela

O produto estrela possui algumas propriedades que serão mostradas nesta subseção. Para as demonstrações, é válido observar que a exponencial pode ser expandida em potências de \hbar de modo que o produto estrela entre duas funções $f(q, p)$ e $g(q, p) \in C^\infty(\mathbb{R}^2)$. Colocando $\partial_q := \frac{\partial}{\partial q}$ e $\partial_p := \frac{\partial}{\partial p}$, a equação (2.40) pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} f(q, p) \star g(q, p) &= f(q, p) \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^n (\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q)^n \right] g(q, p) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^n \frac{(-1)^m}{m!(n-m)!} (\partial_p^m \partial_q^{n-m} f) (\partial_p^{n-m} \partial_q^m g), \end{aligned} \quad (2.41)$$

e será útil na verificação das propriedades a seguir.

Propriedade 2.5.1. *Seja $f(q, p)$ uma função no espaço de fase, e seja $c \in \mathbb{C}$. O produto estrela comuta quando aplicado a uma constante, isto é:*

$$c \star f(q, p) = f(q, p) \star c = cf(q, p) \quad (2.42)$$

Demonstração. Esta propriedade pode ser verificada diretamente da expansão do produto estrela (2.41). De fato, note que

$$c \star f(q, p) = c \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^n (\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q)^n \right] f(q, p). \quad (2.43)$$

Quando os operadores forem aplicados no lado esquerdo da equação todos os termos do somatório serão anulados, restando apenas o termo unitário, e a expressão terá como resultado $cf(q, p)$. O mesmo pode ser feito para $f(q, p) \star c$, e encontraremos resultado igual.

Propriedade 2.5.2. *O produto estrela não é comutativo. Sejam $f(q, p)$ e $g(q, p)$ duas funções no espaço de fase, tem-se que:*

$$f(q, p) \star g(q, p) \neq g(q, p) \star f(q, p). \quad (2.44)$$

Demonstração. Essa é uma propriedade básica em geometrias não-comutativas. Ela decorre da mudança de sinal da exponencial ao alterar a ordem das funções. De fato, veja que

$$f(q, p) \star g(q, p) = f(q, p) e^{+\frac{i\hbar \overleftarrow{\Lambda}}{2}} g(q, p) = g(q, p) e^{-\frac{i\hbar \overleftarrow{\Lambda}}{2}} f(q, p) \neq g(q, p) \star f(q, p). \quad (2.45)$$

Propriedade 2.5.3. *O produto estrela no limite clássico $\hbar \rightarrow 0$, corresponde a:*

$$f(q, p) \star g(q, p) = fg + \frac{i\hbar}{2}\{f, g\} + O(\hbar^2), \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (2.46)$$

Demonstração. Este resultado surge da expansão (2.41), em que o parêntese de Poisson é dado por

$$\{f, g\} := \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial q} \frac{\partial f}{\partial p}. \quad (2.47)$$

Diz-se que o produto estrela representa uma deformação do produto clássico, dependente do termo quântico \hbar . Além disto, tomemos os casos particulares $f(q, p) = q$ e $g(q, p) = p$. Observe que

$$\begin{aligned} q \star p - p \star q &= \left(q + \frac{i\hbar}{2} \partial_p \right) p - \left(p - \frac{i\hbar}{2} \partial_q \right) q \\ &= \left(qp + \frac{i\hbar}{2} \right) - \left(pq - \frac{i\hbar}{2} \right) = i\hbar. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Esta regra de comutação corresponde à também obtida no formalismo usual da mecânica quântica para os operadores no espaço de Hilbert $\hat{P} = -i\hbar \partial_q$, $\hat{Q} = q$, isto é:

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = \hat{Q}\hat{P} - \hat{P}\hat{Q} = i\hbar. \quad (2.49)$$

Propriedade 2.5.4. *O produto estrela quando aplicado a funções do espaço de fase as transforma em operadores, isto é*

$$f(q, p) \star g(q, p) = f \left(q + \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_q \right) g(q, p) = f(q, p) g \left(q - \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p, p + \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \right) \quad (2.50)$$

Demonstração. Para verificar esta propriedade, considere os operadores $a = \overrightarrow{\partial}_p$ e $b = \overrightarrow{\partial}_q$. Com isto, a expressão (2.36) pode ser escrita na forma

$$f(q, p) \star g(q, p) = f(q, p) \exp \left\{ \frac{i\hbar}{2} \left(a \overleftarrow{\partial}_q - b \overleftarrow{\partial}_p \right) \right\} g(q, p). \quad (2.51)$$

Sabendo que o operador de translação espacial promove um deslocamento no argumento da função, ou seja, $\exp(a\partial_x)f(x) = f(x+a)$, então de (2.36) temos

$$f(q, p) \star g(q, p) = f \left(q + \frac{i\hbar}{2} a, p - \frac{i\hbar}{2} b \right) g(q, p) = f \left(q + \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_q \right) g(q, p). \quad (2.52)$$

De modo análogo, definindo $a = \overleftarrow{\partial}_p$ e $b = \overleftarrow{\partial}_q$, pode-se demonstrar a segunda igualdade.

Esta propriedade permite definir operadores no espaço de fase. Seja um observável no espaço de fase representado pela função $f(q, p)$; o operador no espaço de fase associado a ela pode ser representado por

$$\hat{f} := f(q, p) \star. \quad (2.53)$$

Propriedade 2.5.5. *A conjugação complexa inverte a ordem do produto estrela.*

$$(f \star g)^\dagger = g^\dagger \star f^\dagger \quad (2.54)$$

Demonstração. Esta propriedade pode ser verificada pela mudança de sinal provocada pela mudança na ordem das funções. Note que

$$\begin{aligned} (f(q, p) \star g(q, p))^\dagger &= \left(f(q, p) \exp \left\{ +\frac{i\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} \right\} g(q, p) \right)^\dagger \\ &= \left(g(q, p) \exp \left\{ -\frac{i\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} \right\} f(q, p) \right)^\dagger \\ &= g^\dagger(q, p) \exp \left\{ +\frac{i\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} \right\} f^\dagger(q, p) \\ &= g^\dagger(q, p) \star f^\dagger(q, p). \end{aligned} \quad (2.55)$$

Propriedade 2.5.6. *O produto estrela é associativo. Isto é, sejam as funções $f, g, h \in C^\infty(\mathbb{R}^2)$, temos*

$$(f(q, p) \star g(q, p)) \star h(q, p) = f(q, p) \star (g(q, p) \star h(q, p)). \quad (2.56)$$

Demonstração. Este resultado segue da propriedade 2.5.4. Como os operadores diferenciais envolvidos são associativos, podemos escrever

$$\begin{aligned} (f(q, p) \star g(q, p)) \star h(q, p) &= \left\{ f \left(q + \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_q \right) g(q, p) \right\} h \left(q - \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p, p + \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \right) \\ &= f \left(q + \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_q \right) \left\{ g(q, p) h \left(q - \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p, p + \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \right) \right\} \\ &= f(q, p) \star (g(q, p) \star h(q, p)). \end{aligned} \quad (2.57)$$

Propriedade 2.5.7. *O produto estrela possui uma forma integral dada por*

$$f(q, p) \star g(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar} \right)^2 \int dq' dp' dq'' dp'' \exp \left(\frac{2\varrho i}{\hbar} \right) f(q', p') g(q'', p''), \quad (2.58)$$

em que a função $\varrho(q, p, q', p', q'', p'')$ é representada por

$$\varrho := \det \begin{vmatrix} q & p & 1 \\ q' & p' & 1 \\ q'' & p'' & 1 \end{vmatrix} = q(p' - p'') + p(q'' - q') + (q'p'' - p'q''). \quad (2.59)$$

Demonstração. Supondo que as funções $f(q, p)$ e $g(q, p)$ sejam bem comportadas e a integral (2.58) convirja, esta propriedade pode ser verificada notando que

$$f(q, p) = \int dq' dp' f(q', p') \delta(q' - q) \delta(p' - p). \quad (2.60)$$

Utilizando a forma integral da delta de Dirac,

$$\begin{aligned} \delta(q' - q) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int du e^{-iu(q'-q)/\hbar} \\ \delta(p' - p) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dv e^{-iv(p'-p)/\hbar} \end{aligned} \quad (2.61)$$

e substituindo as equações (2.61) na (2.60), encontramos

$$f(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^2 \int dq' dp' dudv f(q', p') \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}[u(q' - q) + v(p' - p)]\right\}. \quad (2.62)$$

Da propriedade 2.5.4 do operador estrela, o produto pode ser expresso na forma

$$\begin{aligned} f(q, p) \star g(q, p) &= f\left(q + \frac{i\hbar}{2}\vec{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2}\vec{\partial}_q\right) g(q, p) \\ &= \int dq' dp' dudv f(q', p') e^{\left\{-\frac{i}{\hbar}[u(q'-q)+v(p'-p)]\right\}} e^{\left\{\frac{1}{2}[v\partial_q - u\partial_p]\right\}} g(q, p). \end{aligned} \quad (2.63)$$

Lembrando que

$$e^{\frac{1}{2}(v\partial_q - u\partial_p)} g(q, p) = g\left(q + \frac{v}{2}, p - \frac{u}{2}\right), \quad (2.64)$$

e fazendo a transformação de variáveis

$$q'' = q + \frac{v}{2} \quad e \quad p'' = p - \frac{u}{2}, \quad (2.65)$$

obtém-se a relação

$$f(q, p) \star g(q, p) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2 4 \int dq' dp' dq'' dp'' f(q', p') e^{-\frac{2i}{\hbar}[(q''-q)(p'-p)-(p''-p)(q'-q)]} g(q'', p''), \quad (2.66)$$

que pode ser reorganizada e expressa finalmente como

$$f(q, p) \star g(q, p) = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \int e^{\frac{2oi}{\hbar}} f(q', p') g(q'', p'') dq' dp' dq'' dp''. \quad (2.67)$$

Nela, a função $\varrho(q, p, q', p', q'', p'')$ é representada pelo termo (2.59).

Propriedade 2.5.8. *A integral do produto estrela no espaço de fase. Sejam duas funções $f(q, p)$ e $g(q, p) \in C^\infty(\mathbb{R}^2)$; é válido que:*

$$\int dqdp f(q, p) \star g(q, p) = \int dqdp g(q, p) \star f(q, p) = \int dqdp f(q, p)g(q, p). \quad (2.68)$$

Demonstração. A importância desta propriedade está na possibilidade de usar o produto usual de funções em lugar do produto estrela ao efetuar a integral. Ela é válida quando as funções envolvidas são bem comportadas, anulando-se nos limites tendendo ao infinito,

e a integral converge. Esta propriedade é consequência da forma integral do produto estrela, apresentada na propriedade 2.5.7. Reordenando os termos da função ϱ , de forma a simplificar os cálculos, é possível escrever o produto estrela como

$$\int dqdp f(q, p) \star g(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^2 \int dqdpdq'dp'dq''dp'' f(q', p') g(q'', p'') \times \exp\left\{\frac{-2i}{\hbar} [p(q' - q'') + p'(q'' - q) + p''(q - q')]\right\}. \quad (2.69)$$

A exponencial do primeiro termo dentro dos colchetes representa uma delta de Dirac no seu formato integral. Veja que

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int dp \exp\left[-\frac{2i}{\hbar} p(q' - q'')\right] = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp\left[-\frac{i}{\hbar} p(q' - q'')\right] = \delta(q' - q''). \quad (2.70)$$

Desta forma, aplicando a propriedade usual da distribuição delta de Dirac, a expressão se torna

$$\int dqdp f(q, p) \star g(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right) \int dqdp'dq''dp'' f(q'', p') g(q'', p'') \times \exp\left\{\frac{-2i}{\hbar} [p'(q'' - q) + p''(q - q'')]\right\}, \quad (2.71)$$

cujos termos entre colchetes podem ser reagrupados como

$$\int dqdp f(q, p) \star g(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right) \int dqdp'dq''dp'' f(q'', p') g(q'', p'') \times \exp\left\{\frac{-2i}{\hbar} [q(p'' - p') + (p'q'' - p''q'')]\right\}. \quad (2.72)$$

Mais uma vez, identificando a delta de Dirac na forma integral

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int dq \exp\left[-\frac{2i}{\hbar} q(p'' - p')\right] = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dq \exp\left[-\frac{i}{\hbar} q(p'' - p')\right] = \delta(p'' - p'), \quad (2.73)$$

e aplicando a propriedade usual, encontra-se:

$$\int dqdp f(q, p) \star g(q, p) = \int dq''dp' f(q'', p') g(q'', p'). \quad (2.74)$$

Como as variáveis q'' e p' são mudas, pode-se fazer a transformação $q'' \rightarrow q$ e $p' \rightarrow p$ e obtém-se finalmente o resultado esperado.

2.6 Evolução temporal da função de Wigner

Vimos, em seções anteriores, como se dá a evolução temporal da função densidade na estatística clássica e na quântica. No formalismo do espaço de fase, o análogo é a função de Wigner, que carrega todas as informações do sistema. Nesta seção apresentaremos a evolução temporal da função de Wigner de duas formas distintas: a primeira, desenvolvida originalmente por Wigner em 1932, e a segunda utilizando a estrutura do produto estrela. Em ambos os casos será apresentada uma conexão com a equação de Liouville, apontando o limite clássico da teoria.

2.6.1 Via expansão de Taylor

Ao propor a função de quasiprobabilidade em 1932, Wigner analisou a evolução temporal da sua função. Partindo da equação de Schrödinger dependente do tempo, sabe-se que a função de estado e sua conjugada evoluem de acordo com as relações:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q) = - \sum_{k=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_k} \frac{\partial^2}{\partial q_k^2} \psi(q) + V(q) \psi(q) \quad (2.75)$$

e

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(q) = \sum_{k=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_k} \frac{\partial^2}{\partial q_k^2} \psi^*(q) - V(q) \psi^*(q). \quad (2.76)$$

Derivando parcialmente com relação ao tempo a definição (2.20) e usando as equações (2.75) e (2.76), após um desenvolvimento que inclui a expansão de Taylor do potencial, obtém-se a equação [9, 56]

$$\frac{\partial W}{\partial t} = - \sum_k^n \frac{p_k}{m_k} \frac{\partial W}{\partial q_k} + \sum_{\lambda_1, \dots, \lambda_n=1}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n - 1} \frac{1}{\lambda_1! \dots \lambda_n!} \frac{\partial^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n} V(q)}{\partial q_1^{\lambda_1} \dots \partial q_n^{\lambda_n}} \frac{\partial^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n} W}{\partial p_1^{\lambda_1} \dots \partial p_n^{\lambda_n}}. \quad (2.77)$$

Analisaremos a relação desta equação de evolução temporal com a equação de Liouville clássica (2.4). Para o caso unidimensional, onde $n = 1$, pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} &= - \frac{p}{m} \frac{\partial W}{\partial q} + \frac{2i}{\hbar} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{\lambda} \frac{1}{\lambda!} \frac{\partial^{\lambda} V(q)}{\partial q^{\lambda}} \frac{\partial^{\lambda} W}{\partial p^{\lambda}} \\ &= - \frac{p}{m} \frac{\partial W}{\partial q} + \frac{\partial V(q)}{\partial q} \frac{\partial W}{\partial p} + \frac{1}{3} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^2 \frac{\partial^3 V(q)}{\partial q^3} \frac{\partial^3 W}{\partial p^3} + \dots \end{aligned} \quad (2.78)$$

Observa-se que, se o hamiltoniano do sistema for independente do tempo e for composto por um potencial cujas derivadas superiores à segunda ordem forem nulas, a equação de Liouville clássica é recuperada. Com efeito, considerando o hamiltoniano estacionário

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q), \quad (2.79)$$

com o potencial do tipo oscilador:

$$V(q) = a + bq + cq^2, \quad (2.80)$$

deve-se observar que as derivadas do hamiltoniano e do potencial serão:

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial V}{\partial q}, \quad \frac{\partial^k V}{\partial q^k} = 0 \quad (k \geq 3),$$

e assim a equação (2.78) pode ser reescrita na forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} &= - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial W}{\partial q} + \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial W}{\partial p} \\ &= \{H, W\}, \end{aligned} \quad (2.81)$$

em que as chaves $\{\cdot, \cdot\}$ representam os parênteses de Poisson. Nota-se a semelhança dessa relação com a equação de Liouville clássica (2.4). Contudo, a função de Wigner não está diretamente associada à probabilidade.

2.6.2 Via transformação de Wigner-Weyl

A evolução temporal da função de Wigner pode ser obtida de outra forma, onde a conexão com a teoria clássica surge no limite clássico $\hbar \rightarrow 0$. Partindo da equação de Liouville-von Neumann (2.18):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = \hat{H} \hat{\rho} - \hat{H} \hat{\rho}$$

e aplicando em ambos os lados a transformação de Wigner-Weyl na forma (2.23), com o operador

$$(\pi\hbar)^{-1} \int dy \langle q+y | \cdot | q-y \rangle e^{\frac{2ipy}{\hbar}}, \quad (2.82)$$

obtém-se a relação:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[(\pi\hbar)^{-1} \int dy \langle q+y | \hat{\rho} | q-y \rangle e^{\frac{2ipy}{\hbar}} \right] = (\pi\hbar)^{-1} \int dy \langle q+y | \hat{H} \hat{\rho} | q-y \rangle e^{\frac{2ipy}{\hbar}} - (\pi\hbar)^{-1} \int dy \langle q+y | \hat{H} \hat{\rho} | q-y \rangle e^{\frac{2ipy}{\hbar}} \quad (2.83)$$

o que leva, da definição do produto estrela (2.36), a

$$i\hbar \frac{\partial W(q, p; t)}{\partial t} = h_w(q, p; t) \star W(q, p; t) - W(q, p; t) \star h_w(q, p; t). \quad (2.84)$$

Utilizando os parênteses de Moyal, definidos como:

$$\{a, b\}_M = \frac{1}{i\hbar} (a \star b - b \star a), \quad (2.85)$$

a evolução temporal adquire uma forma muito semelhante à equação de Liouville clássica, com os parênteses de Moyal substituindo os parênteses de Poisson, e a função de Wigner no lugar da função densidade:

$$\frac{\partial W(q, p; t)}{\partial t} = \{h_w, W\}_M. \quad (2.86)$$

Analisaremos agora o limite clássico mostrando que, quando $\hbar \rightarrow 0$, recupera-se a equação de Liouville clássica (2.4). Observa-se que, utilizando a identidade:

$$e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda}} - e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda}} = 2i \sin \left(\frac{\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda} \right),$$

o parêntese de Moyal pode ser escrito na forma:

$$\{f(q, p), g(q, p)\}_M = \frac{2}{\hbar} f(q, p) \sin \left[\frac{\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda} \right] g(q, p), \quad (2.87)$$

e a equação de evolução temporal se torna:

$$\frac{\partial W(q, p; t)}{\partial t} = \frac{2}{\hbar} h_w(q, p; t) \sin \left[\frac{\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda} \right] W(q, p; t). \quad (2.88)$$

No limite $\hbar \rightarrow 0$, a função seno pode ser aproximada pelo seu argumento, i.e.,

$$\sin \left[\frac{\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} \right] \approx \frac{\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} = \frac{\hbar}{2} \left[\overleftarrow{\partial} \overrightarrow{\partial} - \overrightarrow{\partial} \overleftarrow{\partial} \right], \quad (2.89)$$

onde notamos que a função de Wigner obedecerá a lei de evolução temporal da equação clássica (2.4), com o hamiltoniano transformado h_w no lugar da função hamiltoniana, ou seja:

$$\frac{\partial W(q, p; t)}{\partial t} = \frac{\partial h_w}{\partial q} \frac{\partial W}{\partial p} - \frac{\partial h_w}{\partial p} \frac{\partial W}{\partial q} = \{h_w, W\} \quad (2.90)$$

e, ainda,

$$\dot{q} = \frac{\partial h_w}{\partial p} \quad \text{e} \quad \dot{p} = -\frac{\partial h_w}{\partial q}. \quad (2.91)$$

2.7 Equação de autovalor da função de Wigner

Até aqui vimos que os operadores da mecânica quântica no espaço de Hilbert, no contexto da formulação usual, correspondem a funções no espaço de fase através do mapeamento de Weyl. Além disto, o mapeamento do operador densidade leva à função de Wigner, que contém as informações do sistema.

Observando a evolução temporal da função de Wigner, via transformação de Wigner-Weyl, nota-se que a estrutura algébrica é de certa forma preservada, com uso do produto não comutativo e os parênteses de Moyal. Com efeito, obtém-se no espaço de fase uma equação de evolução temporal (vide 2.90) semelhante à equação de Liouville-von Neumann, que governa a evolução temporal da matriz densidade.

Isto leva a pensar na existência de uma equação de autovalores no espaço de fase, com estrutura semelhante à equação de Schödinger independente do tempo

$$\hat{H}(\hat{Q}, \hat{P})|q\rangle = E|q\rangle \quad (2.92)$$

que, no espaço de fase, seria dada por

$$h_w(q, p) \star W(q, p) = W(q, p) \star h_w(q, p) = EW(q, p). \quad (2.93)$$

De fato, tal expressão existe e nesta seção iremos demonstrar a sua validade. Considere o hamiltoniano na forma

$$\hat{H}(\hat{Q}, \hat{P}) = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\hat{Q}), \quad (2.94)$$

e suponha que $W(q, p)$ seja a função de Wigner associada ao autoestado $\psi(q)$ do hamiltoniano \hat{H} . Desta forma, ela será dada pela definição (2.20) que, de forma equivalente para uma dimensão, pode ser escrita como:

$$W(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz \exp\left(\frac{ip}{\hbar}z\right) \psi^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi\left(q - \frac{z}{2}\right). \quad (2.95)$$

Tomando o produto estrela do hamiltoniano transformado pelo mapeamento de Wigner-Weyl, tem-se

$$h_w(q, p) \star W(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz \left[\frac{1}{2m} \left(p - \frac{i\hbar}{2} \partial_q \right)^2 + V \left(q + \frac{i\hbar}{2} \partial_p \right) \right] \times \exp \left(\frac{ip}{\hbar} z \right) \psi^\dagger \left(q + \frac{z}{2} \right) \psi \left(q - \frac{z}{2} \right). \quad (2.96)$$

Expandindo o termo quadrático entre parênteses e realizando integrações por partes em p , é possível reagrupar o resultado na forma

$$h_w(q, p) \star W(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz \left[\frac{1}{2m} \left(\partial_z - \frac{1}{2} \partial_q \right)^2 + V \left(q + \frac{i\hbar}{2} \partial_p \right) \right] \times \exp \left(\frac{ip}{\hbar} z \right) \psi^\dagger \left(q + \frac{z}{2} \right) \psi \left(q - \frac{z}{2} \right). \quad (2.97)$$

Observa-se que, ao atuar os operadores entre parênteses sobre a autofunção conjugada ψ^\dagger , o termo é anulado, uma vez que

$$\left(\partial_z - \frac{1}{2} \partial_q \right) \psi^\dagger \left(q + \frac{z}{2} \right) = \frac{1}{2} \psi^\dagger \left(q + \frac{z}{2} \right) - \frac{1}{2} \psi^\dagger \left(q + \frac{z}{2} \right) = 0, \quad (2.98)$$

cuja notação ponto representa a derivada com relação ao argumento. Desta forma, ψ^\dagger comuta com os operadores e pode ser posta do lado esquerdo da expressão. Além disto, a equação de Schrödinger independente do tempo na representação das coordenadas pode ser reescrita na forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_z - \frac{1}{2} \partial_q \right)^2 + V \left(q - \frac{z}{2} \right) \right] \psi \left(q - \frac{z}{2} \right) = E \psi \left(q - \frac{z}{2} \right), \quad (2.99)$$

onde foi preciso fazer a transformação de coordenadas $q \rightarrow q - \frac{z}{2}$. Com isto, a (2.97) se torna

$$h_w(q, p) \star W(q, p) = E \left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz \exp \left(\frac{ip}{\hbar} z \right) \psi^\dagger \left(q + \frac{z}{2} \right) \psi \left(q - \frac{z}{2} \right) \right\} = EW(q, p), \quad (2.100)$$

como queríamos demonstrar.

Percebemos que a função de Wigner $W(q, p)$, associada a um autoestado $\psi(q)$, deverá obedecer a uma equação de Schrödinger com estrutura algébrica semelhante à da formulação usual mas regida pelo produto estrela, e operadores representados por funções no espaço de fase. Esta equação de certa forma permite a obtenção da função de Wigner. No [Capítulo 3](#) será apresentada uma formulação da mecânica quântica no espaço de fase autocontida (no sentido que não usa explicitamente a transformação de Wigner-Weyl) onde a obtenção desta relação surge naturalmente.

2.8 Utilização da função de Wigner

A descrição da mecânica quântica, via formalismo no espaço de fase, possui aplicação em diferentes áreas [11], como óptica e informação quântica, física da matéria condensada,

eletrônica quântica e outras. Nesta seção apresentaremos algumas passagens que evidenciam a importância da função de Wigner neste formalismo.

2.8.1 O oscilador harmônico no espaço de fase

O oscilador harmônico é um sistema de grande interesse na física pois pode, por exemplo, ser utilizado para muitos sistemas físicos sob ação de uma força restauradora próximo a um ponto de equilíbrio estável, como aproximação de segunda ordem numa abordagem perturbativa. Neste cenário, conhecer a função de Wigner desse sistema permite compreender aproximadamente vários outros sistemas. Nesta subseção encontraremos a função de Wigner desse sistema a partir da transformada de Fourier da solução obtida via formalismo de Schrödinger; esse resultado teórico será comparado com o obtido experimentalmente na próxima seção.

O hamiltoniano clássico do oscilador harmônico unidimensional, de massa m e frequência ω , é dado por:

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (2.101)$$

Na formulação de Schrödinger, usando a representação das coordenadas, posição e momentum adquirem as formas:

$$\hat{x} \rightarrow x; \quad \hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (2.102)$$

e a equação a ser resolvida, para encontrar a função de estado $\psi(x)$, torna-se:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (2.103)$$

A solução da equação (2.103) é bem conhecida na literatura e pode ser encontrada de diferentes formas [109, 110] sendo em uma delas através do método de expansão em série de potências. Outra forma possível de resolvê-la é através do formalismo algébrico proposto por Dirac, que também será utilizado no [Capítulo 8](#). Há, entretanto, outras possibilidades; no presente trabalho esta equação será resolvida no [Capítulo 4](#), usando o método Nikiforov-Uravov. A solução, em termos dos polinômios de Hermite, é:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left(\frac{\kappa^2}{\pi} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2}(\kappa x)^2\right) H_n(\kappa x), \quad (2.104)$$

em que

$$\kappa = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \quad (2.105)$$

Utilizando essa solução na transformada de Wigner (2.20) para uma dimensão:

$$W(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int dy \psi^*(x+y)\psi(x-y)e^{+\frac{i}{\hbar}2py},$$

obtemos a relação:

$$W_n(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \frac{1}{2^n n!} \frac{e^{-(\kappa x)^2}}{\sqrt{\pi}} \int d\xi \exp \left[-\xi^2 - \frac{i}{\hbar} 2p \frac{\xi}{\kappa} \right] H_n(\kappa x + \xi) H_n(\kappa x - \xi), \quad (2.106)$$

onde definimos a constante $\xi = \kappa y$. Completando quadrados no expoente do integrando,

$$-\xi^2 - 2\xi \left(\frac{ip}{\hbar\kappa} \right) - \left(\frac{ip}{\hbar\kappa} \right)^2 - \left(\frac{p}{\hbar\kappa} \right)^2 = \left(\xi + \frac{ip}{\hbar\kappa} \right)^2 - \left(\frac{p}{\hbar\kappa} \right)^2, \quad (2.107)$$

e definindo a transformação de coordenadas

$$\eta = \xi + \frac{ip}{\hbar\kappa}, \quad (2.108)$$

podemos escrever (2.106) como:

$$W_n(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \frac{1}{2^n n!} \frac{e^{-\left((\kappa x)^2 + \left(\frac{p}{\hbar\kappa} \right)^2 \right)}}{\sqrt{\pi}} \int d\eta e^{-\eta^2} H_n(\eta + z_1) H_n(-\eta - z_2), \quad (2.109)$$

com as variáveis z_1 e z_2 dadas por:

$$z_1 = \kappa x - \frac{ip}{\hbar\kappa} \quad z_2 = -\kappa x - \frac{ip}{\hbar\kappa}. \quad (2.110)$$

Através da identidade de simetria dos polinômios de Hermite

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x), \quad (2.111)$$

da relação integral entre os polinômios de Hermite e os polinômios de Laguerre [103]

$$\int d\eta e^{-\eta^2} H_n(\eta + z_1) H_n(\eta + z_2) = 2^n n! \sqrt{\pi} L_n(-2z_1 z_2) \quad (2.112)$$

e observando que:

$$\begin{aligned} z_1 z_2 &= \left(\kappa x - \frac{ip}{\hbar\kappa} \right) \left(-\kappa x - \frac{ip}{\hbar\kappa} \right) \\ &= - \left(\left(\frac{p}{\hbar\kappa} \right)^2 + (\kappa x)^2 \right) \\ &= - \frac{2}{\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \\ &= - \frac{2}{\hbar\omega} H(x, p). \end{aligned} \quad (2.113)$$

podemos finalmente escrever a função de Wigner para o oscilador harmônico unidimensional

$$W_n(x, p) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(x, p)} L_n \left(\frac{4}{\hbar\omega} H(x, p) \right). \quad (2.114)$$

Os gráficos ¹ das figuras 1, 2, 3 e 4 mostram a comparação entre a função de estado na formulação usual e sua respectiva função de Wigner para o estado fundamental e os três

¹ Nos gráficos a seguir, leia-se vírgula onde houver ponto. O mesmo ocorre para os demais gráficos apresentados no presente trabalho.

primeiros estados excitados do oscilador harmônico. É possível constatar que a densidade de probabilidade $|\psi_i(x)|$ é sempre positiva, enquanto que a função de Wigner apresenta valores positivos e negativos.

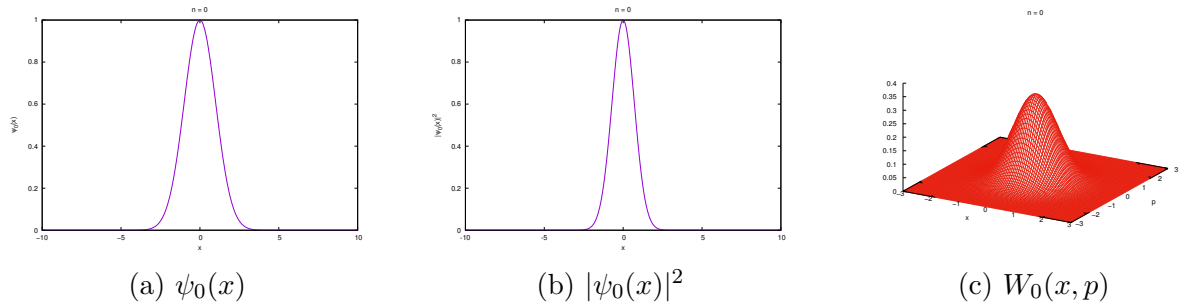


Figura 1 – Comparação entre a função de estado do oscilador, seu módulo quadrado e sua correspondente função de Wigner para $n = 0$.

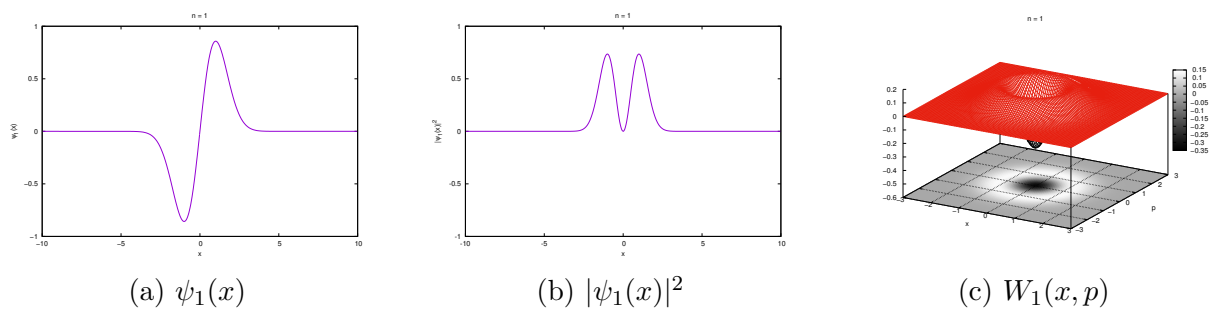


Figura 2 – Comparação entre a função de estado do oscilador, seu módulo quadrado e sua correspondente função de Wigner para $n = 1$.

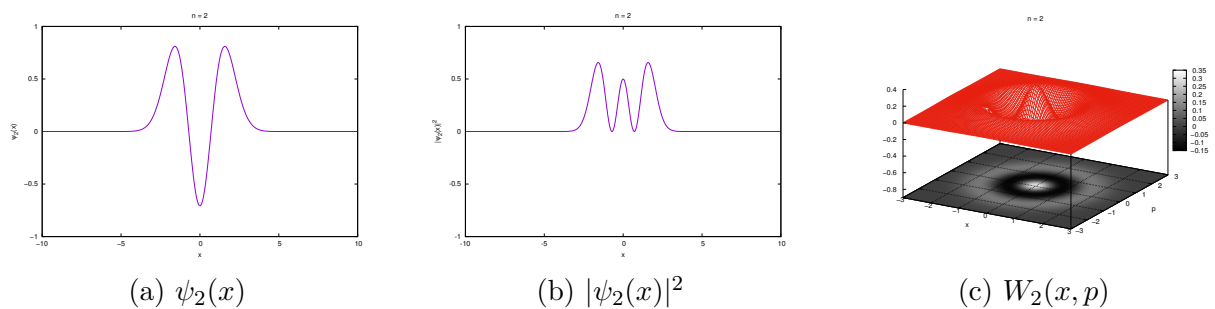


Figura 3 – Comparação entre a função de estado do oscilador, seu módulo quadrado e sua correspondente função de Wigner para $n = 2$.

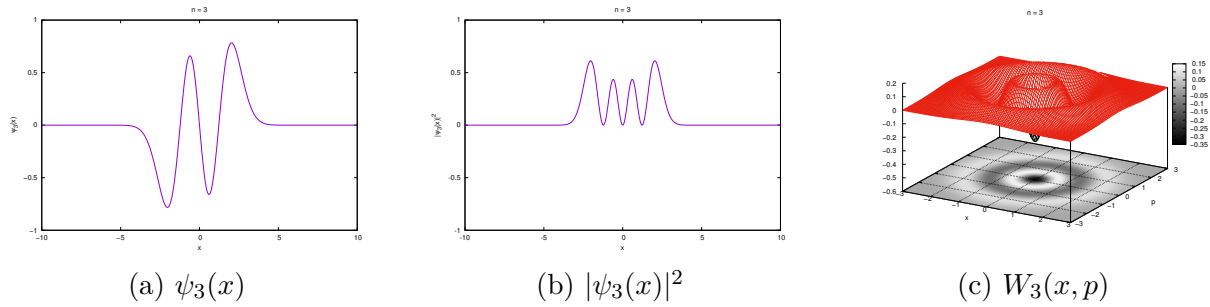


Figura 4 – Comparação entre a função de estado do oscilador, seu módulo quadrado e sua correspondente função de Wigner para $n = 3$.

A função de Wigner pode ser medida em laboratório através de técnicas de tomografia quântica [29, 33–39], podendo ser utilizada na caracterização do estado de sistemas fotônicos estudados na área de óptica e informação quântica. Como exemplo, a Figura 5 apresenta a função de Wigner do oscilador, obtida experimentalmente por Leibfried et al. [1] através de experimentos com íons ${}^9\text{Be}^+$ aprisionados em cavidade. Observa-se a concordância com o resultado obtido teoricamente, na Figura 2c.

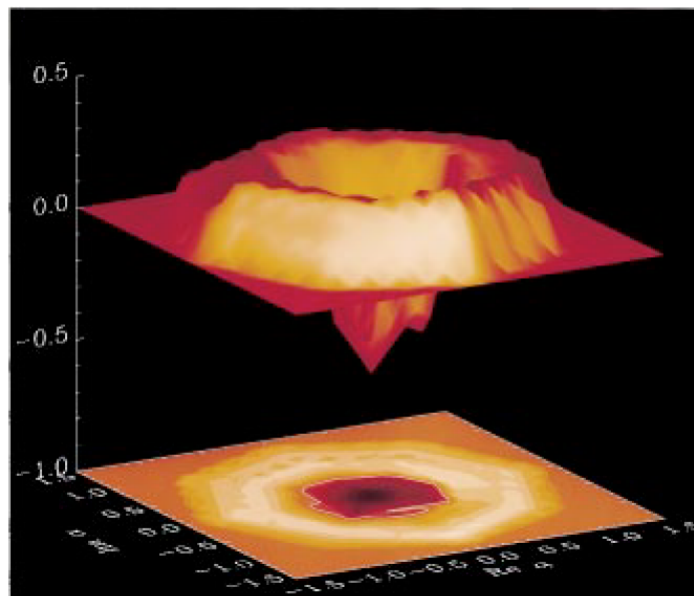


Figura 5 – Função de Wigner para o oscilador no primeiro estado excitado obtida experimentalmente por Leibfried et al. [1].

2.8.2 Indicador de não-classicalidade

Como vimos, a função proposta por Wigner como correção da estatística quântica traz muitas informações de probabilidade, mas não pode ser considerada uma verdadeira distribuição de probabilidade por poder assumir valores negativos, no geral. De fato, Hudson [111] mostrou que ela representará uma probabilidade verdadeira quando ψ for uma exponencial de um polinômio quadrático, como pode ser verificado na Figura 1c, referente ao estado fundamental do oscilador harmônico.

Devido a suas características, a função de Wigner permite boa visualização de correlações e interferências quânticas no espaço de fase. Sabe-se, da literatura, que os valores negativos de $W(q, p, t)$ evidenciam características de sistemas quânticos como estados de superposição, caoticidade [25–28] e emaranhamento em sistemas quânticos [29, 30]. Quanto mais negativa a função de Wigner, mais não-clássico será o sistema [112].

Para estados superpostos, encontram-se na literatura estudos baseados nesta propriedade [105–107]. Em especial, Kenfack e Zyczkowski [31] propuseram um indicador de *não-classicalidade* baseado no volume da região negativa da função de Wigner. Seja W_ψ a função de Wigner associada a um estado ψ ; o índice de não-classicalidade $\eta(\psi)$ será dado por

$$\eta(\psi) = \iint dqdp [|W_\psi(q, p)| - W_\psi(q, p)]. \quad (2.115)$$

No caso em que a função de Wigner é normalizada, esta relação também pode ser representada como

$$\eta(\psi) = \iint dqdp |W_\psi(q, p)| - 1. \quad (2.116)$$

Este indicador de não-classicalidade também tem sido utilizado no estudo de sistemas quânticos que apresentam caoticidade. De fato, Kowalewska-Kudłazyk et al. [113], baseando-se no indicador $\eta(\psi)$, propuseram um indicador de caos quântico em sistemas e obtiveram êxito no estudo. Em trabalhos recentes Paiva [67, 112], ao estudar os análogos quânticos no espaço de fase de sistemas clássicos caóticos, verificou que o valor do índice de não-classicalidade cresce com o aumento da energia do sistema. No presente trabalho nós o utilizaremos para estudar as funções de Wigner do potencial de Yukawa.

3 A Mecânica Quântica Simplética

A Mecânica Quântica Simplética é uma formulação da Mecânica Quântica não relativística no espaço de fase, construída sobre uma representação do grupo de Galilei. Esse formalismo é autocontido, sendo possível a obtenção da função de Wigner do sistema, bem como o estudo da dinâmica de um sistema de interesse, sem passar pelo formalismo usual isto é, sem resolver a equação de Schrödinger ou a equação de Liouville-von Neumann. Neste capítulo apresentaremos as principais ideias deste formalismo baseando-nos no trabalho de Oliveira et al. [50] e outras referências presentes na literatura [49, 53–56, 58].

3.1 Espaço de Hilbert e a estrutura simplética

Seja \mathbb{Q} uma variedade diferenciável n -dimensional; cada ponto de \mathbb{Q} é especificado por um ponto $q = (q^1, q^2, \dots, q^n)$. O espaço cotangente $T^*\mathbb{Q}$ terá pontos denotados por¹

$$(q, p) = (q^1, q^2, \dots, q^n, p^1, p^2, \dots, p^n),$$

e pode ser munido da estrutura simplética introduzindo a 2-forma

$$\omega = dq \wedge dp = \sum_{i=1}^n dq^i \wedge dp^i, \quad (3.1)$$

chamada forma simplética. Consideremos o operador bi-diferencial que atua nas funções de classe C^∞ em $T^*\mathbb{Q}$, dado por

$$\Lambda = \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial}}, \quad (3.2)$$

que, quando aplicado em duas funções $f(q, p)$ e $g(q, p)$, resulta em:

$$\omega(f\wedge, g\wedge) = f \wedge g = \{f, g\}, \quad (3.3)$$

onde $\{f, g\}$ é o parêntesis de Poisson, e f e g são campos vetoriais dados por:

$$h\Lambda = X_h = \frac{\partial h}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial h}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p}. \quad (3.4)$$

O espaço $T^*\mathbb{Q}$, munido com esta estrutura simplética, é chamado espaço de fase e será denotado por Γ .

Pode-se construir uma estrutura do tipo espaço de Hilbert sobre Γ . Para isto, consideremos o conjunto de funções complexas $\phi(q, p)$ de quadrado integrável, isto é,

$$\int_{\Gamma} dq dp \phi^\dagger(q, p) \phi(q, p) < \infty. \quad (3.5)$$

¹ Por simplicidade de notação usaremos p^i em lugar de p_i , $i=1,2,\dots,n$.

que é uma forma bilinear. Escrevendo $\phi(q, p) = \langle q, p | \phi \rangle$ tem-se que, como $\langle q, p | \phi \rangle$ é de quadrado integrável, ela pode ser normalizada, isto é,

$$\langle \phi | \phi \rangle = \int dq dp \langle \phi | q, p \rangle \langle q, p | \phi \rangle = 1 \quad (3.6)$$

em que $\langle \phi |$ é o vetor dual de $|\phi\rangle$ e podemos adotar a relação de completeza [50, 54]

$$\int dq dp |q, p\rangle \langle q, p| = 1. \quad (3.7)$$

O subespaço das funções complexas de quadrado integrável, que obedecem as relações (3.5) e (3.6), é definido como espaço de Hilbert Simplético e será denotado por \mathcal{H}_Γ .

3.2 A representação do grupo de Galilei no espaço de fase

Na seção anterior foi construída a estrutura do espaço de fase. Nesta seção apresentaremos o grupo de Galilei, que surge das simetrias da natureza e é utilizado na construção da dinâmica não relativística. Em especial, estudaremos sua representação no espaço de fase.

3.2.1 As simetrias do espaço-tempo

As leis da natureza devem ser invariantes sob certas simetrias do espaço-tempo incluindo rotações, translações e transformações entre referenciais que se movem, em relação ao outro, com velocidade uniforme [2]. O conjunto de transformações no \mathbb{R}^3 , que mantém tal invariância para velocidades muito menores que a velocidade da luz, compõe o chamado grupo de Galilei \mathcal{G} . Tais transformações possuem a forma:

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = R\vec{x} + \vec{a} + \vec{v}t \quad (3.8)$$

$$t \rightarrow t' = t + s, \quad (3.9)$$

em que R representa a rotação (geralmente representada por matrizes 3x3), \vec{a} é a translação espacial, \vec{v} é a velocidade do sistema de referência que está em movimento, e s é a translação temporal.

Cada elemento $\tau = \tau(R, \vec{a}, \vec{v}, s)$ do grupo compreende um conjunto de 10 parâmetros que caracteriza uma transformação, sendo três para a rotação (ângulos de Euler), três para a velocidade \vec{v} , três para a translação espacial e um para a translação temporal.

Na mecânica quântica usual cada elemento τ está relacionado a um operador $U(t)$, que deve ser unitário (ou antiunitário) para que o produto interno seja preservado. Desta forma, um vetor de estado $|\psi\rangle$ e um operador \hat{A} transformam-se como:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = U(\tau)|\psi\rangle \quad (3.10)$$

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A}' = U(\tau)\hat{A}U^{-1}(\tau). \quad (3.11)$$

Sendo \mathcal{G} um grupo de Lie, uma transformação finita pode ser construída considerando variações infinitesimais de seus parâmetros, uma vez que uma transformação finita pode ser considerada como a composição de um grande número de pequenas transformações. Neste caso, o operador unitário que representa \mathcal{G} em um espaço vetorial pode ser expresso como um produto de exponenciais:

$$U(\tau) = \prod_{i=1}^{10} e^{iS_\mu K_\mu}, \quad (3.12)$$

em que S_μ corresponde ao μ -ésimo parâmetro do grupo, e K_μ é o seu gerador hermitiano associado.

O grupo de Galilei possui 10 geradores associados a transformações como listado na tabela abaixo, onde o índice j assume os valores 1, 2 e 3.

Gerador	Descrição	Transformação no \mathbb{R}^3	Operador unitário
\hat{J}_j	Rotação em torno do eixo j	$\vec{x} \rightarrow R_j(\theta_j)\vec{x}$	$e^{-i\theta_j \hat{J}_j}$
\hat{P}_j	Translação espacial ao longo do eixo j	$x_j \rightarrow x_j + a_j$	$e^{-i\alpha_j \hat{P}_j}$
\hat{G}_j	Velocidade do referencial ao longo do eixo j	$x_j \rightarrow x_j + v_j t$	$e^{iv_j \hat{G}_j}$
\hat{H}	Translação temporal	$t \rightarrow t + s$	$e^{is\hat{H}}$

Tabela 1 – Geradores das transformações infinitesimais de \mathcal{G} [2].

As relações de comutação entre tais geradores definem a álgebra de Lie do grupo, cujas constantes de estrutura são características independentes de representação. Na realidade, tem-se que a álgebra de Lie do grupo de Galilei é dada por:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_i, \hat{J}_j] &= \epsilon_{ijk} \hat{J}_k & [\hat{J}_i, \hat{H}] &= 0 & [\hat{G}_i, \hat{H}] &= \hat{P}_i \\ [\hat{J}_i, \hat{G}_j] &= \epsilon_{ijk} \hat{G}_k & [\hat{G}_i, \hat{G}_j] &= 0 & [\hat{J}_i, \hat{J}_j] &= 0 \\ [\hat{J}_i, \hat{P}_j] &= \epsilon_{ijk} \hat{P}_k & [\hat{G}_i, \hat{P}_j] &= m\delta_{ij}\mathbb{1} & [\hat{P}_i, \hat{H}] &= 0, \end{aligned} \quad (3.13)$$

onde ϵ_{ijk} é o símbolo de Levi-Civita.

Existem diferentes representações para tais geradores. De fato, pode-se construir a mecânica quântica usual partindo das relações da Tabela 1 e utilizando os invariantes de Casimir:

$$I_1 = H - \frac{\vec{P}^2}{2m} \quad (3.14)$$

e

$$I_2 = \left(\vec{J} - \frac{1}{m} \vec{K} \times \vec{P} \right)^2 \quad (3.15)$$

em que $\vec{P}^2 = P_1^2 + P_2^2 + P_3^2$, $\vec{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$ e $\vec{K}^2 = K_1^2 + K_2^2 + K_3^2$.

A formulação de Schrödinger na representação das coordenadas pode, por exemplo, ser obtida [49] com as representações:

$$\hat{P}_i \psi(q) = -i\hbar \frac{\partial \psi(q)}{\partial q_i} \quad e \quad \hat{Q}_i \psi(q) = q_i \psi(q) \quad (3.16)$$

enquanto que, na representação dos momentos,

$$\hat{P}_i \phi(p) = p_i \phi(p) \quad e \quad \hat{Q}_i \phi(p) = i\hbar \frac{\partial \phi(p)}{\partial p_i}. \quad (3.17)$$

3.2.2 Representação no espaço de fase

Dentre as representações possíveis para os geradores de \mathcal{G} há aquela que conduz à MQS, ou seja, uma representação no espaço de Hilbert \mathcal{H}_Γ . Para isto, constrói-se uma transformação unitária $U : \mathcal{H}_\Gamma \rightarrow \mathcal{H}_\Gamma$ de modo a manter $\langle \phi_i | \phi_i \rangle$ dado por (3.6) invariante. E considerando o operador Λ definido em (3.2), utiliza-se o mapeamento $e^{\frac{i\hbar}{2}\Lambda} = \star : \Gamma \times \Gamma \rightarrow \Gamma$ baseado no produto estrela ou produto de Weyl,

$$f \star g = f(q, p) \exp \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q \right) \right] g(q, p). \quad (3.18)$$

para obter-se operadores $f\star$. Segue então que, sendo p_i e q_i pertencentes a Γ temos os operadores:

$$\hat{P}_i := p_i \star = p_i \mathbb{1} - \frac{i\hbar}{2} \partial_{q_i} \quad (3.19)$$

$$\hat{Q}_i := q_i \star = q_i \mathbb{1} + \frac{i\hbar}{2} \partial_{p_i}, \quad (3.20)$$

e construindo demais operadores como:

$$\hat{G}_i := g_i \star = (mq_i - tp_i) \star = m\hat{Q}_i - t\hat{P}_i \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} \hat{J}_i &:= \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} \hat{Q}_j \hat{P}_k \\ &= \sum_{j,k} \left(\epsilon_{ijk} q_j p_k - \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{ijk} q_j \frac{\partial}{\partial q_k} + \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{ijk} p_j \frac{\partial}{\partial p_k} + \frac{\hbar^2}{4} \epsilon_{ijk} \frac{\partial^2}{\partial q_j \partial p_k} \right) \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \hat{H} &:= \frac{\hat{P}^2}{2m} = \frac{1}{2m} (\hat{P}_1^2 + \hat{P}_2^2 + \hat{P}_3^2) \\ &= \frac{1}{2m} \left[\left(p_1 - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_1} \right)^2 + \left(p_2 - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_2} \right)^2 + \left(p_3 - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_3} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Calculando as relações de comutação entre os operadores (3.19-3.23) [49, 58] mostra-se que satisfazem as relações de comutação (3.13), e portanto obedecem a álgebra de Lie do grupo de Galilei. Tal representação constitui a base da MQS.

Até então tais operadores não possuem significado físico associado. Mas, observando a transformação dos operadores \hat{P} e \hat{Q} , com a transformação gerada pelo *boost* \hat{G} , nota-se que:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} v \cdot \hat{G}} \hat{Q}_j e^{\frac{i}{\hbar} v \cdot \hat{G}} = \hat{Q}_j + v_j t \quad (3.24)$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar} v \cdot \hat{G}} \hat{P}_j e^{\frac{i}{\hbar} v \cdot \hat{G}} = \hat{P}_j + mv_j \quad (3.25)$$

e, além disto, obedecem as relações de comutação de Heisenberg:

$$[\hat{Q}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{Q}_i, \hat{Q}_j] = 0, \quad [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0. \quad (3.26)$$

Assim, \hat{Q} e \hat{P} podem ser considerados como observáveis físicos de posição e momento, respectivamente, uma vez que se transformam como tal sob a ação do *boost*. Como consequência, os geradores \hat{J}_i são interpretados como operadores de momento angular, e \hat{H} é o operador Hamiltoniano.

Os invariantes de Casimir, que comutam com todos os demais geradores desta álgebra, são:

$$I_1 = \hat{H} - \frac{\hat{P}^2}{2m}, \quad I_2 = \hat{J} - \frac{1}{m}\hat{G} \times \hat{P}, \quad (3.27)$$

em que o momento angular \hat{J} pode incluir o grau de liberdade de spin, ou seja, $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

Dadas as definições e interpretações da representação dos geradores do grupo de Galilei no espaço de fase, veremos que é possível construir uma base para \mathcal{H}_Γ . Para isto, é possível escrever as equações (3.19) e (3.20):

$$\hat{Q}_j = \frac{1}{2}(\bar{Q}_j + i\hbar\partial_{p_j}) \quad e \quad \hat{P}_j = \frac{1}{2}(\bar{P}_j + i\hbar\partial_{q_j}), \quad (3.28)$$

onde os operadores \bar{Q}_j e \bar{P}_j foram definidos como:

$$\bar{Q}_j = 2q_j\mathbb{1} \quad e \quad \bar{P}_j = 2p_j\mathbb{1} \quad (3.29)$$

e, quando submetidos à ação do *boost*, se transformam como posição e momento. De fato,

$$e^{-\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}}\bar{Q}_je^{\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}} = \bar{Q}_j + v_jt \quad (3.30)$$

e

$$e^{-\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}}\bar{P}_je^{\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}} = \hbar P_j + mv_j. \quad (3.31)$$

Contudo, tais operadores não obedecem as relações de comutação de Heisenberg, uma vez que

$$[Q_i, P_j] = 0, \quad (3.32)$$

o que impede de considerá-los como observáveis quânticos associados à posição e ao momento. Por outro lado, podemos utilizá-los para construir uma base $\{|q, p\rangle\}$, de modo que q e p sejam autovalores que satisfazem simultaneamente a:

$$\bar{Q}_j|q, p\rangle = q_j|q, p\rangle \quad e \quad \bar{P}_j|q, p\rangle = p_j|q, p\rangle, \quad (3.33)$$

onde

$$\langle q, p|q', p'\rangle = \delta(q - q')\delta(p - p'), \quad (3.34)$$

valendo a relação de completeza

$$\int dqdp |q, p\rangle\langle q, p| = 1. \quad (3.35)$$

Com isto, para um vetor de estado qualquer $|\psi\rangle$ pertencente a \mathcal{H}_Γ , podemos escrever:

$$\psi(q, p) = \langle q, p | \psi \rangle, \quad \psi^\dagger(q, p) = (\langle q, p | \psi \rangle)^\dagger = \langle \psi | q, p \rangle. \quad (3.36)$$

Em síntese, vimos que se pode construir uma mecânica quântica em \mathcal{H}_Γ através de representação do grupo de Galilei por operadores-estrela obtidos de funções pertencentes a Γ e o produto estrela (\star). Os autovalores dos operadores \bar{Q} e \bar{P} , que não são os observáveis posição e momento mas se transformam como tais, geram uma base sobre Γ , permitindo representar um estado $|\psi\rangle$ de \mathcal{H}_Γ . Contudo, a interpretação de tal estado não se dá como na mecânica quântica usual, em termos da densidade de probabilidade; sua interpretação será discutida quando fizermos a conexão da MQS com o formalismo de Wigner.

3.3 A dinâmica de funções e observáveis

Na seção anterior foi visto um caminho para a construção de um formalismo da mecânica quântica no espaço de fase através da definição de operadores estrela que obedecem à álgebra de Lie do grupo de Galilei. Nesta seção veremos como se dá a evolução temporal de observáveis, vetores de estado e dos elementos da matriz densidade.

3.3.1 Variação temporal de observáveis

Utilizando a base construída com os autovetores simultâneos dos operadores \bar{Q} e \bar{P} , desenvolvida na seção anterior, podemos projetar vetores de estado em \mathcal{H}_Γ . Seja $|\alpha\rangle$ um vetor de estado; quando projetado sobre $\{|q, p\rangle\}$, encontramos funções nas variáveis q e p , ou seja:

$$\psi_\alpha(q, p) = \langle q, p | \alpha \rangle. \quad (3.37)$$

Utilizando a relação de completeza dada pela eq. (3.35), temos para os kets $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ em \mathcal{H}_Γ :

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \langle \alpha | \left(\int dq dp |q, p\rangle \langle q, p| \right) | \beta \rangle = \int dq dp \phi_\alpha^\dagger(q, p) \phi_\beta(q, p) \quad (3.38)$$

onde

$$\phi_\alpha^\dagger(q, p) = \langle q, p | \alpha \rangle^\dagger = \langle \alpha | q, p \rangle \quad e \quad \phi_\beta(q, p) = \langle q, p | \beta \rangle \quad (3.39)$$

Utilizando-se a propriedade 2.5.8 do produto estrela, com relação a integrais em Γ , é possível reescrever a expressão (3.38), como:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \int dq dp \phi_\alpha^\dagger(q, p) \star \phi_\beta(q, p). \quad (3.40)$$

Seja \hat{A} um observável, portanto operador auto-adjunto; então, quando aplicado em $|\alpha\rangle$, tem-se

$$\langle q, p | \hat{A} | \alpha \rangle = \int dq' dp' \langle q, p | \hat{A} | q', p' \rangle \langle q', p' | \alpha \rangle. \quad (3.41)$$

Assumindo o elemento de matriz na forma

$$\langle q, p | \hat{A} | q', p' \rangle = \hat{A}(q, p) \delta(q - q') \delta(p - p'), \quad (3.42)$$

é imediato que

$$\langle q, p | \hat{A} | \alpha \rangle = \hat{A}(q, p) \phi_\alpha(q, p). \quad (3.43)$$

O operador-estrela $\hat{A}(q, p)$ é, por construção, associado a uma função $a(q, p)$ pertencente a Γ , através do produto estrela

$$\hat{A}(q, p) = a(q, p) \star. \quad (3.44)$$

O valor esperado de um observável para um estado $|\alpha\rangle$, será:

$$\langle \hat{A} \rangle_\alpha = \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = \int dq' dp' dq'' dp'' \langle \alpha | q', p' \rangle \langle q', p' | \hat{A} | q'', p'' \rangle \langle q'', p'' | \alpha \rangle, \quad (3.45)$$

em que foi utilizada duplamente a relação de completeza e, novamente, a propriedade 2.5.8 do produto estrela.

Buscaremos analisar a evolução temporal. Na seção anterior vimos que $\hat{H} = h(q, p) \star$ é a representação do gerador de evolução temporal. Dessa forma, de acordo com a expressão (3.11), podemos escrever

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \hat{A} e^{-\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \quad (3.46)$$

que, quando derivada parcialmente em t, fornece:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) = \hat{A}(t) \hat{H} - \hat{H} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}] \quad (3.47)$$

que é a equação de movimento de Heisenberg.

Ao substituir a expressão (3.46) em (3.45), é possível obter um outra representação para a expressão do valor esperado. Antes, definamos a exponencial estrela [49]

$$e^{\frac{it}{\hbar} h(q, p)} := 1 + \left(\frac{it}{\hbar}\right) h(q, p) + \frac{1}{2!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^2 h \star h + \frac{1}{3!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^3 h \star h \star h + \dots \quad (3.48)$$

Dessa forma, o valor esperado de \hat{A} será:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle_\alpha = \int dq dp \psi_\alpha^\dagger(q, p) \star e^{\frac{it}{\hbar} h} \star \hat{A} \star e^{-\frac{it}{\hbar} h} \star \psi_\alpha(q, p). \quad (3.49)$$

Considerando por (3.10) as funções de estado com dependência no tempo, como:

$$\Psi_\alpha(q, p; t) := e^{-\frac{it}{\hbar} h} \star \psi_\alpha(q, p) \quad (3.50)$$

$$\Psi_\alpha^\dagger(q, p; t) := \psi_\alpha^\dagger(q, p) \star e^{\frac{it}{\hbar} h}, \quad (3.51)$$

o valor esperado do operador adquire a forma:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}(t) \rangle_\alpha &= \int dq dp \Psi_\alpha^\dagger(q, p; t) \star \hat{A} \star \Psi_\alpha(q, p; t) \\ &= \int dq dp \Psi_\alpha^\dagger(q, p; t) \hat{A} \Psi_\alpha(q, p; t), \end{aligned} \quad (3.52)$$

onde o operador agora é fixo num instante de tempo e a função de estado muda com o tempo, como na descrição de Schrödinger.

3.3.2 A equação de Schrödinger no espaço de fase

Também é possível obter uma expressão para a evolução temporal das funções Ψ_α que, por definição, são dependentes do tempo. Diferenciando a equação (3.50) com relação ao tempo, obtemos:

$$\partial_t \Psi_\alpha(q, p; t) = -\frac{i}{\hbar} h(q, p) \star e^{\frac{-it}{\hbar} h} \star \psi_\alpha(q, p) \quad (3.53)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} h(q, p) \star \Psi_\alpha(q, p; t) \quad (3.54)$$

e, portanto, com $\hat{H} = h(q, p) \star$

$$i\hbar \partial_t \Psi_\alpha(q, p; t) = \hat{H} \Psi_\alpha(q, p; t) \quad (3.55)$$

determina a evolução temporal dos vetores de estado. Essa equação é denominada equação de Schrödinger no Espaço de Fase (ESEF).

Assim como na mecânica quântica usual, é possível encontrar uma equação para a solução independente do tempo através do método de separação de variáveis. Com efeito, no caso em que

$$\Psi_\alpha(q, p; t) = \psi_\alpha(q, p) \star \phi(t) = \psi(q, p) \phi(t), \quad (3.56)$$

uma vez que \star não atua em t , temos a relação

$$\hat{H} \psi_\alpha(q, p) = h(q, p) \star \psi_\alpha(q, p) = E \psi_\alpha(q, p), \quad (3.57)$$

com E sendo um autovalor do hamiltoniano. Essa relação é denominada equação de Schrödinger independente do tempo no espaço de fase. Na maioria dos casos de interesse, a equação a ser resolvida primeiramente é essa, cuja solução está associada à função dependente do tempo, por:

$$\Psi_\alpha(q, p; t) = \psi_\alpha(q, p) e^{\frac{i}{\hbar} t E}. \quad (3.58)$$

Tais sistemas descritos pela equação independente do tempo possuem potencial de interação do tipo $V(\hat{Q}) = v(q \star)$. Para uma partícula de massa m , movendo-se sob a influência de um potencial desse tipo, o operador hamiltoniano \hat{H} é representado por:

$$\hat{H} = H(\hat{Q}, \hat{P}) = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\hat{Q}) = \frac{1}{2m} (p \star)^2 + V(q \star). \quad (3.59)$$

3.3.3 O operador densidade

Uma outra grandeza cuja evolução temporal em Γ é interessante é a matriz densidade, definida pelo operador:

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|, \quad (3.60)$$

para o caso de um estado puro. Em termos da base $\{|q, p\rangle\}$, os elementos de matriz desse operador podem ser escritos como:

$$\rho(q, q', p, p'; t) = \langle q, p; t | \Psi \rangle \langle \Psi | q', p'; t \rangle = \Psi(q, p; t) \Psi^\dagger(q, p; t), \quad (3.61)$$

onde os elementos diagonais, em especial, são:

$$\rho(q, p; t) = \Psi(q, p; t) \Psi^\dagger(q, p; t). \quad (3.62)$$

Associado a ρ é possível introduzir um operador ρ estrela dado por

$$\hat{\rho}(q, p; t) = \Psi(q, p; t) \star \Psi^\dagger(q, p; t) \star. \quad (3.63)$$

Usando (3.50), (3.51) e diferenciando parcialmente essa expressão $\hat{\rho}$ com relação ao tempo, tem-se:

$$i\hbar\partial_t\hat{\rho} = (i\hbar\partial_t\Psi) \star \Psi^\dagger + \Psi \star (i\hbar\partial_t\Psi^\dagger) \star. \quad (3.64)$$

De acordo com a expressão (3.55) e seu complexo conjugado, isto é:

$$i\hbar\partial_t\Psi = h \star \Psi \quad (3.65)$$

$$-i\hbar\partial_t\Psi^\dagger = \Psi^\dagger \star h, \quad (3.66)$$

podemos escrever a equação (3.64) como:

$$i\hbar\partial_t\hat{\rho} = h \star (\Psi \star \Psi^\dagger \star) - (\Psi \star \Psi^\dagger) \star h \star \quad (3.67)$$

$$= \hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H}. \quad (3.68)$$

Portanto, o operador estrela $\hat{\rho}$ satisfaz a equação de Liouville-von Neuman, ou seja:

$$i\hbar\partial_t\hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (3.69)$$

que é semelhante à equação de evolução temporal da função de Wigner.

3.4 Conexão com o formalismo de Wigner

A equação de evolução temporal do operador-estrela $\hat{\rho}$ possibilita relacionar a MQS e o formalismo de Wigner. De fato, tal relação é estabelecida a partir da expressão

$$f(q, p; t) = \Psi(q, p; t) \star \Psi^\dagger(q, p; t), \quad (3.70)$$

em que a função $f(q, p; t)$, como mostraremos nesta seção, satisfaz as mesmas propriedades da função de Wigner apresentadas na [seção 2.3](#). Para tal, primeiramente verifica-se se $f(q, p; t)$ é real. Com efeito,

$$f^\dagger(q, p; t) = [\Psi(q, p; t) \star \Psi^\dagger(q, p; t)]^\dagger = \Psi(q, p; t) \star \Psi^\dagger(q, p; t) = f(q, p; t), \quad (3.71)$$

assim como ocorre para a função de Wigner. Além disto, $f(q, p; t)$ também obedece a condição de normalização, pois

$$\int dqdp f(q, p; t) = \int dqdp \Psi(q, p; t) \star \Psi^\dagger(q, p; t) = \int dqdp |\Psi(q, p; t)|^2 = 1. \quad (3.72)$$

Além disto, a equação (3.52) do valor esperado de um observável, juntamente com a definição de operador estrela (3.44) e as propriedades do produto estrela, nos dão:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \int dqdp \Psi_\alpha^\dagger(q, p; t) \hat{A} \Psi_\alpha(q, p; t) \quad (3.73)$$

$$= \int dqdp a(q, p) \left(\Psi(q, p; t) \star \Psi^\dagger(q, p; t) \right) = \int dqdp a(q, p) f(q, p; t) \quad (3.74)$$

que é igual à equação (2.35), no caso dependente do tempo. Tomando o caso específico dos operadores posição e momento \hat{Q} e \hat{P} , respectivamente, teremos

$$\langle \hat{Q}(t) \rangle = \int dqdp q f(q, p; t) \quad (3.75)$$

$$\langle \hat{P}(t) \rangle = \int dqdp p f(q, p; t). \quad (3.76)$$

Por outro lado, a teoria de probabilidades permite representar o valor esperado de um operador \hat{A} , como:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d\mu a \sigma(\mu), \quad (3.77)$$

onde $\sigma(\mu)$ representa a densidade de probabilidade associada à medida do observável \hat{A} , para um certo valor da grandeza no intervalo de integração. Isso implica, por (3.75) e (3.76), que as densidades de probabilidade associadas às medidas de posição e momento são, respectivamente,

$$\sigma(q) = \int dp \Psi \star \Psi^\dagger = \int dp f(q, p; t) \quad (3.78)$$

$$\sigma(p) = \int dq \Psi \star \Psi^\dagger = \int dq f(q, p; t) \quad (3.79)$$

Esse resultado indica que na MQS a função de estado Ψ não possui a propriedade do quadrado do módulo ser igual à densidade de probabilidade associada à posição ou momento, porém a integral da função f a terá; por esse motivo a função de estado Ψ também é denominada quasi-amplitude de probabilidade.

A evolução temporal de f pode ser obtida aplicando à eq. (3.70) o operador ∂_t e usando (3.65) e (3.66), o que resulta em

$$\frac{\partial f(q, p; t)}{\partial t} = \{h, f\}_M, \quad (3.80)$$

onde $\{ , \}_M$ é o parêntesis de Moyal e indica consistência com a dinâmica da função de Wigner.

Por fim, uma importante propriedade é encontrada ao multiplicar a ESEF independente do tempo por $\star \psi_\alpha^\dagger(q, p)$ à direita, resultando na equação de autovalor

$$\hat{H} \star (\psi \star \psi^\dagger) = E(\psi \star \psi^\dagger) \quad \Rightarrow \quad \hat{H} \star f = E \star f, \quad (3.81)$$

também obedecida pela função de Wigner. Essa relação evidencia que apesar de f ser real, obedece à mesma equação de ψ , levando a concluir que a busca por soluções reais para a ESEF independente do tempo pode conduzir a soluções em termos das funções de Wigner.

4 O Método Nikiforov–Uvarov (NU)

A solução de equações diferenciais é uma prática rotineira no estudo de problemas físicos. Nesse contexto, o conhecimento de diferentes métodos para executar essa tarefa tende a facilitar os trabalhos; dentre os métodos conhecidos, destaca-se o proposto por Nikiforov e Uvarov [68]. Diferente do método de expansão em séries de potências, este método permite a obtenção direta da fórmula de Rodrigues [3, 114] da solução procurada. Além disto, este desenvolvimento permite determinar a solução de uma forma paramétrica da equação de Schödinger que pode ser utilizada para diferentes potenciais, bastando identificar os termos e comparar com o resultado obtido. Neste capítulo apresentaremos uma revisão deste método, baseando-nos principalmente nas referências [3, 68–70].

4.1 A equação hipergeométrica generalizada

O método Nikiforov-Uvarov (NU) é baseado na solução de equações diferenciais hipergeométricas de segunda ordem, que são equações do tipo

$$\frac{d^2\psi(s)}{ds^2} + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \frac{d\psi(s)}{ds} + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\psi(s) = 0, \quad (4.1)$$

em que $\sigma(s)$ e $\tilde{\sigma}(s)$ são polinômios de, no máximo, segundo grau, $\tilde{\tau}(s)$ de no máximo primeiro grau e $\psi(s)$ é uma função polinomial do tipo hipergeométrico; os coeficientes de σ , $\tilde{\sigma}$ e $\tilde{\tau}$ são complexos, em geral.

O ponto de partida do método é propor uma solução ψ na forma

$$\psi(s) = \phi(s)y(s), \quad (4.2)$$

de modo a simplificar a eq. (4.1). Usando ψ na forma (4.2) e utilizando de agora em diante, por simplicidade, a notação de Lagrange para derivadas, tem-se

$$\begin{aligned} \psi'(s) &= \phi'(s)y(s) + \phi(s)y'(s) \\ \psi''(s) &= \phi''(s)y(s) + 2\phi'(s)y'(s) + \phi(s)y''(s) \end{aligned}$$

que, substituindo na equação (4.1) e dividindo por $\phi(s)$, resulta na equação para a função $y(s)$

$$y''(s) + y'(s) \left(2\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \right) + y(s) \left(\frac{\phi''(s)}{\phi(s)} + \frac{\phi'(s)}{\phi(s)} \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \right) = 0. \quad (4.3)$$

Para tornar a equação (4.3) mais familiar, pode-se escrever o coeficiente de $y'(s)$ como a razão entre dois polinômios, assim como ocorre na equação (4.1), ou seja,

$$2\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} = \frac{\tau(s)}{\sigma(s)} \quad (4.4)$$

em que $\tau(s)$ é um polinômio de grau máximo um, assim como $\tilde{\tau}(s)$. Esta equação é mais útil na forma

$$\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \quad (4.5)$$

onde o polinômio $\pi(s)$

$$\pi(s) = \frac{1}{2}[\tau(s) - \tilde{\tau}(s)] \quad (4.6)$$

também possui grau máximo um.

Usando estas definições agora no coeficiente de $y(s)$, e notando que é válida e identidade

$$\frac{\phi''(s)}{\phi(s)} = \left(\frac{\phi'(s)}{\phi(s)}\right)' + \left(\frac{\phi'(s)}{\phi(s)}\right)^2 = \left(\frac{\pi(s)}{\sigma(s)}\right)' + \left(\frac{\pi(s)}{\sigma(s)}\right)^2$$

a equação (4.3) toma a forma

$$y''(s) + \frac{\tau(s)}{\sigma(s)}y'(s) + \frac{\bar{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}y(s) = 0, \quad (4.7)$$

onde foram definidas as funções

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) \quad (4.8)$$

$$\bar{\sigma}(s) = \tilde{\sigma}(s) + \pi^2(s) + \pi(s)[\tilde{\tau}(s) - \sigma'(s)] + \pi'(s)\sigma(s). \quad (4.9)$$

As funções $\tau(s)$ e $\bar{\sigma}(s)$ são polinômios de grau máximo um e dois, respectivamente. Consequentemente, a equação (4.7) tem a mesma forma funcional de (4.1). O processo procura assim, com a substituição (4.2), manter a forma da equação diferencial com $\phi(s)$ obedecendo a eq. (4.5) para uma função arbitrária $\pi(s)$

Se o polinômio $\bar{\sigma}(s)$ em (4.7) for divisível por $\sigma(s)$, isto é,

$$\bar{\sigma}(s) = \lambda\sigma(s) \quad (4.10)$$

em que λ é uma constante, a equação (4.7) é transformada na equação do tipo hipergeométrica

$$\sigma(s)y''(s) + \tau(s)y'(s) + \lambda y(s) = 0, \quad (4.11)$$

cujas soluções são chamadas funções do tipo hipergeométricas. Desta forma, é natural que a equação (4.1) seja denominada equação hipergeométrica generalizada.

Para determinar o polinômio $\pi(s)$ e a constante λ , reescreve-se (4.10), isto é:

$$\bar{\sigma}(s) = \lambda\sigma(s) \longrightarrow \pi^2(s) + \pi(s)[\tilde{\tau}(s) - \sigma'(s)] + \tilde{\sigma}(s) + k\sigma(s) = 0 \quad (4.12)$$

em que a constante k foi definida como

$$k = \lambda - \pi'(s). \quad (4.13)$$

A solução para a equação (4.12), supondo k conhecido, será

$$\pi(s) = \frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(s) + k\sigma(s)}. \quad (4.14)$$

Como $\pi(s)$ é um polinômio, a expressão dentro da raiz deve ser o quadrado de um polinômio; isto só será possível se o discriminante da equação quadrática for zero, isto é, o radicando deverá ser uma equação quadrática de raiz com multiplicidade dois. Impondo esta condição é possível determinar os valores da constante k resolvendo-se uma equação quadrática e obtendo-se até dois valores distintos.

Após determinar k , obtém-se $\pi(s)$ através de (4.14) e também $\phi(s)$, $\tau(s)$ e λ através de (4.5), (4.8) e (4.13), respectivamente. Observa-se que haverá quatro possibilidades para $\pi(s)$: duas para k_+ e duas para k_- . Contudo, nem todas as formas resultarão em soluções fisicamente aceitáveis; o critério para escolha será discutido nas seções seguintes.

Notemos que nesta seção a equação hipergeométrica generalizada (4.1) foi transformada numa equação do tipo hipergeométrica mais simples, dada por (4.11), através da transformação (4.2). Na próxima seção serão investigadas as propriedades das soluções de (4.11).

4.2 A fórmula de Rodrigues

Um procedimento comum para generalizar as soluções de (4.11) é mostrar que todas as derivadas de funções hipergeométricas também são funções hipergeométricas. De fato, diferenciando (4.11), obtém-se

$$\sigma'(s)y''(s) + \sigma(s)y'''(s) + \tau'(s)y'(s) + \tau(s)y''(s) + \lambda y'(s) = 0.$$

Considerando $v_1(s) = y'(s)$, encontra-se a equação

$$\sigma(s)v_1''(s) + \tau_1(s)v_1'(s) + \mu_1 v_1(s) = 0, \quad (4.15)$$

que também é uma equação do tipo hipergeométrica, uma vez que

$$\begin{aligned} \tau_1(s) &= \tau(s) + \sigma'(s) \\ \mu_1 &= \lambda + \tau'(s), \end{aligned}$$

onde $\tau_1(s)$ possui grau máximo um, e μ_1 é uma constante e, portanto, independe de s . Diferenciando novamente a equação (4.11) e usando $v_2(s) = y''(s)$ como uma representação para a segunda derivada de $y(s)$, obtém-se

$$\sigma(s)v_2''(s) + \tau_2(s)v_2'(s) + \mu_2 v_2(s) = 0, \quad (4.16)$$

que também é uma equação do tipo hipergeométrica, uma vez que

$$\begin{aligned}\tau_2(s) &= \tau_1(s) + \sigma'(s) = \tau(s) + 2\sigma'(s) \\ \mu_2 &= \mu_1 + \tau_1'(s) = \lambda + 2\tau'(s) + \sigma''(s).\end{aligned}$$

Seguindo o mesmo raciocínio, só que derivando (4.11) n vezes e tomando $v_n(s) = y^{(n)}(s)$, em que $y^{(n)}(s)$ representa a n -ésima derivada de $y(s)$ em função de s , encontra-se

$$\sigma(s)v_n''(s) + \tau_n(s)v_n'(s) + \mu_n v_n(s) = 0, \quad (4.17)$$

onde não é difícil mostrar, por indução, que

$$\tau_n(s) = \tau(s) + n\sigma'(s) \quad (4.18)$$

$$\mu_n = \lambda + n\tau'(s) + \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s). \quad (4.19)$$

Esta propriedade permite construir uma família de soluções particulares de (4.11) correspondentes a um dado λ . Tomando $\mu_n = 0$, a equação (4.19) torna-se

$$\lambda = \lambda_n = -n\tau'(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s), \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (4.20)$$

e tem-se a solução particular $v_n(s) = \text{constante}$. Isto implica em um polinômio de grau n para a solução $y(s) = y_n(s)$ ¹; tal solução é chamada de polinômio hipergeométrico [68]. Os polinômios $y_n(s)$ são as soluções mais simples de (4.11).

Para encontrar explicitamente os polinômios $y_n(s)$, multiplica-se as equações (4.11) e (4.17) por funções peso apropriadas $\rho(s)$ e $\rho_n(s)$, de modo a ser possível escrevê-las na forma

$$(\sigma\rho y')' + \lambda\rho y = 0 \quad (4.21)$$

$$(\sigma\rho_n y_n')' + \mu_n\rho_n v_n = 0. \quad (4.22)$$

Para isto, é necessário que $\rho(s)$ e $\rho_n(s)$ satisfaçam as relações

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho \quad (4.23)$$

$$(\sigma\rho_n)' = \tau_n\rho_n. \quad (4.24)$$

Agora, usando a forma explícita de $\tau_n(s)$ é possível estabelecer a conexão entre $\rho_n(s)$ e $\rho_0(s) \equiv \rho(s)$. De fato, usando (4.24) e (4.18), vem

$$\frac{(\sigma\rho_n)'}{\rho_n} = \tau + n\sigma' = \frac{(\sigma\rho)'}{\rho}$$

de onde encontra-se

$$\frac{\rho_n'}{\rho_n} = \frac{\rho'}{\rho} + n\sigma'$$

¹ Note que $y_n(s)$ representa a n -ésima solução da família, que está atrelada ao índice n .

e, conseqüentemente, verifica-se que

$$\rho_n(s) = \sigma^n(s)\rho(s). \quad (4.25)$$

Desta forma, sendo $\sigma\rho_n = \rho_{n+1}$ e $v'_n(s) = v_{n+1}(s)$, é possível reescrever (4.22) como

$$\rho_n v_n = -\frac{1}{\mu_n}(\rho_{n+1}v_{n+1})',$$

e tomando um $m < n$, obteremos sucessivamente

$$\begin{aligned} \rho_m v_m &= \left(-\frac{1}{\mu_m}\right) (\rho_{m+1}v_{m+1})' \\ &= \left(-\frac{1}{\mu_{m+1}}\right) \left(-\frac{1}{\mu_n}\right) (\rho_{m+2}v_{m+2})'' \\ &= \dots \\ &= \frac{(-1)^{m-n}}{\mu_m \mu_{m+1} \dots \mu_n - 1} (\rho_n v_n)^{(n-m)} \\ &= \frac{A_m}{A_n} (\rho_n v_n)^{(n-m)} \end{aligned} \quad (4.26)$$

em que, por simplicidade, foi definida a constante

$$A_n = (-1)^n \prod_{k=0}^{n-1} \mu_k, \quad A_0 = 1. \quad (4.27)$$

Para obter a forma explícita dos polinômios hipergeométricos basta notar que, se $y(s)$ é um polinômio de grau n , isto é, $y(s) = y_n(s)$, então

$$v_m(s) = y_m^{(m)}(s), \quad v_n(s) = y^n(s) = \text{constante}$$

e obtém-se, de (4.26) a seguinte expressão para $y_n^{(m)}(s)$:

$$y_n^{(m)}(s) = \frac{A_{mn}}{\rho_m(s)} B_n [\rho_n(s)]^{(n-m)}, \quad (4.28)$$

em que

$$A_{mn} = A_m|_{\lambda=\lambda_n}, \quad B_n = \frac{1}{A_{nn}} y_n^{(n)}(s), \quad (4.29)$$

e deve-se lembrar que A depende de μ_n e, portanto, é dependente do parâmetro λ , o que justifica a notação utilizada. Não obstante, $y_n(s)$ está associado a um λ_n , sendo preciso acrescentar o índice n para justificar isto.

Em particular, quando $m = 0$, teremos a representação explícita dos polinômios hipergeométricos do tipo

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} [\sigma^n(s)\rho(s)]^{(n)}, \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (4.30)$$

Consequentemente, as soluções da equação hipergeométrica (4.11) são definidas pela relação (4.30), a menos de uma constante de normalização B_n . Estas soluções correspondem aos valores $\mu_n = 0$, isto é,

$$\lambda = \lambda_n = -n\tau'(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s), \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (4.31)$$

A expressão (4.30) é chamada Fórmula de Rodrigues e foi estabelecida em 1814 por Rodrigues [115] para os polinômios introduzidos por Legendre em 1714, para os quais $\sigma(s) = 1 - s^2$ e $\rho(s) = 1$.

A tabela (2) reúne alguns polinômios ortogonais relevantes e as funções $\sigma(s)$ e $\rho(s)$ a eles associadas presentes na literatura [3].

Nome	Símbolo	B_n	$\sigma(x)$	$\rho(x)$	Intervalo de ortogonalidade
Hermite	$H_n(x)$	$(-1)^n$	1	e^{-x^2}	$-\infty < x < +\infty$
Laguerre	$L_n(x)$	$(-1)^n$	e^{-x}	e^{-x^2}	$0 \leq x < +\infty$
Laguerre associada	$L_n^\alpha(x)$	$\frac{1}{n!}$	$x^\alpha e^{-x}$	x	$0 \leq x < +\infty$
Jacobi	$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$	$\frac{(-1)^n}{2^n n!}$	$1 - x^2$	$(1-x)^\alpha (1+x)^\beta$	$-1 \leq x \leq 1$

Tabela 2 – Polinômios ortogonais presentes na literatura [3].

A constante B_n poderia ser arbitrária mas é escolhida, como indicado na Tabela 2 por razões históricas. Ela pode ser determinada por meio da relação de ortogonalidade a qual é dada para cada um dos polinômios:

$$\int \varphi_n(z)\varphi_m(z)\rho(z) dz = D_n^2 \delta_{nm} \quad (4.32)$$

em que δ_{nm} é o delta de Kronecker, que assume valor 1 caso $m = n$, valor zero quando $m \neq n$, e D_n é a norma do polinômio.

Os polinômios de Jacobi carecem maior atenção pois aparecem na última seção deste capítulo e também na resolução do problema tratado neste trabalho. Eles possuem como casos especiais os polinômios de Legendre, Chebyshev e Genbauer [3, 68].

4.3 Aplicação do método: o oscilador harmônico unidimensional

Nesta seção será demonstrada a aplicação do método NU para resolver a equação de Schrödinger (ES) não relativística, na formulação usual da mecânica quântica. A título de demonstração da aplicação do método, será utilizado o potencial do oscilador harmônico unidimensional. O resultado em termos dos autovalores de energia e autofunções é bem estabelecido na literatura, motivo pelo qual escolhemos este sistema para elucidar a aplicação do método.

4.3.1 Resumo do procedimento

Considerando que o método NU envolve várias etapas, é interessante apresentarmos um roteiro. Seguiremos o proposto por Berkdenin [70], que segue os passos seguintes:

1. Reduzir a equação de Schrödinger à equação do formato (4.1);
2. Comparar a equação obtida com (4.1) para determinar os polinômios $\tilde{\tau}(s)$, $\sigma(s)$ e $\tilde{\sigma}(s)$. Nesta etapa é interessante propor simplificações na equação utilizando algumas mudanças de variável;
3. Utilizar os polinômios determinados na etapa anterior para compor a função $\pi(s)$ dada pela equação (4.14);
4. Igualar o discriminante da função quadrática a zero, obtendo-se duas raízes reais para a equação quadrática de k , isto é, k_{\pm} ;
5. Substituir estes valores na expressão do passo 3 encontrando-se quatro possibilidades para $\pi(s)$, duas para k_+ e duas para k_- ;
6. Utilizar a expressão para $\pi(s)$ que forneça uma função $\tau(s)$, dada por (4.6) com derivada negativa. Deve-se utilizar o valor de k associada a ela nos demais cálculos, pois levará a uma solução fisicamente correta;
7. Comparar a equação (4.13) com a equação (4.31), isto é, fazer $\lambda = \lambda_n$. Desta forma obtém-se uma equação que fornecerá os autovalores de energia;
8. Utilizando $\sigma(s)$ e $\pi(s)$ na equação (4.5), obter a forma funcional de $\phi(s)$;
9. Encontrar a função $\rho(s)$ através da relação (4.21) para obter o polinômio hipergeométrico $y_n(s)$ através da fórmula de Rodrigues (4.30);
10. Combinar as funções $\phi(s)$ e $y_n(s)$ para formar a solução final $\psi(s)$.

Esses passos podem ser sintetizados em um fluxograma, o que apresentaremos na Figura 6 juntamente com as expressões mais importantes do processo.

4.3.2 Aplicação ao oscilador harmônico unidimensional

Como exposto anteriormente, a título de exemplo da aplicação do método, nesta seção apresentaremos a resolução da equação de Schrödinger com o desenvolvimento de Nikiforov e Upravov [68] usando uma partícula de massa m sujeita a um potencial do tipo oscilador harmônico. Consideremos a equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x). \quad (4.33)$$

Como primeiro passo iremos escrever esta equação na forma da equação hipergeométrica generalizada. Para isto, é conveniente definir as variáveis

$$\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad E = \hbar\omega\epsilon, \quad x = \alpha s. \quad (4.34)$$

Com isto, a solução $\psi(x) \rightarrow \psi(s)$ e a equação (4.33) tomam a forma mais simples

$$\frac{d^2\psi(s)}{ds^2} + (2\epsilon - s^2)\psi(s) = 0. \quad (4.35)$$

Comparando com a equação hipergeométrica generalizada (4.1), obtemos

$$\tilde{\tau}(s) = 0, \quad \sigma(s) = 1, \quad \tilde{\sigma}(s) = 2\epsilon - s^2. \quad (4.36)$$

De acordo com o passo 3, determinaremos primeiramente a função $\pi(s)$. Usando a relação (4.14)

$$\pi(s) = \frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(s) + k\sigma(s)}$$

obtemos, com os valores de (4.36):

$$\pi_{\pm}(s) = \pm\sqrt{s^2 + (k - 2\epsilon)}. \quad (4.37)$$

O valor da constante k é obtido impondo que o discriminante da equação quadrática no radicando seja nulo, para que $\pi(s)$ seja um polinômio de grau máximo um. Esta condição implica

$$k = 2\epsilon. \quad (4.38)$$

Usando (4.38) em (4.37), obteremos duas possibilidades, que são $\pi_{\pm}(s) = \pm s$; escolheremos a que gerar uma função $\tau(s)$, dada pela equação (4.8)

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s),$$

com derivada negativa. Neste caso, utilizaremos

$$\pi(s) = -s, \quad (4.39)$$

que fornecerá

$$\tau(s) = -2s \quad (4.40)$$

e, de fato, tem-se $\tau'(s) = -2 < 0$, como queríamos.

Os autovalores de energia são obtidos comparando as equações (4.13) e (4.31), usando (4.36), (4.37), (4.38) e (4.40), isto é,

$$\lambda = \lambda_n \longrightarrow k + \pi'(s) = -n\tau'(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s). \quad (4.41)$$

Desta forma, recordando a definição (4.34), obtemos de forma clara e direta o espectro

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (4.42)$$

Para obter as autofunções deveremos encontrar as funções $\phi(s)$ e $\rho(s)$. A função $\phi(s)$ é obtida através da equação (4.5), ou seja:

$$\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \quad \Rightarrow \quad \frac{\phi'(s)}{\phi(s)} = -s$$

e, integrando esta equação diferencial separável, obtemos a solução

$$\phi(s) = \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right). \quad (4.43)$$

A função $\rho(s)$ é obtida através da relação (4.23), isto é,

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho \quad \Rightarrow \quad \frac{\rho'}{\rho} = \frac{\tau - \sigma'}{\sigma} = -2s.$$

Integrando essa equação diferencial assim como no passo anterior, chegamos a

$$\rho(s) = e^{-s^2}. \quad (4.44)$$

Em consequência, a função $y_n(s)$, dada por (4.30), será

$$y_n(s) = B_n e^{s^2} \frac{d^2}{ds^2} (e^{-s^2}). \quad (4.45)$$

Comparando (4.45) com os polinômios da Tabela 2, podemos concluir que se trata dos polinômios de Hermite $H_n(s)$. Usando a função ϕ obtida e lembrando que $\psi_n(s) = \psi(s)y_n(s)$, obteremos a solução

$$\psi_n(s) = C_n e^{-\frac{s^2}{2}} H_n(s), \quad x = \alpha s, \quad \alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (4.46)$$

Podemos ainda utilizar as propriedades de ortogonalidade deste polinômio para encontrar a constante de normalização C_n , com base na propriedade da função $\psi(s)$ ser de quadrado integrável, isto é,

$$\int \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1, \quad (4.47)$$

cujos resultados serão

$$C_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!} \frac{1}{\alpha \sqrt{\pi}}} \quad (4.48)$$

e a solução final adquire a forma

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right). \quad (4.49)$$

Como se nota, com o uso do método NU o processo de solução da ES é direto e abre a possibilidade de aplicação à equação de Schrödinger para qualquer potencial. Tal procedimento será abordado na seção seguinte.

4.4 Forma paramétrica da Equação de Schrödinger

O método NU se mostra direto e efetivo para resolver analiticamente equações diferenciais do tipo (4.1). Isto se torna útil sobretudo nos problemas de mecânica quântica, onde tem-se como objetivo solucionar a equação de Schrödinger não relativística independente do tempo, na formulação usual:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (4.50)$$

em que o operador Hamiltoniano \hat{H} é

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (4.51)$$

e na representação das coordenadas, os operadores posição e momentum assumem as formas:

$$\hat{x} = x \quad e \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (4.52)$$

Na seção anterior foi demonstrado como aplicar o método NU para o caso em que o potencial $V(x)$ assume a forma

$$V(\hat{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (4.53)$$

O método, no entanto, de acordo com Teczam e Sever [69], pode ser aplicado para diferentes potenciais desde que se consiga escrever a ES na forma geral

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1 - \alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{[s(s - \alpha_3)]^2} \right] \psi(s) = 0 \quad (4.54)$$

em que α_i e ξ_i são constantes reais; é o que apresentaremos a seguir buscando obter uma solução da equação (4.54), em termos das constantes α_i e ξ_i . Para isto seguiremos os passos do roteiro 4.3.1.

Comparando (4.54) com a equação (4.1), obtemos

$$\tilde{\tau}(s) = \alpha_1 - \alpha_2 s \quad \sigma(s) = s(1 - \alpha_3 s) \quad \tilde{\sigma}(s) = -\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3, \quad (4.55)$$

e com isto, a função $\pi(s)$ toma a forma

$$\begin{aligned} \pi(s) &= \frac{(1 - 2\alpha_3 s) - (\alpha_1 - \alpha_2 s)}{2} \\ &\quad \pm \sqrt{\left[\frac{(1 - 2\alpha_3 s) - (\alpha_1 - \alpha_2 s)}{2} \right]^2 + (-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3) + ks(1 - \alpha_3 s)} \\ &= \alpha_4 + \alpha_5 s \pm \sqrt{(\alpha_6 - k\alpha_3)s^2 + (\alpha_7 + k)s + \alpha_8}, \end{aligned} \quad (4.56)$$

em que definimos as constantes:

$$\begin{aligned}
\alpha_4 &= \frac{1}{2}(1 - \alpha_1) \\
\alpha_5 &= \frac{1}{2}(\alpha_2 - 2\alpha_3) \\
\alpha_6 &= \alpha_5^2 + \xi_1 \\
\alpha_7 &= 2\alpha_4\alpha_5 - \xi_2 \\
\alpha_8 &= \alpha_4^2 + \xi_3.
\end{aligned} \tag{4.57}$$

O radicando da equação (4.56) precisa ser o quadrado de um polinômio de grau um, para que a função π seja um polinômio de grau máximo um. Para isto, o discriminante da equação quadrática em s precisa ser nulo. Com esta condição, podemos obter os valores para a constante k . Partindo de:

$$\begin{aligned}
\Delta &= (\alpha_7 + k)^2 - 4\alpha_8(\alpha_6 - k\alpha_3) \\
&= k^2 + 2(\alpha_7 + 2\alpha_8\alpha_3)k + (\alpha_7^2 - 4\alpha_6\alpha_8) = 0,
\end{aligned}$$

essa equação implica em dois valores para k

$$k_{\pm} = -(\alpha_7 + 2\alpha_8\alpha_3) \pm 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9}, \tag{4.58}$$

onde foi definida a constante:

$$\alpha_9 = \alpha_3\alpha_7 + \alpha_3^2\alpha_8 + \alpha_6. \tag{4.59}$$

Cada um destes valores fornecerá duas possibilidades para $\pi(s)$, totalizando 4 formas distintas. De fato, as possibilidades serão:

$$\pi(s) = \alpha_4 + \alpha_5s \pm \begin{cases} (\alpha_9 - \alpha_3\sqrt{\alpha_8})s + \sqrt{\alpha_8}, & \text{se } k_+ = -(\alpha_7 + 2\alpha_8\alpha_3) + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \\ (\alpha_9 + \alpha_3\sqrt{\alpha_8})s - \sqrt{\alpha_8}, & \text{se } k_- = -(\alpha_7 + 2\alpha_8\alpha_3) - 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9}. \end{cases} \tag{4.60}$$

Pelo passo 6 do roteiro, deve-se escolher a função $\pi(s)$ que gera uma função $\tau(s)$, dada pela relação (4.8)

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s),$$

cuja derivada deve ser negativa, para que a solução seja fisicamente válida.

Tomando o valor de k_- , isto é,

$$k = k_- = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) - 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9}, \tag{4.61}$$

a função $\pi(s)$ terá a forma:

$$\pi(s) = \pi_-(s) = \alpha_4 + \alpha_5s - [(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8})s - \sqrt{\alpha_8}]. \tag{4.62}$$

E neste caso, a função $\tau(s)$ será:

$$\tau(s) = \alpha_1 + 2\alpha_4 - (\alpha_2 - 2\alpha_5)s - 2[(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8})s - \sqrt{\alpha_8}], \quad (4.63)$$

podendo-se notar que, de fato,

$$\begin{aligned} \tau'(s) &= -(\alpha_2 - 2\alpha_5) - 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) \\ &= -2\alpha_3 - 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) < 0. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Os autovalores são obtidos comparando as equações (4.13) e (4.31), o que resulta na relação

$$k + \pi'(s) = -2n\tau(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s).$$

Usando (4.55), (4.61), (4.62) e (4.63), encontra-se:

$$\alpha_2 n - (2n+1)\alpha_5 + (2n+1)(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) + n(n-1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} = 0, \quad (4.65)$$

que fornecerá o espectro de energia do sistema, ou seja, os autovalores do problema.

Para encontrar as autofunções associadas é necessário determinar as funções $\phi(s)$ e $\rho(s)$. Primeiramente determinaremos a função $\rho(s)$. Usando a relação (4.23),

$$\frac{\rho'}{\rho} = \frac{\alpha_1 + 2\alpha_4 - (\alpha_2 - 2\alpha_5)s - 2[(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8})s - \sqrt{\alpha_8}] - (1 - 2\alpha_3s)}{s(1 - \alpha_3s)}$$

resulta numa equação diferencial ordinária do tipo separável. Integrando-a,

$$\int \frac{d\rho(s)}{\rho(s)} = \int \left(\frac{\alpha_{10} - 1}{s} + \frac{\alpha_{10}\alpha_3 - \alpha_{11} + \alpha_3}{1 - \alpha_3s} \right) ds$$

obteremos a função

$$\rho(s) = s^{\alpha_{10}-1} (1 - \alpha_3s)^{\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1} \quad (4.66)$$

que, quando utilizada na fórmula de Rodrigues (4.30), nos dá:

$$\begin{aligned} y_n(s) &= \frac{B_n}{s^{\alpha_{10}-1} (1 - \alpha_3s)^{\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1}} \frac{d^n}{ds^n} \left[s^2 (1 - \alpha_3s)^n s^{\alpha_{10}-1} (1 - \alpha_3s)^{\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1} \right] \\ &= \frac{B_n}{(4\alpha_3)^n} [1 - (1 - 2\alpha_3s)]^{-(\alpha_{10}-1)} [1 + (1 - 2\alpha_3s)]^{-\left(\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1\right)} \\ &\quad \times \frac{d^n}{ds^n} \left\{ [1 - (1 - 2\alpha_3s)]^{n+(\alpha_{10}-1)} [1 + (1 - 2\alpha_3s)]^{n+\left(\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1\right)} \right\}. \end{aligned} \quad (4.67)$$

Comparando (4.67) com a fórmula de Rodrigues dos polinômios de Jacobi, presente na Tabela 2,

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(z) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-z)^{-\alpha} (1+z)^{-\beta} \frac{d^n}{dz^n} \left[(1-z)^{n+\alpha} (1+z)^{n+\beta} \right]$$

podemos escrever, a menos de uma constante, a função $y_n(s)$ como:

$$y_n(s) = P_n^{\left(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1\right)}(1 - 2\alpha_3s), \quad (4.68)$$

onde introduzimos as constantes:

$$\begin{aligned}\alpha_{10} &= \alpha_1 + 2\alpha_4 + 2\sqrt{\alpha_8} \\ \alpha_{11} &= \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}).\end{aligned}\quad (4.69)$$

A função $\phi(s)$ é obtida com uso de (4.5), ou seja

$$\frac{\phi'}{\phi} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} = \frac{\alpha_4 + \alpha_5 s - [(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8})s - \sqrt{\alpha_8}]}{s(1 - \alpha_3 s)}$$

que também resulta numa equação diferencial ordinária do tipo separável. Integrando-a, ou seja:

$$\int \frac{d\phi(s)}{\phi(s)} = \int \left(\frac{\alpha_{12}}{s} + \frac{\alpha_{12}\alpha_3 + \alpha_{13}}{1 - \alpha_3 s} \right) ds,$$

obteremos a função

$$\phi(s) = s^{\alpha_{12}}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}}, \quad (4.70)$$

em que definimos as constantes

$$\begin{aligned}\alpha_{12} &= \alpha_4 + \sqrt{\alpha_8} \\ \alpha_{13} &= \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3\sqrt{\alpha_8}).\end{aligned}\quad (4.71)$$

Lembrando que $\psi_n(s) = \phi(s)y_n(s)$, a solução final será

$$\psi_n(s) = s^{\alpha_{12}}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} P_n^{\left(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1\right)}(1 - 2\alpha_3 s). \quad (4.72)$$

Em alguns problemas é possível que α_3 seja nulo. Neste caso, teríamos um problema na solução encontrada anteriormente, uma vez que ela aparece no denominador. Realizando todo desenvolvimento da equação (4.54) com esta consideração, e comparando com o resultado anterior é possível mostrar que:

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} P_n^{\left(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1\right)}(1 - 2\alpha_3 s) = L_n^{\alpha_{10}-1}(\alpha_{11}s) \quad (4.73)$$

em que $L_n^\alpha(s)$ são os polinômios de Laguerre (ver Tabela 2). Além disto, mostra-se que:

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} = e^{\alpha_{13}s}. \quad (4.74)$$

Notemos, concluindo, que a depender do sinal das constantes α_i e ξ_i , nem sempre a inequação (4.64) será verdadeira. Neste caso deve-se utilizar o outro valor possível para k , ou seja,

$$k = k_+ = -(\alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8) + 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} \quad (4.75)$$

e a solução final será

$$\psi_n(s) = s^{\alpha_{12}^*}(1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12}^* - \frac{\alpha_{13}^*}{\alpha_3}} P_n^{\left(\alpha_{10}^*-1, \frac{\alpha_{11}^*}{\alpha_3} - \alpha_{10}^*-1\right)}(1 - 2\alpha_3 s), \quad (4.76)$$

associada aos autovalores de energia encontrados através de:

$$\alpha_2 n - 2n\alpha_5 + (2n+1)(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) + n(n-1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3\alpha_8 - 2\sqrt{\alpha_8\alpha_9} + \alpha_5 = 0, \quad (4.77)$$

onde as constantes neste caso são definidas como:

$$\begin{aligned} \alpha_{10}^* &= \alpha_1 + 2\alpha_4 - 2\sqrt{\alpha_8} \\ \alpha_{11}^* &= \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3\sqrt{\alpha_8}) \\ \alpha_{12}^* &= \alpha_4 - \sqrt{\alpha_8} \\ \alpha_{13}^* &= \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} - \alpha_3\sqrt{\alpha_8}). \end{aligned} \quad (4.78)$$

O método Nikiforov-Uvarov tem recentemente recebido renovado interesse na busca de soluções da equação de Schrödinger e algumas aplicações podem ser encontradas na referência [69]; no presente trabalho nós o utilizaremos na resolução da ES com o potencial de Yukawa.

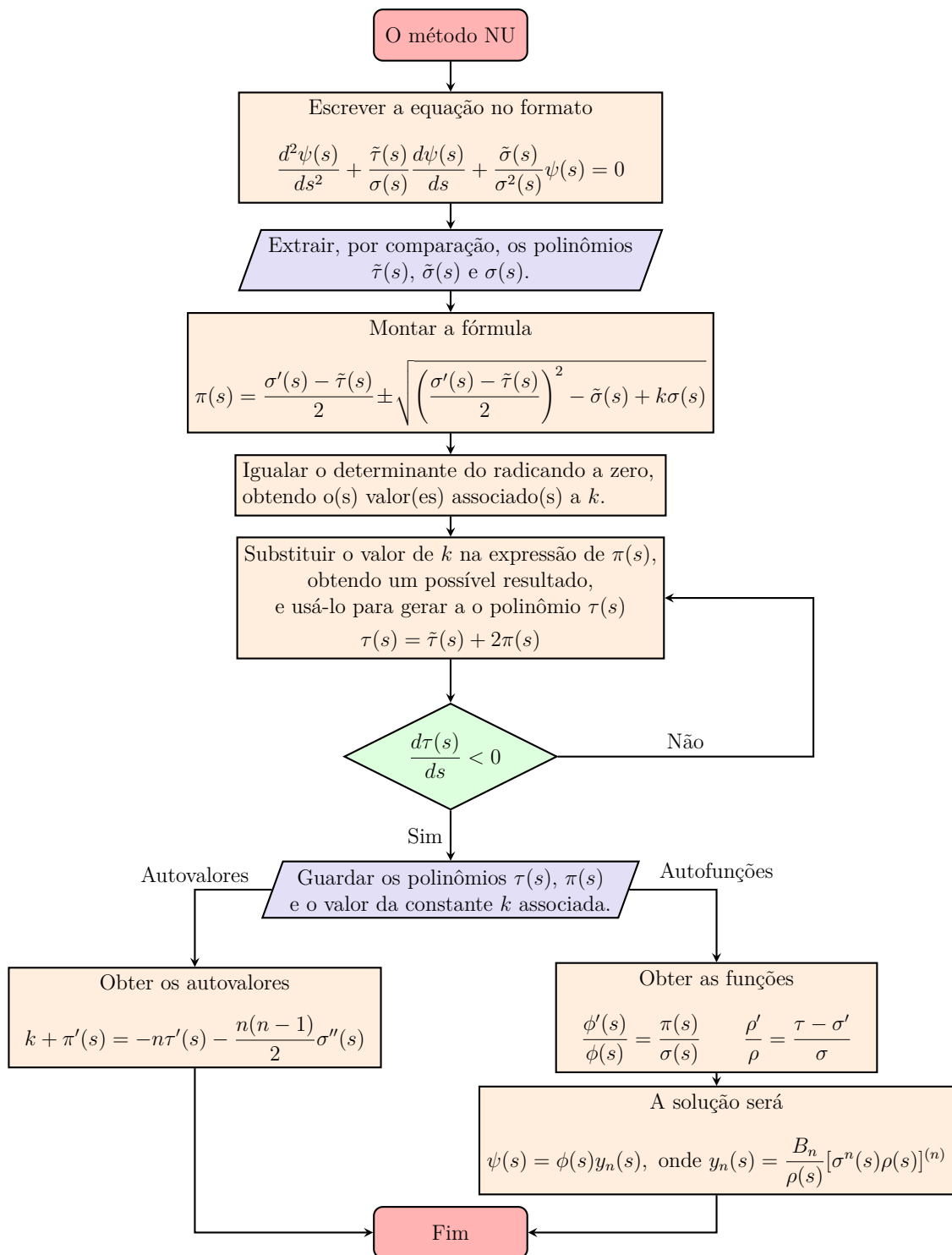


Figura 6 – Fluxograma para aplicação do método Nikiforov-Uvarov (NU).

5 O Potencial de Yukawa no formalismo de Schrödinger

O estudo do potencial de Yukawa é de interesse em diferentes áreas da física; existem na literatura diversos trabalhos, no âmbito da formulação usual da mecânica quântica. Devido à impossibilidade de obter soluções exatas dessa equação para o potencial de Yukawa, muitos procedimentos buscam obter as soluções da equação de Schrödinger através de métodos numéricos, computacionais e analíticos. Um procedimento analítico recursivo foi proposto por Garavelli e Oliveira [96], onde obtém-se a solução da ES na formulação usual para o estado de mais baixa energia. Outro procedimento analítico aproximado foi proposto por Hamzavi et al. [76], através da aplicação do método Nikiforov-Uravov. Neste capítulo apresentaremos alguns resultados e características presentes na literatura acerca do potencial de Yukawa, e mostraremos sistematicamente os métodos propostos por Garavelli e Oliveira e por Hamzavi et al.

5.1 O Potencial de Yukawa

O potencial de Yukawa, também conhecido como potencial de Debye-Hückel, potencial de Coulomb atenuado e potencial de Thomas-Fermi, é utilizado em várias áreas da física, descrevendo interações entre partículas carregadas. Sua forma funcional é representada por (5.1), em que A é uma constante, μ é a atenuação e $1/\mu$ é o alcance da interação e esses parâmetros são descritos de acordo com a área de estudo. No caso em que a atenuação é zero, o potencial é reduzido ao potencial Coulombiano e, por este motivo, o potencial de Yukawa também é chamado de potencial Coulombiano blindado¹.

$$V(\vec{r}) = -A \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad (5.1)$$

Na física de partículas, esse potencial foi primeiramente introduzido por Yukawa [77] em 1935, ao estudar interações entre núcleons e o processo de decaimento beta. Esse potencial representa a força de interação entre as partículas elementares que, por observação, seria de curto alcance. Nesta proposta, a constante A é escrita como $A = \pm g^2$, que deve ser ajustada com os experimentos, assim como a atenuação μ .

Na física da matéria condensada e física dos plasmas esse potencial é conhecido como de Debye-Hückel [78], e é utilizado como boa aproximação para descrever a blindagem do potencial coulombiano sentido por íons imersos num plasma. A constante A surge da

¹ Do inglês, “Screened Coulomb Potential”.

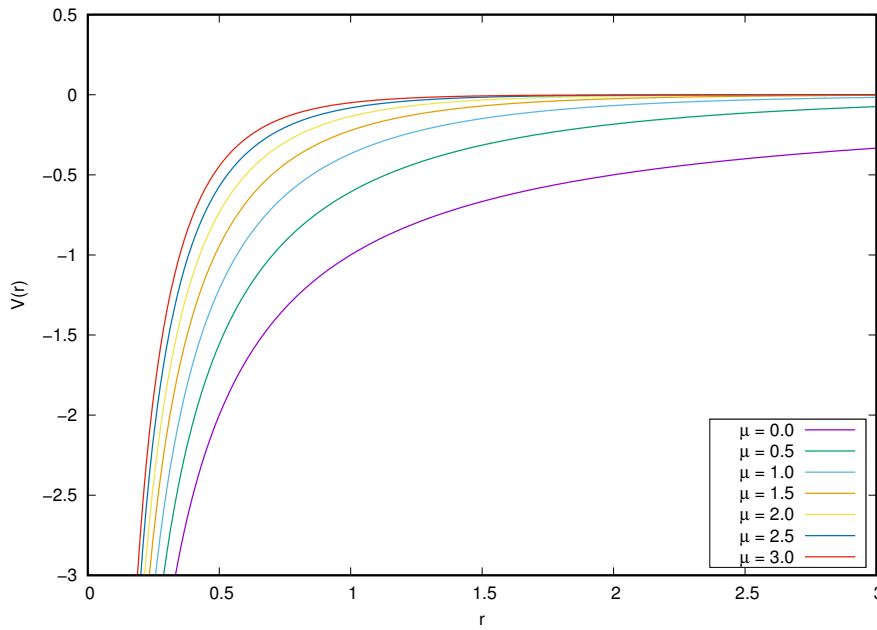


Figura 7 – O potencial de Yukawa com $A = 1$ e diferentes valores para a atenuação μ .

interação coulombiana e é representado por $A = -e^2$. Neste caso, a atenuação μ está associada ao comprimento de Debye λ_D , representado pela equação (5.2), e depende da temperatura dos elétrons T , da carga elementar e , da permissividade do vácuo ϵ_0 , da densidade de elétrons N e da constante de Boltzman k_B , isto é

$$\mu = \lambda = \left(\frac{\epsilon_0 k_B T}{N e^2} \right)^{1/2}. \quad (5.2)$$

Na física do estado sólido é conhecido como potencial de Thomas-Fermi, ou potencial de Coulomb blindado. É utilizado na descrição aproximada de íons em um metal, considerando o modelo da nuvem eletrônica e descrevendo os elétrons como um gás [79]. A constante A também surge da interação coulombiana, e é dada por $A = -e^2$. A atenuação μ é chamada parâmetro de Thomas-Fermi, e é representada de diferentes formas a depender do problema estudado [96]. Uma dessas formas [80], por exemplo, depende da temperatura de Fermi T_f , ou seja:

$$\mu = \left(\frac{6\pi e^2 N}{k_B T_f} \right)^{1/2}. \quad (5.3)$$

5.2 A estabilidade das soluções e a atenuação crítica μ_c

As soluções da equação de Schrödinger para o potencial de Yukawa dependem do fator de atenuação, estando o número de estados ligados diretamente relacionado ao valor de μ [88].

Quando $\mu = 0$, o caso é reduzido ao potencial de Coulomb e uma partícula sujeita a esse potencial admite infinitos estados estacionários. De fato, a solução da equação de

Schödinger para o potencial Coulombiano, grande trunfo da mecânica ondulatória, admite infinitas soluções estacionárias atreladas aos números quânticos n , l e m .

Contudo, nem todos potenciais possuem infinitos estados estacionários. Jost e Pais mostraram, em 1951 [85], que a equação de Schrödinger para um elétron de massa m , sujeito ao potencial central $V(r)$, não possui estados ligados se a integral I obedecer à desigualdade

$$I = 2m \int_0^{\infty} r|V(r)|dr < 1, \quad (5.4)$$

em que a constante multiplicativa $2m$ foi adicionada para concordar com nossas unidades. Por outro lado, Bargmann [86] generalizou este resultado em 1952 mostrando que o número de estados estacionários n_l , associado ao momento angular l , obedecerá à inequação

$$(2l + 1)n_l < I. \quad (5.5)$$

Uma inequação ainda mais geral foi obtida por Schwinger em 1960 [87] ao estudar o problema da estabilidade das soluções da equação de Schrödinger para um dado potencial.

Realizando a integração (5.4) para o potencial de Yukawa, não é difícil mostrar que a desigualdade (5.5) implica na relação

$$(2l + 1)n_l < \frac{2mA}{\mu} \quad (5.6)$$

e, em particular, não há soluções estacionárias ($n_l = 0$) quando

$$\mu > 2mA. \quad (5.7)$$

Para outros valores positivos de μ o número de estados ligados é reduzido e, para valores acima de um valor crítico μ_c , não há soluções de estados ligados. Utilizando métodos perturbativos considerando correções de até quinta ordem e métodos variacionais, Edwards et al. [88] obtiveram, em 2017, que o valor mais preciso atualmente para a atenuação crítica μ_c é

$$\frac{\mu_c}{Am} = 1,1906122105(5), \quad (5.8)$$

o que, para $A = 1$ e $m = 1$, nos dá

$$\mu_c = 1,1906122105(5). \quad (5.9)$$

5.3 Soluções aproximadas

Apesar da vasta aplicabilidade, é impossível obter soluções exatas da equação de Schrödinger para o potencial de Yukawa [89]. Neste cenário, muitos métodos aproximados numéricos e analíticos foram desenvolvidos. Além disto, formas aproximadas do potencial de Yukawa, que permitissem o desenvolvimento de cálculos com certa precisão, foram

propostas; dentre elas, o potencial de Hulthén [97] é bem utilizado na literatura e ele será mostrado com mais detalhes na [subseção 5.3.2](#).

Alguns destes métodos partem da aplicação do princípio variacional sobre funções exponenciais do tipo hidrogenoide conhecidas. Em 1962, Harris [90] aplicou o princípio variacional sobre as soluções hidrogenoides 1s, 2s e 3s, obtendo bons resultados aproximados. Em 1994, Gomes et al. [89] utilizaram o método LCAO com uma base de 26 funções para determinação do estado fundamental de um sistema sob o potencial de Yukawa, em função de μ ; este procedimento permitiu determinar, dentre outras coisas, o valor crítico μ_c até a oitava casa decimal de precisão. Garavelli e Oliveira [96], em 1991, aplicaram o método variacional considerando uma solução analítica aproximada que se assemelha à solução coulombiana fundamental 1s do átomo de hidrogênio, adicionada a uma contribuição do mesmo tipo dependente de um parâmetro. Através do método variacional Edwards et al. [88] obtiveram o valor de μ_c mais preciso encontrado até então, como comentado na seção anterior.

O método de perturbação também é empregado na obtenção de soluções aproximadas. Em 2006, Gönül [91] propôs uma metodologia de resolução baseada na teoria de perturbação considerando a expansão de Taylor do potencial de Yukawa e obteve valores de energia para os estados fundamental e excitados muito próximos de valores encontrados na literatura. Dutt et al. [92] aplicaram a teoria de perturbação sobre o potencial de Hulthén, obtendo valores de energia precisos para pequenos valores de μ .

Outros métodos buscam compreender as características do potencial de Yukawa através de soluções numéricas. Rogers et al. [93] buscaram integrar a equação de Schrodinger através do método de diferenças finitas; com isto foi possível estudar, dentre outras coisas, o espectro de energia e o número de estados ligados, obtendo um valor aproximado para μ_c . Li et al. [94] estudaram o comportamento crítico aplicando os métodos Runge-Kutta e Monte Carlo para solução da equação diferencial.

Em 2021, Napsuciale e Rodríguez [95] investigaram o potencial de Yukawa utilizando supersimetria, propondo uma solução analítica obtida através de um procedimento que envolve expansão de Padé dos super potenciais.

Não menos importante, soluções analíticas aproximadas também são encontradas na literatura. Através de um método iterativo Garavelli e Oliveira [96] obtiveram, em 1991, uma função analítica para o potencial de Yukawa em três dimensões em função do parâmetro de blindagem μ (com $l = 0$) que descreve razoavelmente bem o sistema, inclusive para valores de μ próximos ao valor crítico. Além disto, determinaram um valor μ_c aproximado e a forma funcional da energia $E(\mu)$.

Através do método Nikiforov-Uravov (NU), Hamzavi et al. [76] obtiveram uma solução analítica aproximada para o potencial de Hulthén com momento angular arbi-

trário. Os valores de energia obtidos são próximos de resultados presentes na literatura especialmente para baixos valores de $\mu \ll 1$.

As duas metodologias supracitadas serão desenvolvidas com mais detalhes nas próximas subseções. Elas serão utilizadas em nossas propostas no contexto da mecânica quântica no espaço de fase.

5.3.1 A solução analítica via método iterativo

Buscando obter uma solução analítica para a equação de Schrödinger com o potencial de Yukawa, na formulação usual da mecânica quântica, Garavelli e Oliveira [96] propuseram um procedimento iterativo capaz de fornecer uma solução analítica aproximada. Ilustraremos o desenvolvimento proposto pelos autores, que será útil em nossa descrição no contexto da mecânica quântica no espaço de fase, no [Capítulo 6](#).

Partindo da equação de Schrödinger para uma partícula de massa m na representação das coordenadas (5.10),

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (5.10)$$

é possível, através de uma transformada de Fourier, obter a equação análoga na representação do momentum [116–118]

$$\phi(\vec{p}) = \frac{2m}{\vec{p}^2 - 2E} \int \tilde{v}(\vec{p}') \phi(\vec{p} - \vec{p}') d^3p' \quad (5.11)$$

onde $\tilde{v}(p')$ é o potencial transformado e $\phi(p)$ é a função de estado na representação dos momenta.

O processo iterativo é iniciado tendo como ponto de partida a função hidrogenoide, correspondente a $\mu = 0$, que possui simetria esférica, ou seja,

$$\psi(r) = Ne^{-\alpha r}, \quad (5.12)$$

com N sendo uma constante de normalização e α associado à carga nuclear efetiva. A transformação de Fourier deste estado é dada por

$$\phi_0(p) = \frac{A_0}{(p^2 + \alpha_0^2)^2}, \quad (5.13)$$

em que o índice A_1 é uma constante, e α_0 foi definido como

$$\alpha_0 = \sqrt{-2E_0}, \quad (5.14)$$

o que leva a acreditar na dependência da energia E_k em α_k , para todas as ordens de iteração. Portanto, define-se que

$$E_k = -\frac{1}{2}\alpha_k^2. \quad (5.15)$$

Substituindo a função de partida (5.13) no lado direito da equação (5.11), e utilizando o potencial (5.1), encontra-se como resultado o estado

$$\phi_1(p) = \frac{B_1}{(p^2 + \alpha_1^2)(p^2 + \gamma_1^2)}, \quad (5.16)$$

com $\gamma_1 = \alpha_1 + \mu$. Realizando uma nova iteração, os próximos resultados dependerão da função arco-tangente, que pode ser aproximada por seu argumento em muitos casos de interesse. Com esta aproximação, é possível encontrar a relação de recorrência

$$\phi_k(p) = \frac{B_k}{(p^2 + \alpha_k^2)(p^2 + \gamma_k^2)}, \quad (5.17)$$

com o parâmetro γ_k dado por:

$$\gamma_k^2 = (\gamma_{k-1} + \mu)(\alpha_{k-1} + \mu). \quad (5.18)$$

Observa-se que para um número suficientemente grande de iterações, i.e. $k \rightarrow \infty$, estas relações de recorrência convergem para valores finitos. Desta forma, tomando o limite $\alpha_k \rightarrow \alpha$ e $\gamma_k \rightarrow \gamma$, a solução converge para a forma analítica:

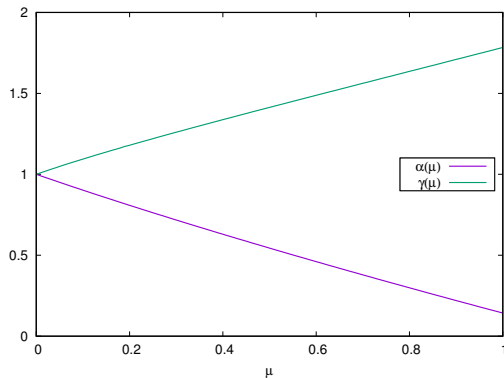
$$\phi(p) = \frac{B}{(p^2 + \alpha^2)(p^2 + \gamma^2)}, \quad (5.19)$$

e os parâmetros α e γ convergem para

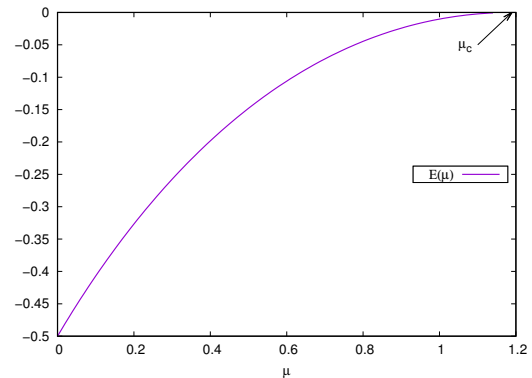
$$\gamma = \left\{ \mu + \alpha + [(\mu + \alpha)(5\mu + \alpha)]^{1/2} \right\} / 2 \quad (5.20)$$

$$\alpha = -\gamma \left\{ 1 + \frac{4(\alpha + \gamma)}{(\gamma - \alpha)^2} \ln \left(\frac{(2\alpha + \mu)(2\gamma + \mu)}{(\alpha + \gamma + \mu)^2} \right) \right\}. \quad (5.21)$$

Nota-se que γ e α dependem unicamente de μ e, da relação (5.15), a energia também dependerá unicamente da atenuação, i.e., $E = E(\mu)$; o valor crítico μ_c é obtido no limite $E \rightarrow 0$. Os gráficos de $\alpha(\mu)$, $\gamma(\mu)$ e $E(\mu)$ são mostrados na Figura 8.



(a) Parâmetros α e γ em função de μ .



(b) Energia em função de μ .

Figura 8 – Gráfico dos parâmetros iterativos e da energia: (a) $\alpha(\mu)$ e $\gamma(\mu)$; (b) $E(\mu)$.

Através de uma transformação de Fourier, a solução (5.19) pode ser escrita na representação das coordenadas na forma abaixo, onde $\lambda = \gamma - \alpha$ é o parâmetro de blindagem, ou seja,

$$\psi(r) = \frac{e^{-\alpha r} - e^{-\gamma r}}{(\gamma - \alpha)r} = e^{-\alpha r} \left(\frac{1 - e^{-\lambda r}}{\lambda r} \right), \quad (5.22)$$

e a expressão da energia é

$$E_k = -\frac{1}{2} \left[-\gamma \left\{ 1 + \frac{4(\alpha + \gamma)}{(\gamma - \alpha)^2} \ln \left(\frac{(2\alpha + \mu)(2\gamma + \mu)}{(\alpha + \gamma + \mu)^2} \right) \right\} \right]^2. \quad (5.23)$$

A função blindada (5.22) corresponde ao estado hidrogenoide atenuado por uma função dependente do parâmetro λ , que guarda informações da blindagem causada pela presença do potencial. A função hidrogenoide (5.13) possui polos em $p = \pm i\alpha_0$, onde α_0 está associada à carga nuclear efetiva. O estado fundamental de uma partícula sob efeito do potencial de Yukawa, ou potencial de Coulomb blindado, possui polos em $p = \pm i\alpha$ e em $p = \pm i\gamma$, surgindo de uma carga γ . Diniz et al. [80,81] argumentam que γ , denominada carga dual, reflete uma quebra de simetria de cargas. Como esperado, para $\lambda r \ll 1$, que ocorre no limite $\gamma \rightarrow \alpha$, a função se comporta como uma hidrogenoide.

Este método foi generalizado por Penna et al. para estados excitados [82]. Esses autores também analisaram a aproximação utilizada no procedimento, mostrando ser quase indistinguíveis as funções com arco-tangente e com o argumento, na aproximação utilizada por Garavelli e Oliveira [96].

O processo foi estendido por Santos, Martins e Vianna [83, 84] para sistemas confinados por potencial do tipo Yukawa considerando o átomo de hélio e íons com dois elétrons. Através da solução analítica da equação de Schrödinger para tal sistema os autores obtiveram valores para a energia fundamental e atenuação crítica μ_c , que concordam com valores obtidos por outros métodos presentes na literatura, para vários sistemas com dois elétrons.

5.3.2 Solução via método Nikiforov-Uravov

Buscando solucionar analiticamente a equação de Schrödinger para um momento angular arbitrário, no contexto da formulação usual da mecânica quântica, Hamzavi et al. aplicaram o método Nikiforov-Uravov, descrito no Capítulo 4, à equação de Schrödinger com o potencial de Yukawa aproximado pelo potencial de Hulthén [97,98]. Nesta subseção apresentaremos o desenvolvimento dos autores, que será útil na descrição utilizada por nós no contexto da mecânica quântica no espaço de fase no Capítulo 7.

A equação de Schrödinger para uma partícula, sob a influência de um potencial do

tipo Yukawa, é dada por:

$$\left[\frac{\hat{P}^2}{2m} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (5.24)$$

onde, na representação usual das coordenadas, o operador momentum é dado por $\hat{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$ e o operador posição é dado por $\hat{r} = r$. Utilizando coordenadas esféricas e o método de separação de variáveis, essa equação pode ser representada numa parte angular e outra parte radial. Considerando uma solução separável no formato $\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{R(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi)$, a equação obedecida pela parte radial será

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + 2m \left(E + V_0 \frac{e^{-ar}}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) = 0. \quad (5.25)$$

Para solucionar a equação (5.25) podemos usar a aproximação do potencial de Hulthen [97] presente na literatura [119], que é válida para $\mu r \ll 1$,

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\mu^2 \frac{e^{-2\mu r}}{(1 - e^{-2\mu r})^2}. \quad (5.26)$$

Com isto, o termo radial do potencial de Yukawa é escrito como

$$\frac{1}{r} \approx 2\mu \frac{e^{-\mu r}}{(1 - e^{-2\mu r})} \quad (5.27)$$

e, assim, $V(r)$ em (5.24) toma a forma também conhecida como potencial de Hulthén, ou seja:

$$V(r) = -2\mu A \frac{e^{-2\mu r}}{(1 - e^{-2\mu r})}, \quad (5.28)$$

com V_0 de (5.25) dado por $-2\mu A$.

Nota-se que a aproximação realizada em (5.28) é razoável dentro do limite citado, de acordo com o gráfico da Figura 9. Ela será fundamental para a obtenção de um resultado analítico para o problema.

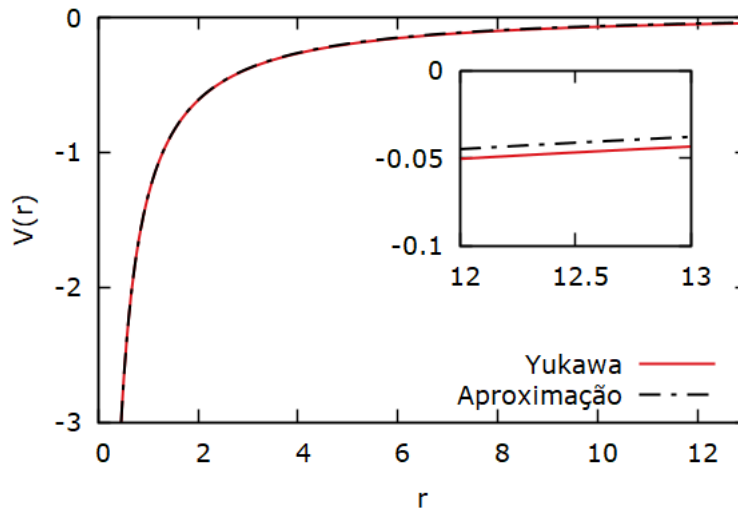


Figura 9 – O potencial de Yukawa e o potencial de Hulthén, com $A = \sqrt{2}$ e $\mu = 0,05 A$.

A equação radial (5.25) aproximada pode, então, ser escrita na forma:

$$\frac{\partial^2 R_{nl}(r)}{\partial r^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + 2\mu A \frac{e^{-2\mu r}}{(1 - e^{-2\mu r})} \right) - \ell(\ell + 1)4\mu^2 \frac{e^{-2\mu r}}{(1 - e^{-2\mu r})^2} \right] R_{nl}(r) = 0. \quad (5.29)$$

Para simplificar essa equação, definiremos a constante positiva definida $\epsilon = -2mE$, e uma coordenada $s = s(r)$ dada por

$$s = e^{-2\mu r}, \quad (5.30)$$

o que nos dá a equação (5.29) nesta nova variável como

$$\frac{d^2}{ds^2} R_{nl}(s) + \frac{(1-s)}{s(1-s)} \frac{d}{ds} R_{nl}(s; \vec{p}) + \frac{1}{s^2(1-s)^2} \left[\frac{-\epsilon}{4\mu^2 \hbar^2} + \frac{mA}{\mu \hbar^2} s(1-s) - \ell(\ell + 1)s \right] R_{nl}(s) = 0. \quad (5.31)$$

Nota-se que essa equação diferencial possui o formato da equação paramétrica de Schrödinger (4.54), apresentada no Capítulo 4, isso é:

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1 - \alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{[s(1 - \alpha_3 s)]^2} \right] \psi_n(s) = 0 \quad (5.32)$$

que, de acordo com o método Nikiforov-Uravov, possui solução geral dada por (4.72), ou seja:

$$\psi(s) = s^{\alpha_{12}} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} P_n^{\left(\alpha_{10}-1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10}-1\right)} (1 - 2\alpha_3 s), \quad (5.33)$$

em que $P_n^{(\alpha, \beta)}$ são os polinômios de Jacobi, e os coeficientes são dados por

$$\begin{aligned} & \alpha_2 n - (2n + 1)\alpha_5 + (2n + 1)(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \\ & + n(n - 1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} = 0 \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$\begin{aligned} \alpha_4 &= \frac{1}{2}(1 - \alpha_1), \quad \alpha_5 = \frac{1}{2}(\alpha_2 - 2\alpha_3) \\ \alpha_6 &= \alpha_5^2 + \xi_1, \quad \alpha_7 = 2\alpha_4 \alpha_5 - \xi_2 \\ \alpha_8 &= \alpha_4^2 + \xi_3, \quad \alpha_9 = \alpha_3 \alpha_7 + \alpha_3^2 \alpha_8 + \alpha_6 \\ \alpha_{10} &= \alpha_1 + 2\alpha_4 + 2\sqrt{\alpha_8} \\ \alpha_{11} &= \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \\ \alpha_{12} &= \alpha_4 + \sqrt{\alpha_8}, \quad \alpha_{13} = \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}). \end{aligned} \quad (5.35)$$

Observando a equação (5.31) e comparando com (5.32), identificamos os coeficientes

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 1, \quad \xi_1 = \frac{mA}{a} + \frac{\epsilon}{4a^2} \\ \alpha_2 &= 1, \quad \xi_2 = \frac{2\epsilon}{4a^2} + \frac{mA}{a} - l(l + 1) \\ \alpha_3 &= 1, \quad \xi_3 = \frac{\epsilon}{4a^2}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Usando as relações (5.35), obtemos os demais coeficientes:

$$\begin{aligned}
\alpha_4 &= 0, & \alpha_5 &= -\frac{1}{2} \\
\alpha_6 &= \frac{1}{4} + \frac{mA}{\mu\hbar^2} + \frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2} \\
\alpha_7 &= -\frac{2\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2} - \frac{mA}{\mu\hbar^2} + \ell(\ell+1) \\
\alpha_8 &= \frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2}, & \alpha_9 &= \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 \\
\alpha_{10} &= 1 + 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2}}, & \alpha_{11} &= 2\ell + 3 + 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2}} \\
\alpha_{12} &= \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2}}, & \alpha_{13} &= -\left(\ell + 1 + \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2}}\right).
\end{aligned} \tag{5.37}$$

Com os resultados (5.37) e a equação (5.34), encontramos os autovalores de energia

$$E_{nl} = -\frac{\mu^2\hbar^2 \left[\frac{mA}{\mu\hbar^2} - (n + \ell + 1)^2 \right]^2}{2m (n + \ell + 1)^2}, \tag{5.38}$$

com a restrição física $n + \ell + 1 \leq \sqrt{\frac{mA}{\mu}}$. Além disto, as autofunções correspondentes $R_{nl}(s)$ serão dadas por

$$R_{nl}(r) = N e^{-\sqrt{\varepsilon}r} (1 - e^{-2\mu r})^{\ell+1} P_n \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}}^{2\ell+1} - \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}} \right) (1 - 2e^{-2\mu r}), \tag{5.39}$$

onde foi utilizada a definição (5.30), e os resultados (5.35) e (5.36) na expressão (5.33).

Portanto, a solução analítica da equação (5.25), com a aproximação do potencial de Hulthén, será:

$$\psi_{nl}(r, \theta, \varphi) = N \frac{1}{r} e^{-\sqrt{\varepsilon}r} (1 - e^{-2\mu r})^{\ell+1} P_n \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}}^{2\ell+1} - \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}} \right) (1 - 2e^{-2\mu r}) Y_{lm}(\theta, \varphi), \tag{5.40}$$

com os autovalores de energia determinados por (5.38).

6 O Potencial de Yukawa no formalismo de Wigner

No capítulo anterior foram apresentados resultados do potencial de Yukawa presentes na literatura no contexto da formulação usual da mecânica quântica. Neste capítulo iremos estudar esse potencial numa concepção da mecânica quântica no espaço de fase. Para isto, utilizaremos a transformação de Wigner no resultado analítico de Garavelli e Oliveira. A função normalizada e gráficos para diferentes valores da atenuação μ serão apresentados. Além disso, através do cômputo do índice de não-classicalidade do sistema em função da atenuação, será mostrado o comportamento desse índice no limite em que μ tende ao valor crítico.

6.1 A função de Wigner do estado fundamental

Obteremos a função de Wigner do estado fundamental de uma partícula sob o potencial de Yukawa através da solução analítica aproximada da equação de Schrödinger discutida na seção anterior. Assim, usaremos a definição da função de Wigner (2.24), e utilizaremos o estado fundamental na representação dos momenta (5.19).

Sabe-se que a função de Wigner de um estado puro $\psi(\vec{r})$ ou $\phi(\vec{p})$ pode ser calculada, respectivamente, por:

$$W(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{(\pi\hbar)^3} \int \psi^*(\vec{r} + \vec{s}) \psi(\vec{r} - \vec{s}) e^{\frac{2i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{s}} d^3 \vec{s} \quad (6.1)$$

$$W(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{(\pi\hbar)^3} \int \phi^*(\vec{p} + \vec{s}) \phi(\vec{p} - \vec{s}) e^{-\frac{2i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{s}} d^3 \vec{s}. \quad (6.2)$$

Considerando a função do estado fundamental na representação dos momenta (5.19), com uma constante de normalização B , teremos

$$\phi(\vec{p}) = \frac{B}{(p^2 + \alpha^2)(p^2 + \gamma^2)} \quad (6.3)$$

que, substituída na relação (6.2) e utilizando coordenadas esféricas com o vetor \vec{p} alinhado com o eixo z , sem perda de generalidade, obteremos a integral

$$W(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{B^2}{(\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\exp\left(-\frac{2i}{\hbar} r s \cos(\theta)\right) s^2 \sin(\theta) d\varphi d\theta ds}{(\alpha^2 + (p-s)^2)(\alpha^2 + (p+s)^2)(\gamma^2 + (p-s)^2)(\gamma^2 + (p+s)^2)} \quad (6.4)$$

que, após efetuar as integrações nas variáveis φ e θ , assume a forma

$$W(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{2B^2}{(\pi\hbar)^2} J \quad (6.5)$$

onde a integral J é dada por

$$J = \int_0^\infty \frac{s \sin\left(\frac{2rs}{\hbar}\right) ds}{r(\alpha^2 + (p-s)^2)(\alpha^2 + (p+s)^2)(\gamma^2 + (p-s)^2)(\gamma^2 + (p+s)^2)}. \quad (6.6)$$

Para determinar J , utilizaremos técnicas de análise complexa; mais especificamente, o teorema de resíduos [3, 114]. Sabendo que é válida a identidade

$$e^{i\frac{2rs}{\hbar}} = \cos\left(\frac{2rs}{\hbar}\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{2rs}{\hbar}\right),$$

definiremos a função complexa

$$f(z) = \frac{z}{r(\alpha^2 + (p-z)^2)(\alpha^2 + (p+z)^2)(\gamma^2 + (p-z)^2)(\gamma^2 + (p+z)^2)}, \quad (6.7)$$

e convenientemente escolheremos o contorno representado na Figura 10,

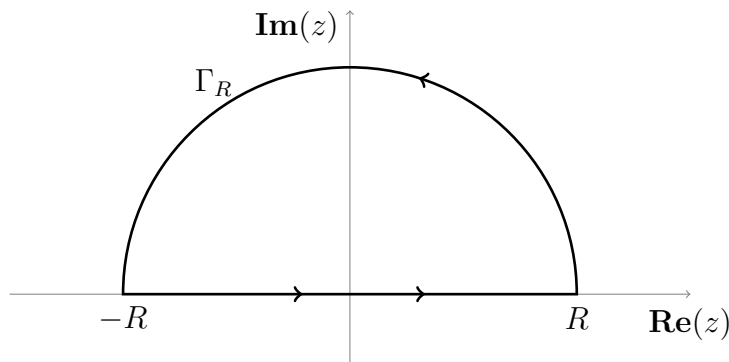


Figura 10 – Contorno utilizado na resolução da integral de resíduos.

de forma que a integral no caminho fechado pode ser escrita como

$$\oint f(z) \exp\left(i\frac{2rz}{\hbar}\right) dz = \int_{-R}^R f(x) \cos\left(\frac{2rx}{\hbar}\right) dx + i \int_{-R}^R f(x) \sin\left(\frac{2rx}{\hbar}\right) dx + \int_{\Gamma_R} f(z) dz \quad (6.8)$$

em que Γ_R é a semicircunferência de raio R orientada no sentido anti-horário.

No limite em que $R \rightarrow \infty$, a integral na semi-circunferência se anulará, de acordo com o lema de Jordan [3], uma vez que $|f(z)| \leq M/R^k$ na parametrização $z = Re^{i\theta}$, onde M é uma constante arbitrária e deve-se ter $k > 1$. Neste problema temos $k = 7$, atendendo às condições do lema. A relação (6.8) pode então ser escrita como:

$$K = \oint f(z) \exp\left(i\frac{2rz}{\hbar}\right) dz = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cos\left(\frac{2rx}{\hbar}\right) dx + i \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \sin\left(\frac{2rx}{\hbar}\right) dx, \quad (6.9)$$

de modo que a integral J será a metade da parte complexa de K , pois o integrando de J é par e está sendo integrado em apenas metade do domínio. Logo,

$$J = \frac{1}{2} \operatorname{Im}(K). \quad (6.10)$$

Por outro lado, a integral no contorno fechado pode ser calculada com o teorema de resíduos, ou seja,

$$\oint f(z) \exp\left(i\frac{2rz}{\hbar}\right) dz = 2\pi i \sum_i \text{Res}(f(z), z_i) \quad (6.11)$$

onde os polos z_i são internos ao contorno de integração.

A função $f(z)$ possui oito polos simples, nos pontos

$$z_{\pm\pm}^{\alpha} = \pm p \pm \alpha \quad \text{e} \quad z_{\pm\pm}^{\gamma} = \pm p \pm \gamma \quad (6.12)$$

dos quais apenas os polos $z_{\pm\pm}^{\alpha}$ e $z_{\pm\pm}^{\gamma}$ são internos ao contorno. Calculando os resíduos para estes valores de z , e simplificando o resultado, obtemos

$$\begin{aligned} K = \oint f(z) \exp\left(i\frac{2rz}{\hbar}\right) dz = 2i\pi & \left(-\frac{ie^{-\frac{2ir(p-i\gamma)}{\hbar}}}{8\gamma pr (\gamma^2 - \alpha^2) (\alpha^2 - \gamma^2 + 4p^2 - 4i\gamma p)} \right. \\ & + \frac{ie^{\frac{2ir(p+i\gamma)}{\hbar}}}{8\gamma pr (\gamma^2 - \alpha^2) (\alpha^2 - \gamma^2 + 4p^2 + 4i\gamma p)} \\ & - \frac{ie^{-\frac{2ir(p-i\alpha)}{\hbar}}}{8\alpha pr (\alpha^2 - \gamma^2) (-\alpha^2 + \gamma^2 + 4p^2 - 4i\alpha p)} \\ & \left. + \frac{ie^{\frac{2ir(p+i\alpha)}{\hbar}}}{8\alpha pr (\alpha^2 - \gamma^2) (-\alpha^2 + \gamma^2 + 4p^2 + 4i\alpha p)} \right). \end{aligned} \quad (6.13)$$

Comparando (6.10) com (6.13) determina-se J . Utilizando esse valor em (6.5) é possível determinar a função de Wigner $W(\vec{r}, \vec{p})$; antes, ajustaremos a constante A de modo a normalizar esta função, i.e.,

$$\int W(\vec{r}, \vec{p}) d^3r d^3p = 1, \quad (6.14)$$

o que implica definirmos

$$B = 4\sqrt{\alpha\gamma(\alpha + \gamma)^3} \quad (6.15)$$

e, portanto, das expressões (6.5), (6.10), (6.13), (6.14) e (6.15) teremos finalmente a função de Wigner referente ao estado fundamental normalizada, dada por:

$$\begin{aligned}
W(\vec{r}, \vec{p}; \mu) = & \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{32\alpha\gamma(\alpha + \gamma)^3}{\pi\hbar^2} \left(-\frac{\alpha^2 e^{-\frac{2\gamma r}{\hbar}} \sin\left(\frac{2pr}{\hbar}\right)}{4\gamma pr (\gamma^2 - \alpha^2) \left((\alpha^2 - \gamma^2 + 4p^2)^2 + 16\gamma^2 p^2\right)} \right. \\
& + \frac{\alpha e^{-\frac{2\alpha r}{\hbar}} \sin\left(\frac{2pr}{\hbar}\right)}{4pr (\alpha^2 - \gamma^2) \left((-\alpha^2 + \gamma^2 + 4p^2)^2 + 16\alpha^2 p^2\right)} \\
& + \frac{\gamma e^{-\frac{2\gamma r}{\hbar}} \sin\left(\frac{2pr}{\hbar}\right)}{4pr (\gamma^2 - \alpha^2) \left((\alpha^2 - \gamma^2 + 4p^2)^2 + 16\gamma^2 p^2\right)} \\
& - \frac{p e^{-\frac{2\gamma r}{\hbar}} \sin\left(\frac{2pr}{\hbar}\right)}{\gamma r (\gamma^2 - \alpha^2) \left((\alpha^2 - \gamma^2 + 4p^2)^2 + 16\gamma^2 p^2\right)} \\
& - \frac{p e^{-\frac{2\alpha r}{\hbar}} \sin\left(\frac{2pr}{\hbar}\right)}{\alpha r (\alpha^2 - \gamma^2) \left((-\alpha^2 + \gamma^2 + 4p^2)^2 + 16\alpha^2 p^2\right)} \\
& - \frac{\gamma^2 e^{-\frac{2\alpha r}{\hbar}} \sin\left(\frac{2pr}{\hbar}\right)}{4\alpha pr (\alpha^2 - \gamma^2) \left((-\alpha^2 + \gamma^2 + 4p^2)^2 + 16\alpha^2 p^2\right)} \\
& + \frac{e^{-\frac{2\gamma r}{\hbar}} \cos\left(\frac{2pr}{\hbar}\right)}{r (\gamma^2 - \alpha^2) \left((\alpha^2 - \gamma^2 + 4p^2)^2 + 16\gamma^2 p^2\right)} \\
& \left. + \frac{e^{-\frac{2\alpha r}{\hbar}} \cos\left(\frac{2pr}{\hbar}\right)}{r (\alpha^2 - \gamma^2) \left((-\alpha^2 + \gamma^2 + 4p^2)^2 + 16\alpha^2 p^2\right)} \right), \tag{6.16}
\end{aligned}$$

em que $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ e $p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}$. Nota-se que a função de Wigner possui dependência direta com a atenuação, uma vez que os parâmetros α e β possuem dependência em μ .

6.2 Gráficos da função de Wigner

Uma forma de analisar a função de Wigner é através do seu gráfico. Contudo, a função (6.16) depende originalmente de um parâmetro, μ , e seis coordenadas, sendo três espaciais e três de momenta. Para que seja possível representar num gráfico 3D, há duas possibilidades: plotar em função das coordenadas radiais r e p ou considerar quatro das seis variáveis constantes. Nas subseções a seguir serão apresentados os gráficos em ambos os formatos.

6.2.1 Função de Wigner em função de x e p_x

Como explicado na seção 6.2, para representar graficamente a função de Wigner (6.16), que originalmente depende de seis variáveis e um parâmetro, uma das formas é considerar as coordenadas y , z , p_x e p_y constantes, e variar apenas as coordenadas x , p_x e

o parâmetro μ . Neste caso, as variáveis r e p , se tornarão

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \sqrt{x^2 + C_1} \\ p &= \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2} = \sqrt{p_x^2 + C_2}, \end{aligned} \quad (6.17)$$

em que C_1 e C_2 são constantes reais. Os gráficos nas Figuras 11-15 foram obtidos considerando $y = z = p_y = p_z = 1$ e $\hbar = 1$.

Observa-se que a função de Wigner apresenta valores negativos para $\mu = 0,01$ e a região negativa cresce com o aumento de μ . O mapa apresentado na parte inferior dos gráficos explicita este fato.

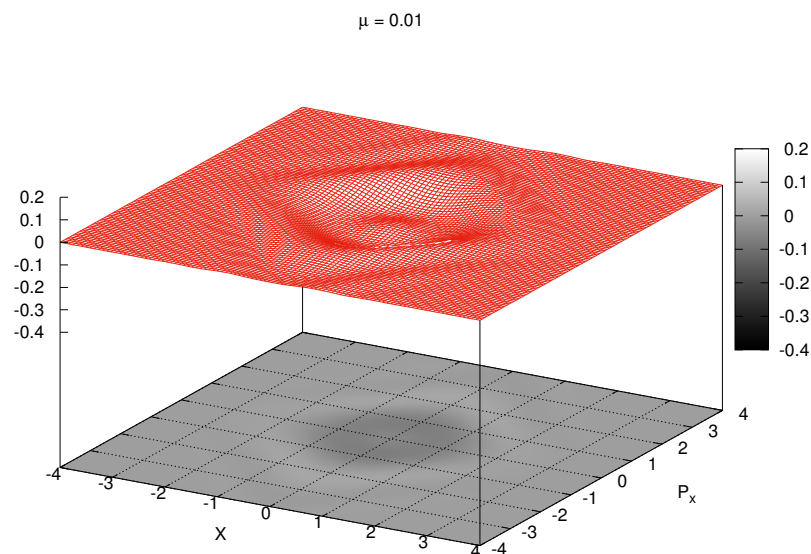


Figura 11 – Função de Wigner normalizada do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,01$.

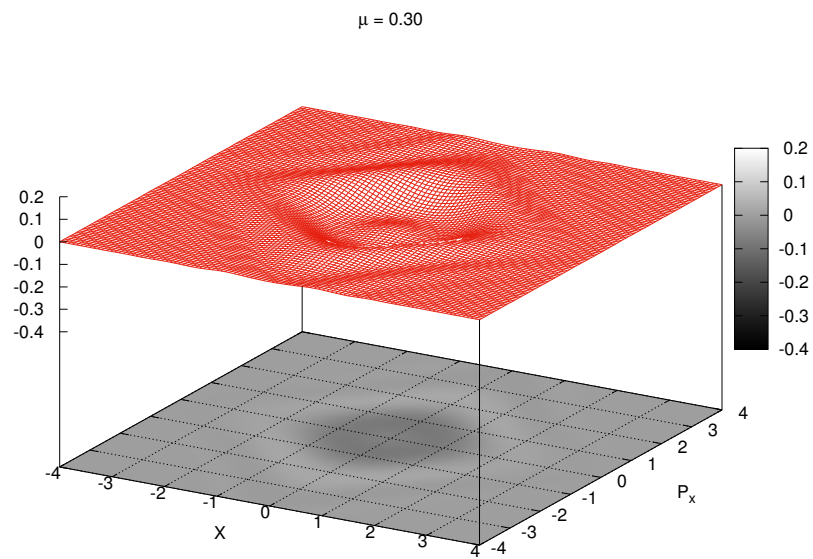


Figura 12 – Função de Wigner normalizada do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,30$.

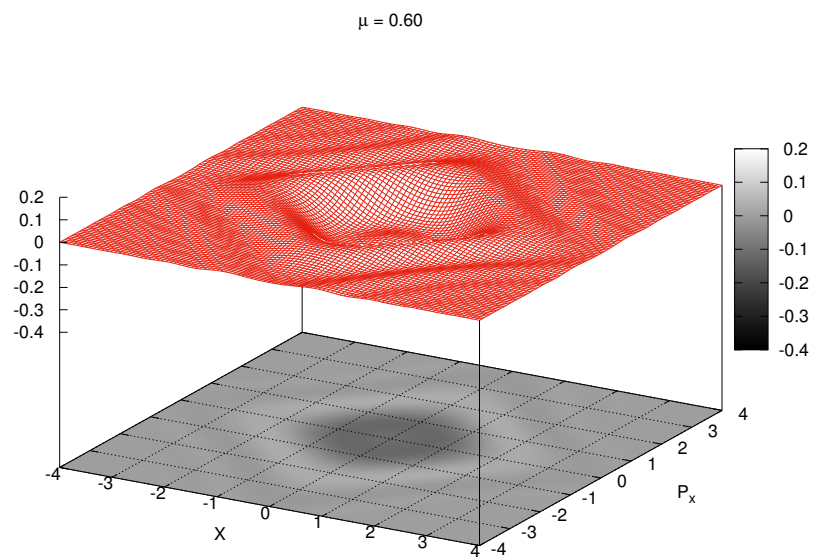


Figura 13 – Função de Wigner normalizada do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,60$.

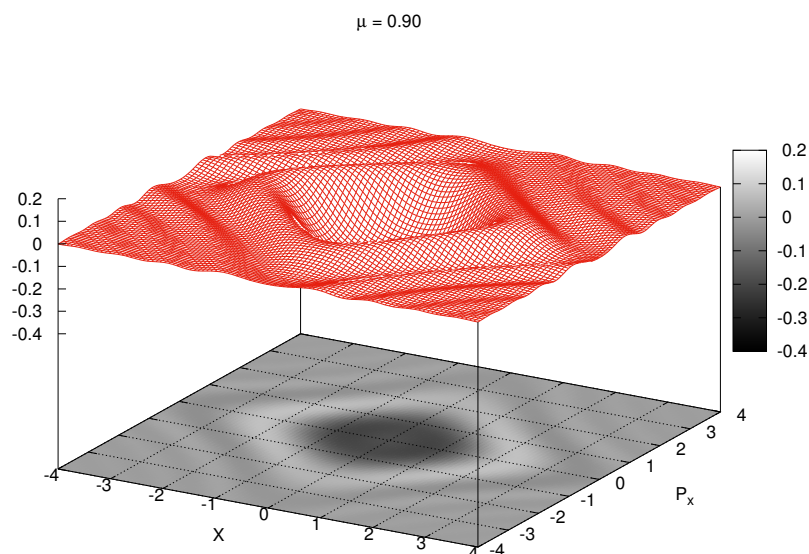


Figura 14 – Função de Wigner normalizada do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,90$.

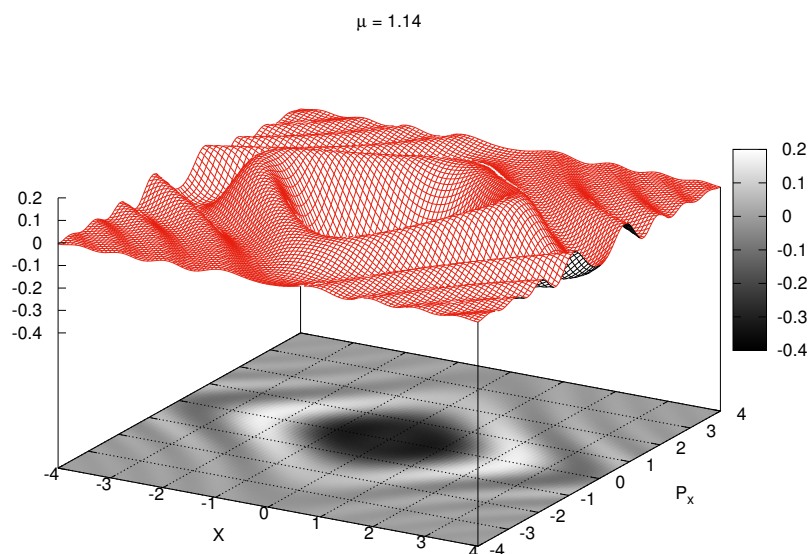


Figura 15 – Função de Wigner normalizada do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=1,14$.

6.2.2 Função de Wigner em função dos parâmetros radiais

Outra representação para (6.16) a ser observada é em termos das coordenadas radiais; ela será útil na análise de classicalidade do sistema. Observa-se que, na equação (6.16), a dependência da função de Wigner está nas coordenadas radiais. Contudo, é de interesse avaliar os gráficos das quasidistribuições radiais na forma $r^2 p^2 W(r, p)$, que

surgirão nas integrais com coordenadas esféricas no espaço de fase. Os gráficos nas Figuras 16-20 foram obtidos nessas condições e com $\hbar = 1$.

Observa-se que a função de Wigner apresenta valores negativos para $\mu = 0,01$ e a região negativa cresce com o aumento de μ , assim como observado na seção anterior. O mapa apresentado na parte inferior dos gráficos explicita este fato.

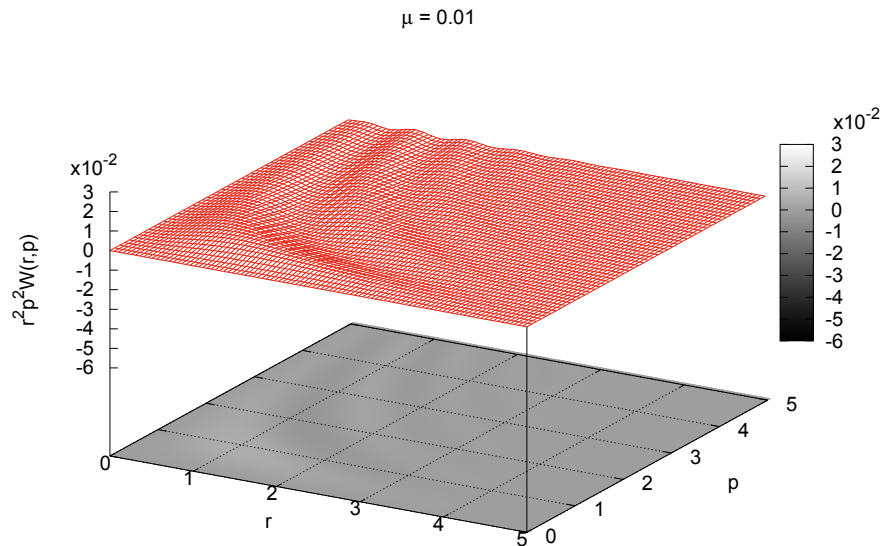


Figura 16 – Função $r^2 p^2 W(r, p; \mu)$ do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,01$, em função das coordenadas radiais.

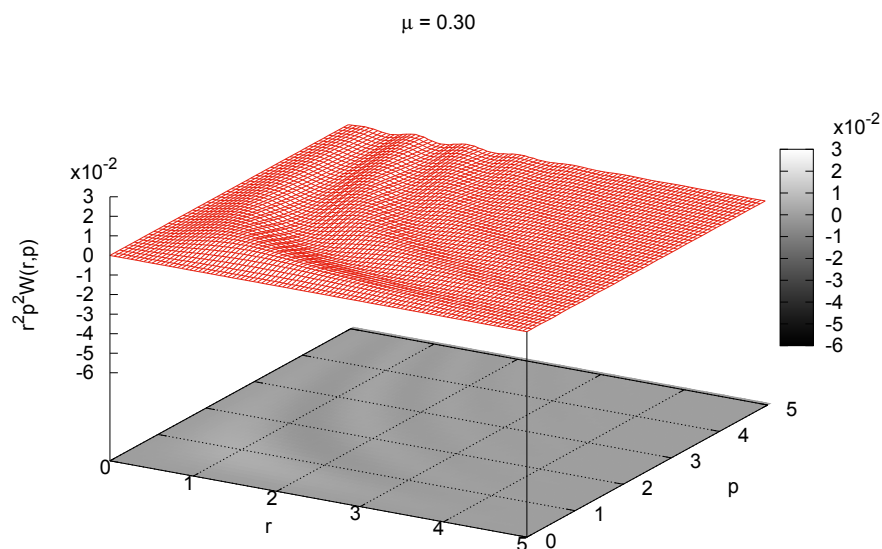


Figura 17 – Função $r^2 p^2 W(r, p; \mu)$ do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,30$, em função das coordenadas radiais.

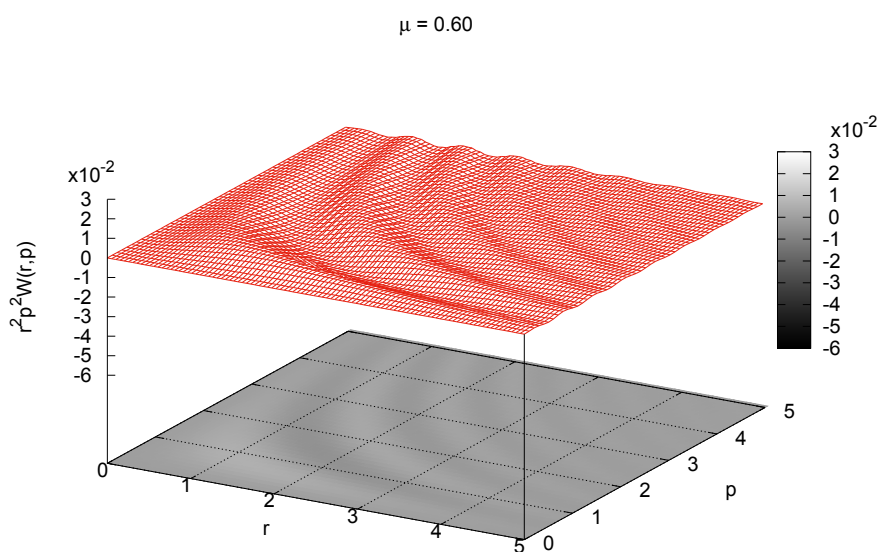


Figura 18 – Função $r^2 p^2 W(r, p; \mu)$ do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,60$, em função das coordenadas radiais.

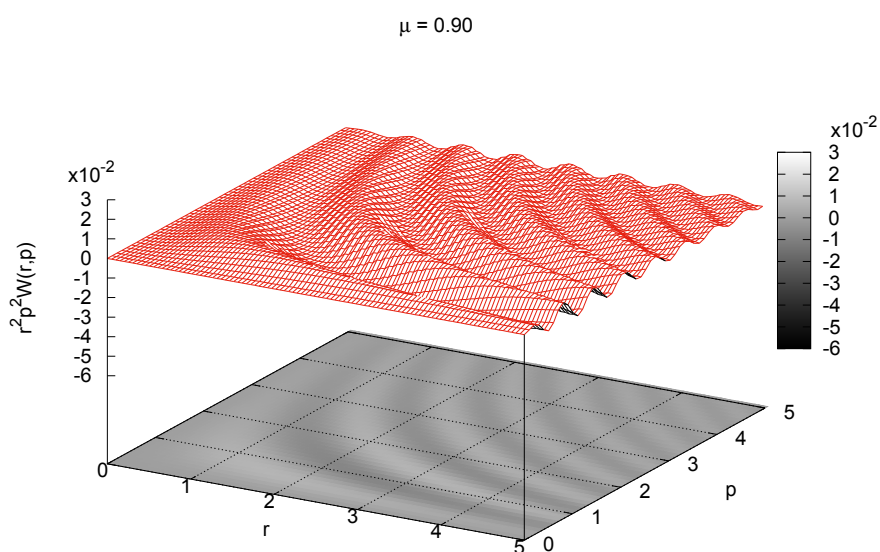


Figura 19 – Função $r^2 p^2 W(r, p; \mu)$ do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=0,90$, em função das coordenadas radiais.

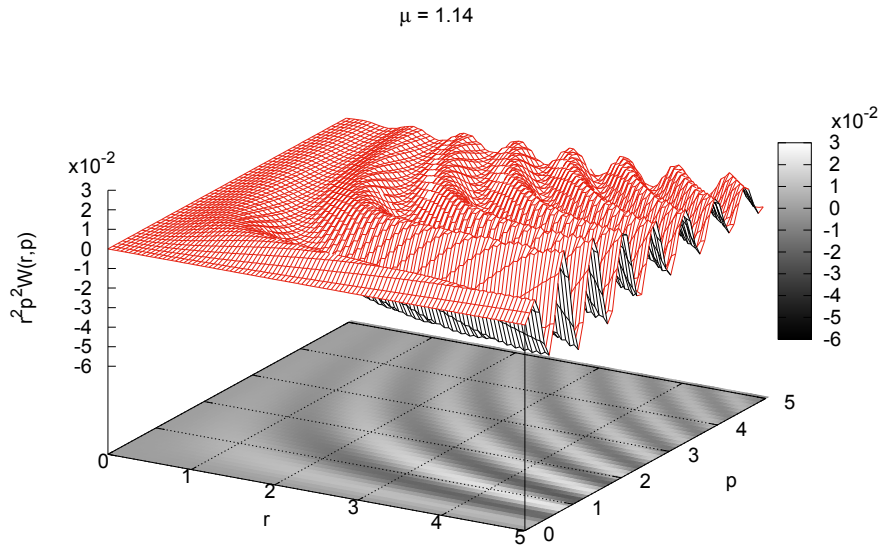


Figura 20 – Função $r^2 p^2 W(r, p; \mu)$ do estado fundamental do potencial de Yukawa para $\mu=1,14$, em função das coordenadas radiais.

6.3 Análise de classicalidade do sistema

Tendo determinado a Função de Wigner, uma informação de interesse a se extrair dessa distribuição de quasi-probabilidade é a não-classicalidade do sistema. O indicador de classicalidade η , como apresentado na [subseção 2.8.2](#), é definido por

$$\eta = \int dqdp |W(q, p)| - \int dqdp W(q, p), \quad (6.18)$$

sendo a integral avaliada em todo espaço de fase. No caso do sistema estudado, teremos três variáveis de posição e três variáveis de momentum. Como a função possui simetria radial, essas integrais podem ser reduzidas a integrais duplas em r e em p , ou seja:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int dqdp |W(q, p)| \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty |W(q, p)| r^2 dr d\theta_r d\phi_r p^2 dp d\theta_p d\phi_p \\ &= (4\pi)^2 \int_0^\infty \int_0^\infty dr dp r^2 p^2 |W(q, p)|. \end{aligned} \quad (6.19)$$

e, de forma análoga,

$$\begin{aligned} I_2 &= \int dqdp W(q, p) \\ &= (4\pi)^2 \int_0^\infty \int_0^\infty dr dp r^2 p^2 W(q, p). \end{aligned} \quad (6.20)$$

Devido ao formato da função $r^2 p^2 |W(q, p)|$ [ver eq. (6.16)], faz-se necessário a utilização de métodos numéricos para o cômputo da integral dupla, o que será descrito na [subseção 6.3.1](#).

No que se refere à expressão (6.18) o significado físico é que quanto maior o valor de $\eta(\mu)$, mais características quânticas o sistema apresenta. Sabe-se da literatura que os valores negativos evidenciam o caráter quântico de estados de superposição, caoticidade em sistemas quânticos e emaranhamento. Quanto mais negativa a função de Wigner, mais não-clássico será o sistema.

6.3.1 Descrição dos cálculos

Para realizar a integração utilizamos um método de análise numérica chamado Segunda Regra de Simpson (SRS) [120, 121] (também conhecido como Regra dos 3/8). Este método aproxima numericamente a integral definida de uma função por uma soma de valores da função calculados em pontos do intervalo de integração.

Seja uma função $f(x)$ que se busca saber a integral definida no intervalo $[a, b]$. Subdividindo este intervalo em n subintervalos de igual comprimento $h = (b - a)/n$, o valor aproximado pode ser determinado através da expressão [120]

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &\approx \frac{3h}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + 2f(x_3) + 3f(x_4) + 3f(x_5) \\ &\quad + 2f(x_6) + \cdots + 3f(x_{n-2}) + 3f(x_{n-1}) + f(x_n)] \\ &= \frac{3h}{8} \left[f(x_0) + 3 \sum_{i \neq 3k}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{j=1}^{n/3-1} f(x_{3j}) + f(x_n) \right]. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Quanto maior o número de subintervalos utilizados na aproximação, melhor o resultado; contudo, o custo computacional também aumenta consideravelmente. O erro máximo da aproximação pela Segunda Regra de Simpson composta para integrais simples, pode ser estimado através da relação [121]

$$\epsilon_1 = -\frac{h^4}{80}(b-a) \max_{\xi \in [a,b]} f^{(4)}(\xi), \quad (6.22)$$

ou seja, o erro máximo dependerá do valor máximo da quarta derivada da função no domínio de integração $f^{(4)}(\xi)$.

No caso de integrais duplas o método é adaptado da seguinte maneira: seja a função de duas variáveis $f(x, y)$, e $\mathcal{A} = [a, b] \times [c, d]$ uma região em \mathbb{R}^2 ; a integral dupla pode então ser aproximada por

$$\int_a^b \int_c^d f(x, y) dx dy = \int_a^b \left[\int_c^d f(x, y) dy \right] dx = \int_a^b G(x, y) dx, \quad (6.23)$$

em que a integral $G(x, y)$ é dada por:

$$G(x, y) = \int_c^d f(x, y) dy, \quad (6.24)$$

e usa-se a aproximação (6.21) na (6.24) e na (6.23), para as variáveis y e x , respectivamente.

Subdividindo o intervalo $[a, b]$ em n subintervalos de igual comprimento $h = (b - a)/n$, e o intervalo $[c, d]$ em m subintervalos de igual comprimento $k = (d - c)/m$, o erro máximo da Segunda Regra de Simpson composta para integrais duplas pode ser estimado através da expressão [120]:

$$\epsilon_2 = -\frac{(b-a)(d-c)}{80} \left[h^4 \max_{\xi \in \mathcal{A}} \frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(\xi) + k^4 \max_{\xi \in \mathcal{A}} \frac{\partial^4 f}{\partial y^4}(\xi) \right]. \quad (6.25)$$

Nós escolhemos este método por ser de simples implementação e fornecer resultados precisos com custo computacional não muito elevado. Como resultado, pudemos calcular o indicador de não-classicalidade para diferentes valores de μ e que será apresentado na subseção 6.3.2.

6.3.2 Resultados numéricos

Para implementação computacional do método Segunda Regra de Simpson (SRS) usamos a linguagem $C++$ por sua alta velocidade e desempenho. Escrevemos um código computacional para obter o indicador de não-classicalidade em função do parâmetro μ . Os resultados são apresentados nesta seção.

Os cálculos foram realizados com os parâmetros apresentados na Tabela 3. Além destes, em todos os cálculos realizados consideramos $\hbar = 1$. Os resultados obtidos foram bem precisos. Com efeito, a Figura 21 mostra o resultado da integral de normalização $\sigma(\mu) = (4\pi)^2 \int_0^\infty \int_0^\infty dr dp r^2 p^2 W(q, p)$ cujo valor analítico exato é 1, calculado numericamente pelo método SRS. Observa-se que o erro máximo cometido na aproximação, neste caso, é na ordem de 0,002.

	Posição (r)	Momentum (p)
Início	0	0
Fim	10	100
Nro. de divisões	999	6666
Passo na grade	0,01	0,15

Tabela 3 – Parâmetros utilizados no cálculo numérico da integral.

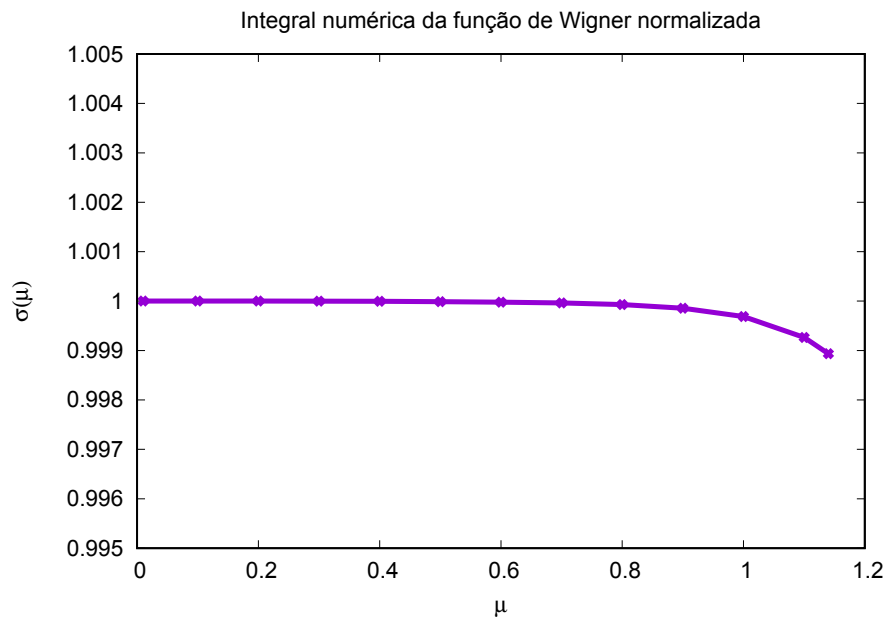


Figura 21 – Integral numérica da função de Wigner normalizada.

O gráfico da função $\eta(\mu)$ é apresentado na Figura 22. Nota-se que no limite $\mu \rightarrow 0$, a função $\eta(\mu)$ é diferente de zero. O volume da região negativa da função de Wigner neste limite indica que, segundo esta aproximação, o potencial coulombiano já apresenta não-classicalidade, e seu indicador de classicalidade é diferente de zero. Além disto, observa-se um comportamento assintótico para $\mu \rightarrow \mu_c$.

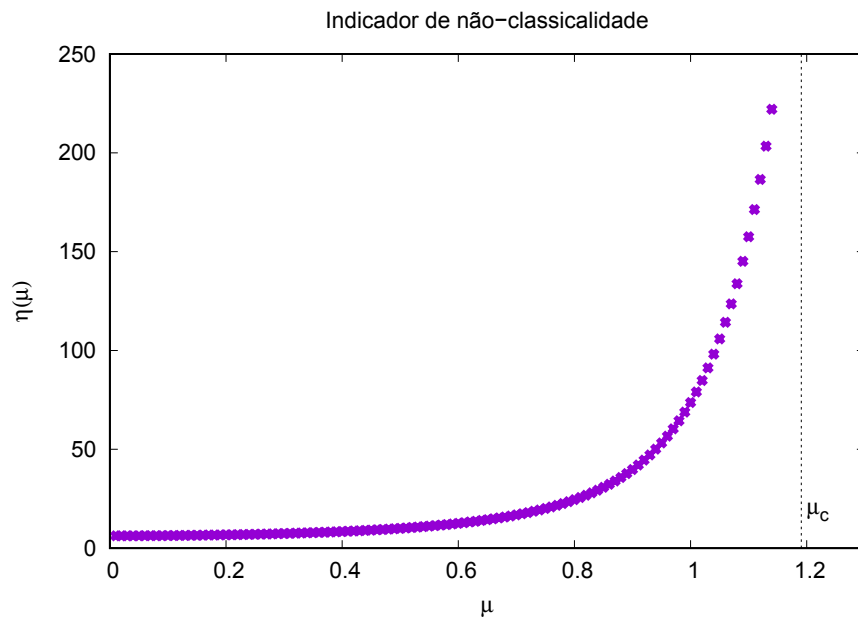


Figura 22 – Indicador de não classicalidade do sistema submetido ao potencial de Yukawa, obtido através do cálculo numérico das integrais (6.19) e (6.20), com $W(r, p)$ dada por (6.16).

Os valores do gráfico da Figura 22 permitem determinar uma forma empírica para

a função $\eta(\mu)$ através de regressão não linear usando o método dos mínimos quadrados. Devido ao comportamento assintótico, podemos propor, por exemplo, a função hiperbólica generalizada

$$y(x) = A - \frac{B}{(1 + Cx)^{1/D}} \quad (6.26)$$

que depende dos parâmetros de ajuste A , B , C e D ; os dados do ajuste que obtivemos são apresentados na [Tabela 4](#). Observa-se que o coeficiente de determinação R^2 (COD) e o coeficiente de determinação ajustado (Adj. R^2), que leva em consideração o número de parâmetros de ajuste, apresentam valores muito bons, estando muito próximos de 1; o coeficiente χ^2 reduzido, relacionado à variância dos pontos ajustados, está próximo de 0, indicando que a função ajustada descreve bem o conjunto [122]. Além disto, os erros associados a cada parâmetro da regressão também são baixos, indicando que os resultados estão precisos.

Equação	$y(x) = A - B/(1 + C*x)^{(1/D)}$
A	$5,37832 \pm 0,04475$
B	$-0,80684 \pm 0,01573$
C	$-0,60517 \pm 0,0022$
D	$0,20922 \pm 0,00214$
χ^2 Reduzido	0,0343
R^2 (COD)	0,99998
Adj. R^2	0,99998

Tabela 4 – Parâmetros da expressão (6.26).

Seguindo a relação empírica, existe um valor $\mu = \xi$ onde o índice de não-classicalidade diverge, tendendo a infinito; com objetivo de investigar a relação deste ponto com a atenuação crítica μ , determinamos esse valor. A [Figura 23](#) apresenta a função (6.26) e sua assíntota em $\mu = \xi \pm \delta\xi$ em que, pela expressão (6.26),

$$\xi = -1/C \quad e \quad \delta\xi = \left| \frac{\partial\xi}{\partial C} \right|_{C' = C} \delta C. \quad (6.27)$$

Com efeito, obtivemos

$$\xi = 1,652 \pm 0,006. \quad (6.28)$$

É possível que uma solução exata apresente assíntota em μ_c , por ser o ponto crítico do sistema. É válido lembrar que a função de Wigner obtida é baseada numa solução analítica aproximada da equação de Schrödinger. A discrepância entre ξ e μ_c pode estar relacionada com a aproximação utilizada.

A [Figura 24](#) apresenta os valores com os erros estimados pela relação (6.25). Estes valores podem ser vistos com mais detalhes na [Tabela 5](#).

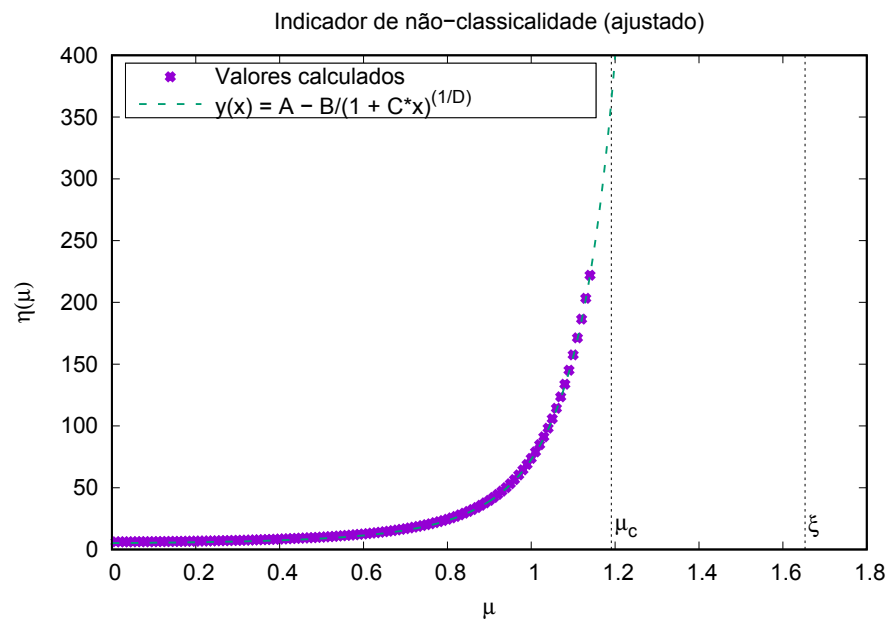


Figura 23 – Indicador de não-classicalidade do potencial de Yukawa, em função da atenuação, com a função ajustada (6.26).

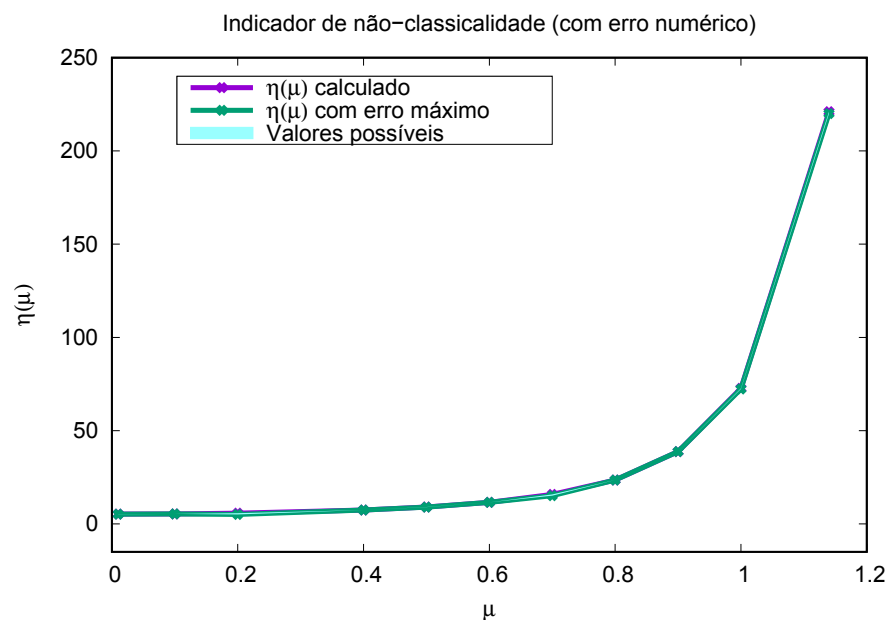


Figura 24 – Indicador de não-classicalidade do potencial de Yukawa, calculada pelas relações (6.21) e (6.25), em função da atenuação, apresentando comportamento assintótico próximo ao valor crítico μ_c e com erro estimado nas integrações numéricas.

μ	$I_2 = \int dr dp W(r, p)$	ϵ_{I_2}	$I_1 = \int dr dp W(r, p) $	ϵ_{I_1}
0,010000	1,000002	-0,010890	6,236817	-0,062865
0,100000	1,000002	-0,010836	6,362605	-0,017028
0,200000	1,000001	-0,010746	6,734542	-0,670237
0,400000	0,999995	-0,010533	8,415469	-0,016543
0,500000	0,999989	-0,010435	10,015079	-0,016383
0,600000	0,999979	-0,010354	12,559679	-0,016246
0,700000	0,999962	-0,010301	16,819175	-0,670284
0,800000	0,999929	-0,010306	24,508817	-0,021076
0,900000	0,999857	-0,010497	39,795219	-0,021136
1,000000	0,999689	-0,011570	73,694064	-0,336584
1,140000	0,998937	-0,020577	222,010684	-1,015827

Tabela 5 – Valores das integrais numéricas e seus erros associados.

7 Descrição tridimensional via separação de variáveis

Neste capítulo resolveremos a Equação de Schrödinger no espaço de fase para uma partícula no \mathbb{R}^3 submetida ao potencial de Yukawa usando a Mecânica Quântica Simplética. Para isto, nos baseamos em procedimentos utilizados para o problema coulombiano [46, 47], definindo uma transformação que torna a equação no espaço de fase semelhante à equação usual. Supondo uma solução separável, resolvemos a equação radial aplicando o método NU, tendo como base o trabalho de Hamzavi et al. [76] e apresentamos a solução geral. É proposta uma solução particular, onde fazemos uma conexão com a solução no formalismo usual na representação das posições apresentada no [Capítulo 5](#).

7.1 A Equação de Schrödinger no espaço de fase

Na Mecânica Quântica Simplética o estado do sistema $|\psi\rangle$ pode ser representado em termos dos autokets $|\Gamma(q, p)\rangle$, de forma que

$$\langle \Gamma(q, p) | \psi \rangle = \psi(q, p) \quad (7.1)$$

em que a representação dos operadores \hat{Q} e \hat{P} , nesta formulação, é [50]

$$\hat{P} = p - \frac{i\hbar}{2} \partial_q \quad (7.2)$$

$$\hat{Q} = q + \frac{i\hbar}{2} \partial_p. \quad (7.3)$$

Os estados independentes do tempo são encontrados resolvendo a Equação de Schrödinger no Espaço de Fase (ESEF) dada por

$$h(q, p) \star \psi(q, p) = E\psi(q, p) \quad (7.4)$$

em que \star é o produto estrela,

$$\star = \exp \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q \right) \right] \quad (7.5)$$

e $h(q, p)$ é o hamiltoniano no espaço de fase, obtido do hamiltoniano clássico

$$h(q, p) = \frac{\vec{p}^2}{2M} + V(q) \quad (7.6)$$

com uso de (7.2) e (7.3).

No problema em questão, teremos o potencial de Yukawa, também conhecido como potencial de Debye-Hückel:

$$V(r) = -A \frac{e^{-\mu r}}{r}. \quad (7.7)$$

Generalizando para três dimensões, a equação independente do tempo será, de (7.4), (7.5) e (7.6),

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi = E\psi, \quad (7.8)$$

onde $E < 0$ e a posição e momento, em coordenadas retangulares, podem ser escritos como

$$\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k} \quad (7.9)$$

e

$$\vec{p} = p_x\hat{i} + p_y\hat{j} + p_z\hat{k}. \quad (7.10)$$

Então, tem-se

$$\vec{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2. \quad (7.11)$$

Na formulação da MQS, os operadores de posição e momentum x_i e p_i são representados por

$$\begin{aligned} x &\rightarrow \hat{X}' = x + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_x} \\ y &\rightarrow \hat{Y}' = y + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_y} \\ z &\rightarrow \hat{Z}' = z + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_z} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p_x &\rightarrow \hat{P}'_x = p_x - \frac{i\hbar}{2}\partial_x \\ p_y &\rightarrow \hat{P}'_y = p_y - \frac{i\hbar}{2}\partial_y \\ p_z &\rightarrow \hat{P}'_z = p_z - \frac{i\hbar}{2}\partial_z. \end{aligned}$$

Então a eq. (7.8) se torna

$$\left[\frac{1}{2m}(\hat{P}'_x{}^2 + \hat{P}'_y{}^2 + \hat{P}'_z{}^2) + V(\hat{X}', \hat{Y}', \hat{Z}') \right] \psi(\vec{r}, \vec{p}) = E\psi(\vec{r}, \vec{p}). \quad (7.12)$$

Pode-se mostrar [55, 56] que são válidas as identidades:

$$\left(q_j + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_j} \right)^n = \exp \left[-\frac{2iq_j p_j}{\hbar} \right] \left(2q_j + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_j} \right)^n \exp \left[\frac{2iq_j p_j}{\hbar} \right] \quad (7.13)$$

$$\left(p_j - \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_j} \right)^n = \exp \left[-\frac{2iq_j p_j}{\hbar} \right] \left(-\frac{i\hbar}{2}\partial_{q_j} \right)^n \exp \left[\frac{2iq_j p_j}{\hbar} \right] \quad (7.14)$$

$$V(\hat{X}', \hat{Y}', \hat{Z}') = \exp \left[-\frac{2i}{\hbar} \vec{r}' \cdot \vec{p}' \right] V(X, Y, Z) \exp \left[\frac{2i}{\hbar} \vec{r}' \cdot \vec{p}' \right] \quad (7.15)$$

onde $q_j = x, y, z$, $p_j = p_x, p_y, p_z$ e as variáveis X, Y e Z são dadas por:

$$X = 2x + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_x}, \quad Y = 2y + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_y}, \quad Z = 2z + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_z}. \quad (7.16)$$

Assim, a eq. (7.12) se torna

$$\exp\left[-\frac{2i}{\hbar}\vec{r}\cdot\vec{p}\right] \left\{ \frac{1}{2m} \left[\left(-\frac{i\hbar}{2}\partial_x\right)^2 + \left(-\frac{i\hbar}{2}\partial_y\right)^2 + \left(-\frac{i\hbar}{2}\partial_z\right)^2 \right] + V(X, Y, Z) \right\} \cdot \exp\left[\frac{2i}{\hbar}\vec{r}\cdot\vec{p}\right] \psi(\vec{r}, \vec{p}) = E\psi(\vec{r}, \vec{p}). \quad (7.17)$$

Definindo a transformação

$$\Omega(X, Y, Z; \vec{p}) = \exp\left[-\frac{2i}{\hbar}\vec{r}\cdot\vec{p}\right] \psi(\vec{r}, \vec{p}), \quad (7.18)$$

pode-se reescrever a eq. (7.17) num formato semelhante à equação de Schrödinger na formulação usual da mecânica quântica, que passa a ter a forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) + V(X, Y, Z) \right] \Omega(X, Y, Z; \vec{p}) = E\Omega(X, Y, Z; \vec{p}), \quad (7.19)$$

onde deve-se notar que X, Y e Z são operadores diferenciais e não comutam com \vec{p} . Para indicar isto, no nosso desenvolvimento, X, Y e Z sempre serão escritos antes de \vec{p} . Trataremos X, Y e Z como variáveis e, após encontrar a solução, resgataremos o caráter de operador. Além disto, como consequência das transformações, temos

$$\begin{aligned} \partial_x &= \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial X}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial x} \left(2x + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_x} \right) \frac{\partial}{\partial X} = 2 \frac{\partial}{\partial X} \\ \partial_y &= \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial Y}{\partial y} \frac{\partial}{\partial Y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(2y + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_y} \right) \frac{\partial}{\partial Y} = 2 \frac{\partial}{\partial Y} \\ \partial_z &= \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial Z}{\partial z} \frac{\partial}{\partial Z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(2z + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p_z} \right) \frac{\partial}{\partial Z} = 2 \frac{\partial}{\partial Z}. \end{aligned}$$

Para resolver (7.19), utilizaremos o método da separação de variáveis. Lembrando que a transformação de coordenadas cartesianas para coordenadas esféricas é dada por

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi \quad e \quad z = r \cos \theta \quad (7.20)$$

e o laplaciano associado, neste caso, será

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

Adaptaremos nossas coordenadas canônicas X, Y, Z e \vec{P} , no espaço de fase, as escrevendo como

$$X = R \sin \Theta \cos \Phi \quad Y = R \sin \Theta \sin \Phi \quad Z = R \cos \Theta$$

A eq. (7.19), então, se torna

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2 \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{R^2 \sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right] + V(R, \Theta, \Phi) \right\} \Omega(R, \Theta, \Phi; \vec{p}) = E \Omega(R, \Theta, \Phi; \vec{p}). \quad (7.21)$$

Buscando soluções separáveis para tal equação, consideraremos uma solução na forma

$$\Omega(R, \Theta, \Phi; \vec{p}) = \frac{u(R; \vec{p})}{R} \chi(\Theta, \Phi; \vec{p}) \quad (7.22)$$

que, substituída em (7.21), resulta em duas equações separadas

$$\frac{\partial^2 u(R; \vec{p})}{\partial R^2} + \left[\frac{2M}{\hbar^2} (E - V(R)) - \frac{l(l+1)}{R^2} \right] u(R; \vec{p}) = 0 \quad (7.23)$$

e

$$\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial \chi(\Theta, \Phi; \vec{p})}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 \chi(\Theta, \Phi; \vec{p})}{\partial \Phi^2} + \ell(\ell+1) \chi(\Theta, \Phi; \vec{p}) = 0, \quad (7.24)$$

cuja constante de separação foi escolhida por conveniência como $\ell(\ell+1)$. Lembremos que R , Θ e Φ são operadores e, portanto, não necessariamente comutam com \vec{p} . Na nossa notação, os manteremos sempre à direita de \vec{p} . A solução de ambas equações será discutida nas seções seguintes.

7.1.1 A solução da equação angular

Para solucionar a equação (7.24) podemos propor uma solução separável do tipo

$$\chi(\Theta, \Phi; \vec{p}) = v(\Theta; \vec{p}) w(\Phi; \vec{p}). \quad (7.25)$$

Com isto, obtemos as equações

$$\left\{ \frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m}{\sin^2 \Theta} \right] \right\} v(\Theta; \vec{p}) = 0 \quad (7.26)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} + m \right) w(\Phi; \vec{p}) = 0. \quad (7.27)$$

Propondo uma transformação para a coordenada $\xi = \cos \Theta$ e buscando, para a equação (7.26), uma solução expandida em série de potências de ξ ,

$$v(\Theta; \vec{p}) = \sum_{i=0}^{\infty} \xi^i C_i(p), \quad (7.28)$$

encontra-se a solução

$$v_{\ell m}(\Theta; \vec{p}) = N_{\ell m} P_{\ell}^m(\cos \Theta) C'_{\ell}(p), \quad (7.29)$$

em que P_ℓ^m são os polinômios associados de Legendre [114], $N_{\ell m}$ é uma constante de normalização e $C'(\vec{p})$ é uma função arbitrária que obedece a condição

$$\int_p d\vec{p} \left| \frac{d^j}{dp^j} C'(\vec{p}) \right| < \infty. \quad (7.30)$$

Procedendo de forma semelhante para solucionar a equação (7.27), obtém-se como solução a função

$$w_m(\Phi; \vec{p}) = N_m \exp(im\Phi) C''(\vec{p}), \quad (7.31)$$

onde N_m é uma constante de normalização e $C''(\vec{p})$ é uma função que também deverá obedecer a condição

$$\int_p d\vec{p} \left| \frac{d^j}{dp^j} C''(\vec{p}) \right| < \infty. \quad (7.32)$$

A equação (7.24), como se sabe, é recorrente na mecânica quântica e define as funções especiais denominadas harmônicos esféricos. Sua solução é bem estabelecida na literatura [3, 114] e, em termos da nossa notação (sem incluir as funções de p), é escrita como:

$$\chi_{\ell m}(\Theta, \Phi; \vec{p}) = A_\ell^m P_\ell^m(\cos \Theta) e^{im\Phi} \quad (7.33)$$

onde a constante de normalização A_ℓ^m tem a forma

$$A_\ell^m = \sqrt{\frac{(2\ell + 1)(\ell - m)!}{4\pi(\ell + m)!}}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (7.34)$$

e P_ℓ^m representa os polinômios especiais de Legendre.

7.1.2 A solução da equação radial

Para solucionar a equação radial utilizaremos um procedimento semelhante ao adotado por Hamzavi et al. [76], no contexto do formalismo usual da mecânica quântica, buscando uma solução analítica aproximada para o potencial de Yukawa. Neste cenário, utilizando o método Nikiforov-Uravov, que foi discutido no [Capítulo 4](#), e a aproximação do potencial de Hulthén, mostraremos os passos sistemáticos para obtenção do resultado.

Para solucionar a equação (7.23) é conveniente utilizarmos a aproximação do potencial de Hulthén, que é válida para $\mu r \ll 1$. Nesta aproximação considera-se

$$\frac{1}{R^2} \approx 4\mu^2 \frac{e^{-2\mu R}}{(1 - e^{-2\mu R})^2}. \quad (7.35)$$

Com isto, o termo radial do potencial de Yukawa é escrito como

$$\frac{1}{R} \approx 2\mu \frac{e^{-\mu R}}{(1 - e^{-2\mu R})} \quad (7.36)$$

e, por fim, o potencial toma a forma

$$V(R) = -2\mu A \frac{e^{-2\mu R}}{(1 - e^{-2\mu R})}. \quad (7.37)$$

A equação radial (7.23) aproximada pode então ser escrita como

$$\frac{\partial^2 u(R; \vec{p})}{\partial R^2} + \left[\frac{2M}{\hbar^2} \left(E + 2\mu A \frac{e^{-2\mu R}}{(1 - e^{-2\mu R})} \right) - \ell(\ell + 1)4\mu^2 \frac{e^{-2\mu R}}{(1 - e^{-2\mu R})^2} \right] u(R; \vec{p}) = 0 \quad (7.38)$$

e, para simplificá-la, definiremos a constante positiva definida $\epsilon = -2mE$ e uma coordenada $S = S(R)$, dada por:

$$S = e^{-2\mu R}. \quad (7.39)$$

A equação para esta nova variável toma a forma

$$\frac{d^2}{dS^2} u(S; \vec{p}) + \frac{(1 - S)}{S(1 - S)} \frac{d}{dS} u(S; \vec{p}) + \frac{1}{S^2(1 - S)^2} \left[\frac{-\epsilon}{4\mu^2 \hbar^2} + \frac{MA}{\mu \hbar^2} S(1 - S) - \ell(\ell + 1)S \right] u(S; \vec{p}) = 0. \quad (7.40)$$

Note que a equação possui o formato da equação de Schrödinger paramétrica, cuja solução foi discutida na [seção 4.4](#), ou seja, tem a forma

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{\alpha_1 - \alpha_2 s}{s(1 - \alpha_3 s)} \frac{d}{ds} + \frac{-\xi_1 s^2 + \xi_2 s - \xi_3}{[s(1 - \alpha_3 s)]^2} \right] \psi_n(s) = 0 \quad (7.41)$$

que, de acordo com o método Nikiforov-Uravov, possui solução geral

$$\psi(s) = s^{\alpha_{12}} (1 - \alpha_3 s)^{-\alpha_{12} - \frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}} P_n^{\left(\alpha_{10} - 1, \frac{\alpha_{11}}{\alpha_3} - \alpha_{10} - 1\right)} (1 - 2\alpha_3 s), \quad (7.42)$$

em que $P_n^{(\alpha, \beta)}$ são os polinômios de Jacobi, e os coeficientes são dados por:

$$\begin{aligned} \alpha_2 n - (2n + 1)\alpha_5 + (2n + 1)(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \\ + n(n - 1)\alpha_3 + \alpha_7 + 2\alpha_3 \alpha_8 + 2\sqrt{\alpha_8 \alpha_9} = 0 \end{aligned} \quad (7.43)$$

$$\begin{aligned} \alpha_4 &= \frac{1}{2}(1 - \alpha_1), & \alpha_5 &= \frac{1}{2}(\alpha_2 - 2\alpha_3) \\ \alpha_6 &= \alpha_5^2 + \xi_1, & \alpha_7 &= 2\alpha_4 \alpha_5 - \xi_2 \\ \alpha_8 &= \alpha_4^2 + \xi_3, & \alpha_9 &= \alpha_3 \alpha_7 + \alpha_3^2 \alpha_8 + \alpha_6 \end{aligned} \quad (7.44)$$

$$\begin{aligned} \alpha_{10} &= \alpha_1 + 2\alpha_4 + 2\sqrt{\alpha_8} \\ \alpha_{11} &= \alpha_2 - 2\alpha_5 + 2(\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}) \\ \alpha_{12} &= \alpha_4 + \sqrt{\alpha_8}, & \alpha_{13} &= \alpha_5 - (\sqrt{\alpha_9} + \alpha_3 \sqrt{\alpha_8}). \end{aligned}$$

Observando a equação (7.40) e comparando com (7.41), identificamos os coeficientes

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 1, & \xi_1 &= \frac{MA}{a} + \frac{\epsilon}{4a^2} \\ \alpha_2 &= 1, & \xi_2 &= \frac{2\epsilon}{4a^2} + \frac{MA}{a} - l(l + 1) \\ \alpha_3 &= 1, & \xi_3 &= \frac{\epsilon}{4a^2}. \end{aligned} \quad (7.45)$$

Usando as relações (5.35), obtemos os demais coeficientes

$$\begin{aligned}
\alpha_4 &= 0, & \alpha_5 &= -\frac{1}{2} \\
\alpha_6 &= \frac{1}{4} + \frac{MA}{\mu\hbar^2} + \frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2} \\
\alpha_7 &= -\frac{2\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2} - \frac{MA}{\mu\hbar^2} + \ell(\ell+1) \\
\alpha_8 &= \frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2}, & \alpha_9 &= \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 \\
\alpha_{10} &= 1 + 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2}}, & \alpha_{11} &= 2\ell + 3 + 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2}} \\
\alpha_{12} &= \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2}}, & \alpha_{13} &= -\left(\ell + 1 + \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2\hbar^2}}\right).
\end{aligned} \tag{7.46}$$

Com os resultados (7.46) e a equação (7.43), encontramos que os autovalores de energia são:

$$E_{nl} = -\frac{\mu^2\hbar^2}{2M} \frac{\left[\frac{MA}{\mu\hbar^2} - (n + \ell + 1)^2\right]^2}{(n + \ell + 1)^2}, \tag{7.47}$$

com a restrição física $n + \ell + 1 \leq \sqrt{\frac{MA}{\mu}}$. Além disto, suas autofunções $u_{nl}(R; \vec{p})$ serão dadas por

$$u_{nl}(R; \vec{p}) = N e^{-\sqrt{\varepsilon}R} (1 - e^{-2\mu R})^{\ell+1} P_n \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}}^{2\ell+1} - \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}} \right) (1 - 2e^{-2\mu R}) C(\vec{p}), \tag{7.48}$$

onde foi utilizada a definição (7.39), e os resultados (7.44) e (7.45) na expressão geral (7.42). A função $C(\vec{p})$ também deve obedecer a relação

$$\int_p d\vec{p} \left| \frac{d^j}{dp^j} C(\vec{p}) \right| < \infty. \tag{7.49}$$

7.1.3 A solução geral

Reunindo a transformação (7.25) e as soluções (7.29), (7.31) e (7.48), encontramos finalmente a função de quasi-amplitude para a ESEF com o potencial de Yukawa aproximado por (7.37), ou seja:

$$\begin{aligned}
\Psi_{nlm}(\vec{r}; \vec{p}) &= \exp\left(-\frac{2i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right) \frac{1}{R} N_{nl} e^{-\sqrt{\varepsilon}R} (1 - e^{-2\mu R})^{\ell+1} P_n \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}}^{2\ell+1} - \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}} \right) (1 - 2e^{-2\mu R}) C(\vec{p}) \\
&\quad \cdot N_{\ell m} P_{\ell}^m(\cos \Theta) C'(\vec{p}) \cdot N_m \exp(im\Phi) C''(\vec{p})
\end{aligned} \tag{7.50}$$

em que N_{nl} , $N_{\ell m}$ e N_m são constantes de normalização, e as $C(\vec{p})$, $C'(\vec{p})$ e $C''(\vec{p})$ são funções arbitrárias do momento, que obedecem as condições (7.30), (7.32) e (7.49), respectivamente.

7.2 Uma solução particular

A solução (7.50), no geral, pode ter dependências muito complicadas entre \vec{r} e \vec{p} , não podendo separar as partes. Uma escolha conveniente para as funções do momento pode ser assumida de modo que consigamos separá-las. Um exemplo é o seguinte:

$$C(\vec{p}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{2i}{\hbar} \vec{r}_0 \cdot \vec{p}\right) \quad (7.51)$$

$$C'(\vec{p}) = C''(\vec{p}) = 1 \quad (7.52)$$

em que $\vec{r}_0 = x_0 \hat{i} + y_0 \hat{j} + z_0 \hat{k}$ é composto pelos autovalores do operador posição. De fato, a eq. (7.51) não obedece à condição imposta anteriormente em todo o espaço, mas pode-se escolher uma região arbitrariamente grande mas finita de forma que a integral (7.49) convirja.

Usando (7.52) segue que

$$v_{\ell m}(\Theta; \vec{p}) = N_{\ell m} P_{\ell}^m(\cos \Theta) C'(p) = N_{\ell m} P_{\ell}^m(\cos \Theta) \quad (7.53)$$

$$w_m(\Phi; \vec{p}) = N_m \exp(im\Phi) C''(\vec{p}) = N_m \exp(im\Phi). \quad (7.54)$$

Por outro lado, da (7.51), através da expansão em potências de X , Y e Z , que foram definidos em (7.16), utilizando a propriedade

$$\left(x + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_x}\right)^i \left(y + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_y}\right)^j \left(z + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_z}\right)^k C(p) = (x - x_0)^i (y - y_0)^j (z - z_0)^k C(p) \quad (7.55)$$

obtém-se a solução da parte radial

$$u_{nl}(R; \vec{p}) = N e^{-\sqrt{\varepsilon}|\vec{r}-\vec{r}_0|} \left(1 - e^{-2\mu|\vec{r}-\vec{r}_0|}\right)^{\ell+1} \cdot P_n \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}}, 2\ell+1 - \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}}\right) \left(1 - 2e^{-2\mu|\vec{r}-\vec{r}_0|}\right) (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{2i}{\hbar} \vec{r}_0 \cdot \vec{p}\right), \quad (7.56)$$

de modo que a solução particular do problema, para as funções $C(\vec{p})$ escolhidas, se torna:

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}; \vec{p}) = \exp\left(-\frac{2i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} N_{nl} e^{-\sqrt{\varepsilon}|\vec{r}-\vec{r}_0|} \left(1 - e^{-2\mu|\vec{r}-\vec{r}_0|}\right)^{\ell+1} \cdot P_n \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}}, 2\ell+1 - \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}}\right) \left(1 - 2e^{-2\mu|\vec{r}-\vec{r}_0|}\right) Y_{\ell m}(\Theta, \Phi) (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{2i}{\hbar} \vec{r}_0 \cdot \vec{p}\right), \quad (7.57)$$

em que $Y_{\ell m}(\Theta, \Phi) = N_{\ell m} P_{\ell}^m(\cos \Theta) \exp(im\Phi)$ são os harmônicos esféricos. Note que, exceto pelo fator de fase $\exp\left(-\frac{2i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right)$, posição e momento estão completamente separados nesta solução particular. Além disto, \vec{r} e \vec{p} são vetores no espaço de fase, diferentemente da variável-operador R , definida em termos de derivadas (7.16), e está presente na solução geral (7.50).

7.3 Conexão com o formalismo usual

Como mostramos no [Capítulo 5](#) é possível obter, dentro da formulação usual da Mecânica Quântica, soluções aproximadas para o potencial de Yukawa, no mínimo por dois processos: um, usando o potencial de Yukawa exato e procurando uma solução aproximada da equação de Schrödinger por um processo iterativo; outro considerando a aproximação do potencial de Hulthén (5.26) para o potencial de Yukawa e usando o método Nikiforov-Uvarov para determinar os autovalores e as autofunções da equação de Schrödinger. No presente capítulo consideramos a Mecânica Quântica Simplética e a correspondente Equação de Schrödinger no Espaço de Fase e determinamos sua solução para o potencial de Yukawa aproximado pela equação (5.26). Desta forma é interessante comparar esse resultado com aqueles do [Capítulo 5](#), o que apresentaremos nas seções a seguir; especificamente comparamos as energias, as funções de estado e discutimos a função de Wigner.

7.3.1 Os valores de energia

Comparando a equação (7.47) com a (5.38), observa-se que a energia em função de μ , obtida no presente capítulo utilizando o formalismo do espaço de fase, possui a mesma forma funcional que a encontrada por Hamzavi et al. obtida utilizando o formalismo usual e o método Nikiforov-Uvarov, como apresentado na [subseção 5.3.2](#) do [Capítulo 5](#); compararemos, então, esta com os valores de Garavelli e Oliveira. A [Figura 25](#) apresenta os valores da energia em unidades atômicas (7.47) do estado fundamental ($l = 0$) em função do parâmetro μ . Para isto utilizou-se $\hbar = A = m = 1$.

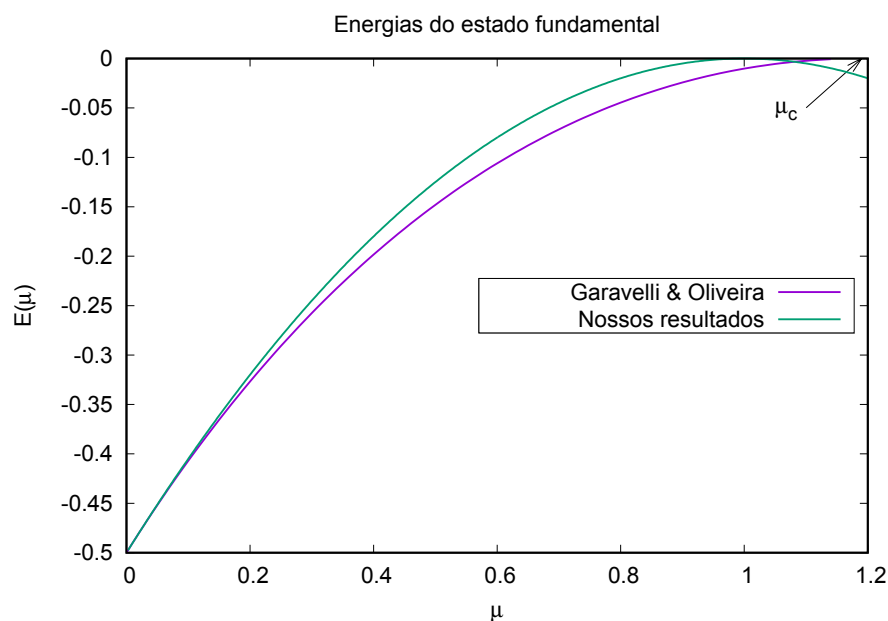


Figura 25 – Valores da energia para o estado fundamental de uma partícula sujeita ao potencial de Yukawa em função de μ .

Note que ambas aproximações possuem comportamentos próximos para pequenos valores da atenuação, e a discrepância entre elas aumenta com o crescimento de μ . Considerando a energia obtida através do processo iterativo de Garavelli e Oliveira obtém-se um bom valor crítico μ_c . Nosso resultado, como o de Hamzavi et al., prevê $\mu_c = 1$. De fato, a aproximação do potencial de Hulthén é válida para $\mu r \ll 1$.

7.3.2 As funções de estado e os parâmetros

As autofunções no espaço de Hilbert podem ser obtidas através de projeções do tipo Fourier da função de quasi-probabilidade [41, 42, 44, 46]. Para o caso tridimensional [47],

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = \int d^3p \exp\left(i\frac{\vec{r}\cdot\vec{p}}{2}\right) \Psi_{nlm}(\vec{r}, \vec{p}) \quad (7.58)$$

$$\phi_{nlm}(\vec{p}) = \int d^3r \exp\left(-i\frac{\vec{r}\cdot\vec{p}}{2}\right) \Psi_{nlm}(\vec{r}, \vec{p}) \quad (7.59)$$

Ao projetar a função de quasi-probabilidade da solução particular (7.57), obtemos uma única correspondente no espaço de Hilbert. Para a autofunção na representação das posições, tem-se

$$\begin{aligned} \psi_{nlm}(\vec{r}) &= A_{nl} \frac{1}{r} e^{-\sqrt{\varepsilon}r} (1 - e^{-2\mu r})^{\ell+1} \\ &\cdot P_n \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}}, 2\ell+1 - \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}} \right) (1 - 2e^{-2\mu r}) Y_{\ell m}(\Theta, \Phi) \end{aligned} \quad (7.60)$$

em que A_{nl} é uma constante de normalização. Além disto, a autofunção na representação dos momenta se tornará

$$\begin{aligned} \phi_{nlm}(\vec{p}) &= \int d^3r \exp(-i\vec{r}\cdot\vec{p}) A_{nl} \frac{1}{r} e^{-\sqrt{\varepsilon}r} (1 - e^{-2\mu r})^{\ell+1} \\ &\cdot P_n \left(2\sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}}, 2\ell+1 - \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\mu^2}} \right) (1 - 2e^{-2\mu r}) Y_{\ell m}(\Theta, \Phi) \end{aligned} \quad (7.61)$$

onde foi usada a identidade

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp_{\eta} \frac{1}{2\pi} \exp(i\eta_0 p_{\eta}) = \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L/2}^{L/2} dp_{\eta} \frac{1}{L} \exp\left(\frac{i2\pi j p_{\eta}}{L}\right) = \delta_{j,0} \quad (7.62)$$

com $\eta = x, y, z$ e $j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. A função (7.60) é semelhante à obtida por Hamzavi et al. em sua abordagem na formulação usual, e está claro que (7.61) é a transformada de Fourier desta função.

Para o estado fundamental, desprezando a constante de normalização, a autofunção da posição (7.60) toma a forma

$$\psi_{000}(\vec{r}) = e^{-\sqrt{\varepsilon}r} \left(\frac{1 - e^{-2\mu r}}{r} \right) \quad (7.63)$$

que, a menos de constantes multiplicativas, é semelhante à solução (5.22) proposta por Garavelli e Oliveira através de processos iterativos.

Na solução de Garavelli e Oliveira a carga nuclear efetiva α e a carga dual γ dependem da atenuação μ mas são obtidas através de relações de recorrência. Na solução (7.63) surgem termos equivalentes com dependência explícita em μ . De fato, sendo $\alpha^*(\mu)$ e $\gamma^*(\mu)$ estes termos, obtemos por comparação:

$$\begin{aligned}\alpha^*(\mu) &= \sqrt{\varepsilon} = \sqrt{-2mE_{00}} = \frac{mA}{\hbar} - \mu \\ \gamma^*(\mu) &= \sqrt{\varepsilon} + 2\mu = \frac{mA}{\hbar} + \mu.\end{aligned}\tag{7.64}$$

Podemos “plotar” estes resultados e comparar com os valores obtidos por Garavelli e Oliveira através do método iterativo. O gráfico da Figura 26 apresenta este resultado, onde foi considerado $A = m = \hbar = 1$, sem perda de generalidade. As linhas tracejadas são os resultados iterativos e as linhas contínuas representam as funções $\alpha^*(\mu)$ e $\gamma^*(\mu)$

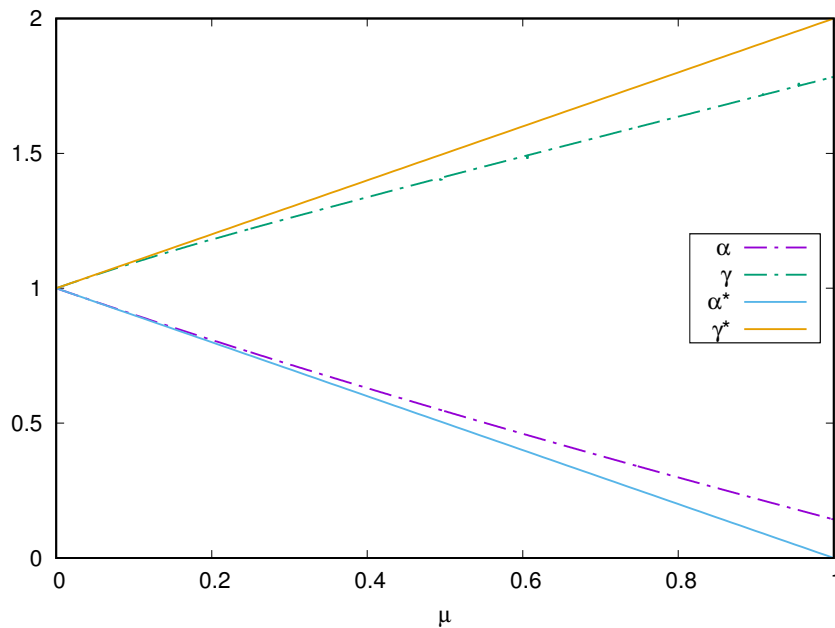


Figura 26 – A carga efetiva e a carga dual em função da atenuação μ .

Percebe-se que a aproximação concorda perfeitamente para fracas blindagens, i.e., pequenos valores de μ . Para fortes blindagens observa-se o aparecimento de diferença entre os resultados. De fato, as funções aproximadas foram obtidas com uma aproximação do potencial que é válida para $\mu \ll 1$.

7.3.3 A função de Wigner

A solução particular (7.57), obtida pela abordagem da separação de variáveis, traz vantagens e desvantagens. Veremos que a função de Wigner derivada dela não é útil do

ponto de vista da MQS, mas possui conexão direta com as soluções do formalismo usual apresentadas no [Capítulo 5](#).

A quasi-amplitude de probabilidade encontrada na [seção 7.2](#) não é diretamente útil para estudar as propriedades do sistema, na visão da Mecânica Quântica Simplética, sendo necessário, então, obter a função de Wigner através da relação (3.70).

$$W_{nlm}(\vec{r}, \vec{p}) = \Psi_{nlm} \star \Psi_{nlm}^\dagger$$

Buscaremos a função de Wigner associada ao estado fundamental $\Psi_{000}(\vec{x}, \vec{p})$, baseando-nos na solução particular (7.57). Em consequência da equação (7.57), desprezando as constantes multiplicativas e com $n = l = m = 0$, temos

$$\Psi_{000}(\vec{r}, \vec{p}) = \exp\left(-\frac{2i}{\hbar}(\vec{r} - \vec{r}_0) \cdot \vec{p}\right) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} e^{-\sqrt{\varepsilon}|\vec{r} - \vec{r}_0|} \left(1 - e^{-2\mu|\vec{r} - \vec{r}_0|}\right), \quad (7.65)$$

onde foi possível trabalhar com a última exponencial devido à ausência das variáveis Θ e Φ , para $l = m = 0$. A função de Wigner associada será, então:

$$W_{000}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} e^{-\sqrt{\varepsilon}|\vec{r} - \vec{r}_0|} \left(1 - e^{-2\mu|\vec{r} - \vec{r}_0|}\right). \quad (7.66)$$

Note que a função de Wigner não possui dependência nas coordenadas de momento. A escolha particular das funções dos momenta (7.51) e (7.52) conduz a uma função de Wigner “patológica”, do ponto de vista da MQS, no sentido de ser independente de p . A escolha não é única e pode existir uma função que consiga fornecer uma solução separável apesar da dificuldade que surgirá devido aos operadores diferenciais R , Θ e Φ .

Com a solução encontrada através do método de separação de variáveis mostramos que é possível recuperar os resultados da formulação usual, mas a dependência arbitrária em funções dos momenta fornece uma função de Wigner que independe explicitamente de p . Torna-se necessário explorar outros caminhos para contornar estes problemas. No capítulo seguinte buscaremos soluções aproximadas através de transformação de coordenadas e métodos perturbativos no espaço de fase.

8 Descrição bidimensional via transformação de coordenadas

Neste capítulo mostraremos o desenvolvimento da equação de Schrödinger (ES) no espaço de fase, para uma partícula sujeita ao potencial de Yukawa, usando a Mecânica Quântica Simplética. Consideramos o problema descrito no plano, i.e., o estado da partícula dependerá de quatro variáveis, sendo duas para posição e duas para o momentum; para isto, aproximamos o potencial de Yukawa, usando termos iniciais da expansão em série de potências. Utilizando então a transformação de Levi-Civita, resolvemos o problema empregando operadores de criação e destruição e teoria de perturbação no espaço de fase; determinamos assim os autoestados e os autovalores associados, bem como a função de Wigner e, com base nesta, calculamos o indicador de não classicalidade para o estado fundamental em função da atenuação μ .

8.1 O potencial aproximado

Assim como discutido no capítulo anterior, faz-se necessário a utilização de uma aproximação para o potencial de Yukawa. Expandindo a parte exponencial em série de potências em torno de $r = 0$, em que $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ é a distância da partícula até a origem do sistema de coordenadas, temos

$$V(r) = -\frac{A}{r} e^{-\mu r} = -\frac{A}{r} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\mu r)^n}{n!}. \quad (8.1)$$

Quanto mais termos da expansão da parte exponencial utilizarmos, menor será a discrepância entre o potencial aproximado e o original. Observando a imagem na [Figura 27](#), e considerando os potenciais aproximados via expansão de Taylor até a terceira ordem notamos que, para pequenos valores de μ , melhor é a descrição, e quanto menor o valor da posição r menos discrepante será a aproximação com respeito ao potencial original. De modo geral, os primeiros termos fornecem boa descrição do potencial para valores de $\mu r \ll 1$; por este motivo, neste capítulo analisaremos os resultados comparando termos até a terceira ordem, isto é:

$$V(r) \approx -\frac{A}{r} \left(1 - \frac{1}{1!} \mu r + \frac{1}{2!} \mu^2 r^2 - \frac{1}{3!} \mu^3 r^3 \right). \quad (8.2)$$

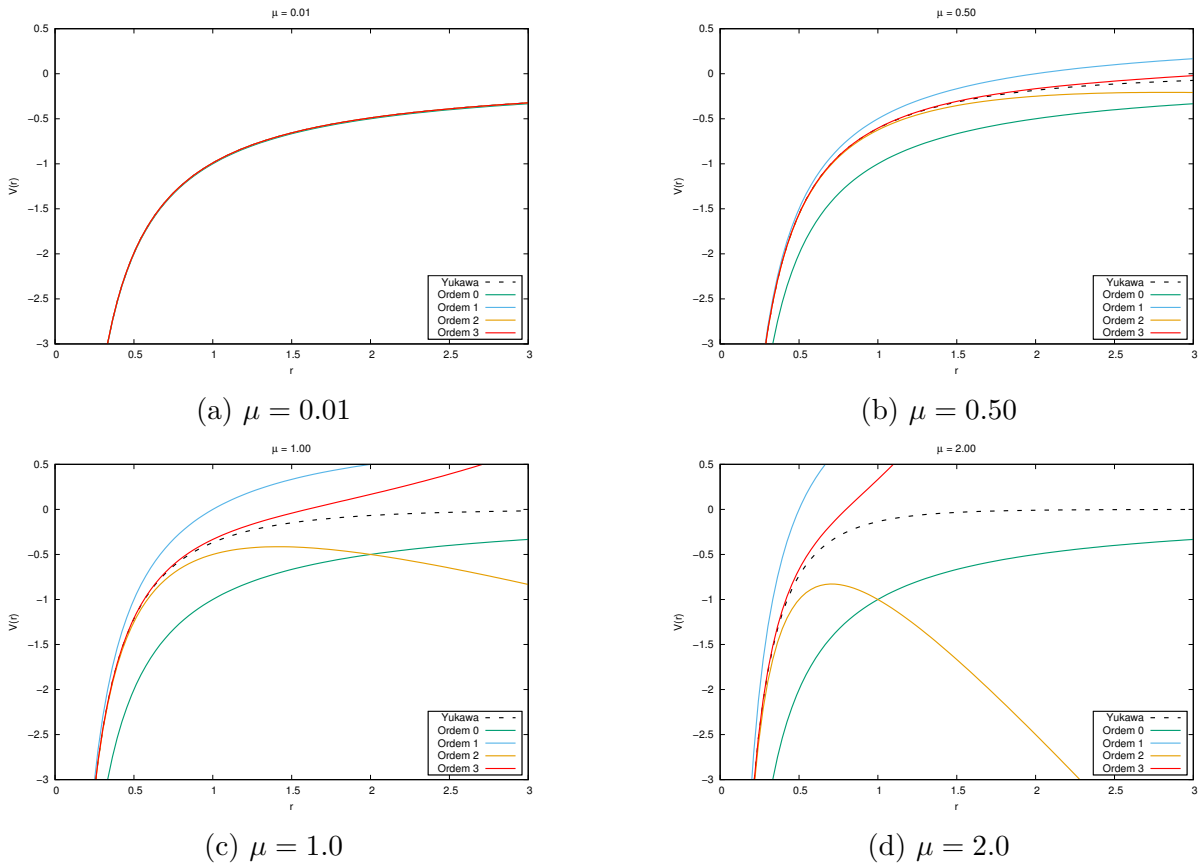


Figura 27 – Comparando o potencial de Yukawa aproximado via expansão de Taylor com termos até a terceira ordem para diferentes valores de μ .

8.2 A transformação de Levi-Civita

A transformação de Levi-Civita [123, 124] consiste em aplicar o problema de \mathbb{R}^2 em um espaço \mathbb{C} , parametrizado pelas variáveis complexas w e z , através do mapeamento conforme [125]:

$$w = \frac{z^2}{2}. \quad (8.3)$$

Essa transformação possui generalizações para espaços de dimensões maiores. O mapeamento de \mathbb{R}^3 em $\mathbb{C}^2 = \mathbb{H}$, conjunto dos quatérnions, é denominado transformação de Kustaanheimo-Stifel, que é útil para solucionar problemas no espaço tridimensional [64, 65, 126, 127]. O mapeamento do \mathbb{R}^5 em $\mathbb{C}^4 = \mathbb{H}^2$ é citado em referências de Mecânica Supersimétrica [125] e denomina-se transformação de Hurwitz, ou transformação de Kustaanheimo-Stifel generalizada.

Sejam as variáveis complexas $w = q_1 + iq_2$ e $z = u_1 + iu_2$; através do mapeamento

(8.3) obtém-se a transformação hiperbólica $A : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, como:

$$q_1 = \frac{u_1^2 - u_2^2}{2} \quad (8.4)$$

$$q_2 = u_1 u_2, \quad (8.5)$$

onde nota-se que os pontos (u_1, u_2) e $(-u_1, -u_2)$ levam ao mesmo ponto (q_1, q_2) e, portanto, A não é bijetora. Isso implica numa condição para a solução da equação de Schrödinger no espaço transformado, ou seja, ela deve obedecer a $\psi(u_1, u_2) = \psi(-u_1, -u_2)$. A transformação “inversa” (excluindo-se a origem do domínio e do contradomínio), obtida de (8.4) e (8.5), é dada por [128]:

$$u_1 = \pm \sqrt{q_1 + r} \quad (8.6)$$

$$u_2 = \frac{q_2}{u_1}. \quad (8.7)$$

onde $r = \sqrt{q_1^2 + q_2^2}$.

É conveniente adotar uma notação matricial para explorar as propriedades desta transformação; sejam as matrizes:

$$q := \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix}, \quad A(u) := \begin{pmatrix} u_1 & -u_2 \\ u_2 & u_1 \end{pmatrix}, \quad u := \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad (8.8)$$

que permitem reescrever as equações (8.4) e (8.5), como:

$$q = \frac{1}{2} A(u)u. \quad (8.9)$$

De (8.9) verifica-se diretamente, com t significando transposta, que

$$q^t q = u^t A^t(u) A(u) u \Rightarrow q_1^2 + q_2^2 = \left(\frac{u_1^2 + u_2^2}{2} \right)^2 \quad (8.10)$$

e, portanto, a coordenada radial pode ser escrita na forma

$$r = \sqrt{q_1^2 + q_2^2} = \frac{u_1^2 + u_2^2}{2}. \quad (8.11)$$

Em termos de diferenciais, sejam as matrizes

$$dq := \begin{pmatrix} dq_1 \\ dq_2 \end{pmatrix}, \quad du := \begin{pmatrix} du_1 \\ du_2 \end{pmatrix}, \quad \frac{\partial}{\partial q} := \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial q_1} \\ \frac{\partial}{\partial q_2} \end{pmatrix}, \quad \frac{\partial}{\partial u} := \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial u_1} \\ \frac{\partial}{\partial u_2} \end{pmatrix}. \quad (8.12)$$

Diferenciando as equações (8.4) e (8.5), temos

$$dq = A(u)du \quad (8.13)$$

e, portanto, a matriz $A(u)$ também é a matriz Jacobiana da transformação. Além disto, utilizando a regra da cadeia, encontra-se a relação entre as derivadas parciais $\frac{\partial}{\partial u}$ e $\frac{\partial}{\partial q}$, isto é,

$$\frac{\partial}{\partial u} = A^t(u) \frac{\partial}{\partial q}, \quad (8.14)$$

em que o índice t , como dito acima, representa a matriz transposta.

Sejam p_i e P_i os momentos conjugados às coordenadas q_i e u_i , respectivamente. Em notação matricial, temos:

$$p := \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} \quad e \quad P := \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \end{pmatrix} \quad (8.15)$$

que se transformam como [128–131]

$$P = A^t(u)p, \quad (8.16)$$

relação que pode ser invertida, fornecendo a equação

$$p = \frac{1}{r}A(u)P. \quad (8.17)$$

Além disto, fazendo a transposta da relação (8.16) e aplicando o produto com ela mesma, obtemos:

$$P^t P = p^t A A^t p \quad \Rightarrow \quad p_1^2 + p_2^2 = \frac{P_1^2 + P_2^2}{u_1^2 + u_2^2}. \quad (8.18)$$

Para estudar o efeito da transformação no espaço de fase, é necessário verificar a canonicidade da transformação que está diretamente ligada à invariância do produto estrela no espaço transformado. Calculando os parênteses de Poisson fundamentais nas novas coordenadas, obtém-se:

$$\{u_i, u_j\} = 0, \quad \{P_i, P_j\} = 0, \quad \{u_i, P_j\} = \delta_{ij}, \quad (8.19)$$

evidenciando a canonicidade. Além disto, tem-se:

$$\overleftarrow{\partial}_q \cdot \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \cdot \overrightarrow{\partial}_q = \overleftarrow{\partial}_u \cdot \overrightarrow{\partial}_P - \overleftarrow{\partial}_P \cdot \overrightarrow{\partial}_u, \quad (8.20)$$

que mantém invariante o produto estrela, apresentado na equação (2.36).

8.3 O Hamiltoniano clássico transformado

Para resolver o problema de uma partícula de massa m sob o potencial de Yukawa, no formalismo da Mecânica Quântica Simplética, é necessário primeiramente estabelecer o hamiltoniano clássico do sistema. O hamiltoniano clássico bidimensional, com o potencial aproximado (8.2), é dado por:

$$H_c(q_1, p_1, q_2, p_2) = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2) - \frac{A}{r} \left(1 - \frac{1}{1!} \mu r + \frac{1}{2!} \mu^2 r^2 - \frac{1}{3!} \mu^3 r^3 \right), \quad (8.21)$$

onde $r = (q_1^2 + q_2^2)^{\frac{1}{2}}$. Quantizando (8.21) via MQS, através da utilização dos operadores estrela, obtém-se:

$$H(\hat{q}, \hat{p}) = H_{c\star} = \frac{1}{2m} \left[\left(p_1 - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_1} \right)^2 + \left(p_2 - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_2} \right)^2 \right] + V(q_{1\star}, q_{2\star}). \quad (8.22)$$

Como se pode notar, o potencial possui uma dependência com as posições, de difícil desenvolvimento, devido à presença de derivadas nos momenta. Para contornar esse problema, utilizaremos a transformação de Levi-Civita, apresentada na seção anterior. Com efeito, das equações (8.10) e (8.18), o hamiltoniano clássico no espaço transformado será dado por:

$$H_c(u_1, P_1, u_2, P_2) = \frac{1}{2m} \left(\frac{P_1^2 + P_2^2}{u_1^2 + u_2^2} \right) - \frac{2A}{u_1^2 + u_2^2} \left[1 - \frac{1}{1!} \mu \left(\frac{u_1^2 + u_2^2}{2} \right) + \frac{1}{2!} \mu^2 \left(\frac{u_1^2 + u_2^2}{2} \right)^2 - \frac{1}{3!} \mu^3 \left(\frac{u_1^2 + u_2^2}{2} \right)^3 \right]. \quad (8.23)$$

Considerando uma hipersuperfície de energia E , i.e., $H_c = E$, obtém-se a relação:

$$\frac{1}{2m} (P_1^2 + P_2^2) - \varepsilon (u_1^2 + u_2^2) - \frac{2A}{2!} \left(\frac{\mu}{2} \right)^2 (u_1^2 + u_2^2)^2 + \frac{2A}{3!} \left(\frac{\mu}{2} \right)^3 (u_1^2 + u_2^2)^3 - k = 0, \quad (8.24)$$

onde definimos as constantes

$$\varepsilon = E - A\mu \quad (8.25)$$

e

$$k = 2A. \quad (8.26)$$

É a partir da equação (8.24) que faremos a resolução do problema. De fato, usando a quantização via MQS nas coordenadas clássicas u_1, u_2 e momenta P_1 e P_2 teremos, de (8.24):

$$\hat{H}\psi_{n_1, n_2}(u_1, P_1, u_2, P_2) = k\psi_{n_1, n_2}(u_1, P_1, u_2, P_2), \quad (8.27)$$

onde o hamiltoniano \hat{H} pode ser separado em duas partes, ou seja,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (8.28)$$

com \hat{H}_0 e \hat{H}_1 considerados hamiltoniano não perturbado e a perturbação, respectivamente, e dados por:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} (\hat{P}_1^2 + \hat{P}_2^2) - \varepsilon (\hat{u}_1^2 + \hat{u}_2^2), \quad (8.29)$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{2A}{2!} \left(\frac{\mu}{2} \right)^2 (\hat{u}_1^2 + \hat{u}_2^2)^2 + \frac{2A}{3!} \left(\frac{\mu}{2} \right)^3 (\hat{u}_1^2 + \hat{u}_2^2)^3, \quad (8.30)$$

sendo

$$\hat{P}_i = P_i^\star = P_i - \frac{i\hbar}{2} \partial_{u_i} \quad \text{e} \quad \hat{u}_i = u_i^\star = u_i + \frac{i\hbar}{2} \partial_{P_i}. \quad (8.31)$$

Observa-se que \hat{H}_0 , o hamiltoniano não perturbado, possui o mesmo formato do hamiltoniano de um oscilador isotrópico bidimensional com frequência angular $\omega = \sqrt{-2\varepsilon/m}$, o que nos possibilita adaptá-lo para este caso. Na MQS, em especial, o hamiltoniano (8.29) aparece na solução do átomo de hidrogênio bidimensional [63–65] sendo resolvido de forma analítica, e em trabalhos recentes [67] de forma algébrica.

Para resolver a equação (8.27), consideraremos soluções escritas na forma:

$$\psi_{n_1, n_2}(u_1, P_1, u_2, P_2) = \phi_{n_1}^1(u_1, P_1) \phi_{n_2}^2(u_2, P_2) \quad (8.32)$$

em que, na nossa notação, o índice superior nas funções refere-se à dependência apenas nas coordenadas u_i e P_i ($i = 1, 2$).

Visando utilizar o formalismo algébrico, definiremos os operadores estrela de criação e aniquilação, ou seja:

$$\hat{a}_i = \sqrt{\frac{W}{2\hbar}} \hat{u}_i + i \sqrt{\frac{1}{2W\hbar}} \hat{P}_i \quad (8.33)$$

$$\hat{a}_i^\dagger = \sqrt{\frac{W}{2\hbar}} \hat{u}_i - i \sqrt{\frac{1}{2W\hbar}} \hat{P}_i, \quad (8.34)$$

que obedecem as propriedades:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] &= \delta_{ij}, \\ \hat{a}_i \phi_{n_i}^i &= \sqrt{n_i} \phi_{n_i-1}^i, \\ \hat{a}_i^\dagger \phi_{n_i}^i &= \sqrt{n_i + 1} \phi_{n_i+1}^i, \end{aligned} \quad (8.35)$$

sendo $[\cdot, \cdot]$ o comutador, e

$$W = \sqrt{-2m\varepsilon}. \quad (8.36)$$

Os operadores estrela de posição e momento, em termos dos operadores de criação e destruição, podem ser obtidos de (8.33) e (8.34) resultando em,

$$\hat{u}_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2W}} (\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger) \quad (8.37)$$

$$\hat{P}_i = -i \sqrt{\frac{W\hbar}{2}} (\hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger), \quad (8.38)$$

onde $i = 1, 2$.

Com isto, os hamiltonianos (8.29) e (8.30) podem ser expressos na forma:

$$\hat{H}_0 = \frac{W\hbar}{m} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + 1) \quad (8.39)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= -\frac{A}{2!} \left(\frac{\mu}{2}\right)^2 \left(\frac{\hbar}{2W}\right)^2 [(\hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger)^2 + (\hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger)^2]^2 \\ &\quad + \frac{A}{3!} \left(\frac{\mu}{2}\right)^3 \left(\frac{\hbar}{2W}\right)^3 [(\hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger)^2 + (\hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger)^2]^3. \end{aligned} \quad (8.40)$$

8.4 Aproximação via teoria de perturbação no espaço de fase

Determinaremos nesta seção, inicialmente a solução da equação de Schrödinger no espaço de fase associada ao hamiltoniano não perturbado (8.39). Com os autovalores e

autovetores obtidos, aplicaremos a teoria de perturbação no espaço de fase para encontrar as soluções aproximadas de primeira ordem para o estado fundamental. Aplicando o produto estrela determinaremos a função de Wigner e calcularemos o índice de não-classicalidade em função de μ .

8.4.1 A solução não perturbada

Consideremos a equação

$$\hat{H}_0 \psi_{n_1 n_2}^{(0)}(u_1, P_1, u_2, P_2) = k^{(0)} \psi_{n_1 n_2}^{(0)}(u_1, P_1, u_2, P_2). \quad (8.41)$$

A equação não perturbada (8.41), com \hat{H}_0 dado por (8.39), é de um oscilador isotrópico bidimensional e possui solução conhecida. Na realidade, ela corresponde à equação de Schrödinger no espaço de fase para o átomo de hidrogênio no caso bidimensional, após o uso da transformação de Levi-Civita [63].

No formalismo algébrico seus autovalores são facilmente determinados. Com efeito, utilizando o hamiltoniano em termos dos operadores de criação e aniquilação e notando que, decorrente das propriedades (8.35), é válida a relação

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \psi_{n_1, n_2}^{(0)} = n_i \psi_{n_1, n_2}^{(0)}, \quad (8.42)$$

tem-se imediatamente da eq. (8.41) o resultado

$$k_{n_1, n_2}^{(0)} = \frac{W\hbar}{m}(n_1 + n_2 + 1), \quad (8.43)$$

onde m é a massa da partícula sujeita ao potencial.

Utilizando as definições (8.25), (8.26) e (8.36), obtemos o espectro de energia em função da atenuação como

$$E_{n_1, n_2}^{(0)}(\mu) = -\frac{2mA^2}{\hbar^2(n_1 + n_2 + 1)^2} + A\mu, \quad (8.44)$$

que corresponde ao espectro do hidrogênio bidimensional, adicionado a um termo linear da expansão de Taylor do potencial, ou seja, os valores de energia aparecem transladados do valor $A\mu$.

Nota-se ser importante fazer uma consideração sobre os valores físicos de n_1 e n_2 : ao realizar a transformação de coordenadas, o problema descrito pelo hamiltoniano não perturbado, referente ao átomo de hidrogênio, se relaciona com o problema do oscilador bidimensional. Das soluções da equação de Schrödinger para o oscilador unidimensional (ver subseção 2.8.1), sendo $\phi_k(x)$ o autoestado associado ao autovalor k , a simetria das soluções permite escrever

$$\phi_k(-x) = (-1)^k \phi_k(x).$$

Da mesma forma, as soluções de (8.41) obedecem a relação

$$\psi_{n_1, n_2}^{(0)}(-u) = (-1)^{n_1 + n_2} \psi_{n_1, n_2}^{(0)}(u).$$

Como, pela transformação de Levi-Civita (8.4) os pontos (u_1, u_2) e $(-u_1, -u_2)$ levam ao mesmo ponto (q_1, q_2) , segue que esta condição de contorno implica que os autovalores n_1 e n_2 associados ao espectro (8.44) estarão relacionados a um n tal que

$$2n = n_1 + n_2. \quad (8.45)$$

Um fato a observar é que, no limite $\mu \rightarrow 0$, o potencial de Yukawa torna-se coulombiano e sabe-se que a energia para o estado fundamental do átomo de hidrogênio para o potencial coulombiano em unidades atômicas ($e = m = \hbar = c = a_0 = 1$) é de -2 hartrees [132], resultado que concorda com estudos analíticos sobre o átomo de hidrogênio em duas dimensões, na formulação usual da mecânica quântica. De fato, Yang et al. obtiveram o espectro

$$E_n = -\frac{Z^2}{2\left(n + \frac{1}{2}\right)^2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.46)$$

que concorda com nosso resultado no limite proposto, tomando $A = Ze^2$ e $2n = n_1 + n_2$.

Para determinar a função de quasi-probabilidade não perturbada, utilizaremos a propriedade:

$$\hat{a}_i \phi_0^i = 0, \quad i = 1, 2 \quad (8.47)$$

para ϕ_0^i a autofunção de mais baixa energia.

Da definição (8.33), segue que

$$\left(\sqrt{\frac{W}{2\hbar}} \hat{u}_i + i \sqrt{\frac{1}{2W\hbar}} \hat{P}_i \right) \phi_0^i = 0, \quad (8.48)$$

e utilizando as expressões dos operadores \hat{u}_i e \hat{P}_i , obtemos a equação

$$\left(\sqrt{\frac{W}{2\hbar}} \left(u_i + \frac{i\hbar}{2} \partial_{P_i} \right) + i \sqrt{\frac{1}{2W\hbar}} \left(P_i - \frac{i\hbar}{2} \partial_{u_i} \right) \right) \phi_0^i = 0. \quad (8.49)$$

Para que esta igualdade seja válida, tanto a parte real quanto a parte imaginária devem ser nulas. Para isto, a função ϕ_0^i deve obedecer as relações

$$\left(u_i + \frac{\hbar}{2W} \partial_{u_i} \right) \phi_0^i = 0, \quad \text{e} \quad (8.50)$$

$$\left(P_i + \frac{W\hbar}{2} \partial_{P_i} \right) \phi_0^i = 0. \quad (8.51)$$

A solução geral normalizada será, portanto,

$$\phi_0^i(u_i, P_i) = \left(\frac{2}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{W}{\hbar}\left(u_i^2 + \left(\frac{P_i}{W}\right)^2\right)\right], \quad (8.52)$$

e, como as soluções buscadas são da forma como proposta na eq. (8.32), segue que a solução da eq. (8.41) normalizada será o produto, ou seja,

$$\psi_{0,0}^{(0)} = \frac{2}{\pi\hbar} \exp\left[-\frac{W}{\hbar}\left((u_1^2 + u_2^2) + \left(\frac{P_1}{W}\right)^2 + \left(\frac{P_2}{W}\right)^2\right)\right] \quad (8.53)$$

$$= \frac{2}{\pi\hbar} \exp\left[-\frac{2m}{\hbar W}(H^1 + H^2)\right], \quad (8.54)$$

onde H^i é o hamiltoniano clássico do oscilador na i -ésima coordenada, isto é

$$H^i = \frac{1}{2m}P_i^2 - \varepsilon u_i^2. \quad (8.55)$$

Com o método de operadores de criação e aniquilação o estado ψ_{n_1, n_2} , para $n_i \neq 0$, pode ser construído através de aplicações sucessivas dos operadores de criação sobre o estado de mais baixa energia $\psi_{0,0}^{(0)}$; outra forma é resolver analiticamente a equação

$$H_0 \star \psi_{n_1, n_2}^{(0)} = 0, \quad (8.56)$$

obtendo-se em ambos os casos a solução, a menos de uma constante de normalização, dada por [49, 50, 54, 58, 63–65, 67]:

$$\psi_{n_1, n_2}^{(0)} \sim (-1)^{n_1+n_2} \exp\left(-\frac{2m}{\hbar W}(H_1 + H_2)\right) L_{n_1}\left(-\frac{4m}{\hbar W}H_1\right) L_{n_2}\left(-\frac{4m}{\hbar W}H_2\right) \quad (8.57)$$

onde $L_{n_i}\left(-\frac{4m}{\hbar W}H_i\right)$ é o polinômio de Laguerre.

8.4.2 Aproximação de primeira ordem

Da teoria de perturbação no espaço de fase [49], a correção de primeira ordem nos autovalores pode ser obtida com a integral

$$\Delta k_{n_1, n_2}^{(1)} = \int du_1 dP_1 du_2 dP_2 \psi_{n_1, n_2}^{(0)} \widehat{H}_1 \psi_{n_1, n_2}^{*(0)}. \quad (8.58)$$

Para resolver esta integral utilizaremos as propriedades dos operadores de criação e aniquilação (8.35) e a ortonormalidade das autofunções, i.e.,

$$\int dq_1 dp_1 dq_2 dp_2 \psi_{n_1, n_2}^{(0)} \psi_{m_1, m_2}^{*(0)} = \delta_{n_1, m_1} \delta_{n_2, m_2}. \quad (8.59)$$

Primeiramente podemos observar que, de

$$\int du_1 dP_1 du_2 dP_2 \psi_{n_1, n_2}^{(0)} \left[(\hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger)^2 + (\hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger)^2 \right]^2 \psi_{n_1, n_2}^{*(0)} = \Delta_1, \quad (8.60)$$

expandindo o termo quadrático e realizando as aplicações sucessivas dos operadores de criação e aniquilação, que não comutam, encontra-se o resultado:

$$\begin{aligned} \Delta_1 = & n_2^2 + 2n_2n_1 + 2n_2(n_1 + 1) + 2(n_2 + 1)n_1 + 2(n_2 + 1)(n_1 + 1) + (n_2 - 1)n_2 \\ & + 2(n_2 + 1)n_2 + (n_2 + 1)^2 + (n_2 + 1)(n_2 + 2) + n_1^2 + (n_1 + 1)^2 + (n_1 - 1)n_1 \quad (8.61) \\ & + 2n_1(n_1 + 1) + (n_1 + 1)(n_1 + 2) \end{aligned}$$

que, após algumas simplificações, pode ser escrito como

$$\Delta_1 = 2(4 + 3n_2^2 + 5n_1 + 3n_1^2 + n_2(5 + 4n_1)). \quad (8.62)$$

Procedendo do mesmo modo, o termo cúbico nos dá:

$$\int du_1 dP_1 du_2 dP_2 \psi_{n_1, n_2}^{(0)} \left[(\hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger)^2 + (\hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger)^2 \right]^3 \psi_{n_1, n_2}^{*(0)} = \Delta_2 \quad (8.63)$$

que, após expandir, fazer as aplicações sucessivas dos operadores e aplicar a condição de ortonormalidade, resulta em:

$$\begin{aligned} \Delta_2 = & n_2^3 + 3n_2^2n_1 + 3n_2^2(n_1 + 1) + 2(n_2 - 1)n_2^2 + 3(n_2 + 1)n_2^2 \\ & + 3n_2n_1^2 + 3(n_2 + 1)n_1^2 + 3n_2(n_1 + 1)^2 + 3(n_2 - 1)n_2n_1 \\ & + 6(n_2 + 1)n_2n_1 + 3n_2(n_1 - 1)n_1 + 3(n_2 - 1)n_2(n_1 + 1) \\ & + 6(n_2 + 1)n_2(n_1 + 1) + 6n_2n_1(n_1 + 1) + 3n_2(n_1 + 1)(n_1 + 2) \\ & + 3(n_2 + 1)(n_1 + 1)^2 + 3(n_2 + 1)^2n_1 + 3(n_2 + 1)(n_2 + 2)n_1 \\ & + 3(n_2 + 1)(n_1 - 1)n_1 + 3(n_2 + 1)^2(n_1 + 1) + \\ & 3(n_2 + 1)(n_2 + 2)(n_1 + 1) + 6(n_2 + 1)n_1(n_1 + 1) \quad (8.64) \\ & + 3(n_2 + 1)(n_1 + 1)(n_1 + 2) + (n_2 - 1)^2n_2 + 3(n_2 + 1)^2n_2 \\ & + (n_2 - 2)(n_2 - 1)n_2 + 2(n_2 - 1)(n_2 + 1)n_2 + 2(n_2 + 1)(n_2 + 2)n_2 \\ & + (n_2 + 1)^3 + (n_2 + 1)(n_2 + 2)^2 + 2(n_2 + 1)^2(n_2 + 2) \\ & + (n_2 + 1)(n_2 + 2)(n_2 + 3) + n_1^3 + 2(n_1 - 1)n_1^2 + 3n_1^2(n_1 + 1) \\ & + (n_1 + 1)^3 + 3n_1(n_1 + 1)^2 + (n_1 + 1)(n_1 + 2)^2 + (n_1 - 1)^2n_1 \\ & + (n_1 - 2)(n_1 - 1)n_1 + 2(n_1 - 1)n_1(n_1 + 1) + 2(n_1 + 1)^2(n_1 + 2) \\ & + 2n_1(n_1 + 1)(n_1 + 2) + (n_1 + 1)(n_1 + 2)(n_1 + 3). \end{aligned}$$

que pode ser simplificado, assumindo então a forma

$$\Delta_2 = 4(5n_2^3 + 3n_2^2(3n_1 + 4) + n_2(9n_1^2 + 18n_1 + 19) + 5n_1^3 + 12n_1^2 + 19n_1 + 12). \quad (8.65)$$

Com esse resultado, a correção de primeira ordem no autovalor dada pela eq. (8.58), será:

$$\Delta k_{n_1, n_2}^{(1)} = -\frac{A}{2!} \left(\frac{\mu}{2}\right)^2 \left(\frac{\hbar}{2W}\right)^2 \Delta_1 + \frac{A}{3!} \left(\frac{\mu}{2}\right)^3 \left(\frac{\hbar}{2W}\right)^3 \Delta_2, \quad (8.66)$$

com as constantes Δ_1 e Δ_2 dadas pelas expressões (8.62) e (8.65). O autovalor corrigido até a primeira ordem, $k_{n_1 n_2}^{(1)}$, com o uso de (8.43) e (8.66) nos dá, então,

$$k_{n_1, n_2}^{(1)} = \frac{W\hbar}{m}(n_1 + n_2 + 1) - \frac{2A}{2!} \left(\frac{\mu}{2}\right)^2 \left(\frac{\hbar}{2W}\right)^2 \Delta_1 + \frac{2A}{3!} \left(\frac{\mu}{2}\right)^3 \left(\frac{\hbar}{2W}\right)^3 \Delta_2. \quad (8.67)$$

O espectro de energia corrigido até a primeira ordem, em função de μ , é dado por:

$$E_{n_1, n_2}^{(1)}(\mu) = A\mu - \frac{W_{n_1, n_2}^{(1)}(\mu)}{2m}, \quad (8.68)$$

em que $W_{n_1, n_2}^{(1)}(\mu)$ é uma solução da equação polinomial de quarto grau em W , originada de (8.67) com $k_{n_1, n_2}^{(1)} = 2A$, justificada pela (8.26). Essa equação pode ser resolvida analiticamente, fornecendo dois pares de soluções: um par complexo conjugado e um par real; desses, apenas um representa solução física, com energia negativa descrevendo o estado ligado, e nós o utilizamos nos cálculos seguintes.

O gráfico na Figura 28 mostra a energia do estado fundamental em função de μ para $E_{n_1, n_1}^{(0)}$ e $E_{n_1, n_1}^{(1)}$. A energia corrigida indica um valor crítico da atenuação superior ao conhecido no caso tridimensional. Esse valor deve-se ao fato que a aproximação utilizada para correção é tanto melhor quanto menor for o valor da atenuação; contudo, é esperado que esse valor crítico não seja o mesmo do caso tridimensional, pois os casos bi e tridimensional representam sistemas distintos. Deve-se notar também que há, na literatura, falta de estudos do potencial de Yukawa bidimensional na formulação usual, o que dificulta a comparação.

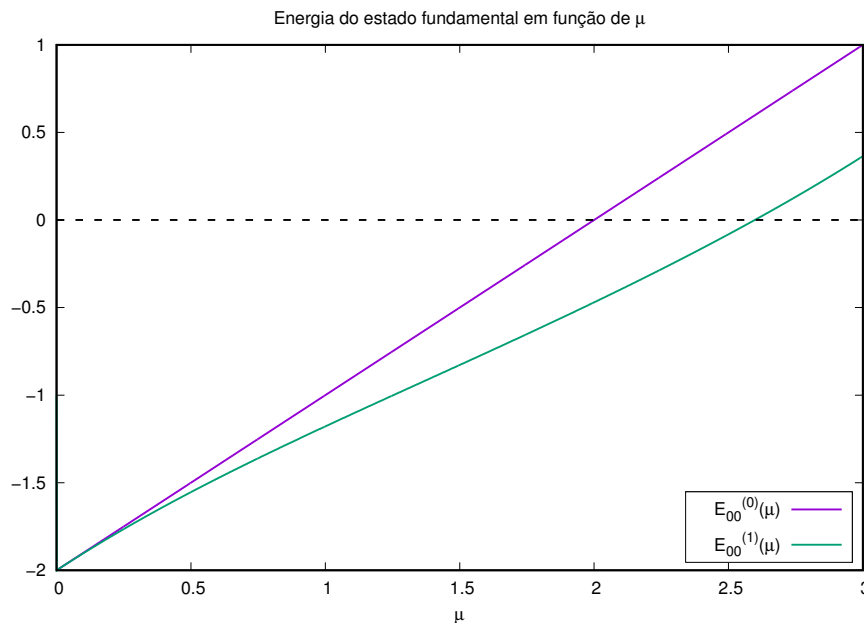


Figura 28 – Energia fundamental em função da atenuação μ para duas dimensões. Em roxo, com a correção de ordem zero e, em verde, corrigida até a primeira ordem.

No contexto da Mecânica Quântica Simplética precisamos obter a função quasi-amplitude de probabilidade corrigida, para então encontrarmos a função de Wigner. A correção de primeira ordem nas autofunções é dada pela relação [49, 67]:

$$\begin{aligned} \psi_{n_1, n_2}^{(1)}(u_1, P_1, u_2, P_2) = & \psi_{n_1, n_2}^{(0)}(u_1, P_1, u_2, P_2) + \sum_{\substack{m_1 \neq n_1 \\ m_2 \neq n_2}} \\ & \cdot \left(\frac{I_{n_1, n_2}^{m_1, m_2}}{k_{n_1, n_2}^{(0)} - k_{m_1, m_2}^{(0)}} \right) \times \psi_{m_1, m_2}^{(0)}(u_1, P_1, u_2, P_2), \end{aligned} \quad (8.69)$$

em que a integral $I_{n_1, n_2}^{m_1, m_2}$ é definida como:

$$I_{n_1, n_2}^{m_1, m_2} = \int du_1 dP_1 du_2 dP_2 \psi_{m_1, m_2}^{*(0)}(u_1, P_1, u_2, P_2) \hat{H}_1 \psi_{n_1, n_2}^{(0)}(u_1, P_1, u_2, P_2). \quad (8.70)$$

Para calcular (8.70) usamos, de forma análoga à realizada no cálculo de correção da energia, as propriedades dos operadores de criação e aniquilação e à relação de ortogonalidade das funções de onda. Assim, considerando $n_1 = n_2 = 0$, obtemos o estado fundamental corrigido, a menos de uma constante de normalização, como:

$$\begin{aligned} \psi_{0,0}^{(1)} \sim & \psi_{0,0}^{(0)} + \frac{Am\mu^2\hbar}{2\sqrt{2}W^3} \psi_{0,2}^{(0)} + \frac{\sqrt{\frac{3}{2}}Am\mu^2\hbar}{16W^3} \psi_{0,4}^{(0)} + \frac{Am\mu^2\hbar}{2\sqrt{2}W^3} \psi_{2,0}^{(0)} + \frac{Am\mu^2\hbar}{16W^3} \psi_{2,2}^{(0)} \\ & + \frac{\sqrt{\frac{3}{2}}Am\mu^2\hbar}{16W^3} \psi_{4,0}^{(0)} - \frac{3Am\mu^3\hbar^2}{8\sqrt{2}W^4} \psi_{0,2}^{(0)} - \frac{3\sqrt{\frac{3}{2}}Am\mu^3\hbar^2}{32W^4} \psi_{0,4}^{(0)} - \frac{\sqrt{5}Am\mu^3\hbar^2}{96W^4} \psi_{0,6}^{(0)} \\ & - \frac{3Am\mu^3\hbar^2}{8\sqrt{2}W^4} \psi_{2,0}^{(0)} - \frac{3Am\mu^3\hbar^2}{32W^4} \psi_{2,2}^{(0)} - \frac{Am\mu^3\hbar^2}{32\sqrt{3}W^4} \psi_{2,4}^{(0)} - \frac{3\sqrt{\frac{3}{2}}Am\mu^3\hbar^2}{32W^4} \psi_{4,0}^{(0)} \\ & - \frac{Am\mu^3\hbar^2}{32\sqrt{3}W^4} \psi_{4,2}^{(0)} - \frac{\sqrt{5}Am\mu^3\hbar^2}{96W^4} \psi_{6,0}^{(0)}. \end{aligned} \quad (8.71)$$

8.4.3 Gráficos da função quasi-amplitude de probabilidade corrigida

Podemos visualizar o formato da função quasi-amplitude de probabilidade corrigida (8.71). Para isso, construímos os gráficos considerando $m = 1$, $A = 1$, $\hbar = 1$; além disso, as coordenadas u_1 e P_1 foram consideradas como constantes iguais a 1, e W é dado por (8.43), com $k_{n_1, n_2}^{(0)} = 2A$, como justificado pela definição (8.26).

Observando os gráficos apresentados na Figura 29 pode-se notar que o volume da região negativa aumenta com o crescimento de μ .

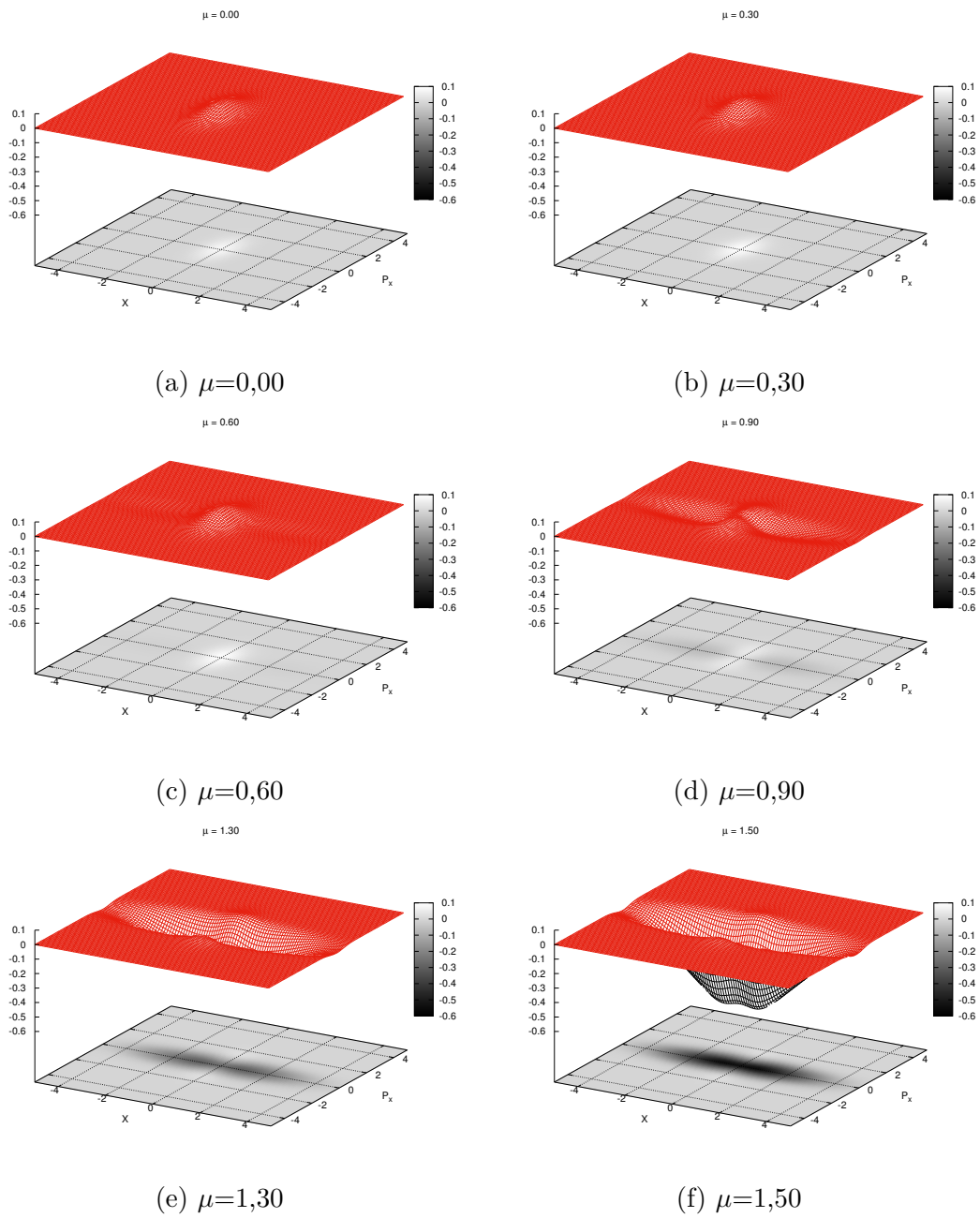


Figura 29 – A função quasi-amplitude de probabilidade do estado fundamental em duas dimensões para diferentes valores de μ .

8.5 A função de Wigner

Na Mecânica Quântica Simplética a função de Wigner é obtida através do produto estrela entre a função quasi-amplitude de probabilidade e seu complexo conjugado, de acordo com a relação (3.70). Logo, a função de Wigner do estado fundamental $W_{0,0}$, com base na quasi-amplitude de probabilidade corrigida até a primeira ordem, será dada por:

$$W_{0,0}(u_1, P_1, u_2, P_2) = \psi_{0,0}^{(1)}(u_1, P_1, u_2, P_2) \star \psi_{0,0}^{(1)\dagger}(u_1, P_1, u_2, P_2). \quad (8.72)$$

Devido ao formato não trivial da função (8.71), torna-se viável a determinação

aproximada do produto estrela; além disto, nota-se que a função $\psi_{0,0}^{(1)}$ depende de quatro variáveis, u_1 , u_2 , P_1 , P_2 , e do parâmetro μ . A utilização do produto estrela generalizado (2.40), neste caso, proporcionaria alto custo computacional devido às derivadas que serão computadas no processo. Portanto, utilizaremos a definição (2.37) para duas coordenadas, o que permitirá avaliar o comportamento qualitativo da função de Wigner. Tomando u_2 e P_2 constantes e partindo da forma expandida do produto estrela (2.41), temos:

$$\begin{aligned} f(q, p) \star g(q, p) &= f(q, p) \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^n \left(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q \right)^n \right] g(q, p) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^n \frac{(-1)^m}{m!(n-m)!} \left(\partial_p^m \partial_q^{n-m} f \right) \left(\partial_p^{n-m} \partial_q^m g \right). \end{aligned}$$

Os termos da somatória em n , que vão de zero a infinito, decaem com $n!$. Logo, uma aproximação razoável é truncar a somatória infinita para algum termo cujo denominador seja finito e suficientemente grande, e tomar a parte real, que carrega a informação física. Em nossos cálculos consideramos até o décimo termo da série, cujo fatorial é da ordem de $\sim 10^7$. Desta forma, a função de Wigner aproximada pode ser escrita, em nossa notação, como:

$$W_{0,0}(u_1, P_1) \approx \sum_{n=0}^{10} \sum_{m=0}^n \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^n \frac{(-1)^m}{m!(n-m)!} \left(\partial_{P_1}^m \partial_{u_1}^{n-m} \psi_{0,0}^{(1)} \right) \left(\partial_{P_1}^{n-m} \partial_{u_1}^m \psi_{0,0}^{(1)\dagger} \right), \quad (8.73)$$

cujo desenvolvimento das derivadas aplicadas na eq. (8.71) foi realizado utilizando computação algébrica, com o software Wolfram Mathematica. Através de um código computacional desenvolvido por nós, em C++, pudemos fazer o gráfico da função obtida e analisá-la. Com esse objetivo procurando observar seu comportamento com o aumento de μ , construímos os gráficos considerando $m = 1$, $A = 1$, $\hbar = 1$, todos com a mesma escala. Além disto, as coordenadas u_1 e P_1 foram tomadas como constantes e ambas igual a 1. Os gráficos são apresentados na [Figura 30](#).

Observando os gráficos da função de Wigner (8.73), que contém a informação física na MQS, é possível notar que o volume da região negativa cresce com o aumento de μ . Com essa função é possível estudar o comportamento qualitativo do índice de não-classicalidade do sistema, o que será apresentado na [seção 8.6](#).

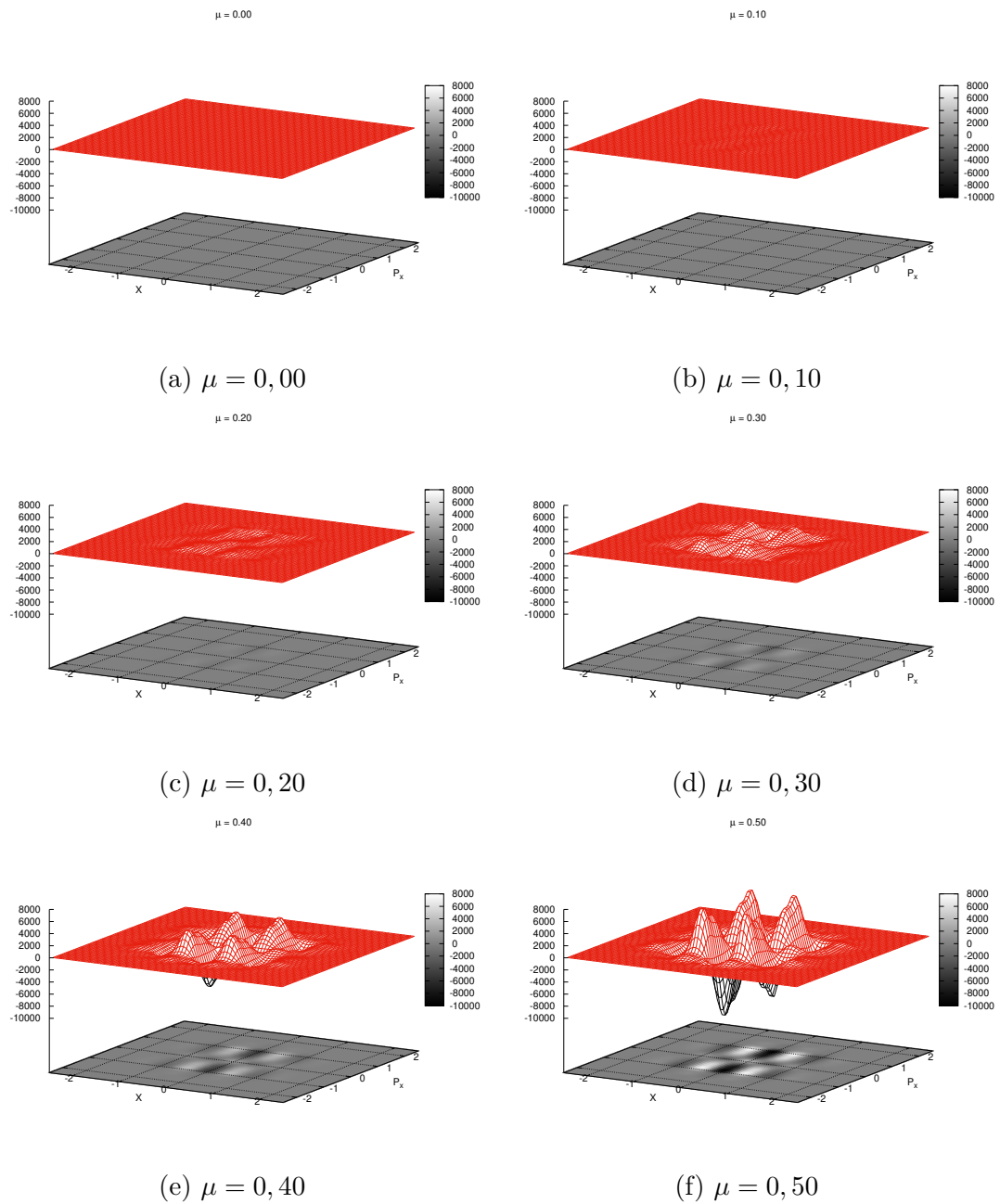


Figura 30 – Gráficos da função de Wigner para uma partícula sob a ação do potencial de Yukawa com diferentes valores de μ .

8.6 O indicador de não-classicalidade

Para o cálculo do índice de não-classicalidade foi utilizado o mesmo código computacional em C++ mencionado na [subseção 6.3.1](#). As integrais foram obtidas de forma numérica e os parâmetros utilizados são apresentados na [Tabela 6](#). Por conta do extenso formato da função de Wigner (8.73), resultando em 12522 linhas de código, poucos pontos foram avaliados, devido ao custo computacional. O gráfico da função $\eta(\mu)$ é apresentado na [Figura 31](#).

	Posição (u_1)	Momentum (P_1)
Início	-2,5	-2,5
Fim	2,5	2,5
Nro. de divisões	333	333
Passo na grade	0,015	0,015

Tabela 6 – Parâmetros utilizados no cálculo numérico das integrais.

Nota-se que, no limite $\mu \rightarrow 0$, a função $\eta(\mu)$ tende a zero; a função de Wigner não possui região com valores negativos neste limite. Com a variação de μ observa-se o mesmo crescimento assintótico encontrado no [Capítulo 6](#), indicando que o fator de não-classicalidade aumenta.

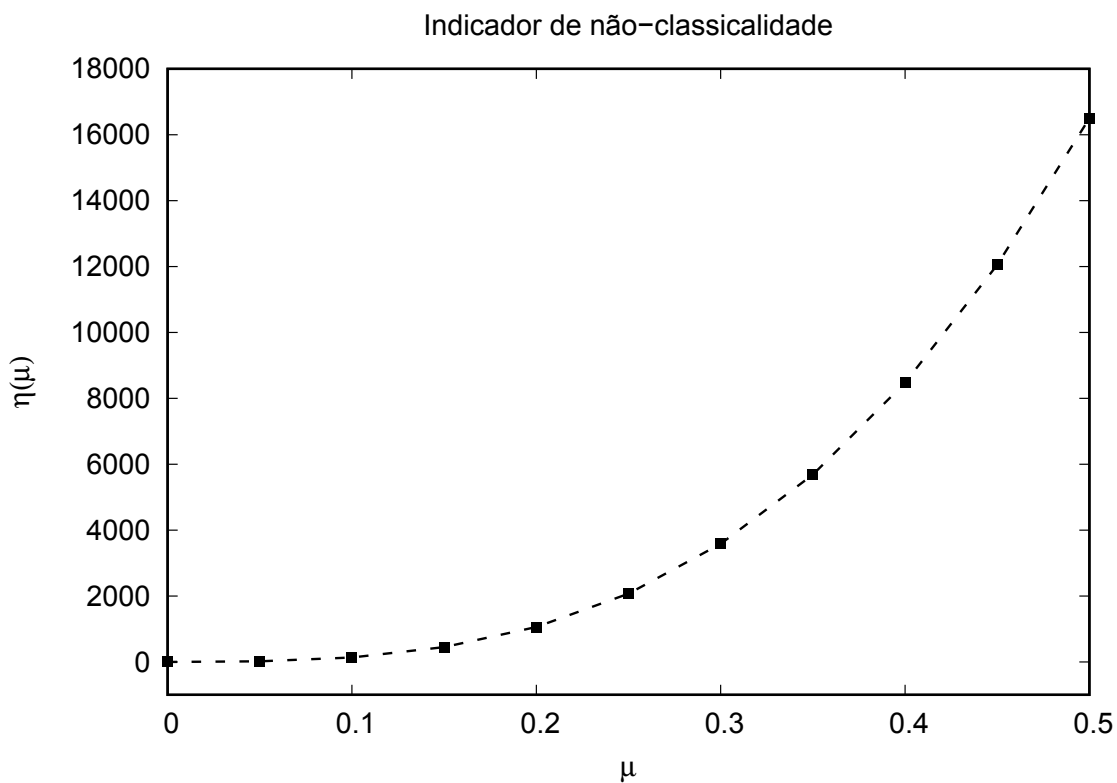


Figura 31 – Indicador de não-classicalidade para um sistema sob o potencial de Yukawa em função da atenuação com a função de Wigner (8.73) expandida até o termo de 10^{a} ordem.

μ	$\eta(\mu)$	μ	$\eta(\mu)$
0,00	2,1E-5	0,30	3579,75149
0,05	16,22437	0,35	5682,35444
0,10	131,59287	0,40	8474,49392
0,15	446,08575	0,45	12049,14976
0,20	1059,50767	0,50	16496,26688
0,25	2071,2178		

Tabela 7 – Valores do índice de classicalidade para uma partícula sob o potencial de Yukawa num espaço bidimensional para diferentes valores de μ .

Os valores do gráfico da [Figura 31](#) permitem determinar uma forma empírica para a função $\eta(\mu)$ através de regressão não linear, e uso do método dos mínimos quadrados. Com esse objetivo, devido a seu comportamento assintótico, propusemos para $\eta(\mu)$ a função hiperbólica generalizada

$$\nu(\mu) = A - \frac{B}{(1 + C\mu)^{1/D}}, \quad (8.74)$$

que depende dos parâmetros de ajuste A , B , C e D . Os dados do ajuste por nós obtidos são apresentados na [Tabela 8](#). Observe que o coeficiente de determinação R^2 e o coeficiente de determinação ajustado Adj. R^2 , que leva em consideração o número de parâmetros de ajuste, apresentam valores excelentes, estando muito próximos de 1 [122]. Devido à forma da função (8.73), o cômputo do índice de não-classicalidade exigiu grande custo computacional. Com isto, o número de pontos obtidos foi limitado. Isto fez com que os erros associados a cada parâmetro da regressão apresentem-se relativamente altos. A [figura 32](#) apresenta a função ajustada pela expressão (8.74).

Equação	$\eta(\mu) = A - B/(1 + C*\mu)^{1/D}$
A	$-11,26449 \pm 7,33236$
B	$-0,01193 \pm 0,02448$
C	$213,66268 \pm 154,35723$
D	$-0,33101 \pm 0,00266$
χ^2 Reduzido	102,31072
R^2 (COD)	1
Adj. R^2	1

Tabela 8 – Parâmetros da regressão não linear para o fator de não-classicalidade para o potencial de Yukawa 2D.

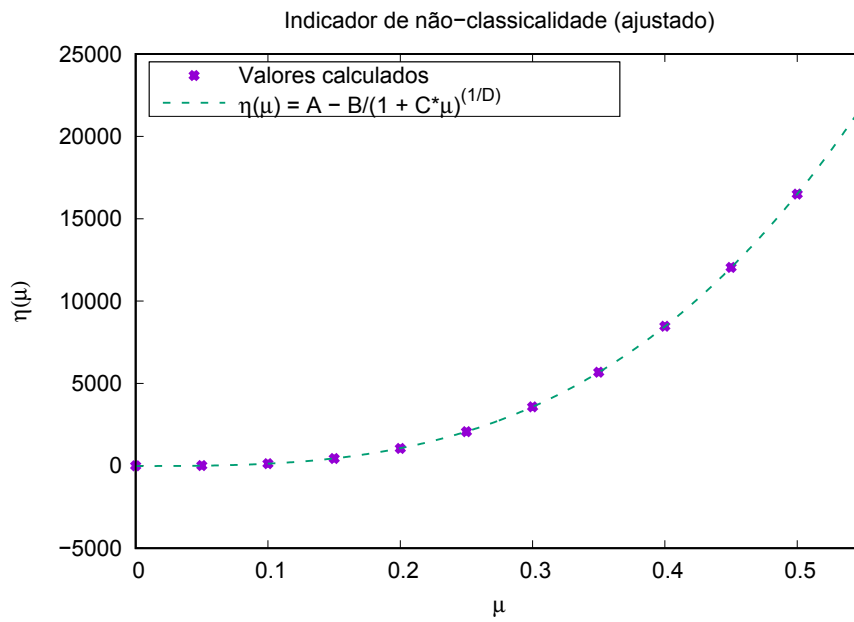


Figura 32 – Indicador de não-classicalidade do potencial de Yukawa em função da atenuação com a forma empírica (8.74).

9 Conclusões e perspectivas

Com o objetivo de estudar o potencial de Yukawa na descrição da Mecânica Quântica no Espaço de Fase, e determinar a função de Wigner de um sistema formado por uma partícula sujeita a este potencial, analisamos diferentes métodos.

Inicialmente consideramos soluções deste sistema com a formulação usual da Mecânica Quântica e exploramos a transformação de Wigner aplicada à solução de Garavelli e Oliveira [96], e à solução de Hamzavi et al. [76].

Na sequência, buscamos resolver o mesmo sistema usando a equação de Schrödinger no Espaço de Fase (ESEF), característica da Mecânica Quântica Simplética. Nesta formulação, devido aos operadores de momentum e posição serem dados respectivamente por $\hat{P} = p - i\hbar\partial_q/2$ e $\hat{Q} = q + i\hbar\partial_p/2$, há dificuldades adicionais na resolução da ESEF para potenciais que dependem de $1/r$, como é o caso do Potencial de Yukawa. Procurando resolver o problema, usamos no caso tridimensional o Método NU, com o potencial aproximado por um potencial tipo Hulthén e, no caso bidimensional, considerando a transformação de Levi-Civita e a teoria de perturbação no espaço de fase analisamos a solução do sistema para o potencial de Yukawa expandido até termos de terceira ordem em μ , o fator de atenuação do potencial.

Em todos os casos a função-solução e os autovalores foram determinados, bem como a função de Wigner calculada e o fator de não-classicalidade relacionados com o fator de atenuação crítico.

Observamos, através dos nossos resultados, que o crescimento do fator μ implica num aumento no índice de não-classicalidade do sistema. Na primeira abordagem, partindo da solução na formulação usual e calculando o índice de não classicalidade, no limite $\mu \rightarrow \mu_c$, notamos um crescimento assintótico dos valores obtidos para o índice de não-classicalidade, cujo comportamento mostramos ser bem representado por uma função do tipo hiperbólica. Quanto ao espectro de energia para uma partícula de massa m , sob o efeito do potencial de Yukawa no espaço de fase 6-dimensional, nossos resultados mostraram boa concordância com os valores obtidos na formulação da teoria quântica usual, dentro das aproximações consideradas pelo potencial de Hulthén; além disto mostramos como, a partir das soluções ESEF, recuperar as soluções usuais do estado fundamental através de transformações do tipo Fourier. O índice de não classicalidade da função de Wigner do estado fundamental, para uma partícula no espaço físico bidimensional, obtido via MQS, apresentou crescimento semelhante ao dos casos no espaço tridimensional, podendo ser representado pelo mesmo tipo de função empírica, inclusive; também mostramos que, no limite $\mu \rightarrow 0$, onde o potencial de Yukawa tende ao potencial de Coulomb, obtemos a

função de Wigner do átomo de hidrogênio em duas dimensões [63], bem como o espectro de energia deste sistema na formulação usual [132].

Em conclusão, neste trabalho procuramos explorar diferentes maneiras de analisar o problema de uma partícula sujeita ao potencial de Yukawa usando a Mecânica Quântica na descrição do Espaço de Fase, o que pode favorecer uma melhor compreensão desse potencial e contribuir na busca por uma visão mais ampla da Física; em particular, nossos resultados podem ser de interesse no estudo de sistemas atômicos confinados usando a MQS.

Por nosso desenvolvimento é possível, como perspectivas (que já se encontram em andamento):

- Usando a MQS e o potencial de Yukawa, encontrar a função de Wigner no espaço tridimensional via transformação de Kustaanheimo-Stiefel, Teoria de Perturbação no Espaço de Fase e o produto estrela.
- Obter a solução da Equação de Schrödinger no Espaço de Fase (EQEF) para outros sistemas através do método Nikiforov-Uravov (NU) e da equação de Schrödinger generalizada.
- Desenvolver algebricamente a forma analítica do produto estrela em espaços $2N$ dimensionais e implementar códigos computacionais para determinação do índice de não-classicalidade utilizando o Método de Monte Carlo para integração, que apresenta vantagens sobretudo em integrais de grande dimensionalidade.

Referências

- 1 LEIBFRIED, D. et al. Experimental Determination of the Motional Quantum State of a Trapped Atom. *Physical Review Letters*, v. 77, n. 21, p. 4281–4285, nov. 1996. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.4281>>. Citado 3 vezes nas páginas xv, 1 e 26.
- 2 BALLENTINE, L. E. *Quantum Mechanics: A Modern Development*. Edição: 2nd ed. Singapore: World Scientific Publishing Company, 1998. ISBN 978-981-02-4105-6. Citado 4 vezes nas páginas xvii, 1, 30 e 31.
- 3 ARFKEN, G.; WEBER, H. *Física Matemática: Métodos Matemáticos para Engenharia e Física - tradução da 6 edição*. [S.l.]: Elsevier Brasil, 2007. ISBN 978-85-352-2050-6. Citado 5 vezes nas páginas xvii, 41, 46, 68 e 87.
- 4 FEYNMAN, R. P. Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics. *Reviews of Modern Physics*, v. 20, n. 2, p. 367–387, abr. 1948. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.20.367>>. Citado na página 1.
- 5 VIANA, J. D. M. Feynman e as Integrais de Trajetória. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 40, n. 4, 2018. ISSN 1806-1117. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_abstract&pid=S1806-11172018000400106&lng=en&nrm=iso&tlng=pt>. Citado na página 1.
- 6 PAULING, L.; BRIGHT WILSON E. *Introduction to Quantum Mechanics*. McGraw Hill Book Company Inc., 1935. Disponível em: <<http://archive.org/details/introductiontoqu031712mbp>>. Citado na página 1.
- 7 SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics, Revised Edition*. 1ª edição. ed. Reading, Mass: Pearson, 1993. ISBN 978-0-201-53929-5. Citado na página 1.
- 8 NEUMANN, J. v. *Mathematical foundations of quantum mechanics*. Princeton Chichester: Princeton University Press, 1996. (Princeton landmarks in mathematics and physics). OCLC: ocm37904902. ISBN 978-0-691-02893-4 978-0-691-08003-1. Citado 3 vezes nas páginas 1, 5 e 6.
- 9 WIGNER, E. On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium. *Physical Review*, v. 40, n. 5, p. 749–759, jun. 1932. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.40.749>>. Citado 4 vezes nas páginas 1, 5, 8 e 19.
- 10 WEYL, H. *The Theory of Groups and Quantum Mechanics*. Mineola, NY: Dover Publications, 1950. ISBN 978-0-486-60269-1. Citado 3 vezes nas páginas 1, 5 e 12.
- 11 WEINBUB, J.; FERRY, D. K. Recent advances in Wigner function approaches. *Applied Physics Reviews*, v. 5, n. 4, p. 041104, out. 2018. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.5046663>>. Citado 3 vezes nas páginas 1, 5 e 22.

- 12 MOYAL, J. E. Quantum mechanics as a statistical theory. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 45, n. 1, p. 99–124, jan. 1949. ISSN 1469-8064, 0305-0041. Publisher: Cambridge University Press. Disponível em: <<https://www.cambridge.org/core/journals/mathematical-proceedings-of-the-cambridge-philosophical-society/article/quantum-mechanics-as-a-statistical-theory/9D0DC7453AD14DB641CF8D477B3C72A2>>. Citado 3 vezes nas páginas 1, 5 e 12.
- 13 GROENEWOLD, H. J. On the principles of elementary quantum mechanics. *Physica*, v. 12, n. 7, p. 405–460, out. 1946. ISSN 0031-8914. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031891446800594>>. Citado 4 vezes nas páginas 1, 5, 12 e 13.
- 14 BAKER, G. A. Formulation of Quantum Mechanics Based on the Quasi-Probability Distribution Induced on Phase Space. *Physical Review*, v. 109, n. 6, p. 2198–2206, mar. 1958. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.109.2198>>. Citado na página 1.
- 15 KUBO, R. Wigner Representation of Quantum Operators and Its Applications to Electrons in a Magnetic Field. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 19, n. 11, p. 2127–2139, nov. 1964. ISSN 0031-9015. Publisher: The Physical Society of Japan. Disponível em: <<https://journals.jps.jp/doi/10.1143/JPSJ.19.2127>>. Citado na página 1.
- 16 FAIRLIE, D. B. The formulation of quantum mechanics in terms of phase space functions. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 60, n. 3, p. 581–586, jul. 1964. ISSN 1469-8064, 0305-0041. Publisher: Cambridge University Press. Disponível em: <<https://www.cambridge.org/core/journals/mathematical-proceedings-of-the-cambridge-philosophical-society/article/abs/formulation-of-quantum-mechanics-in-terms-of-phase-space-functions/8723A207BF236947622C039A1E067DC3>>. Citado na página 1.
- 17 HILLERY, M. et al. Distribution functions in physics: Fundamentals. *Physics Reports*, v. 106, n. 3, p. 121–167, abr. 1984. ISSN 0370-1573. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157384901601>>. Citado na página 1.
- 18 SCHROECK, F. *Quantum Mechanics on Phase Space*. [S.l.]: Springer, 1996. ISBN 978-0-7923-3794-2. Citado na página 1.
- 19 CURTRIGHT, T. L.; FAIRLIE, D. D.; ZACHOS, C. K. *Quantum Mechanics In Phase Space: An Overview With Selected Papers*. [S.l.]: World Scientific, 2005. ISBN 978-981-4485-87-6. Citado na página 1.
- 20 CURTRIGHT, T. L.; FAIRLIE, D. D.; ZACHOS, C. *A Concise Treatise on Quantum Mechanics in Phase Space*. [S.l.]: World Scientific, 2014. ISBN 978-981-4520-43-0. Citado na página 1.
- 21 KIM, Y. S.; NOZ, M. E. *Phase Space Picture Of Quantum Mechanics: Group Theoretical Approach*. [S.l.]: World Scientific, 1991. ISBN 978-981-4506-67-0. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 8.

- 22 CURTRIGHT, T. L.; ZACHOS, C. K. Quantum Mechanics in Phase Space. *Asia Pacific Physics Newsletter*, v. 01, n. 01, p. 37–46, maio 2012. ISSN 2251-158X. Disponível em: <<https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S2251158X12000069>>. Citado na página 1.
- 23 CASE, W. B. Wigner functions and Weyl transforms for pedestrians. *American Journal of Physics*, v. 76, n. 10, p. 937–946, set. 2008. ISSN 0002-9505. Publisher: American Association of Physics Teachers. Disponível em: <<https://aapt.scitation.org/doi/10.1119/1.2957889>>. Citado na página 1.
- 24 MARCHIOLLI, M. A. Mecânica Quântica no Espaço de Fase: I. Formulação de Weyl-Wigner. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 24, n. 4, p. 421–436, 2002. ISSN 1806-1117. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_abstract&pid=S1806-11172002000400009&lng=en&nrm=iso&tlng=pt>. Citado na página 1.
- 25 KOWALEWSKA-KUDŁASZYK, A.; KALAGA, J. K.; LEOŃSKI, W. Wigner-function nonclassicality as indicator of quantum chaos. *Physical Review E*, v. 78, n. 6, p. 066219, dez. 2008. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.78.066219>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 27.
- 26 KIM, Y. S.; ZACHARY, W. W. (Ed.). *The Physics of Phase Space Nonlinear: Nonlinear dynamics and chaos, geometric quantization, and Wigner function*. Berlin u.a.: Springer, 1987. (Lecture notes in physics, 278). Meeting Name: International conference on the physics of phase space OCLC: 256160092. ISBN 978-3-540-17894-1 978-0-387-17894-3. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 27.
- 27 DITTRICH, T. Quantum Chaos and Quantum Randomness—Paradigms of Entropy Production on the Smallest Scales. *Entropy*, v. 21, n. 3, p. 286, mar. 2019. Number: 3 Publisher: Multidisciplinary Digital Publishing Institute. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/1099-4300/21/3/286>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 27.
- 28 GUTZWILLER, M. C. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. ISBN 978-1-4612-0983-6. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 27.
- 29 MCCONNELL, R. et al. Entanglement with negative Wigner function of almost 3,000 atoms heralded by one photon. *Nature*, v. 519, n. 7544, p. 439–442, mar. 2015. ISSN 1476-4687. Number: 7544 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/nature14293>>. Citado 3 vezes nas páginas 1, 26 e 27.
- 30 VIDAL, G.; WERNER, R. F. Computable measure of entanglement. *Physical Review A*, v. 65, n. 3, p. 032314, fev. 2002. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.65.032314>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 27.
- 31 KENFACK, A.; YCZKOWSKI, K. Negativity of the Wigner function as an indicator of non-classicality. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, v. 6, n. 10, p. 396–404, ago. 2004. ISSN 1464-4266. Publisher: IOP Publishing. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F1464-4266%2F6%2F10%2F003>>. Citado 3 vezes nas páginas 1, 5 e 27.

- 32 LEMOS, G. B. *Decoerência e Perda de Emaranhamento por Ambientes Caóticos com Poucos Graus de Liberdade*. Tese (Tese de Doutorado em Física) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (RJ), 2010. Citado na página 1.
- 33 LUTTERBACH, L. G.; DAVIDOVICH, L. Method for Direct Measurement of the Wigner Function in Cavity QED and Ion Traps. *Physical Review Letters*, v. 78, n. 13, p. 2547–2550, mar. 1997. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.78.2547>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 26.
- 34 KHANNA, F. C.; MELLO, P. A.; REVZEN, M. Classical and quantum-mechanical state reconstruction. *European Journal of Physics*, v. 33, n. 4, p. 921–939, maio 2012. ISSN 0143-0807. Publisher: IOP Publishing. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0143-0807%2F33%2F4%2F921>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 26.
- 35 DOUCE, T. et al. Direct measurement of the biphoton Wigner function through two-photon interference. *Scientific Reports*, v. 3, n. 1, p. 3530, dez. 2013. ISSN 2045-2322. Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/srep03530>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 26.
- 36 MCCONNELL, R. et al. Erratum: Entanglement with negative Wigner function of almost 3,000 atoms heralded by one photon. *Nature*, v. 521, n. 7551, p. 246–246, maio 2015. ISSN 1476-4687. Number: 7551 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/nature14470>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 26.
- 37 KURTSIEFER, C.; PFAU, T.; MLYNEK, J. Measurement of the Wigner function of an ensemble of helium atoms. *Nature*, v. 386, n. 6621, p. 150–153, mar. 1997. ISSN 1476-4687. Number: 6621 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/386150a0>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 26.
- 38 LEMOS, G. B. et al. Experimental observation of quantum chaos in a beam of light. *Nature Communications*, v. 3, n. 1, p. 1211, nov. 2012. ISSN 2041-1723. Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/ncomms2214>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 26.
- 39 TIAN, Y. et al. Measurement of complete and continuous Wigner functions for discrete atomic systems. *Physical Review A*, v. 97, n. 1, p. 013840, jan. 2018. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.97.013840>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 26.
- 40 AMORIM, R. G. G. et al. Função de Wigner-80 anos e as origens da geometria não-comutativa. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 35, n. 3, p. 1–14, set. 2013. ISSN 1806-1117. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_abstract&pid=S1806-11172013000300029&lng=en&nrm=iso&tlng=pt>. Citado 3 vezes nas páginas 1, 5 e 12.
- 41 TORRES-VEGA, G.; FREDERICK, J. H. Quantum mechanics in phase space: New approaches to the correspondence principle. *The Journal of Chemical Physics*, v. 93, n. 12, p. 8862–8874, dez. 1990. ISSN 0021-9606. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.459225>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 92.

- 42 TORRES-VEGA, G.; FREDERICK, J. H. A quantum mechanical representation in phase space. *The Journal of Chemical Physics*, v. 98, n. 4, p. 3103–3120, fev. 1993. ISSN 0021-9606. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.464085>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 92.
- 43 HU, X.; LI, Q. Comment on “A quantum mechanical representation in phase space” [J. Chem. Phys. 98, 3103 (1993)]. *The Journal of Chemical Physics*, v. 101, n. 8, p. 7187–7188, out. 1994. ISSN 0021-9606. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.468276>>. Citado na página 1.
- 44 MO/LLER, K. B.; JO/RGENSEN, T. G.; TORRES-VEGA, G. On coherent-state representations of quantum mechanics: Wave mechanics in phase space. *The Journal of Chemical Physics*, v. 106, n. 17, p. 7228–7240, maio 1997. ISSN 0021-9606. Publisher: American Institute of Physics. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.473684>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 92.
- 45 MO/LLER, K. B. Comment on phase-space representation of quantum state vectors. *Journal of Mathematical Physics*, v. 40, n. 5, p. 2531–2535, abr. 1999. ISSN 0022-2488. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.532881>>. Citado na página 1.
- 46 LI, Q.-S.; LU, J. One-dimensional hydrogen atom in quantum phase-space representation: rigorous solutions. *Chemical Physics Letters*, v. 336, n. 1, p. 118–122, mar. 2001. ISSN 0009-2614. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261401000811>>. Citado 3 vezes nas páginas 1, 83 e 92.
- 47 JUN, L. Wave mechanics in quantum phase space: hydrogen atom. *Progress in Natural Science*, v. 17, n. 2, p. 144–149, fev. 2007. ISSN 1002-0071. Disponível em: <<https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/10020070612331343238>>. Citado 3 vezes nas páginas 1, 83 e 92.
- 48 SMITH, T. B. Wavefunctions on phase space. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 39, n. 6, p. 1469–1484, jan. 2006. ISSN 0305-4470. Publisher: IOP Publishing. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0305-4470/39/6/019>>. Citado na página 1.
- 49 OLIVEIRA, M. D. *Mecânica Quântica no Espaço de Fase via Representações do Grupo de Galilei*. Tese (Dissertação de Mestrado em Física) — Universidade Federal da Bahia, Salvador, mar. 2002. Citado 9 vezes nas páginas 2, 5, 12, 29, 31, 32, 35, 103 e 106.
- 50 OLIVEIRA, M. D. et al. Symplectic quantum mechanics. *Annals of Physics*, v. 312, n. 2, p. 492–510, ago. 2004. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491604000466>>. Citado 7 vezes nas páginas 2, 5, 12, 29, 30, 83 e 103.
- 51 AMORIM, R. G. G.; ULHOA, S. C.; SANTANA, A. E. The Noncommutative Harmonic Oscillator Based on Symplectic Representation of Galilei Group. *Brazilian Journal of Physics*, v. 43, n. 1, p. 78–85, abr. 2013. ISSN 1678-4448. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s13538-013-0119-0>>. Citado na página 2.
- 52 FILHO, J. S. da C. et al. Hénon–Heiles interaction for hydrogen atom in phase space. *International Journal of Modern Physics A*, v. 31, n. 10, p. 1650046, abr. 2016. ISSN 0217-751X. Publisher: World Scientific Publishing Co. Disponível em:

<<https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217751X16500469>>. Citado na página 2.

53 DESSANO, H. et al. Wigner Function and Non-classicality for Oscillator Systems. *Brazilian Journal of Physics*, jun. 2019. ISSN 1678-4448. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s13538-019-00677-2>>. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 29.

54 AMORIM, R. G. G. *Geometria Não-Comutativa e Teoria de Campos Simplética*. Tese (Tese de doutorado em física) — Universidade de Brasília, Brasília, jul. 2009. Citado 4 vezes nas páginas 2, 29, 30 e 103.

55 MENEZES, M. B. de et al. Supersymmetric symplectic quantum mechanics. *Annals of Physics*, v. 389, p. 111–135, fev. 2018. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491617303639>>. Citado 3 vezes nas páginas 2, 29 e 84.

56 MENEZES, M. B. de. *Mecânica quântica simplética supersimétrica*. Tese (Tese de Doutorado em Física) — Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2015. Citado 4 vezes nas páginas 2, 19, 29 e 84.

57 AMORIM, R. G. G. et al. Non-commutative geometry and symplectic field theory. *Physics Letters A*, v. 361, n. 6, p. 464–471, fev. 2007. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960106015209>>. Citado na página 2.

58 AMORIM, R. G. G. *Formulação de teorias de campos via estruturas simpléticas e o produto de Weyl*. Tese (Dissertação de Mestrado em Física) — Universidade de Brasília, Brasília, 2006. Accepted: 2010-02-02T15:24:46Z. Disponível em: <<https://repositorio.unb.br/handle/10482/3492>>. Citado 6 vezes nas páginas 2, 5, 12, 29, 32 e 103.

59 AMORIM, R. G. G. et al. Perturbative symplectic field theory and Wigner function. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 388, n. 18, p. 3771–3778, set. 2009. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437109004506>>. Citado na página 2.

60 AMORIM, R. G. G. et al. Quantum field theory in phase space. *International Journal of Modern Physics A*, v. 34, n. 08, p. 1950037, mar. 2019. ISSN 0217-751X. Disponível em: <<https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217751X19500374>>. Citado na página 2.

61 AMORIM, R. G. G. et al. Solutions for the Landau problem using symplectic representations of the galilei group. *International Journal of Modern Physics A*, v. 28, n. 05n06, p. 1350013, mar. 2013. ISSN 0217-751X. Publisher: World Scientific Publishing Co. Disponível em: <<https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217751X13500139>>. Citado na página 2.

62 AMORIM, R. G. G. et al. Realization of the noncommutative Seiberg–Witten gauge theory by fields in phase space. *International Journal of Modern Physics A*, v. 30, n. 22, p. 1550135, jul. 2015. ISSN 0217-751X. Publisher: World Scientific Publishing Co. Disponível em: <<https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217751X15501353>>. Citado na página 2.

- 63 CAMPOS, P.; MARTINS, M. G. R.; VIANNA, J. D. M. Quantum mechanics on phase space and the Coulomb potential. *Physics Letters A*, v. 381, n. 13, p. 1129–1133, abr. 2017. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960117301226>>. Citado 5 vezes nas páginas 2, 99, 101, 103 e 114.
- 64 CAMPOS, P. et al. Quantum mechanics on phase space: The hydrogen atom and its Wigner functions. *Annals of Physics*, v. 390, p. 60–70, mar. 2018. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491618300046>>. Citado 4 vezes nas páginas 2, 96, 99 e 103.
- 65 CAMPOS, P. *Mecânica Quântica Simplética e O Potencial De Coulomb*. Tese (Tese de Doutorado em Física) — Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2018. Citado 4 vezes nas páginas 2, 96, 99 e 103.
- 66 KIBLER, M.; NEGADI, T. *On the use of nonbijective canonical transformations in chemical physics*. [S.l.], 1984. Disponível em: <http://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig_q=RN:16018798>. Citado na página 2.
- 67 PAIVA, R. et al. Zeeman Effect in Phase Space. *Advances in High Energy Physics*, v. 2020, p. 1–9, jan. 2020. Citado 5 vezes nas páginas 2, 27, 99, 103 e 106.
- 68 NIKIFOROV; UVAROV. *Special functions of mathematical physics: a unified introduction with applications*. 1. ed. Birkhäuser, 1988. ISBN 978-0-8176-3183-3. Disponível em: <<http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=844463e0cc8486a1c98cb8e9aa989546>>. Citado 5 vezes nas páginas 2, 41, 44, 46 e 47.
- 69 TEZCAN, C.; SEVER, R. A General Approach for the Exact Solution of the Schrödinger Equation. *International Journal of Theoretical Physics*, v. 48, n. 2, p. 337–350, fev. 2009. ISSN 1572-9575. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10773-008-9806-y>>. Citado 4 vezes nas páginas 2, 41, 50 e 54.
- 70 BERKDEMIR, C. Application of the Nikiforov-Uvarov Method in Quantum Mechanics. *Theoretical Concepts of Quantum Mechanics*, fev. 2012. Disponível em: <<https://www.intechopen.com/books/theoretical-concepts-of-quantum-mechanics/application-of-the-nikiforov-uvarov-method-in-quantum-mechanics>>. Citado 3 vezes nas páginas 2, 41 e 47.
- 71 ESHGHI, M.; MEHRABAN, H.; IKHDAIR, S. M. Bound states of (1+1)-dimensional Dirac equation with kink-like vector potential and delta interaction. *Acta Mathematicae Applicatae Sinica, English Series*, v. 31, n. 4, p. 1131–1140, out. 2015. ISSN 1618-3932. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10255-015-0521-1>>. Citado na página 2.
- 72 ZHANG, M.-C.; SUN, G.-H.; DONG, S.-H. Exactly complete solutions of the Schrödinger equation with a spherically harmonic oscillatory ring-shaped potential. *Physics Letters A*, v. 374, n. 5, p. 704–708, jan. 2010. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960109015059>>. Nenhuma citação no texto.
- 73 IKOT, A. N.; HASSANABADI, H.; ABBEY, T. M. Spin and Pseudospin Symmetries of Hellmann Potential with Three Tensor Interactions Using Nikiforov–Uvarov Method. *Communications in Theoretical Physics*, v. 64, n. 6, p. 637–643, dez. 2015. ISSN 0253-6102. Publisher: IOP Publishing. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0253-6102/64/6/637>>. Nenhuma citação no texto.

- 74 IKOT, A. N. et al. The Nikiforov–Uvarov-Functional Analysis (NUFA) Method: A New Approach for Solving Exponential-Type Potentials. *Few-Body Systems*, v. 62, n. 1, p. 9, fev. 2021. ISSN 1432-5411. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s00601-021-01593-5>>. Citado na página 2.
- 75 IKHDAIR, S. Approximate k-state solutions to the Dirac-Yukawa problem based on the spin and pseudospin symmetry. *Open Physics*, v. 10, n. 2, p. 361–381, 2012. ISSN 2391-5471. Disponível em: <<https://www.degruyter.com/view/j/phys.2012.10.issue-2/s11534-011-0121-5/s11534-011-0121-5.xml>>. Citado na página 2.
- 76 HAMZAVI, M. et al. Approximate Analytical Solution of the Yukawa Potential with Arbitrary Angular Momenta. *Chinese Physics Letters*, v. 29, n. 8, p. 080302, aug 2012. ISSN 0256-307X. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0256-307x%2F29%2F8%2F080302>>. Citado 7 vezes nas páginas 2, 3, 57, 60, 83, 87 e 113.
- 77 YUKAWA, H. On the Interaction of Elementary Particles. I. *Proceedings of the Physico-Mathematical Society of Japan. 3rd Series*, v. 17, p. 48–57, 1935. ISSN 0370-1239, 2185-2707. Disponível em: <https://www.jstage.jst.go.jp/article/ppmsj1919/17/0/17_0_48/_article/-char/en>. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 57.
- 78 BRAUS, M. The theory of electrolytes. I. Freezing point depression and related phenomena (Translation). jul. 2019. Accepted: 2019-07-18T18:36:12Z. Disponível em: <<https://minds.wisconsin.edu/handle/1793/79225>>. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 57.
- 79 THOMAS, L. H. The calculation of atomic fields. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 23, n. 5, p. 542–548, jan. 1927. ISSN 1469-8064, 0305-0041. Disponível em: <<https://www.cambridge.org/core/journals/mathematical-proceedings-of-the-cambridge-philosophical-society/article/calculation-of-atomic-fields/ADCA3D21D0FACD7077B5FDBB7F3B3F3A>>. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 58.
- 80 DINIZ, J. B. et al. Charge degeneracy for a Thomas–Fermi hydrogen molecule: Bound–unbound transition. *Solid State Communications*, v. 146, n. 3, p. 169–174, abr. 2008. ISSN 0038-1098. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109808000641>>. Citado 3 vezes nas páginas 2, 58 e 63.
- 81 DINIZ, J. B. *Quebra de simetria de cargas em estruturas eletrônicas blindadas*. Tese (Tese de Doutorado em Física) — Universidade de Brasília, Brasília, mar. 2008. Accepted: 2009-09-16T19:15:08Z. Disponível em: <<https://repositorio.unb.br/handle/10482/1692>>. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 63.
- 82 PENNA, A. L. A.; DINIZ, J. B.; OLIVEIRA, F. A. Charge degeneracy removal in the screened hydrogen atom. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, v. 42, n. 21, p. 215001, out. 2009. ISSN 0953-4075. Publisher: IOP Publishing. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0953-4075%2F42%2F21%2F215001>>. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 63.
- 83 SANTOS, L. C.; MARTINS, M. G. R.; VIANNA, J. D. M. Analytical solutions for Yukawa potential applied to atomic systems embedded in Debye plasmas. *International Journal of Quantum Chemistry*, v. 111, n. 7-8, p. 1671–1679, 2011. ISSN 1097-461X. _eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/qua.22794>. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qua.22794>>. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 63.

- 84 SANTOS, L. C. *Estudo de Sistemas Atômicos Confinados Usando o Potencial de Yukawa*. Tese (Dissertação de Mestrado em Física) — Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 63.
- 85 JOST, R.; PAIS, A. On the Scattering of a Particle by a Static Potential. *Physical Review*, v. 82, n. 6, p. 840–851, jun. 1951. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.82.840>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 59.
- 86 BARGMANN, V. On the Number of Bound States in a Central Field of Force. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 38, n. 11, p. 961–966, nov. 1952. ISSN 0027-8424, 1091-6490. Publisher: National Academy of Sciences Section: Mathematics. Disponível em: <<https://www.pnas.org/content/38/11/961>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 59.
- 87 SCHWINGER, J. On the Bound States of a Given Potential. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 47, n. 1, p. 122–129, jan. 1961. ISSN 0027-8424, 1091-6490. Publisher: National Academy of Sciences Section: Physics. Disponível em: <<https://www.pnas.org/content/47/1/122>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 59.
- 88 EDWARDS, J. P. et al. The Yukawa potential: ground state energy and critical screening. *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, v. 2017, n. 8, ago. 2017. Publisher: Oxford Academic. Disponível em: <<https://academic.oup.com/ptep/article/2017/8/083A01/4092946>>. Citado 4 vezes nas páginas 3, 58, 59 e 60.
- 89 GOMES, O. A.; CHACHAM, H.; MOHALLEM, J. R. Variational calculations for the bound-unbound transition of the Yukawa potential. *Physical Review A*, v. 50, n. 1, p. 228–231, jul. 1994. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.50.228>>. Citado 3 vezes nas páginas 3, 59 e 60.
- 90 HARRIS, G. M. Attractive Two-Body Interactions in Partially Ionized Plasmas. *Physical Review*, v. 125, n. 4, p. 1131–1140, fev. 1962. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.125.1131>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 60.
- 91 GÖNÜL, B.; KÖKSAL, K.; BAKIR, E. An alternative treatment for Yukawa-type potentials. *Physica Scripta*, v. 73, n. 3, p. 279–283, fev. 2006. ISSN 1402-4896. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0031-8949%2F73%2F3%2F007>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 60.
- 92 DUTT, R.; CHOWDHURY, K.; VARSHNI, Y. P. An improved calculation for screened Coulomb potentials in Rayleigh-Schrodinger perturbation theory. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 18, n. 9, p. 1379, jun. 1985. ISSN 0305-4470. Publisher: IOP Publishing. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/18/9/020/meta>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 60.
- 93 ROGERS, F. J.; GRABOSKE, H. C.; HARWOOD, D. J. Bound Eigenstates of the Static Screened Coulomb Potential. *Physical Review A*, v. 1, n. 6, p. 1577–1586, jun. 1970. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.1.1577>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 60.

- 94 LI, Y.; LUO, X.; KRÖGER, H. Bound states and critical behavior of the Yukawa potential. *Science in China Series G*, v. 49, n. 1, p. 60–71, jan. 2006. ISSN 1672-1799. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11433-004-0020-5>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 60.
- 95 NAPSUCIALE, M.; RODRÍGUEZ, S. Complete analytical solution to the quantum Yukawa potential. *Physics Letters B*, v. 816, p. 136218, maio 2021. ISSN 0370-2693. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269321001581>>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 60.
- 96 GARAVELLI, S. L.; OLIVEIRA, F. A. Analytical solution for a Yukawa-type potential. *Physical Review Letters*, v. 66, n. 10, p. 1310–1313, mar. 1991. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.66.1310>>. Citado 7 vezes nas páginas 3, 57, 58, 60, 61, 63 e 113.
- 97 HULTHÉN, L.; LAURIKAINEN, K. V. Approximate Eigensolutions of $(\frac{d^2\phi}{dx^2}) + [a + b(\frac{e^{-x}}{x})]\phi = 0$. *Reviews of Modern Physics*, v. 23, n. 1, p. 1–9, jan. 1951. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.23.1>>. Citado 4 vezes nas páginas 3, 60, 63 e 64.
- 98 HULTHÉN, L.; SUGAWARA, M. The Two-Nucleon Problem. In: HULTHÉN, L. et al. (Ed.). *Structure of Atomic Nuclei / Bau der Atomkerne*. Berlin, Heidelberg: Springer, 1957, (Encyclopedia of Physics / Handbuch der Physik). p. 1–143. ISBN 978-3-642-45872-9. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-45872-9_1>. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 63.
- 99 STANEK, J. The one-dimensional Hulthén potential in the quantum phase space representation. *Open Physics*, v. 12, n. 2, p. 90–96, fev. 2014. ISSN 2391-5471. Publisher: Versita Section: Open Physics. Disponível em: <<https://www.degruyter.com/document/doi/10.2478/s11534-014-0433-3/html>>. Citado na página 3.
- 100 STANEK, J. Approximate analytical solutions for arbitrary l-state of the Hulthén potential with an improved approximation of the centrifugal term. *Central European Journal of Chemistry*, v. 9, n. 4, p. 737–742, ago. 2011. ISSN 1644-3624. Disponível em: <<https://doi.org/10.2478/s11532-011-0050-6>>. Citado na página 3.
- 101 CURTRIGHT, T. L.; FAIRLIE, D. D.; ZACHOS, C. *A Concise Treatise on Quantum Mechanics in Phase Space*. [S.l.]: World Scientific, 2014. ISBN 978-981-4520-43-0. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 12.
- 102 AMORIM, R. Teoria quântica não-comutativa: Da quantização de Weyl ao método da função de Wigner. *e-Boletim da Física*, v. 8, n. 1, fev. 2019. ISSN 2318-8901. Number: 1. Disponível em: <<https://periodicos.unb.br/index.php/e-bfis/article/view/23242>>. Citado 3 vezes nas páginas 5, 12 e 13.
- 103 SCHLEICH, W. P. *Quantum Optics in Phase Space*. 1st edition. ed. Berlin ; New York: Wiley-VCH, 2001. ISBN 978-3-527-29435-0. Citado 5 vezes nas páginas 5, 6, 9, 12 e 24.

- 104 FAIRLIE, D. B. Moyal brackets, star products and the generalised Wigner function. *Chaos, Solitons & Fractals*, v. 10, n. 2, p. 365–371, fev. 1999. ISSN 0960-0779. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960077998001581>>. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 14.
- 105 BENEDICT, M. G.; CZIRJÁK, A. Wigner functions, squeezing properties, and slow decoherence of a mesoscopic superposition of two-level atoms. *Physical Review A*, v. 60, n. 5, p. 4034–4044, nov. 1999. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.60.4034>>. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 27.
- 106 FÖLDI, P. et al. Formation of Schrödinger-cat states in the Morse potential: Wigner function picture. *Optics Express*, v. 10, n. 8, p. 376–381, abr. 2002. ISSN 1094-4087. Publisher: Optical Society of America. Disponível em: <<https://www.osapublishing.org/oe/abstract.cfm?uri=oe-10-8-376>>. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 27.
- 107 LEMOS, H. C. F. et al. Roughness as classicality indicator of a quantum state. *Physics Letters A*, v. 382, n. 12, p. 823–836, mar. 2018. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037596011830080X>>. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 27.
- 108 HUSIMI, K. Some Formal Properties of the Density Matrix. *Proceedings of the Physico-Mathematical Society of Japan. 3rd Series*, v. 22, n. 4, p. 264–314, 1940. Citado na página 9.
- 109 EISBERG, R. R. *Física Quântica - Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*. 1ª edição. ed. Rio de Janeiro (RJ): GEN LTC, 1979. ISBN 978-85-7001-309-5. Citado na página 23.
- 110 GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. 2ª edição. ed. São Paulo: Pearson Universidades, 2011. ISBN 978-85-7605-927-1. Citado na página 23.
- 111 HUDSON, R. L. When is the Wigner quasi-probability density non-negative? *Reports on Mathematical Physics*, v. 6, n. 2, p. 249–252, out. 1974. ISSN 0034-4877. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/003448777490007X>>. Citado na página 26.
- 112 PAIVA, R. A. S. *Mecânica Quântica Simplética e Não-Classicalidade*. Tese (Doutorado) — Universidade de Brasília, jun. 2019. Accepted: 2020-04-02T20:40:00Z. Disponível em: <<https://repositorio.unb.br/handle/10482/37300>>. Citado na página 27.
- 113 KOWALEWSKA-KUDŁASZYK, A.; KALAGA, J. K.; LEOŃSKI, W. Wigner-function nonclassicality as indicator of quantum chaos. *Physical Review E*, v. 78, n. 6, p. 066219, dez. 2008. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.78.066219>>. Citado na página 27.
- 114 BUTKOV, E. *Mathematical Physics*. [S.l.]: Addison-Wesley, 1973. Citado 3 vezes nas páginas 41, 68 e 87.
- 115 ALTMANN, S.; ALTMANN, S. L.; ORTIZ, E. L. *Mathematics and Social Utopias in France: Olinde Rodrigues and His Times*. [S.l.]: American Mathematical Soc., 2005. ISBN 978-0-8218-3860-0. Citado na página 46.

- 116 PAULING, L.; BRIGHT WILSON E. *Introduction To Quantum Mechanics*. McGraw Hill Book Company Inc., 1935. Disponível em: <<http://archive.org/details/introductiontoqu031712mbp>>. Citado na página 61.
- 117 SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics, Revised Edition*. 1ª edição. ed. Reading, Mass: Pearson, 1993. ISBN 978-0-201-53929-5. Citado na página 61.
- 118 HERMOSO, W.; ORNELLAS, F. R. Modelos da química quântica no espaço dos momento: diferentes representações de um mesmo sistema. *Química Nova*, v. 32, n. 9, p. 2487–2491, 2009. ISSN 0100-4042. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_abstract&pid=S0100-40422009000900045&lng=en&nrm=iso&tlng=pt>. Citado na página 61.
- 119 GREENE, R. L.; ALDRICH, C. Variational wave functions for a screened Coulomb potential. *Physical Review A*, v. 14, n. 6, p. 2363–2366, dez. 1976. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.14.2363>>. Citado na página 64.
- 120 BURDEN, R.; FAIRES, J. D. *Análise numérica*. 3ª edição. ed. [S.l.]: Cengage Learning, 2016. ISBN 978-85-221-2340-7. Citado 2 vezes nas páginas 77 e 78.
- 121 BARROSO, L. C. et al. *Calculo Numerico - Com Aplicações*. [S.l.]: HARBRA EDITORA. ISBN 978-85-294-0089-1. Citado na página 77.
- 122 VUOLO, J. H. *Fundamentos da Teoria de Erros*. 2ª edição. ed. São Paulo (SP): Blucher, 1996. ISBN 978-85-212-0056-7. Citado 2 vezes nas páginas 80 e 111.
- 123 LEVI-CIVITA, T. Traiettorie singolari ed urti nel problema ristretto dei tre corpi. *Annali di Matematica Pura ed Applicata (1898-1922)*, v. 9, n. 1, p. 1–32, dez. 1904. ISSN 0373-3114. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF02419867>>. Citado na página 96.
- 124 LEVI-CIVITA, T. Sur la régularisation du problème des trois corps. *Acta Mathematica*, v. 42, n. none, p. 99–144, jan. 1920. ISSN 0001-5962, 1871-2509. Publisher: Institut Mittag-Leffler. Disponível em: <<https://projecteuclid.org/journals/acta-mathematica/volume-42/issue-none/Sur-la-régularisation-du-problème-des-trois-corps/10.1007/BF02404404.full>>. Citado na página 96.
- 125 BELLUCCI, S. (Ed.). *Supersymmetric Mechanics - Vol. 1: Supersymmetry, Noncommutativity and Matrix Models*. 2006 edition. ed. Berlin ; New York: Springer, 2006. ISBN 978-3-540-33313-5. Citado na página 96.
- 126 NOURI, S. Wigner phase-space distribution function for the hydrogen atom. *Physical Review A*, v. 57, n. 3, p. 1526–1528, mar. 1998. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.57.1526>>. Citado na página 96.
- 127 DAHL, J. P.; SPRINGBORG, M. Comment on “Wigner phase-space distribution function for the hydrogen atom”. *Physical Review A*, v. 59, n. 5, p. 4099–4100, maio 1999. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.59.4099>>. Citado na página 96.
- 128 KIBLER, M.; NEGADI, T. *On the use of nonbijective canonical transformations in chemical physics*. [S.l.], 1984. Disponível em: <http://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig_q=RN:16018798>. Citado 2 vezes nas páginas 97 e 98.

- 129 SAGGIO, M. L. Bohlin transformation: the hidden symmetry that connects Hooke to Newton. *European Journal of Physics*, v. 34, n. 1, p. 129–137, dez. 2012. ISSN 0143-0807. Publisher: IOP Publishing. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0143-0807%2F34%2F1%2F129>>. Citado na página 98.
- 130 TSIGANOV, A. V. The Maupertuis Principle and Canonical Transformations of the Extended Phase Space. *Journal of Nonlinear Mathematical Physics*, v. 8, n. 1, p. 157–182, jan. 2001. ISSN 1402-9251. Publisher: Taylor & Francis _eprint: <https://doi.org/10.2991/jnmp.2001.8.1.12>. Disponível em: <<https://doi.org/10.2991/jnmp.2001.8.1.12>>. Citado na página 98.
- 131 CHANDA, S.; GIBBONS, G. W.; GUHA, P. Jacobi–Maupertuis metric and Kepler equation. *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, v. 14, n. 07, p. 1730002, mar. 2017. ISSN 0219-8878. Publisher: World Scientific Publishing Co. Disponível em: <<https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0219887817300021>>. Citado na página 98.
- 132 YANG, X. L. et al. Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory. *Physical Review A*, v. 43, n. 3, p. 1186–1196, fev. 1991. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.43.1186>>. Citado 2 vezes nas páginas 102 e 114.