Universidade Federal da Bahia
Instituto de Física
Programa de Pós-graduação em Física

Tese de Doutorado

Aplicações de uma estrutura algébrica não aditiva em teoria quântica

Bruno Gomes da Costa

Salvador
2015

Bruno Gomes da Costa

Aplicações de uma estrutura algébrica não aditiva em teoria quântica

Tese de doutorado apresentada junto ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal da Bahia, como requisito para obtenção do título de Doutor.

Orientador: Prof. Dr. Ernesto Pinheiro Borges

Salvador
2015

Ao meu avô,
Manoel Pereira de Souza (*in memoriam*).

Ausência

Por muito tempo achei que a ausência é falta.
E lastimava, ignorante, a falta.
Hoje não a lastimo.
Não há falta na ausência.
A ausência é um estar em mim.
E sinto-a, branca, tão pegada, aconchegada nos meus braços,
que rio e danço e invento exclamações alegres,
porque a ausência, essa ausência assimilada,
ninguém a rouba mais de mim.

(Carlos Drummond de Andrade)

Agradecimentos

Esta Tese de doutorado é um resultado de bastante trabalho e dedicação, e portanto apenas poderia ser realizada com a contribuição de várias pessoas as quais sou enormemente grato.

Agradeço primeiramente à minha família pelo amor, incetivo e compreensão pelas frequentes ausências em momentos importantes.

Agradeço especialmente ao professor Ernesto Borges pela amizade, ensinamentos e dedicação para a realização deste projeto.

Aos professores Roberto Andrade, José Garcia Miranda, Suani Pinho, Flora Bacelar, Raimundo Muniz Filho e Luciano Abreu agradeço pelas contribuições na minha formação. À servidora Marli Cabral agradeço pela atenção e apoio.

Aos pesquisadores Constantino Tsallis, Fernando Nobre e Marco A. do Rego-Monteiro agradeço pelas valiosas contribuições durante as visitas que realizei ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.

Aos amigos do PGIF-UFBA: Lucas, Aureliano, Josenilton, Tércio, Elenilson, Alexsandro, Naiara, Vanessa, Eduardo, Daniel Prado e Brenda que me acompanharam nos momentos de trabalho árduo, assim como nas boas horas de lazer em Salvador.

Agradeço o apoio dado pelos companheiros da coordenação do curso de Licenciatura em Física do IFSertão-PE: George Loula, Pedro Campos, Aléssio Celeste, Cícero Thiago, Ericleiton Rodrigues, Newton Pinório, Sérgio Carvalho, Leudiane Rodrigues, Daniel Berg, Deivd Porto, Aristóteles Feitosa, Jorge Fernandes (*in memoriam*) e Patrício Andrade.

Agradeço em especial aos estudantes do IFSertão-PE pelo apoio e compreensão da dificuldade em realizar um curso de Doutorado e trabalhar como professor simultaneamente.

Aos amigos Luzinete Moreira e Fabiano Santos sou imensamente grato pelos seus incentivos.

E à minha querida Carol, agradeço pelo enorme carinho e amor que foi fundamental ao longo da reta final deste trabalho.

Resumo

A dinâmica quântica de sistemas com massa dependente da posição tem atraído o interesse de diversos pesquisadores devido à sua grande aplicabilidade em física da matéria condensada, teoria de condutores e semicondutores, física nuclear, ótica não linear, física de partículas e outros problemas relacionados. Recentemente, generalizações das equações da mecânica quântica têm sido propostas a partir de funções deformadas que emergem da mecânica estatística não extensiva. Uma destas formulações está associada a uma equação de Schrödinger não linear q-deformada, e uma outra está associada a uma equação de Schrödinger linear q-deformada. A última pode ser aplicada para descrever sistemas com massa dependente da posição. Esta Tese está baseada nestas formulações e propõe desenvolvimentos teóricos adicionais. Em relação à primeira formulação, revisitamos algumas de suas características e investigamos o problema de precessão para um sistema de spin $\frac{1}{2}$. A maior parte deste presente trabalho é dedicado à segunda formulação na qual é derivada a partir de um operador que origina deslocamentos não aditivos. Propomos uma modificação deste operador translação que leva à definição de um operador momento linear hermitiano $\hat{p}_q$, e seu operador posição canonicamente conjugado $\hat{x}_q$. A transformação canônica $(\hat{x}_q, \hat{p}_q) \to (\hat{x}, \hat{p})$ mapeia o hamiltiano de uma partícula com massa constante em um espaço deformado em um outro hamiltoniano de uma partícula com massa dependente da posição. A massa da partícula é uma função da posição controlada por um parâmetro, γ_q. Uma vez que os operadores $\hat{x}_q$ e $\hat{p}_q$ são hermitianos e canonicamente conjugados, investigamos os análogos clássicos de sistemas quânticos envolvendo estas variáveis dinâmicas. As equações de movimento para o espaço de fase clássico (x, p) podem ser expressas em termos de operadores derivada deformados. Investigamos alguns problemas típicos de mecânica quântica considerando o efeito da massa dependente da posição: poços de potencial quadrado infinito e finito, potencial degrau e tunelamento quântico. Também revisitamos o problema de uma partícula com massa dependente da posição em um potencial quadrático. Particularmente, esta transformação canônica leva uma partícula com massa dependendente da posição em um potencial quadrático para uma partícula com massa constante em um potencial de Morse. Apresentamos também a definição de novas funções trigonométricas e hiperbólicas que tornam-se importantes ferramentas matemáticas para descrever estes sistemas.

Abstract

Quantum dynamics of systems with mass dependent on position have been attracting the interest of many researchers due to wide application in condensed matter physics, theory of conductors and semiconductors, nuclear physics, nonlinear optics, particle physics and other problems. Recently, generalizations of the quantum mechanics equations have been proposed from deformed functions that emerge from statistical mechanics. One of these is associated with a q-deformed nonlinear Schrödinger equation, and another one is associated with a q-deformed linear Schrödinger equation. The latter can be applied to describe systems with mass dependent on the position. This thesis is based on these formulations and proposes additional theoretical developments. For the first formulation, we revisit some of its characteristics and investigated the precession problem for a spin-$\frac{1}{2}$ system. Most part of the present work is devoted to the second formulation which is derived from an operator that originates non-additive displacements. We propose a modification of this translation operator that leads to the definition of a Hermitian deformed linear momentum operator $\hat{p}_q$, and its canonically conjugate deformed position operator $\hat{x}_q$. The canonical transformation $(\hat{x}_q, \hat{p}_q) \to (\hat{x}, \hat{p})$ leads the Hamiltonian of a particle with constant mass in a deformed space into another Hamiltonian of a position-dependent mass particle in an usual space. The particle mass is a function of the position controlled by a parameter, γ_q. Furthermore, since the operators $\hat{x}_q$ and $\hat{p}_q$ are Hermitian and canonically conjugated, we investigate the classical analogue of quantum systems involving these dynamical variables. The equation of motion for the classical phase space (x, p) may be expressed in terms of deformed derivative operators. We investigate some typical problems of quantum mechanics considering a position-dependent mass: infinite and finite square potential wells, potential step and quantum tunneling. We also revisit the problem of a position-dependent mass in a quadratic potential in both classical and quantum formalisms. Particularly, this canonical transformation maps the problem of a particle with position-dependent mass under a quadratic potential into a problem of a particle with constant mass under a Morse potential. We also introduce new trigonometric and hyperbolic functions that become important mathematical tools to describe these systems.

Sumário

Lista de Figuras **ix**

Lista de Abreviaturas **xi**

1 Introdução **1**

2 Álgebra não aditiva e funções elementares q-deformadas **7**

2.1 Mecânica estatística não extensiva e funções q-deformadas 7

2.2 Outra generalização de funções elementares 13

2.3 Propriedades da q-álgebra 17

2.4 Números q-deformados 23

2.5 q-cálculo 27

2.6 Funções trigonométricas e hiperbólicas deformadas 33

3 Dinâmica quântica q-deformada NRT **47**

3.1 Algumas equações lineares e não lineares da física 48

3.2 Ondas q-planas 52

3.3 A equação de Schrödinger não linear NRT 55

3.4 Equação de Schrödinger não linear NRT em sistemas de coordenadas móveis 57

3.5 Teoria clássica de campos para a equação de Schrödinger não linear NRT . 61

3.6 Estados estacionários para uma partícula em um potencial quadrado infinito 66

3.7 Operador evolução temporal q-deformado 72

3.8 Dinâmica não linear q-deformada para sistemas de spin $\frac{1}{2}$ 78

4 Dinâmica quântica q-deformada para um sistema com massa efetiva **85**

4.1 Operadores hamiltonianos para sistemas com massa dependente da posição 86

4.2 Operadores translação, momento linear e espaço generalizados hermitianos 92

4.3 Equações lineares q-deformadas da dinâmica no formalismo quântico 99

4.4 Função de onda para partícula livre com massa efetiva 108

4.5 Análogos clássicos dos operadores deformados 114

4.6 Equações de Ehrenfest para sistema com massa dependente da posição . . 118

4.7 Aproximação semiclássica para sistemas com massa dependente da posição 123

4.8 Teoria clássica de campos para equação de Schrödinger linear q-deformada 127

5 Aplicações da dinâmica quântica q-deformada para massa efetiva 133

5.1 Partícula com massa efetiva em um poço de potencial quadrado infinito . . 133
5.2 Ondas eletromagnéticas em meios não homogêneos 157
5.3 Potencial degrau para partículas com massa efetiva 162
5.4 Tunelamento quântico para partícula com massa efetiva 166
5.5 Partícula com massa dependente da posição em poço de potencial finito . . 171

6 Oscilador harmônico q-deformado 175

6.1 Oscilador harmônico simples q-deformado 176
6.2 Oscilador harmônico amortecido q-deformado 192
6.3 Variáveis ação e ângulo para o oscilador q-deformado 196
6.4 Oscilador harmônico quântico q-deformado 201
6.5 Teoria de perturbação independente do tempo para oscilador q-deformado . 221

7 Conclusões e perspectivas 227

A Lista de definições matemáticas 233

B Equações de Ehrenfest para sistemas com massa efetiva 241

C Algumas propriedades dos polinômios associados de Laguerre 247

Referências Bibliográficas 255

Lista de Figuras

1.1 Representação da energia potencial de um elétron em um cristal. 4
1.2 Modificação da relação de dispersão em um cristal. 4

2.1 Funções $\exp_q(x)$ e $\ln_q(x)$. 12
2.2 Efeitos da transformação $x \to x_q$ sobre um triângulo. 24
2.3 Quadro de operadores e números deformados. 27
2.4 Funções trigonométricas deformadas $\cos_q(x)$ e $\mathrm{sen}_q(x)$. 34
2.5 Gráficos de produtos entre funções trigonométricas generalizadas. 36
2.6 Funções trigonométricas deformadas $\mathrm{Sn}_q(x)$ e $\mathrm{Cs}_q(x)$. 39
2.7 Funções trigonométricas deformadas $\mathrm{Sen}_q(x)$ e $\mathrm{Cos}_q(x)$. 44

3.1 Gráfico da constante de normalização N_q para ondas q-planas. 53
3.2 Função trigonométrica generalizada $\mathrm{SEN}_q(u)$. 69
3.3 Grandeza adimensional τ_q associada ao período de $\mathrm{SEN}_q(u)$. 69
3.4 Função $\eta_n(q)$. 70
3.5 $\rho(x)$ para o problema do poço quadrado infinito. 71
3.6 Evolução temporal de $\langle \hat{S}_x \rangle_t$ e $\langle \hat{S}_y \rangle_t$. 84

4.1 Curvas q'-gaussianas q-transladadas. 94

5.1 Espaço de fase de uma partícula em uma caixa com massa efetiva. 134
5.2 Densidade de probabilidade clássica para uma partícula em uma caixa . . . 136
5.3 Razão entre os comprimentos deformado e usual: L_q/L. 136
5.4 Níveis de energia para uma partícula em poço quadrado infinito 139
5.5 Autofunções e densidades de probabilidade para partícula em uma caixa . 141
5.6 Densidade de probabilidade quântica para partícula em uma caixa ($n = 10$). 142
5.7 Densidade de probabilidade em uma caixa bidimensional ($\gamma_q L = 0$). . . . 143
5.8 Densidade de probabilidade em uma caixa bidimensional ($\gamma_q L = 0.5$). . . 143
5.9 Densidade de probabilidade em uma caixa bidimensional ($\gamma_q L = 2.0$). . . 144
5.10 Densidade de probabilidade em uma caixa bidimensional ($\gamma_q L = 10$). . . 144
5.11 Valores esperados de $\langle \hat{x} \rangle$ e $\langle \hat{x}^2 \rangle$. 146
5.12 Valor esperado de $\langle \hat{p}^2 \rangle$. 147

5.13 Relação de incerteza para uma partícula em uma caixa. 148
5.14 Potencial degrau. 162
5.15 Barreira de potencial retangular. 167
5.16 Coeficiente de transmissão para tunelamento quântico deformado. 170
5.17 Poço de potencial quadrado finito. 171
5.18 Função $\tan(a_q z/2a)$ para partícula em poço de potencial quadrado finito. . 174

6.1 Posição, velocidade, aceleração e fase de um oscilador q-deformado ($\gamma_q < 1$). 179
6.2 Posição e velocidade do oscilador q-deformado ($\gamma_q > 1$). 179
6.3 Momento linear de um oscilador q-deformado. 180
6.4 Energias cinética e potencial de um oscilador q-deformado. 180
6.5 Potencial de Morse. 181
6.6 Órbitas nos espaços de fase (x, p) e (x_q, p_q). 182
6.7 Densidade de probabilidade para o oscilador clássico deformado. 184
6.8 $\overline{T}$ e $\overline{V}$ para o oscilador deformado em função de $\gamma_q A$. 185
6.9 Figuras de Lissajous deformadas 186
6.10 Potencial anarmônico $V(x) = (m_0\omega_0^2/2\gamma_q^2)\ln^2(1+\gamma_q x)$. 187
6.11 Potencial de Lennard-Jones modificado. 188
6.12 Velocidade e posição do oscilador amortecido q-deformado. 194
6.13 Momento linear e energia cinética do oscilador amortecido q-deformado. . . 195
6.14 Energia E e derivada dE/dt para o oscilador amortecido q-deformado. . . . 196
6.15 Níveis de energia dos estados ligados. 200
6.16 Autofunções e densidade de probabilidade para o oscilador deformado. . . . 208
6.17 Densidade de probabilidade do oscilador harmônico deformado ($n = 10$) . . 209
6.18 Densidade de probabilidade oscilador bidimensional ($\gamma_q a_0 = 0$). 210
6.19 Densidade de probabilidade oscilador bidimensional ($\gamma_q a_0 = 0.2$). 211
6.20 Δx, Δp e relação de incerteza para o oscilador deformado. 215

Lista de Abreviaturas

BG	Boltzmann–Gibbs
NRT	Nobre–Rego-Monteiro–Tsallis
WKB	Wentzel–Kramers–Brillouin
CK	Caldirola-Kanai

Capítulo 1

Introdução

As três primeiras décadas do século XX foram marcadas na história das ciências naturais pela revolucionária mudança no entendimento de fenômenos que ocorrem na escala atômica, não apenas pelas limitações da física clássica, mas também pelo desenvolvimento de uma teoria com um largo alcance de aplicabilidade [1]. A partir do postulado de Max Planck em 1900, vários cientistas, tais como Albert Einstein, Niels Bohr e Arthur Compton, desenvolveram trabalhos que propuseram modificações no entendimento da matéria em escalas microscópicas, em particular, em fenômenos que envolvem a interação entre luz e matéria por meio de pacotes de energia denominados fótons. Entre 1923 e 1928, cientistas como Erwin Schrödinger, Louis de Broglie, Werner Heisenberg, Max Born, Pascual Jordan, Wolfrang Pauli, Paul Dirac e outros contribuíram para a formulação da mecânica quântica.

Especificamente, a equação de Schrödinger [2] em um espaço d-dimensional, dada por

$$i\hbar\frac{\partial\Phi(\vec{x},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\vec{\nabla}^2\Phi(\vec{x},t) + V(\vec{x},t)\Phi(\vec{x},t), \tag{1.1}$$

descreve a propagação das ondas de matéria em termos da função de onda $\Phi(\vec{x},t)$, onde esta representa o estado de partículas não relativísticas de massa m_0 na teoria quântica.

Uma formulação alternativa foi proposta pelos físicos M. Born, P. Jordan e W. Heisenberg [3], e pode ser utilizada para descrever fenômenos atômicos [4]. Nesta formulação, grandezas dinâmicas como momento linear, posição e energia são representadas através de operadores (ou matrizes), onde os autovalores representam possíveis valores das medidas. Apesar de serem aparentemente diferentes, o próprio Schrödinger provou que estas duas formulações são equivalentes. De forma simplificada, considerando um operador hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0}\hat{p}^2 + V(\hat{x},t), \tag{1.2}$$

com o operador momento $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ na representação posição $\{|\hat{x}\rangle\} = \{|\hat{x}_1,...,\hat{x}_d\rangle\}$, a equação de Schrödinger (1.1) é equivalente à equação para o vetor ket de estado no espaço

de Hilbert $|\alpha(t)\rangle$ dada por

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha(t)\rangle = \hat{H}|\alpha(t)\rangle, \tag{1.3}$$

onde a função de onda é a representação de $|\alpha(t)\rangle$ na base $\{|\hat{x}\rangle\}$, *i.e.*, $\langle\hat{x}|\alpha(t)\rangle = \Phi(\vec{x},t)$.

Uma característica importante da Eq. (1.1) é que esta corresponde a uma equação diferencial linear, e da qual torna-se válido o princípio de superposição para suas soluções. Além disso, para potenciais independentes do tempo, esta equação de onda permite que as soluções tenham as partes espacial e temporal desacopladas na forma $\Phi(\vec{x},t) = \varphi(\vec{x})e^{-iEt/\hbar}$ (estados estacionários), onde $\varphi(\vec{x})$ satisfaz a chamada equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\vec{\nabla}^2\varphi(\vec{x}) + V(\vec{x})\varphi(\vec{x}) = E\varphi(\vec{x}), \tag{1.4}$$

ou na formulação matricial: $\hat{H}\varphi(\vec{x}) = E\varphi(\vec{x})$, de modo que E e $\varphi(\vec{x})$ são autovalores e autofunções do operador hamiltoniano.

Deve-se a Born uma das interpretações da função de onda: $\rho(\vec{x},t) \equiv |\Phi(\vec{x},t)|^2$ representa a densidade de probabilidade de encontrar a partícula entre $\vec{x}$ e $\vec{x}+d\vec{x}$ no instante de tempo t. Notemos que para estados estacionários, a densidade de probabilidade é independentente do tempo e dada em termos das autofunções $\varphi(\vec{x})$. O valor esperado de uma grandeza $\hat{\Omega}$ para um estado representado por uma função de onda normalizada, *i.e.*, na qual

$$\int \Phi^*(\vec{x},t)\Phi(\vec{x},t)d^d\vec{x} = 1, \tag{1.5}$$

é dado por

$$\langle\hat{\Omega}\rangle \equiv \langle\alpha|\hat{\Omega}|\alpha\rangle = \int \Phi^*(\vec{x},t)\hat{\Omega}\Phi(\vec{x},t)d^d\vec{x}. \tag{1.6}$$

As aplicabilidades da mecânica quântica são inumeráveis, uma vez que vai desde sistemas atômicos simples, como o átomo de hidrogênio resolvido pelo próprio Schrödinger em 1926, a sistemas atômicos mais complexos como moléculas e cristais com uso de métodos aproximativos ou de computadores de alta velocidade [5].

Um dos exemplos mais simples da aplicação da Eq. (1.1) é o de um elétron de massa m_0 em um potencial constante $V(\vec{x},t) = V_0$.[1] Classicamente, este problema corresponde ao de uma partícula livre, uma vez que está sujeita a uma força nula $\vec{F} = -\vec{\nabla}V = \vec{0}$. Neste caso, considerando o problema unidimensional, a equação de Schrödinger independente do tempo (1.4) torna-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E\varphi(x), \tag{1.7}$$

e tem como solução autofunções do tipo $\varphi(x) = Ae^{\pm ikx}$, com

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m_0}. \tag{1.8}$$

[1] Neste exemplo, estamos desconsiderando o spin do elétron não relativístico.

Portanto as funções de onda são funções exponenciais

$$\Phi(x,t) = Ae^{i(\omega t \pm kx)}, \tag{1.9}$$

chamadas de ondas planas, cuja velocidade de fase é $v_f = \omega/k$. A partir das hipóteses de de Broglie, $E = \hbar\omega$ e $p = \hbar k$, a energia dada pela Eq. (1.8) satisfaz a relação de dispersão $\omega(k) = \hbar k^2/2m_0$. No entanto, as ondas planas apresentam duas inconsistências com a descrição da partícula livre. A primeira está relacionada ao fato das ondas planas serem funções não normalizáveis. A segunda é que a velocidade de fase $v_f = p/2m_0$ não coincide com a velocidade clássica da partícula que a função de onda representa.

Por outro lado, devido a linearidade da Eq. (1.1), pode-se construir um pacote de ondas planas dado por

$$\Phi(x,t) = \int \phi(k) e^{i(kx-\omega t)} dk, \tag{1.10}$$

e que se propaga com uma velocidade de grupo

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k}. \tag{1.11}$$

Considerando que a função de distribuição $\phi(k)$ apresenta um máximo em $k = k_0$, tem-se que a velocidade de grupo coincide com a velocidade da partícula para este valor do vetor de onda. De fato, da relação de disperão (1.8), obtemos [6]

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m_0} = \frac{p_0}{m_0}. \tag{1.12}$$

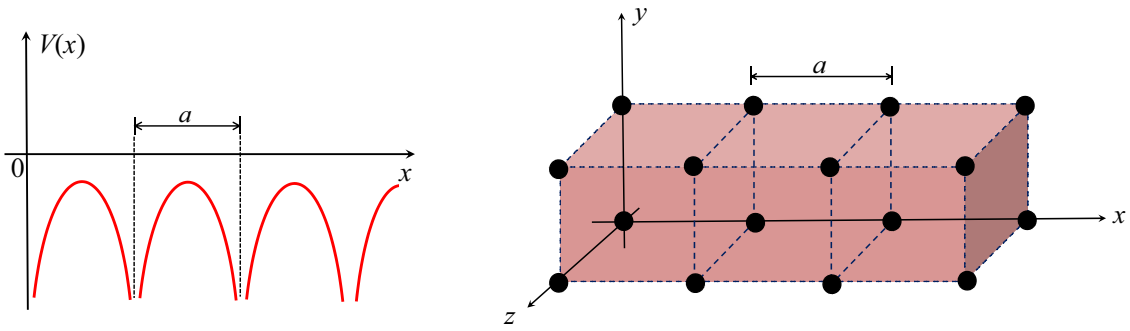
O modelo do elétron livre é útil, por exemplo, para compreender diversas propriedades físicas de metais e semicondutores. Neste modelo, os elétrons mais fracamente ligados (elétrons de valência) aos núcleos dos átomos constituintes do material se desprendem do mesmo, e tornam-se os chamados elétrons de condução que podem se mover livremente. Também considera-se que as posições dos núcleos atômicos são fixas, constituindo o que denomina-se de rede cristalina. A Figura 1.1 ilustra em (a) a energia potencial periódica ao longo do eixo x associada à interação do elétron com os íons de uma rede cristalina representada por (b).

O potencial periódico de interação entre o elétron e os íons dá origem aos possíveis valores do vetor de onda para o qual o elétron de condução pode se comportar como um elétron quase livre. Especificamente, considerando a periodicidade da rede em uma dimensão, as ondas que satisfazem a condição de Bragg

$$2a \operatorname{sen}\theta = n\lambda = \frac{2\pi n}{k}, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, ... \tag{1.13}$$

são refletidas pela rede, dando origem a ondas estacionárias. Nos pontos onde $k = n\pi/a$,

a curva de dispersão é descontínua. Conforme ilustrado qualitativamente na Figura 1.2, entre dois valores consecutivos de $k = n\pi/a$ ocorrem a formação de faixas de energias possíveis da qual o elétron comporte-se como uma partícula livre, e que são chamadas de bandas de condução. As descontinuidades de energia E_g são os gaps de energia das bandas de condução e caracterizam se um material comporta-se como condutor, semicondutor ou isolante [5].



(a) (b)

Figura 1.1: Em (a) é representado a energia potencial de um elétron ao longo do eixo x para a rede cristalina ilustrada em (b).

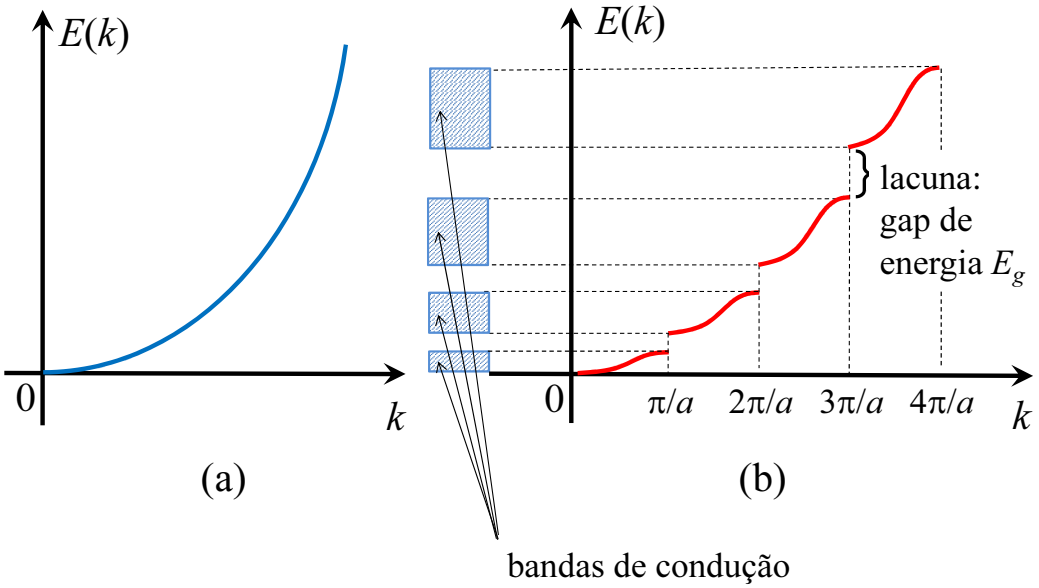


Figura 1.2: (a) Representação da relação de dispersão de um elétron livre. (b) Representação da relação de dispersão de um elétron quase livre para uma rede cristalina. As curvas sólidas separadas pelas linhas tracejadas são as bandas de condução.

Para analisar as propriedades elétricas dos metais e dos semicondutores é preciso também compreender como um elétron comporta-se no material sob a influência de um campo elétrico externo, quando o mesmo será submetido a uma força externa F. Durante um intervalo de tempo δt, a variação de energia δE sobre o elétron é

$$\delta E = F\delta x = Fv_g\delta t. \tag{1.14}$$

Notando que

$$\delta E = \frac{\partial E}{\partial t}\delta t = \frac{\partial E}{\partial k}\frac{dk}{dt}\delta t = \hbar v_g\frac{dk}{dt}\delta t, \tag{1.15}$$

e comparando com (1.14), obtemos

$$F = \hbar\frac{dk}{dt}. \tag{1.16}$$

Esta equação é nada mais que a segunda lei de Newton, uma vez que $\hbar k$ é o momento linear do elétron. A Eq. (1.16) torna-se surpreendente, pois poderia se esperar que o potencial da rede cristalina tivesse algum efeito sobre o movimento do elétron. Vemos que a interação da rede não modifica a forma da equação acima, no entanto, ela altera a dependência da energia com o momento, que corresponde a mudar a massa do elétron. Para mostrar isso, calculando a aceleração do elétron a partir da velocidade de grupo dada pela Eq. (1.11), obtemos:

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial E}{\partial k}\right) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\frac{dk}{dt}. \tag{1.17}$$

Pelo valor de dk/dt obtido na expressão (1.16), e substituído na expressão acima, temos:

$$a = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right)F. \tag{1.18}$$

Portanto, podemos observar que a ação da força externa sobre o elétron no cristal atua de forma como se esta partícula possuísse uma *massa efetiva* m^*, tal que

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}. \tag{1.19}$$

No caso particular de um elétron livre, a partir da relação entre energia E e vetor de onda k dada pela Eq. (1.8), obtém-se $m^* = m_0$, ou seja, a massa efetiva é a própria massa do elétron. Para outras relações de dispersão, o fato da massa efetiva m^* ser diferente de m_0 está associado a curvatura da função $E(k)$, que por sua vez depende do potencial periódico que o elétron é submetido. Neste caso, a presença de um campo elétrico externo faz com que o elétron seja acelerado como se sua massa fosse igual a massa efetiva dada por (1.19). Se a energia em uma banda depender de valores de k de modo que não há grandes variações da função $\partial E/\partial k$, pode-se dizer que a massa efetiva é grande, ou ainda,

$m^*/m_0 \gg 1$, uma vez que $\partial^2 E/\partial k^2 \ll 1$.

O principal objetivo desta Tese é apresentar recentes resultados de possíveis deformações das equações da mecânica quântica que podem ser aplicadas como uma alternativa para descrever sistemas com massa efetiva, ou ainda, uma massa que dependa da posição.

Em particular, recentes formulações da equação de Schrödinger associadas a uma álgebra não aditiva (q-álgebra) [7, 8] que está relacionada à mecânica estatística não extensiva [9], têm sido propostas na literatura. Uma delas trata-se de uma equação de Schrödinger não linear proposta inicialmente em [10]. Outra trata-se de uma equação linear proposta em [11] relacionada a um espaço não aditivo, e que pode ser utilizada para descrever sistemas com massa dependente da posição.

Portanto esta Tese está organizada como segue: o Capítulo 2 discute algumas propriedades da q-álgebra e funções deformadas que tornam-se importantes para a descrição destas formulações da mecânica quântica q-deformadas linear e não linear. Com o objetivo basicamente de uma revisão de literatura, a formulação não linear q-deformada da equação de Schrödinger proposta em [10], bem como outros trabalhos relacionados, são apresentados no Capítulo 3. Em seguida, no Captítulo 4, discutimos a formulação linear q-deformada da equação de Schrödinger proposta em [11] e demais trabalhos relacionados. Algumas aplicações desta formulação são apresentadas nos capítulos seguintes. No Capítulo 5 revisitamos sistemas com massa dependente da posição em problemas como poços de potencial quadrado infinito e finito, barreiras de potencial e tunelamento quântico. No Capítulo 6 apresentamos um oscilador q-deformado associado a uma partícula com massa dependente da posição. Por fim, no Capítulo 7, apresentamos nossas conclusões e perspectivas dos resultados discutidos nesse trabalho.

Capítulo 2

Álgebra não aditiva e funções elementares q-deformadas

O objetivo central desta Tese é a análise de recentes formulações de equações da mecânica quântica deformadas através de uma álgebra não aditiva e funções deformadas que emergem da mecânica estatística não extensiva, cujas aplicações estão estreitamente ligadas a sistemas complexos [12]. Desta forma, o presente Capítulo tem como objetivo realizar uma fundamentação teórica desta álgebra, assim como apresentar recentes desenvolvimentos que realizamos.

O Capítulo está organizado da seguinte forma: iniciaremos com uma revisão sucinta dos conceitos básicos da mecânica estatística não extensiva e suas funções deformadas. A título de conhecimento, apresentamos brevemente alguns conceitos de uma álgebra deformada diferente daquela que estamos interessados, mas que está associada a um formulação da mecânica quântica deformada em espaços não comutativos [13, 14, 15, 16, 17, 18]. O uso de métodos algébricos nesta formulação, como por exemplo operadores criação e aniquilação, está associada à álgebra generalizada de Heisenberg [19, 20]. Em seguida, apresentamos a álgebra não aditiva, aqui denominada q-álgebra. Operadores de um cálculo deformado relacionado à q-álgebra são apresentados. Desenvolvemos aplicações deste cálculo a funções elementares deformadas, e que por sua vez estão associadas a equações da mecânica quântica deformadas estudadas a seguir ao longo desta Tese.

2.1 Mecânica estatística não extensiva e funções q-deformadas

A termodinâmica é uma teoria fenomenológica que busca sistematizar as leis empíricas sobre o comportamento térmico de sistemas físicos macroscópicos [21]. As propriedades macroscópicas destes sistemas poderiam ser descritas através das leis da mecânica (clássica ou quântica). Entretanto, como o número de partículas é muito grande, da ordem do

número de Avogrado ($N_A \approx 6 \times 10^{23}$), torna-se impossível a aplicabilidade destas leis a sistemas nesta escala, e faz-se necessário o uso de ferramentas estatísticas. A mecânica estatística é uma teoria que tem como objetivo explicar as leis da termodinâmica através da modelagem do comportamento das inúmeras partículas constituintes dos sistemas macroscópicos, e está baseada em leis da mecânica e princípios de teoria das probabilidades [22].

A mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (BG) fornece uma ferramenta poderosa para entender como partículas microscópicas com interações de curto alcance afetam as propriedades termodinâmicas de um sistema em escalas muito grandes de espaço-tempo. Por exemplo: sistemas gasosos de moléculas apolares que interagem através das forças de van der Waals, difusão normal, sistemas dinâmicos com memórias de curta duração (sistemas ergódicos) etc. Esta teoria é baseada na entropia de Boltzmann-Gibbs definida em sua forma discreta por

$$S = -k \sum_{i=1}^{W} p_i \ln p_i, \tag{2.1}$$

onde k é uma constante positiva, p_i é a probabilidade de ocorrência de um dos W microestados possíveis do sistema, e que satisfaz a condição de normalização $\sum_{i=1}^{W} p_i = 1$. A partir de uma simples manipulação matemática, podemos escrever a expressão acima em termos do seguinte valor médio sobre todos os microestados:

$$\begin{aligned} S &= k \sum_{i=1}^{W} p_i \ln\left(\frac{1}{p_i}\right) \\ &= k \left\langle \ln\left(\frac{1}{p_i}\right) \right\rangle. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Em particular, no caso de todos os microestados serem igualmente provavéis (*ensemble* microcanônico), temos $p_i = 1/W$, e portanto

$$S = k \ln W. \tag{2.3}$$

Considerando que o sistema é constituído por N subsistemas (ou partículas) idênticos(as) independentes, cada um deles com μ estados possíveis, o número total de microestados representativos possíveis para o sistema macroscópico é

$$W_N = \mu^N. \tag{2.4}$$

Para este caso, observamos que a quantidade de microestados possíveis cresce exponenci-

almente com N. A entropia de BG torna-se

$$S = k \ln \mu^N = Nk \ln \mu, \tag{2.5}$$

mostrando que S é proporcional ao número N de subsistemas. Esta propriedade é chamada de extensividade.

Consideremos dois subsistemas independentes A e B, com W_A e W_B a quantidade de microestados possíveis de cada um respectivamente, e que constituem um sistema composto AB. O número total de estados possíveis do sistema composto é dado pelo produto do número de microestados de cada parte, *i.e.*, $W_{AB} = W_A W_B$. Portanto, a entropia do sistema composto satisfaz

$$S(A+B) = k \ln W_{AB} = k \ln(W_A W_B) = k \ln W_A + k \ln W_B = S(A) + S(B), \tag{2.6}$$

ou seja, a entropia do sistema composto é a soma das entropias dos subsistemas constituintes. Esta propriedade é chamada de aditividade. Devido às propriedades da função logaritímica, aditividade e extensividade são propriedades coincidentes.

A mecânica estatística de BG pode ser aplicada a inúmeros sistemas físicos, mas apresenta limitações como o próprio Gibbs afirmava na página 35 do livro *Elementary Principles in Statistical Mechanics – Developed with Especial Reference to the Rational Foundation of Thermodynamics* [23]:

> "In treating of the canonical distribution, we shall always suppose the multiple integral in equation (92) [partition function] to have a finite value, as otherwise the coefficient of probability vanishes, and the law of distribution becomes illusory. This will exclude certain cases, but not such apparently, as will affect the value of our results with respect to their bearing on thermodynamics. It will exclude, for instance, cases in which the system or parts of it can be distributed in unlimited space (or in a space which has limits, but is still infinite in volume), while the energy remains beneath a finite limit. It also excludes many cases in which the energy can decrease without limit, as when the system contains material points which attract one another inversely as the squares of their distances. [...] For the purposes of a general discussion, it is sufficient to call attention to the assumption implicitly involved in the formula (92)."

Durante as últimas décadas, tem-se observado as limitações deste formalismo para a descrição de sistemas complexos naturais, artificiais ou sociais, observados e desenvolvidos nas diversas áreas da ciência: física (astronomia, física de partículas, turbulência), biologia (DNA, conformações de enzimas), matemática (geometria fractal), computação (percolação, autômatos celulares), economia (índices da bolsa de valores), entre outros.

Em particular na física, a entropia (2.1) não consegue descrever sistemas hamiltonianos de muitos corpos com interação de longo-alcance (*e.g.* íons não blindados interagindo através de força coloumbiana), difusão anômala, espalhamentos do momento transversal em colisões partículas de altas energias, sistemas dinâmicos com memória de longa duração (sistemas não ergódicos) etc. Tipicamente, estes sistemas são caracterizados por números de estados W_N dados por leis de potência do tipo

$$W_N \propto N^{\nu}, \tag{2.7}$$

onde ν é uma constante positiva e N é o número de subsistemas constituintes. Este fato está associado aos subsistemas não serem estatisticamente independentes, ou seja, apresentam correlações [9, 24].

A importância destes fenômenos levaram a novos métodos de tratamento de sistemas complexos como por exemplo a mecânica estatística não extensiva. Ela surgiu a partir da publicação do artigo intitulado *Possible Generalization of Boltzmann-Gibbs Statistics*, pelo físico Constantino Tsallis em 1988 [25]. Naquele trabalho, foi proposta a seguinte função para uma entropia generalizada

$$S_q \equiv \frac{k}{q-1}\left(1-\sum_{i=1}^{W} p_i^q\right), \tag{2.8}$$

onde q é um parâmetro, chamado de índice entrópico, que controla a generalização da entropia S_q. Considerando a condição de normalização, a entropia generalizada pode ser escrita de uma forma análoga à Eq. (2.2). De fato,

$$\begin{aligned} S_q &= \frac{k}{q-1}\left(\sum_{i=1}^{W} p_i - \sum_{i=1}^{W} p_i^q\right) \\ &= k\sum_{i=1}^{W} p_i \frac{1-p_i^{q-1}}{q-1} \\ &= k\sum_{i=1}^{W} p_i \frac{(1/p_i)^{1-q}-1}{1-q} \\ &= k\left\langle \ln_q\left(\frac{1}{p_i}\right)\right\rangle, \end{aligned} \tag{2.9}$$

onde é definida a função q-logaritmo [26]

$$\ln_q x \equiv \frac{x^{1-q}-1}{1-q}, \qquad (x>0). \tag{2.10}$$

Para o *ensemble* microcanônico, a entropia de Tsallis é dada por

$$S_q = k\frac{W^{1-q}-1}{1-q} = k\ln_q W, \tag{2.11}$$

e satisfaz a seguinte propriedade para dois subsistemas independentes A e B com número de microestados dados por $W = W_A W_B$:

$$\frac{S_q(A+B)}{k} = \frac{S_q(A)}{k} + \frac{S_q(B)}{k} + (1-q)\frac{S_q(A)}{k}\frac{S_q(B)}{k}. \tag{2.12}$$

A entropia S_q do sistema composto não é a soma das entropia dos dois subsistemas, como a entropia de BG, ou ainda, S_q é não aditiva. Chamamos a atenção que aditividade e extensividade são propriedades diferentes, mas que são coincidentes para sistemas fracamente correlacionados. Como curiosidade, apesar da propriedade não aditiva da entropia, a denominação mecânica estatística não extensiva é a mais utilizada, porque para sistemas com interação de longo alcance, a energia, ao invés da entropia, é não extensiva.

Por outro lado, apesar desta propriedade não extensiva (e não aditiva) da entropia S_q, esta consegue abrir um leque de aplicabilidades dos conceitos de mecânica estatística a sistemas complexos, ademais, preserva propriedades relevantes da termodinâmica como expansibilidade, modularidade, concavidade, estabilidade de Lesche, e estrutura das transformações de Legendre, formas do teorema de Ehrenfest, teorema H, equação de von Neumann [9].

A mecânica estatística não extensiva tem sido tratada basicamente ao longo de três linhas (que se complementam): desenvolvimento de formalismo matemático, observação de consistências com experimentos, e do seu próprio desenvolvimento teórico.

A base matemática da mecânica estatística não extensiva é desenvolvida em torno das definições de funções generalizadas, como o q-logaritmo (2.10), e sua inversa, a função q-exponencial dada por:

$$\exp_q x \equiv [1+(1-q)x]_+^{1/(1-q)}, \tag{2.13}$$

com $[A]_+ \equiv \max\{A, 0\}$ [26]. No limite $q \to 1$, as funções generalizadas (2.10) e (2.13) recuperam as funções usuais, ou seja, $\ln_1(x) = \ln(x)$ e $\exp_1(x) = \exp(x)$.

Para $q > 1$, $\exp_q(x)$ é definida no intervalo $(-\infty, (q-1)^{-1})$, e para $q < 1$, está definida $\forall x$ e anula-se para $x < -(1-q)^{-1}$. No limite $x \to 0$, temos $\exp_q(x) \sim 1 + x$ $(\forall q)$. Para $q > 1$, temos que $\exp_q(x)$ possui assíntotas verticais em $x = (q-1)^{-1}$. A Figura 2.1 mostra em (a) o comportamento da função $\exp_q(x)$ para $q = -2$, -1, 0, 1 e 2. Uma vez que a função q-logaritmo é a inversa da função q-exponencial, não seria necessário ilustrá-la, no entanto, por clareza a mostramos em (b).

Algumas outras propostas de generalização da entropia foram formuladas dentro do contexto da teoria da informação. Citemos como exemplo a entropia de Rényi [27], e que

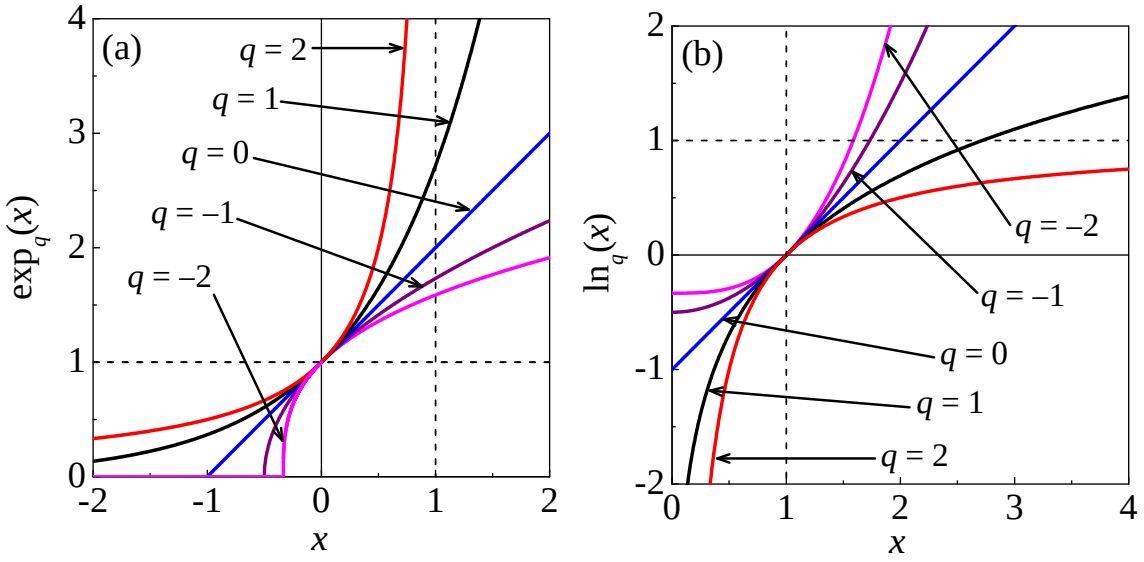


Figura 2.1: Funções (a) $\exp_q(x)$ e (b) $\ln_q(x)$ para $q = -2$, -1, 0, 1 e 2.

tem grande conexão em multifractais [28, 29]:

$$S_R = \frac{k}{1-q} \ln \left(\sum_{i=1}^{W} p_i^q \right). \tag{2.14}$$

No caso de *ensemble* microcanônico ($p_i = 1/W$), a entropia generalizada acima coincide com a entropia de Boltzmann-Gibbs (2.1). Considerando a transformação funcional [25, 30]

$$L(S/k) = \frac{\ln[1 + (1-q)(S/k)]}{1-q} = \ln[\exp_q(S/k)], \tag{2.15}$$

tem-se que as entropias de Rényi e Tsallis estão relacionadas por meio da equação

$$S_R/k = L(S_q/k) \longleftrightarrow S_q/k = K(S_R/k), \tag{2.16}$$

onde K é a funcional inversa de L, *i.e.*,

$$K(S/k) = L^{-1}(S/k) = \frac{e^{(1-q)S/k} - 1}{1-q} = \ln_q[\exp(S/k)]. \tag{2.17}$$

A transformação (2.15) tem aperecido em outros contextos. Por exemplo, em [31] foi utilizada na definição de uma possível generalização de números complexos $\zeta_q = \ln \exp_q z$, e na qual permite expressar uma deformação da fórmula de Euler dada por $\exp_q z = \exp_1 \zeta_q$. Nesta Tese, a transformação (2.15) será importante no estudo de sistemas com uma massa efetiva [32, 33].

2.2 Outra generalização de funções elementares

Evidentemente existe uma infinidade de formas de generalizar uma função, e portanto a q-exponencial dada pela Eq. (2.13) não é única forma de generalizar a exponencial usual. Uma generalização da função exponencial está associada ao cálculo q-deformado, um ramo da matemática que remota dos tempos de Gauss e Euler [34, 35], e com importantes contribuições de Jackson no século passado [36, 37].

Contudo, recentes desenvolvimentos e aplicações do cálculo q-deformado podem ser encontradas na literatura devido à sua relação com grupos quânticos [38] e aplicações na generalização de funções especiais aplicadas a fenômenos não lineares [39]. Este cálculo tem sido aplicado na formulação de uma teoria quântica q-deformada e que está associada a espaços não comutativos [13, 14, 15, 16, 17, 18]. Em particular, o problema de uma álgebra q-deformada para o oscilador harmônico [19, 20, 40, 41, 42] está associado a q-análogos de muitas funções especiais, como a função q-exponencial, funções q-gama, q-trigonométricas, polinômios de q-Hermite e q-Laguerre [16, 19, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49]. Aplicações do q-oscilador em física da matérica condensada podem ser, por exemplo, encontradas em capacidade térmica de sólidos [50] e diagmagnetismo [51].

O cálculo q-deformado é desenvolvido baseado nos operadores derivada e integral de Jackson [36, 37]. A saber, a derivada de Jackson pode ser definida por

$$\mathscr{D}_{(q)}f(x) \equiv \frac{f(qx) - f(x)}{(q-1)x}, \tag{2.18}$$

e está associada a efeitos de dilatação.

Consistente com o cálculo q-deformado é introduzida a integração

$$\int_0^{x_0} f(x) d_{(q)}x = \sum_{n=0}^{\infty} f(x_n)\Delta_q x_n, \tag{2.19}$$

onde $\Delta_q x_n = x_n - x_{n+1}$ e $x_n = x_0 q^n$ para $0 < q < 1$, enquanto $\Delta_q x_n = x_{n-1} - x_n$, e $x_n = x_0 q^{-n-1}$ para $q > 1$ [16]. Claramente notamos que a equação é similar a integração de Riemann, mas apresenta um passo variável $\Delta_q x_n$. É possível verificar que

$$\mathscr{D}_{(q)} \int_0^{x_0} f(y) d_{(q)}y = f(x). \tag{2.20}$$

Duas funções q-exponenciais (diferentes da função $\exp_q(z)$ dada pela Eq. (2.13)) no cálculo q-deformado comumente utilizadas são definidas por

$$e^z_{(q)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{[n]_q!}, \tag{2.21}$$

e

$$E_{(q)}^{z} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{[\tilde{n}]_q!}, \tag{2.22}$$

onde q é positivo, z é complexo, e

$$[n]_q! = \prod_{j=1}^{n} [j]_q, \tag{2.23a}$$

$$[j]_q = \sum_{i=1}^{j} (q)^{i-1} = \frac{q^j - 1}{q - 1}, \tag{2.23b}$$

$$[\tilde{n}]_q! = \prod_{j=1}^{n} [\tilde{j}]_q, \tag{2.23c}$$

$$[\tilde{j}]_q = \sum_{i=1}^{j} \left(\frac{1}{q}\right)^{i-1} = \frac{q^{-j} - 1}{q^{-1} - 1}. \tag{2.23d}$$

Das equações acima, imediatamente obtém-se $E_{(q)}^{z} = e_{(q^{-1})}^{z}$. As funções q-exponenciais acima podem ser representadas pelos produtórios:

$$e_{(q)}^{z} = \prod_{k=0}^{\infty} [1 - (1-q)q^k z]^{-1}, \tag{2.24}$$

e

$$E_{(q)}^{z} = \prod_{k=0}^{\infty} [1 + (1-q)q^k z]. \tag{2.25}$$

A partir disto, é fácil observar que $e_{(q)}^{z} E_{(q)}^{-z} = 1$. A existência de duas representações das funções exponenciais q-deformadas (série e produto infinitos) está relacionada ao fato que a função exponencial usual ($q = 1$) é dada por:

$$e^z = \sum_{n=0} \frac{z^n}{n!} = \lim_{\nu \to \infty} \left(1 + \frac{z}{\nu}\right)^{\nu}. \tag{2.26}$$

A ação da derivada de Jackson sobre as funções exponenciais q-deformadas é

$$\mathscr{D}_{(q)} e_{(q)}^{z} = e_{(q)}^{z}, \tag{2.27}$$

e

$$\mathscr{D}_{(q)} E_{(q)}^{z} = E_{(q)}^{qz}. \tag{2.28}$$

Além disso, para a função monômio $f(x) = ax^n$, onde $n \geq 0$, temos que

$$\mathscr{D}_{(q)}(ax^n) = a[n]_q x^{n-1}. \tag{2.29}$$

Também é possível definir funções trigonométricas deformadas [36]

$$\cos_{(q)}(x) = \frac{1}{2}(e^{ix}_{(q)} + e^{-ix}_{(q)}), \tag{2.30}$$

$$\mathrm{sen}_{(q)}(x) = \frac{1}{2i}(e^{ix}_{(q)} - e^{-ix}_{(q)}), \tag{2.31}$$

$$\mathrm{Cos}_{(q)}(x) = \frac{1}{2}(E^{ix}_{(q)} + E^{-ix}_{(q)}), \tag{2.32}$$

e

$$\mathrm{Sen}_{(q)}(x) = \frac{1}{2i}(E^{ix}_{(q)} - E^{-ix}_{(q)}). \tag{2.33}$$

A partir das propriedades das funções exponenciais deformadas, pode-se obter que as funções trigonométricas acima satisfazem às seguintes relações:

$$\cos_{(q)}(x)\mathrm{Cos}_{(q)}(x) + \mathrm{sen}_{(q)}(x)\mathrm{Sen}_{(q)}(x) = 1, \tag{2.34a}$$
$$\mathrm{sen}_{(q)}(x)\mathrm{Cos}_{(q)}(x) = \cos_{(q)}(x)\mathrm{Sen}_{(q)}(x), \tag{2.34b}$$
$$\mathscr{D}_{(q)}\mathrm{sen}_{(q)}(x) = \cos_{(q)}(x), \tag{2.34c}$$
$$\mathscr{D}_{(q)}\cos_{(q)}(x) = -\mathrm{sen}_{(q)}(x), \tag{2.34d}$$
$$\mathscr{D}_{(q)}\mathrm{Sen}_{(q)}(x) = \mathrm{Cos}_{(q)}(qx), \tag{2.34e}$$
$$\mathscr{D}_{(q)}\mathrm{Cos}_{(q)}(x) = -\mathrm{Sen}_{(q)}(qx). \tag{2.34f}$$

Notemos que as correspondentes tangentes são coincidentes: $\mathrm{Tan}_{(q)}(x) = \tan_{(q)}(x)$.

Mecânica quântica q-deformada

Generalizações de versões lineares e não lineares da equação de Schrödinger tem atraído o interesse de físicos devido à sua importante relevância em descrever efeitos em teoria quântica de muitos corpos [52, 53, 54]. Neste sentido a álgebra generalizada de Heisenberg e a equação de Schrödinger q-deformadas têm sido propostas baseadas nas propriedades do cálculo q-deformado, e que levam a uma estrutura diferencial não comutativa na representação espaço.

É fácil mostrar que a partir dos operadores espaço $\hat{x}$ e momento linear $\hat{p}_{(q)} \to -i\hbar\mathscr{D}_{(q)}$ é satisfeita a seguinte relação q-comutativa:

$$[\hat{x}, \hat{p}_{(q)}]_q = \hat{x}\hat{p}_{(q)} - q\hat{p}_{(q)}\hat{x} = i\hbar\hat{1}. \tag{2.35}$$

Neste formalismo, a equação de Schrödinger dependente do tempo q-generalizada é pos-

tulada como

$$i\hbar\frac{\partial\Phi_{(q)}(x,t)}{\partial t} = \hat{H}_{(q)}\Phi_{(q)}(x,t), \tag{2.36}$$

onde

$$\hat{H}_{(q)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\mathscr{D}^2_{(q)} + V_{(q)}(x) \tag{2.37}$$

é o operador hamiltoniano q-deformado. Notemos que o operador hamiltoniano (2.37) é não hermitiano.

A equação (2.36) admite uma solução na forma $\Psi_{(q)}(x,t) = \varphi_{(q)}(x)e^{-iEt/\hbar}$, onde $\varphi_{(q)}(x)$ satisfaz a equação de q-Schrödinger independente do tempo

$$\hat{H}_{(q)}\varphi_{(q)}(x) = \varphi_{(q)}(x)E. \tag{2.38}$$

Para este formalismo, as funções de onda obedecem a condição de q-normalização

$$\int |\Phi_{(q)}(x,t)|^2 d_{(q)}x = 1. \tag{2.39}$$

Para uma partícula livre ($V_{(q)} = 0$), por exemplo, a função de onda $\varphi_{(q)}(x)$ satisfaz a equação diferencial q-deformada

$$\mathscr{D}^2_{(q)}\varphi_{(q)}(x) + k^2\varphi_{(q)}(x) = 0, \tag{2.40}$$

onde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. A solução da equação anterior pode ser escrita como

$$\varphi_{(q)}(x) = Ae^{ikx}_{(q)}. \tag{2.41}$$

Em nosso trabalho, estaremos interessados em discutir aplicações de um diferente cálculo deformado (chamado aqui de q-cálculo) associado às propriedades das funções q-exponencial (2.13) e q-logaritmo (2.10), e suas propriedades. Este cálculo será útil nas formulações de equações generalizadas da mecânica quântica. Desta forma, nas próximas Seções, apresentamos algumas propriedades de uma álgebra deformada (q-álgebra) associada às funções $\exp_q(x)$ e $\ln_q(x)$. Definiremos alguns possíveis operadores para a formulação de um q-cálculo, e finalizaremos com aplicações destes operadores a funções elementares deformadas e com propriedades de estruturas similares a estas que apresentamos acima.

2.3 Propriedades da q-álgebra

Nas últimas três décadas, diversos trabalhos têm sido realizados no desenvolvimento matemático da mecânica estatística não extensiva: formulação de uma q-algébra generalizada [7, 8, 55, 56, 57, 58, 59], cálculo q-deformado [60, 61], funções trigonométricas e hiperbólicas q-deformadas [31, 62, 63, 64], q-transformada de Laplace [65, 66], q-transformada de Fourier [67, 68], teorema do limite central [69, 70], representações deformadas da função delta de Dirac [71, 72, 73], fórmula de Stirling q-deformada [74], q-binômio de Newton [75, 76], lei dos erros [77, 78, 79], distribuição de Lévy [80], além de outras possíveis formulações para as funções exponencial e logaritmo deformadas [81, 82, 83, 84, 85].

Mais especificamente, pode-se definir as seguintes operações deformadas [7, 8]

(i) q-soma $\oplus_q$:

$$x \oplus_q y \equiv x + y + (1-q)xy, \tag{2.42a}$$

(ii) q-diferença $\ominus_q$:

$$x \ominus_q y \equiv \frac{x-y}{1+(1-q)y}, \qquad \left(y \neq -\frac{1}{1-q}\right), \tag{2.42b}$$

(iii) q-produto $\otimes_q$:

$$x \otimes_q y \equiv [x^{1-q} + y^{1-q} - 1]_+^{1/(1-q)}, \qquad (x \geq 0, y \geq 0), \tag{2.42c}$$

(iv) q-razão $\oslash_q$:

$$x \oslash_q y \equiv [x^{1-q} - y^{1-q} + 1]_+^{1/(1-q)}, \qquad (x \geq 0, y \geq 0). \tag{2.42d}$$

Para os operadores deformados (2.42) pode-se verificar que a identidade aditiva é 0 e a identidade multiplicativa é 1, *i.e.*,

$$x \oplus_q 0 = x, \qquad \text{e} \qquad x \otimes_q 1 = x, \tag{2.43}$$

assim como

$$x \ominus_q 0 = x, \qquad \text{e} \qquad x \oslash_q 1 = x. \tag{2.44}$$

Por outro lado, 0 não é elemento absorvente do produto e da razão, *i.e.*,

$$0 \otimes_q x \neq 0, \qquad \text{e} \qquad 0 \oslash_q x \neq 0. \tag{2.45}$$

Pode-se ainda verificar que $x \oslash_q 0$ não diverge e que $x \oslash_q x = 1$.

É fácil verificar que $\oplus_q$ e $\otimes_q$ satisfazem leis de comutatividade e associativade:

$$\begin{aligned} x \oplus_q y &= y \oplus_q x, && (2.46)\\ x \otimes_q y &= y \otimes_q x, && (2.47)\\ (x \oplus_q y) \oplus_q z &= x \oplus_q (y \oplus_q z), && (2.48)\\ (x \otimes_q y) \otimes_q z &= x \otimes_q (y \otimes_q z). && (2.49) \end{aligned}$$

No entanto, estes operadores não obedecem a lei de distributividade em relação ao produto deformado

$$z \otimes_q (x \oplus_q y) \neq (z \otimes_q x) \oplus_q (z \otimes_q y), \tag{2.50}$$

ou em relação ao produto usual

$$z(x \oplus_q y) \neq (zx) \oplus_q (zy). \tag{2.51}$$

Similarmente, também pode-se observar que

$$z \otimes_q (x + y) \neq (z \otimes_q x) + (z \otimes_q y). \tag{2.52}$$

As operações deformadas (2.42) levam às seguintes propriedades para a q-exponencial e o q-logaritmo:

$$\begin{aligned} \exp_q(x)\exp_q(y) &= \exp_q(x \oplus_q y), & \ln_q(xy) &= \ln_q(x) \oplus_q \ln_q(y),\\ \exp_q(x)/\exp_q(y) &= \exp_q(x \ominus_q y), & \ln_q(x/y) &= \ln_q(x) \ominus_q \ln_q(y),\\ \exp_q(x) \otimes_q \exp_q(y) &= \exp_q(x + y), & \ln_q(x \otimes_q y) &= \ln_q(x) + \ln_q(y),\\ \exp_q(x) \oslash_q \exp_q(y) &= \exp_q(x - y), & \ln_q(x \oslash_q y) &= \ln_q(x) - \ln_q(y). \end{aligned} \tag{2.53}$$

Obviamente, ao se aplicar a álgebra generalizada de operadores definidos pelas expressões de (2.42), é possível expressar a não aditividade da mecânica estatística e termodinâmica não extensivas em uma forma similar à entropia de BG. Por exemplo, para dois subsistemas A e B estatisticamente independentes, podemos escrever que a propriedade (2.12) da entropia generalizada S_q pode ser reescrita como

$$\frac{S_q(A+B)}{k} = \frac{S_q(A)}{k} \oplus_q \frac{S_q(B)}{k}. \tag{2.54}$$

Na expressão acima, notemos que as entropias estão escalonadas pela constante k, uma vez que a q-soma deve ser aplicada a grandezas adimensionais. Para $q \to 1$, a aditividade usual é recuperada.

Nivanen *et al.* [7] propuseram outros operadores deformados adição $\oplus^q$ e produto $\otimes^q$, diferentes daqueles propostos em [8], mas que satisfazem as relações

$$\exp[\ln_q(x \oplus^q y)] = \exp[\ln_q(x)] + \exp[\ln_q(y)] \tag{2.55}$$

e

$$\ln[\exp_q(x \otimes^q y)] = \ln[\exp_q(x)] \ln[\exp_q(y)]. \tag{2.56}$$

A partir disso, verifica-se que estes operadores obedecem a uma lei de distributividade conforme são apresentados a seguir[1]. Em [86], da Silva afirma que $\ln_q(e)$ é elemento inverso do produto $\otimes^q$, e a partir disso define uma razão $\oslash^q$ que estará associada às leis de distributividade. Ademais foi mostrado também que não existe elemento inverso para a soma $\oplus^q$. Porém, para fechar o quadro de operadores deformados, definimos uma nova subtração deformada $\ominus^q$ que satisfaz às leis de distributividade. Estas operações, denominadas aqui de operações deformadas adjuntas, são dadas por:

(i) q-soma adjunta $\oplus^q$:

$$\begin{aligned} x \oplus^q y &\equiv \left[(1-q)\ln\left(e^{\frac{x^{1-q}}{1-q}} + e^{\frac{y^{1-q}}{1-q}}\right)\right]_+^{1/(1-q)} \\ &= \left[1 + (1-q)\ln\left(e^{\frac{x^{1-q}-1}{1-q}} + e^{\frac{y^{1-q}-1}{1-q}}\right)\right]_+^{1/(1-q)}, \end{aligned} \tag{2.57a}$$

(ii) q-diferença adjunta $\ominus^q$:

$$\begin{aligned} x \ominus^q y &\equiv \left[(1-q)\ln\left(e^{\frac{x^{1-q}}{1-q}} - e^{\frac{y^{1-q}}{1-q}}\right)\right]_+^{1/(1-q)} \\ &= \left[1 + (1-q)\ln\left(e^{\frac{x^{1-q}-1}{1-q}} - e^{\frac{y^{1-q}-1}{1-q}}\right)\right]_+^{1/(1-q)}, \end{aligned} \tag{2.57b}$$

(iii) q-produto adjunto $\otimes^q$:

$$x \otimes^q y \equiv \frac{e^{\ln[1+(1-q)x]_+ \ln[1+(1-q)y]_+/(1-q)} - 1}{1-q}. \tag{2.57c}$$

(iv) q-razão adjunta $\oslash^q$:

$$x \oslash^q y \equiv \frac{e^{(1-q)\ln[1+(1-q)x]_+ / \ln[1+(1-q)y]_+} - 1}{1-q}. \tag{2.57d}$$

[1] Os autores usaram uma notação diferente onde $a \equiv 1-q$, e que torna as expressões mais compactas. Neste Capítulo, escolhemos utilizar o mesmo índice comumemente utilizado em mecânica estatística não extensiva.

Os operadores deformados adjuntos têm propriedades diferentes daqueles operadores deformados apresentados primeiramente. Por exemplo, pode-se verificar que 0 não é identidade aditiva, assim como 1 não é identidade multiplicativa, *i.e.*,

$$x \oplus^q 0 \neq x, \qquad \text{e} \qquad x \otimes^q 1 \neq x. \tag{2.58}$$

Similarmente, temos

$$x \ominus^q 0 \neq x, \qquad \text{e} \qquad x \oslash^q 1 \neq x. \tag{2.59}$$

Por outro lado, 0 é elemento absorvente do produto e da razão, *i.e.*,

$$0 \otimes^q x = 0, \qquad \text{e} \qquad 0 \oslash^q x = 0. \tag{2.60}$$

Ainda verifica-se que $x \oslash^q 0$ diverge e que $x \oslash^q x = \ln_q(e)$.

Pode-se verificar que $\oplus^q$ e $\otimes^q$ também satisfazem às leis de comutatividade e associativade:

$$x \oplus^q y = y \oplus^q x, \tag{2.61}$$

$$x \oplus^q y = y \oplus^q x, \tag{2.62}$$

$$(x \oplus^q y) \oplus^q z = x \oplus^q (y \oplus^q z), \tag{2.63}$$

$$(x \otimes^q y) \otimes^q z = x \otimes^q (y \otimes^q z). \tag{2.64}$$

Mas estes operadores também não obedecem a lei de distributividade em relação ao seu produto deformado

$$z \otimes^q (x \oplus^q y) \neq (z \otimes^q x) \oplus^q (z \otimes^q y), \tag{2.65}$$

ou em relação ao produto usual

$$z(x \oplus^q y) \neq (zx) \oplus^q (zy). \tag{2.66}$$

Similarmente, temos que

$$z \otimes^q (x + y) \neq (z \otimes^q x) + (z \otimes^q y). \tag{2.67}$$

Leis de distributividade podem ser estabelecidas associando as operações deformadas e as operações deformadas adjuntas. Em [7], propõe-se:

$$x \otimes^q (y \oplus_q z) = (x \otimes^q y) \oplus_q (x \otimes^q z), \tag{2.68}$$

$$x \otimes_q (y \oplus^q z) = (x \otimes_q y) \oplus^q (x \otimes_q z). \tag{2.69}$$

Aqui, observamos também que a leis de distributividades também são válidas para os

operadores $\ominus_q$ e $\ominus^q$ no lugar dos operadores $\oplus_q$ e $\oplus^q$:

$$x \otimes^q (y \ominus_q z) = (x \otimes^q y) \ominus_q (x \otimes^q z), \tag{2.70}$$

$$x \otimes_q (y \ominus^q z) = (x \otimes_q y) \ominus^q (x \otimes_q z). \tag{2.71}$$

Analogamente, também pode-se verificar as seguintes propriedades envolvendo as razões deformadas $\oslash_q$ e $\oslash^q$:

$$(x \oplus^q y) \oslash_q z = (x \oslash_q z) \oplus^q (y \oslash_q z), \tag{2.72}$$

$$(x \oplus_q y) \oslash^q z = (x \oslash^q z) \oplus_q (y \oslash^q z), \tag{2.73}$$

$$(x \ominus^q y) \oslash_q z = (x \oslash_q z) \ominus^q (y \oslash_q z), \tag{2.74}$$

$$(x \ominus_q y) \oslash^q z = (x \oslash^q z) \ominus_q (y \oslash^q z). \tag{2.75}$$

Estas operações aritméticas deformadas podem ser utilizadas para construir outras operações deformadas. Por exemplo, em [8] é definido uma q-soma de n termos idênticos

$$n \odot_q x \equiv \underbrace{x \oplus_q x \oplus_q \cdots \oplus_q x}_{n \text{ termos}} = \frac{1}{1-q}\Big\{\big[1+(1-q)x\big]^n - 1\Big\}. \tag{2.76}$$

Particularmente, para $x = 1$, $n \odot_q 1$ é identificado como o número de Heine deformado e que está conectado a grupos quânticos [59, 87]. Em termos das funções q-exponencial e q-logaritmo, uma forma alternativa de escrever $n \odot_q x$ [57] é dada por:

$$\begin{aligned} n \odot_q x &= \frac{\{[\exp_q(x)]^{1-q}\}^n - 1}{1-q} \\ &= \frac{\{[\exp_q(x)]^n\}^{1-q} - 1}{1-q} \\ &= \ln_q[\exp_q^n(x)]. \end{aligned} \tag{2.77}$$

Notemos que $n \odot_q \ln_q x = \ln_q x^n$ e $\exp_q(n \odot_q x) = \exp_q^n(x)$, e que está de acordo com as propriedades do q-logaritmo e da q-exponencial (2.53). Em particular, $n \odot_q 1 = \ln_q[\exp_q^n(1)]$. Para $q = 1$, o caso usual $n \odot_1 x = \ln(e^{xn}) = nx$ é recuperado.

Podemos observar que o produto (2.77) é não distributivo em relação à soma usual,

$$a \odot_q (b + c) \neq a \odot_q b + a \odot_q c, \tag{2.78}$$

não comutativo em relação ao produto usual,

$$(ka) \odot_q b \neq a \odot_q (kb), \tag{2.79}$$

e também não comutativo em relação a outro produto $\odot_q$,

$$(a \odot_q b) \odot_q c \neq a \odot_q (b \odot_q c). \tag{2.80}$$

Em [8], também é definido uma q-potência $x^{\wedge_q n}$, *i.e.*, o q-produto de n fatores idênticos, por

$$x^{\wedge_q n} \equiv \underbrace{x \otimes_q x \otimes_q \cdots \otimes_q x}_{n \text{ vezes}} = \left[nx^{1-q} - (n-1)\right]_+^{1-q}. \tag{2.81}$$

Em termos das funções deformadas, temos que [57]

$$\begin{aligned} x^{\wedge_q n} &= \{n[1 + (1-q)\ln_q x] - n + 1\}_+^{1/(1-q)} \\ &= [1 + (1-q)(n \ln_q x)]_+^{1/(1-q)} \\ &= \exp_q[n \ln_q x], \end{aligned} \tag{2.82}$$

que pode ser escrita $\ln_q(x^{\wedge_q n}) = n \ln_q(x)$ em acordo com as propriedades do q-logaritmo. Para $q = 1$, temos que $x^{\wedge_1 n} = e^{n \ln x} = x^n$, como esperado.

Para os operadores q-soma e q-produto adjuntos, propriedades similares também foram exploradas em nosso trabalho. Consideremos, por exemplo, a q-soma adjunta de n termos idênticos. Segue que:

$$\begin{aligned} n \odot^q x \equiv \underbrace{x \oplus^q x \oplus^q \cdots \oplus^q x}_{n \text{ termos}} &= \left[(1-q)\ln\left(ne^{\frac{x^{1-q}}{1-q}}\right)\right]_+^{1/(1-q)} \\ &= [x^{1-q} + (1-q)\ln(n)]^{1/(1-q)} \\ &= \{x^{1-q} + [1 + (1-q)\ln(n)] - 1\}_+^{1/(1-q)} \\ &= \{x^{1-q} + [\exp_q \ln(n)]^{1-q} - 1\}_+^{1/(1-q)} \\ &= x \otimes_q \exp_q[\ln(n)]. \end{aligned} \tag{2.83}$$

Notemos que $n \odot^q 1 = \exp_q[\ln(n)]$. Para $q = 1$, temos $n \odot^1 x = xe^{\ln(n)} = nx$.

Uma q-potência adjunta $x^{\wedge^q n}$ também é proposta, e satisfaz:

$$\begin{aligned} x^{\wedge^q n} \equiv \underbrace{x \otimes^q x \otimes^q \cdots \otimes^q x}_{n \text{ vezes}} &= \frac{1}{1-q}\left(\exp\left[(1-q)\left\{\frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q}\right\}^n\right] - 1\right) \\ &= \frac{(\exp\{\ln[\exp_q(x)]\}^n)^{1-q} - 1}{1-q} \\ &= \ln_q(\exp\{\ln[n \odot^q \exp_q(x)]\}) \\ &= \ln_q[n \odot^q \exp_q(x)]. \end{aligned} \tag{2.84}$$

A expressão acima equivale à $\exp_q x^{\wedge^q n} = n \odot^q \exp_q(x)$, e claramente, recupera-se o caso usual para $q = 1$.

2.4 Números q-deformados

A partir das propriedades dadas pelas Eq.'s (2.68) a (2.75), assim como as Eq.'s (2.83) e (2.84), existe uma conexão entre os operadores deformados e os operadores deformados duais, e uma possível unificação destas álgebras torna-se interessante. Desta forma, a partir da transformação (2.15), consideremos um q-número deformado definido por:

$$x_q = \frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q} = \ln[\exp_q(x)]. \tag{2.85}$$

É fácil verificar que a transformação dada Eq. (2.85) leva a adição (subtração) usual de dois números reais deformados no q-número da q-soma (2.42a) (q-diferença (2.42b)) dos correspondentes números usuais, *i.e.*,

$$\begin{aligned}
x_q + y_q &= \ln[\exp_q(x)] + \ln[\exp_q(y)] \\
&= \frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q} + \frac{\ln[1+(1-q)y]}{1-q} \\
&= \frac{\ln[1+(1-q)(x+y)+(1-q)^2xy]}{1-q} \\
&= \frac{\ln[1+(1-q)(x\oplus_q y)]}{1-q} \\
&= \ln[\exp_q(x\oplus_q y)] \\
&= (x\oplus_q y)_q, \qquad (2.86) \\
x_q - y_q &= \ln[\exp_q(x)] - \ln[\exp_q(y)] \\
&= \frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q} - \frac{\ln[1+(1-q)y]}{1-q} \\
&= \frac{1}{1-q}\ln\left[\frac{1+(1-q)x}{1+(1-q)y}\right] \\
&= \frac{1}{1-q}\ln\left[\frac{1+(1-q)y-(1-q)y+(1-q)x}{1+(1-q)y}\right] \\
&= \frac{1}{1-q}\ln\left[1+(1-q)\frac{x-y}{1+(1-q)y}\right] \\
&= \frac{\ln[1+(1-q)(x\ominus_q y)]}{1-q} \\
&= \ln[\exp_q(x\ominus_q y)] \\
&= (x\ominus_q y)_q. \qquad (2.87)
\end{aligned}$$

De modo bastante similar, através dos operadores duais (2.57c) e (2.57d), temos que a transformação (2.85) leva o produto (a razão) usual de dois números q-deformados no q-número do q-produto adjunto (da q-razão adjunta) dos correspondentes números usuais,

i.e.,

$$\begin{aligned} x_q y_q &= \ln[\exp_q(x)]\,\ln[\exp_q(y)] \\ &= \frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q}\,\frac{\ln[1+(1-q)y]}{1-q} \\ &= \frac{\ln[1+(1-q)(x\otimes^q y)]}{1-q} \\ &= \ln[\exp_q(x\otimes^q y)] \\ &= (x\otimes^q y)_q, \end{aligned} \tag{2.88}$$

$$\begin{aligned} x_q/y_q &= \ln[\exp_q(x)]/\ln[\exp_q(y)] \\ &= \frac{\ln[1+(1-q)x]}{\ln[1+(1-q)y]} \\ &= \frac{\ln[1+(1-q)(x\oslash^q y)]}{1-q} \\ &= \ln[\exp_q(x\oslash_q y)] \\ &= (x\oslash^q y)_q. \end{aligned} \tag{2.89}$$

Obviamente, notemos que a Eq. (2.88) é equivalente à Eq. (2.56).

A Figura 2.2 ilustra o efeito da transformação (2.85) sobre um triângulo equilátero de um plano (x, y) para um plano q-deformado (x_q, y_q), onde consideramos $x_q = \ln[\exp_q(x)]$ e $y_q = \ln[\exp_q(y)]$ para valores de $q = 0.1$ e 1.5. Os lados L_A, L_B, L_C são transformados respectivamente em $L_{A,q}$, $L_{B,q}$, $L_{C,q}$. Nota-se que os lados mapeados $L_{A,q}$ e $L_{B,q}$ tornam-se curvos, enquanto o lado $L_{C,q}$ mantém-se retilíneo. Para valores de $1 < q < 2$ ($q > 1$), observamos que o triângulo sofre uma contração (dilatação) de suas dimensões.

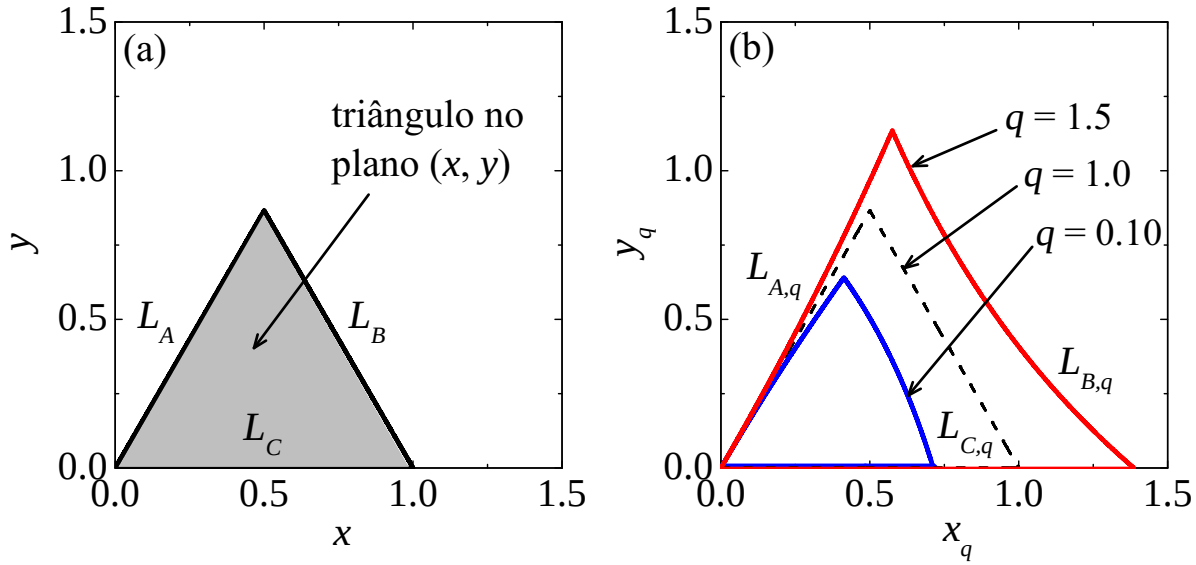


Figura 2.2: Efeito da transformação (2.85) sobre um triângulo equilátero no plano (x, y) para um plano q-deformado (x_q, y_q). Para $1 < q < 2$ ($q > 1$), temos além da curvatura dos lados L_A e L_B, observamos uma contração (dilatação) das dimensões do triângulo.

Para a transformação $K = L^{-1}$, definimos um antinúmero deformado

$$ {}_q x \equiv \frac{[\exp(x)]^{1-q} - 1}{1-q} = \ln_q[\exp(x)], \tag{2.90} $$

e que leva às seguintes propriedades:

$$ ({}_q x) \oplus_q ({}_q y) = {}_q(x+y), \tag{2.91} $$
$$ ({}_q x) \ominus_q ({}_q y) = {}_q(x-y), \tag{2.92} $$
$$ ({}_q x) \otimes^q ({}_q y) = {}_q(xy), \tag{2.93} $$
$$ ({}_q x) \oslash^q ({}_q y) = {}_q(x/y). \tag{2.94} $$

Notemos que

$$ ({}_q x)_q = {}_q(x_q) = x. \tag{2.95} $$

Outras transformações similares àquela dada pela Eq. (2.85) e sua inverva podem ser exploradas. Aqui destacamos a transformação adjunta ($\bar{L}$)

$$ \bar{x}_q \equiv \exp\left(\frac{x^{1-q} - 1}{1-q}\right) = \exp[\ln_q(x)]. \tag{2.96} $$

Para esta transformação, verifica-se que esta leva a adição (subtração) usual de dois q-números duais deformados no q-número adjunto da q-soma adjunta (2.57a) (q-diferença (2.57b)) adjunta dos dois números usuais correspondentes, *i.e.*,

$$ \begin{aligned} \bar{x}_q + \bar{y}_q &= \exp(\ln_q x) + \exp(\ln_q y) \\ &= \exp\left[\frac{(x \oplus^q y)^{1-q} - 1}{1-q}\right] \\ &= \exp[\ln_q(x \oplus^q y)] \\ &= \overline{(x \oplus^q y)}_q, \end{aligned} \tag{2.97} $$

$$ \begin{aligned} \bar{x}_q - \bar{y}_q &= \exp(\ln_q x) - \exp(\ln_q y) \\ &= \exp\left[\frac{(x \ominus^q y)^{1-q} - 1}{1-q}\right] \\ &= \exp[\ln_q(x \ominus^q y)] \\ &= \overline{(x \ominus^q y)}_q. \end{aligned} \tag{2.98} $$

Mais uma vez, temos que a Eq. (2.97) é equivalente à Eq. (2.55).

Da mesma forma, temos que a transformação (2.96) leva o produto (a razão) usual de dois números q-deformados duais no q-número adjunto do q-produto (2.42c) (da q-razão

(2.42d)) destes correspondentes números usuais, *i.e.*,

$$\begin{aligned}
\bar{x}_q \bar{y}_q &= \exp(\ln_q x)\exp(\ln_q y) \\
&= \exp(\ln_q x + \ln_q y) \\
&= \exp[\ln_q(x \otimes_q y)] \\
&= \overline{(x \otimes_q y)}_q, \qquad (2.99) \\
\bar{x}_q / \bar{y}_q &= \exp(\ln_q x)/\exp(\ln_q y) \\
&= \exp(\ln_q x - \ln_q y) \\
&= \exp[\ln_q(x \oslash_q y)] \\
&= \overline{(x \oslash_q y)}_q. \qquad (2.100)
\end{aligned}$$

Para a transformação $\bar{K} = \bar{L}^{-1}$ também definimos um antinúmero adjunto deformado

$${}_q\bar{x} \equiv [1 + (1-q)\ln(x)]_+^{1/(1-q)} = \exp_q[\ln(x)], \qquad (2.101)$$

e da qual se obtém as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned}
({}_q\bar{x}) \oplus^q ({}_q\bar{y}) &= {}_q\overline{(x+y)}, \qquad (2.102) \\
({}_q\bar{x}) \ominus^q ({}_q\bar{y}) &= {}_q\overline{(x-y)}, \qquad (2.103) \\
({}_q\bar{x}) \otimes^q ({}_q\bar{y}) &= {}_q\overline{(xy)}, \qquad (2.104) \\
({}_q\bar{x}) \oslash^q ({}_q\bar{y}) &= {}_q\overline{(x/y)}. \qquad (2.105)
\end{aligned}$$

Notemos ainda que

$$\overline{({}_q\bar{x})}_q = {}_q\overline{(\bar{x}_q)} = x. \qquad (2.106)$$

Resumiremos a seguir estas propriedades que apresentamos, e para isso, consideremos que $\underset{q}{\square}$ representa o grupo das operações aritméticas deformadas $\oplus_q$, $\ominus_q$, $\otimes^q$ ou $\oslash^q$; e similarmente, $\overline{\underset{q}{\square}}$ representa o grupo das operações aritméticas deformadas $\oplus^q$, $\ominus^q$, $\otimes_q$ ou $\oslash_q$. Evidentemente, temos que $\underset{1}{\square} = \overline{\underset{1}{\square}} = \square$, onde $\square$ representa quaisquer uma das operações aritméticas usuais.

Além disso, como vimos aqui, existe uma relação entre os números q-deformados x_q definidos pela Eq. (2.85), seus correspondentes números usuais, a operação deformada $\underset{q}{\square}$ e sua correspondente operação usual $\square$, tal que $x_q \square y_q = (x \underset{q}{\square} y)_q$. Por outro lado, existe uma relação entre os números q-deformados duais $\bar{x}_q$ definidos pela Eq. (2.96), seus correspondentes números usuais, a operação $\overline{\underset{q}{\square}}$ e a correspondente operação usual $\square$, de modo que $\bar{x}_q \square \bar{y}_q = \overline{(x \underset{q}{\square} y)}_q$. Similarmente, para o antinúmero q-deformado ${}_qx$ e seu adjunto ${}_q\bar{x}$ são válidas, respectivamente, as relações ${}_qx \underset{q}{\square} {}_qy = {}_q(x \square y)$ e ${}_q\bar{x} \overline{\underset{q}{\square}} {}_q\bar{y} = {}_q\overline{(x \square y)}$. Esquematicamente, a Figura 2.3 resume alguns pontos discutidos nesta Seção.

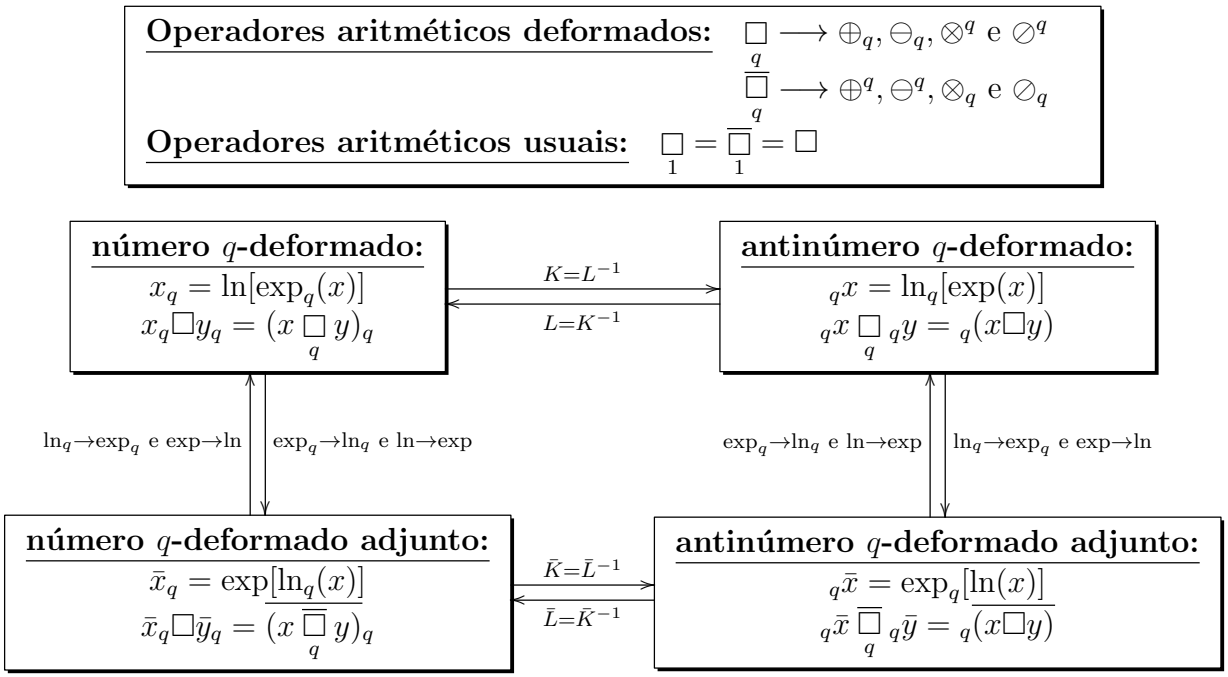


Figura 2.3: Quadro de operadores e números deformados.

2.5 q-cálculo

Nesta Seção iremos discutir algumas características de um cálculo q-deformado associado com a mecânica estatística não extensiva. Abe [88] mostrou que a derivada de Jackson (associada a dilatações) está diretamente relacionada à entropia não extensiva S_q, assim como a derivada usual de Newton-Leibniz (associada a translações) está conectada à entropia de Boltzmann-Gibbs.

Por outro lado, conforme proposto em [8], é possível definir uma generalização do operador q-derivada baseada nos operadores deformados (2.42). Particularmente, temos que uma q-derivada foi definida por:

$$D_q f(x) = \lim_{x' \to x} \frac{f(x') - f(x)}{x' \ominus_q x}. \tag{2.107}$$

Conforme analisamos, esta derivada deformada pode ser escrita de outras formas. Seja a mudança de variável $x' = x \oplus_q \Delta x$, onde Δx é uma variável pequena e independente de x e x', tal que quando $x' \to x$ equivale a $\Delta x \to 0$. Temos ainda que:

$$\begin{aligned} x' \ominus_q x &= (x \oplus_q \Delta x) \ominus_q x \\ &= [x + \Delta x + (1-q)x\Delta x] \ominus_q x \\ &= \frac{x + \Delta x + (1-q)x\Delta x - x}{1 + (1-q)x} \\ &= \Delta x, \end{aligned} \tag{2.108}$$

logo, uma forma alternativa de definir a q-derivada (2.107) é

$$\begin{aligned} D_q f(x) &= \lim_{x' \to x} \frac{f(x') - f(x)}{x' \ominus_q x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x \oplus_q \Delta x) - f(x)}{\Delta x}. \end{aligned} \tag{2.109}$$

A partir da expansão em série de Taylor

$$f(u) = f(u_0) + (u - u_0)\frac{df}{du}\Big|_{u=u_0} + \frac{1}{2}(u - u_0)^2 \frac{d^2 f}{du^2}\Big|_{u=u_0} + ...$$

aplicada à função $f(x \oplus_q \Delta x)$ em torno de x, temos que:

$$f(x \oplus_q \Delta x) = f(x) + [(x \oplus_q \Delta x) - x]\frac{df(x')}{dx'}\Big|_{x'=x} + \mathcal{O}((\Delta x)^2), \tag{2.110}$$

com $x' = x \oplus_q \Delta x$. Segue da Eq. (2.109) que:

$$\begin{aligned} D_q f(x) &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x) + [(x \oplus_q \Delta x) - x]\frac{df(x')}{dx'}\Big|_{x'=x} + \mathcal{O}((\Delta x)^2) - f(x)}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{[1 + (1-q)x](\Delta x)\frac{df(x')}{dx'}\Big|_{x'=x} + \mathcal{O}((\Delta x)^2)}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \left\{ [1 + (1-q)x]\frac{df(x)}{dx} + \mathcal{O}(\Delta x) \right\}, \end{aligned} \tag{2.111}$$

ou seja,

$$D_q f(x) = [1 + (1-q)x]\frac{df(x)}{dx}, \tag{2.112}$$

que poderia também ser obtida diretamente da definição dada pela Eq. (2.107) e do uso da q-diferença $x' \ominus_q x = (x' - x)/[1 + (1-q)x]$, conforme feito em [8]. Resumindo, temos que

$$\begin{aligned} D_q f(x) &\equiv \lim_{x' \to x} \frac{f(x') - f(x)}{x' \ominus_q x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x \oplus_q \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \\ &= [1 + (1-q)x]\frac{df(u)}{dx}. \end{aligned} \tag{2.113}$$

Recentemente Weberszpil *et al.* mostraram que existe uma conexão entre o operador D_q e o operador derivada de Hausdorff associado ao cálculo fracionário [89]. Mais especificamente sobre cálculo fracionário, este trata-se de uma ferramenta matemática que envolve derivadas e integrais de ordens não inteiras, e que começou a ser desenvolvida há mais de três séculos atrás quando Leibniz propôs uma derivada de ordem $\frac{1}{2}$ em uma carta enviada a l'Hôpital [90]. O cálculo fracionário foi também estudado por matemáticos

como Euler, Fourier, Liouville, Grünwald, Letnikov, Riemann e outros até hoje em dia. Em teoria quântica, o cálculo fracionário tem sido aplicado na formulação de uma equação de Schrödinger deformada com os operadores derivada usuais substituídos por operadores derivada fracionários [91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100].

Notemos que a q-exponencial é autofunção deste operador deformado:

$$D_q \exp_q(x) = \exp_q(x). \tag{2.114}$$

Por outro lado

$$D_1 \exp_q(x) = [\exp_q(x)]^q, \tag{2.115}$$

onde $D_1 = d/dx$ é o operador derivada usual.

Um operador q-derivada dual $\widetilde{D}_q$, associada com D_q, também pode ser definido por [8]

$$\begin{aligned} \widetilde{D}_q f(x) &\equiv \lim_{x' \to x} \frac{f(x') \ominus_q f(x)}{x' - x} \\ &= \frac{1}{1 + (1-q) f(x)} \frac{df(x)}{dx}, \end{aligned} \tag{2.116}$$

e o qual satisfaz

$$\widetilde{D}_q \ln_q x = \frac{1}{x}. \tag{2.117}$$

Para o operador derivada usual, temos que:

$$D_1 \ln_q(x) = \frac{1}{x^q}. \tag{2.118}$$

Os operadores D_q e $\widetilde{D}_q$ estão relacionados através da equação:

$$[1 + (1-q) f(x)] \widetilde{D}_q f(x) = \frac{1}{1 + (1-q)x} D_q f(x) = \frac{df(x)}{dx}. \tag{2.119}$$

Também observamos que estes operadores satisfazem à relação

$$\widetilde{D}_q x(y) = [D_q y(x)]^{-1}. \tag{2.120}$$

Obviamente, o operador derivada usual é recuperado para $q = 1$ em ambos os casos, assim como a identidade $dy/dx = (dx/dy)^{-1}$. Seja $f(x) = x$, obtemos a curiosa relação

$$D_q x = (\widetilde{D}_q x)^{-1} = 1 + (1-q)x. \tag{2.121}$$

O operador derivada deformado $D_q f(x)$ pode ser entendido como a taxa de variação da função $f(x)$ com respeito a variação não linear da variável independente x. Similarmente, o operador derivada deformado dual $\widetilde{D}_q f(x)$ pode ser visto como a taxa de variação não

linear da função $f(x)$ em relação a variação usual da variável independente x. Notemos que $D_q f(x)$ e $\widetilde{D}_q f(x)$ são respectivamente lineares e não lineares com relação à $f(x)$.

Ademais, considerando a variável real x e o q-número $x_q = x_q(x)$ definido pela Eq. (2.96), temos que

$$d_q(x) \equiv \lim_{x' \to x} x' \ominus_q x = \frac{dx}{1 + (1-q)x} = dx_q. \tag{2.122}$$

Por comodidade, denotaremos a partir de agora $d_q(x) = d_q x$. A relação acima apresenta uma interessante característica: a q-derivada da variável dependente f em relação à variável independente x é igual à derivada usual da variável dependente usual f em relação à variável independente deformada x_q, *i.e.*,

$$D_q f(x) = \frac{df(x)}{d_q x} = \frac{df(x)}{dx_q}. \tag{2.123}$$

Simetricamente, a q-derivada dual da variável dependente f em relação à variável independente x é igual à derivada usual da variável dependente deformada $f_q(x) = \ln\{\exp_q[f(x)]\}$ em relação à variável usual x, *i.e.*,

$$\widetilde{D}_q f(x) = \frac{d_q f(x)}{dx} = \frac{df_q(x)}{dx}. \tag{2.124}$$

Conforme veremos adiante nesta Tese, as derivadas deformadas (2.113) e (2.116) têm sido utilizadas em equações diferenciais deformadas da física, de forma que as derivadas deformadas de segundas devem seguir a regra

$$D_q^2 f(x) = [1 + (1-q)x] \frac{d}{dx} \left\{ [1 + (1-q)x] \frac{df(x)}{dx} \right\}, \tag{2.125}$$

e

$$\widetilde{D}_q^2 f(x) = \frac{1}{1 + (1-q)f(x)} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{1 + (1-q)f(x)} \frac{df(x)}{dx} \right]. \tag{2.126}$$

Em [8], também são definidas a q-integral

$$\int_{(q)} f(x) dx \equiv \int \frac{f(x)}{1 + (1-q)x} dx = \int f(x) d_q x, \tag{2.127}$$

e sua correspondente q-integrada dual

$$\widetilde{\int_{(q)}} f(x) dx \equiv \int [1 + (1-q)f(x)] f(x) dx. \tag{2.128}$$

Pode-se observar que

$$\int_{(q)} D_q f(x) dx = \int D_q f(x) d_q x = D_q \int f(x) d_q x = D_q \int_{(q)} f(x) dx = f(x) \tag{2.129}$$

e

$$\widetilde{\int_{(q)}} \widetilde{D}_q f(x) dx = \widetilde{D}_q \widetilde{\int_{(q)}} f(x) dx = f(x). \tag{2.130}$$

Evidentemente, além do número deformado x_q (2.96), os demais números deformados ($_qx$, $\bar{x}_q$, e $_q\bar{x}$) definidos na Seção anterior abrem um leque para que outras derivadas e integrais deformadas possam ser definidas.

Uma derivada deformada diferente foi definida em [10], dada por

$$\hat{D}_q f(x) = [f(x)]^{1-q} \frac{df(x)}{dx}. \tag{2.131}$$

O operador derivada $\hat{D}_q$ coincide com o operador derivada D_q quando aplicada à função q-exponencial, *i.e.*,

$$\hat{D}_q \exp_q x = \exp_q x = D_q \exp_q x. \tag{2.132}$$

Este operador derivada emerge de uma formulação de uma mecânica quântica deformada [10] que discutiremos a seguir no Capítulo 3.

Similarmente, definimos aqui (esta definição não foi introduzida em [10]) um operador derivada deformada dual em relação à (2.131), dado por

$$\check{D}_q f(x) = \frac{1}{x^{1-q}} \frac{df(x)}{dx}. \tag{2.133}$$

Este operador também está conectado a uma outra deformação do cálculo fracionário (Eq. (17) de [89]). Ao ser aplicada à função q-logaritmo, obtém-se

$$\check{D}_q \ln_q x = x^{-1} = \widetilde{D}_q \ln_q x. \tag{2.134}$$

Estes operadores deformados estão relacionados um ao outro de modo similar àqueles definidos pelas Eq.'s (2.131) e (2.133), *i.e.*,

$$\hat{D}_q y(x) \equiv [\check{D}_q x(y)]^{-1}. \tag{2.135}$$

Seja $f(x) = x$, obtemos mais outra curiosa relação:

$$\hat{D}_q x \equiv (\check{D}_q x)^{-1} = x^{1-q}. \tag{2.136}$$

Estabelecendo as seguintes regras da cadeia para os operadores $\hat{D}_q$ e $\check{D}_q$, respectiva-

mente por

$$\hat{D}_q z(y(x)) = z^{1-q}\frac{dz}{dy}\frac{dy}{dx}, \tag{2.137}$$

e

$$\check{D}_q z(y(x)) = \frac{1}{y^{1-q}}\frac{dz}{dy}\frac{dy}{dx}, \tag{2.138}$$

pode-se observar que são satisfeitas as propriedades:

$$\hat{D}_q \exp_q[f(x)] = f'(x)\exp_q(f(x)), \tag{2.139}$$

e

$$\check{D}_q \ln_q[f(x)] = \frac{f'(x)}{f(x)}. \tag{2.140}$$

Em termos do número q-deformado adjunto definido por (2.96), podemos escrever que:

$$\frac{1}{f(x)}\hat{D}_q f(x) = \frac{1}{\bar{f}_q(x)}\frac{d\bar{f}_q(x)}{dx} = \frac{d\ln\bar{f}_q(x)}{dx}, \tag{2.141}$$

e

$$x\check{D}_q f(x) = \bar{x}_q\frac{df}{d\bar{x}_q} = \frac{df(x)}{d\ln\bar{x}_q}. \tag{2.142}$$

Similarmente às q-derivadas, as derivadas de segunda ordem para (2.131) e (2.133) são definidas por

$$\hat{D}_q^2 f(x) = [f(x)]^{1-q}\frac{d}{dx}\left\{[f(x)]^{1-q}\frac{df(x)}{dx}\right\}, \tag{2.143}$$

e

$$\check{D}_q^2 f(x) = \frac{1}{x^{1-q}}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{x^{1-q}}\frac{df(x)}{dx}\right]. \tag{2.144}$$

2.6 Funções trigonométricas e hiperbólicas deformadas

No desenvolvimento de álgebras generalizadas podemos encontrar diversos trabalhos na literatura relacionados com deformações de funções elementares trigonométricas (ou circulares) e hiperbólicas. Algumas dessas deformações estão associadas ao cálculo deformado baseado na derivada de Jackson [36, 43, 44, 49], ao cálculo em escalas temporais [101, 102, 103], e à q-álgebra associada a mecânica estatística não extensiva [31, 62, 63, 64, 71, 104].

Nesta Seção, iniciaremos com uma breve revisão de uma classe de funções trigonométricas e hiperbólicas deformadas definidas em [31]. Apresentamos também algumas identidades que observamos para estas funções. Em seguida, definimos mais outras duas novas classes de funções trigonométricas e hiperbólicas deformadas associadas às q-derivadas (2.113) e (2.116) discutidas na Seção anterior. Algumas das propriedades destas funções analisadas aqui serão aplicadas mais adiante ao longo deste trabalho, em particular, no estudo de sistemas com massa efetiva.

Funções trigonométricas e hiperbólicas q-espirais

Desta forma, a partir da função q-exponencial (2.13), funções trigonométricas generalizadas $\cos_q(x)$ e $\mathrm{sen}_q(x)$ foram definidas em [31] por:

$$\cos_q(x) \equiv \frac{\exp_q(ix) + \exp_q(-ix)}{2}, \tag{2.145a}$$

e

$$\mathrm{sen}_q(x) \equiv \frac{\exp_q(ix) - \exp_q(-ix)}{2i}. \tag{2.145b}$$

Estas funções podem ser reescritas como

$$\cos_q(x) = \rho_q(x)\cos[\theta_q(x)] \qquad \text{e} \qquad \mathrm{sen}_q(x) = \rho_q(x)\mathrm{sen}[\theta_q(x)], \tag{2.146}$$

com

$$\begin{aligned} \rho_q^2(x) &= \exp_q(ix)\exp_q(-ix) \\ &= [1 + (1-q)^2x^2]^{1/(1-q)} \\ &= \exp_q[(1-q)x^2], \end{aligned} \tag{2.147}$$

e

$$\theta_q(x) = \frac{\mathrm{atan}((1-q)x)}{1-q}. \tag{2.148}$$

Uma vez que $\cos_q^2(x) + \mathrm{sen}_q^2(x) = \rho_q^2(x)$, as funções trigonométricas deformadas não são circulares para $q \neq 1$. Conforme feito em [31], as definições (2.145) podem ser extendidas para números complexos. Aqui, nos restringiremos a discutir as propriedades destas funções para números reais. A Figura 2.4 mostra as funções $\cos_q(x)$ e $\mathrm{sen}_q(x)$ para valores de (a) $q = 1.1$ e (b) 0.90. Em (c), o diagrama $(\cos_q(x), \mathrm{sen}_q(x))$ também é mostrado para estes valores de q e $x > 0$.

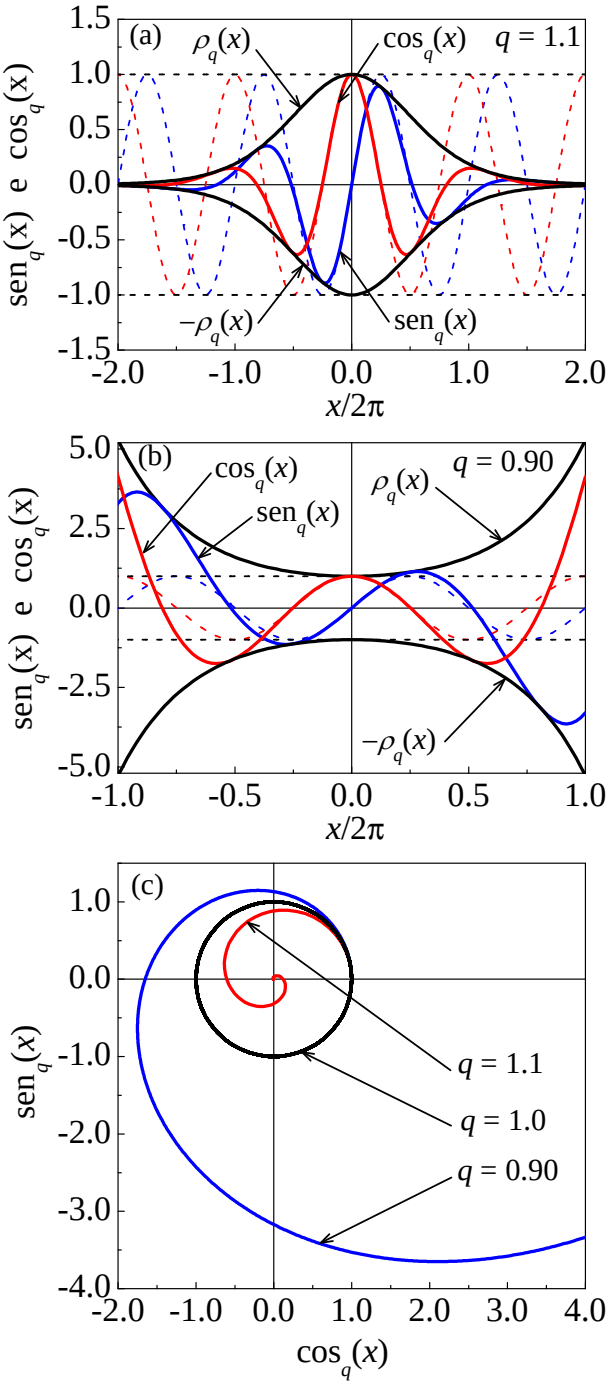


Figura 2.4: Gráficos das funções trigonométricas generalizadas $\cos_q(x)$ e $\mathrm{sen}_q(x)$ para (a) $q = 1.1$ e (b) $q = 0.90$. Os casos usuais ($q = 1$) são mostrados para comparação (linhas pontilhadas). Em (c), o plano $(\cos_q(x), \mathrm{sen}_q(x))$ é mostrado para estes mesmos valores de q e $x > 0$.

Através da transformação

$$i\chi_q(x) \equiv \frac{\ln[1+(1-q)(ix)]}{1-q} = \ln[\exp_q(ix)] = x_q(ix), \tag{2.149}$$

notamos que as funções trigonométricas generalizadas (2.145) podem ser escritas em termos de funções exponenciais usuais com argumentos deformados:

$$\cos_q(x) = \frac{\exp[i\chi_q(x)] + \exp[i\chi_q(-x)]}{2} \tag{2.150a}$$

e

$$\mathrm{sen}_q(x) = \frac{\exp[i\chi_q(x)] - \exp[i\chi_q(-x)]}{2i}. \tag{2.150b}$$

As funções trigonométricas (2.145) deformadas apresentadas satisfazem as relações [31, 105]

$$\frac{d}{dx}[\cos_q(x)] = -\mathrm{sen}_{2-1/q}(qx) \neq -\mathrm{sen}_q(x), \tag{2.151a}$$

$$\frac{d}{dx}[\mathrm{sen}_q(x)] = \cos_{2-1/q}(qx) \neq \cos_q(x). \tag{2.151b}$$

É simples mostrar que $\varphi_q(x) = \exp_q(i\kappa x)$ é solução exata complexa da seguinte equação diferencial de um oscilador não linear

$$\frac{d^2[\varphi_q(x)]^\nu}{dx^2} + k^2[\varphi_q(x)]^\mu = 0, \tag{2.152}$$

com

$$q = \frac{\mu-\nu}{2} + 1 \qquad \text{e} \qquad \kappa^2 = \frac{k^2}{\nu(\mu+\nu)}. \tag{2.153}$$

Quando $q \to 1$, o caso do oscilador harmônico simples é recuperado. É importante salientar que as funções $\cos_q(x)$ e $\mathrm{sen}_q(x)$, consideradas individualmente, não são soluções da equação diferencial (2.152), mas as combinações lineares $\cos_q(\kappa x) \pm i\mathrm{sen}_q(\kappa x) = \exp_q(\pm i\kappa x)$ tornam-se soluções. No próximo Capítulo (Seção 3.2) discutimos como soluções deste tipo podem apresentar um significado físico em mecânica quântica.

Da propriedade da função q-exponencial de um imaginário puro [106]

$$\exp_q(ix)\exp_{2-q}(-ix) = \frac{[1+(1-q)(ix)]_+^{1/(1-q)}}{[1+(1-q)(ix)]_+^{1/(1-q)}} = 1, \tag{2.154}$$

temos que

$$(\cos_q(x) + i\mathrm{sen}_q(x))(\cos_{2-q}(x) - i\mathrm{sen}_{2-q}(x)) = 1. \tag{2.155}$$

A partir das partes real e imaginária da equação acima, temos que

$$\cos_q(x)\cos_{2-q}(x) + \mathrm{sen}_q(x)\mathrm{sen}_{2-q}(x) = 1, \tag{2.156a}$$

e

$$\cos_q(x)\mathrm{sen}_{2-q}(x) = \cos_{2-q}(x)\mathrm{sen}_q(x). \tag{2.156b}$$

Notemos que enquanto as funções trigonométricas $\mathrm{sen}_q(x)$ e $\cos_q(x)$ convergem a 0 para valores de $q > 1$ quando $x \to \pm\infty$, suas respectivas cofunções $\cos_{q'}(x)$ e $\mathrm{sen}_{q'}(x)$, com $q' = 2 - q$, divergem (vide Figura 2.4 (a) e (b)). As Eq.'s (2.156) estão relacionadas a este comportamento. A Figura 2.5 mostra os gráficos entre produtos de funções trigonométricas generalizadas: (a) $\cos_q(x)\cos_{2-q}(x)$ e $\mathrm{sen}_q(x)\mathrm{sen}_{2-q}(x)$, (b) $\cos_q(x)\mathrm{sen}_{2-q}(x)$ e $-\cos_{2-q}(x)\mathrm{sen}_q(x)$ para $q = 1.1$.

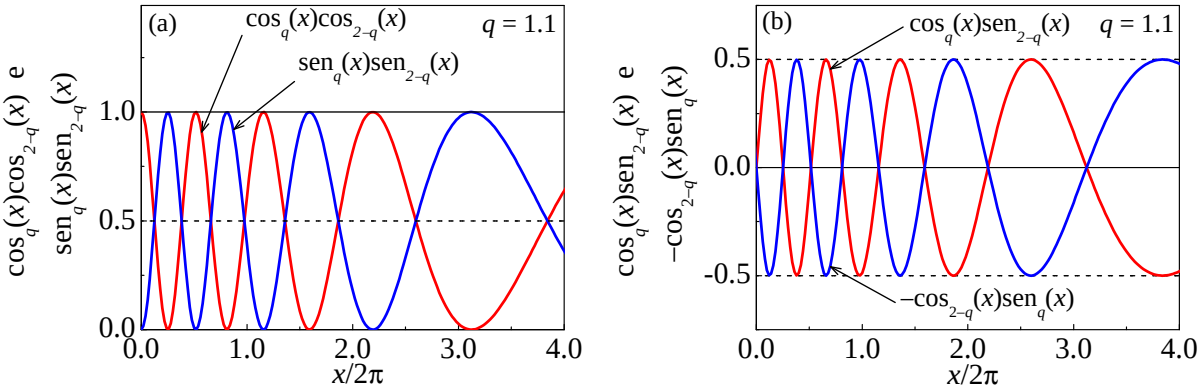


Figura 2.5: Gráficos dos produtos entre funções trigonométricas generalizadas: (a) $\cos_q(x)\cos_{2-q}(x)$ e $\mathrm{sen}_q(x)\mathrm{sen}_{2-q}(x)$, (b) $\cos_q(x)\mathrm{sen}_{2-q}(x)$ e $-\cos_{2-q}(x)\mathrm{sen}_q(x)$ para $q = 1.1$. Notemos que $\cos_q(x)\cos_{2-q}(x)+\mathrm{sen}_q(x)\mathrm{sen}_{2-q}(x) = 1$ e $\cos_q(x)\mathrm{sen}_{2-q}(x)-\cos_{2-q}(x)\mathrm{sen}_q(x) = 0$.

Pode-se também definir outras funções trigonométricas deformadas associada às funções (2.145), como por exemplo, a tangente deformada

$$\tan_q(x) \equiv \frac{\mathrm{sen}_q(x)}{\cos_q(x)} = \tan[\theta_q(x)], \tag{2.157}$$

e que satisfaz a propriedade

$$\tan_q(x) = \tan_{2-q}(x). \tag{2.158}$$

Em [31], funções hiperbólicas deformadas também são definidas a partir da função q-exponencial (2.13) por:

$$\cosh_q(x) = \frac{\exp_q(x) + \exp_q(-x)}{2}, \qquad \text{e} \qquad \mathrm{senh}_q(x) = \frac{\exp_q(x) - \exp_q(-x)}{2}. \tag{2.159}$$

Estas definições levam à relação

$$\cosh_q^2(x) - \mathrm{senh}_q^2(x) = \exp_q(x)\exp_q(-x) = \exp_q[-(1-q)x^2]. \tag{2.160}$$

Pode-se também mostrar que as funções hiperbólicas satisfazem as relações [105]

$$\frac{d}{dx}[\cosh_q(x)] = \mathrm{senh}_{2-1/q}(qx) \neq \mathrm{senh}_q(x), \tag{2.161a}$$

$$\frac{d}{dx}[\mathrm{senh}_q(x)] = \cosh_{2-1/q}(qx) \neq \cosh_q(x). \tag{2.161b}$$

Em termos do q-número (2.85), podemos escrever as funções hiperbólicas deformadas (2.159) em termos de exponenciais usuais de números deformados:

$$\cosh_q(x) = \frac{\exp[x_q(x)] + \exp[x_q(-x)]}{2} \tag{2.162a}$$

e

$$\mathrm{senh}_q(x) = \frac{\exp[x_q(x)] - \exp[x_q(-x)]}{2}. \tag{2.162b}$$

Da propriedade da função q-exponencial [106]

$$\exp_q(x)\exp_{2-q}(-x) = \frac{[1+(1-q)x]_+^{1/(1-q)}}{[1+(1-q)x]_+^{1/(1-q)}} = 1, \tag{2.163}$$

temos que

$$\cosh_q(x)\cosh_{2-q}(x) - \mathrm{senh}_q(x)\mathrm{senh}_{2-q}(x) = 1, \tag{2.164a}$$

e

$$\cosh_q(x)\mathrm{senh}_{2-q}(x) = \cosh_{2-q}(x)\mathrm{senh}_q(x). \tag{2.164b}$$

Define-se também a função tangente hiperbólica deformada [105]

$$\tanh_q(x) \equiv \frac{\mathrm{senh}_q(x)}{\cosh_q(x)} = \frac{\exp_q(x) - \exp_q(-x)}{\exp_q(x) + \exp_q(-x)}, \tag{2.165}$$

e que satisfaz

$$\tanh_q(x) = \tanh_{2-q}(x). \tag{2.166}$$

Notemos que as funções trigonométricas e hiperbólicas apresentadas acima estão relacionados através das equações

$$\begin{aligned} \cos_q(ix) &= \cosh_q(x), & \cosh_q(ix) &= \cosh_q(x), \\ \mathrm{sen}_q(ix) &= i\mathrm{senh}_q(ix), & \mathrm{senh}_q(ix) &= i\mathrm{sen}_q(x), \\ \tan_q(ix) &= i\tanh_q(x), & \tanh_q(ix) &= i\tan_q(x). \end{aligned} \tag{2.167}$$

Funções trigonométricas e hiperbólicas associadas à q-derivada

A partir da q-derivada (2.113), desejamos definir funções trigonométricas deformadas $\mathrm{Sn}_q(x)$ e $\mathrm{Cs}_q(x)$ que satisfaçam as equações:

$$D_q\mathrm{Cs}_q(x) = -\mathrm{Sn}_q(x) \qquad \text{e} \qquad D_q\mathrm{Sn}_q(x) = \mathrm{Cs}_q(x), \tag{2.168}$$

onde $\mathrm{Cs}_q^2(x) + \mathrm{Sn}_q^2(x) = 1$, *i.e.*, $\mathrm{Cs}_q(x)$ e $\mathrm{Sn}_q(x)$ são funções circulares.

Para obter uma expressão explícita destas funções, consideremos por exemplo a primeira equação diferencial deformada acima, e que $y(x) = \mathrm{Cs}_q(x)$. Segue que:

$$dx_q = \frac{dx}{1+(1-q)x} = -\frac{dy}{\sqrt{1-y^2}}. \tag{2.169}$$

Integrando a equação acima, temos $\arccos(y) = \ln[1+(1-q)x]/(1-q)$, e portanto,

$$\mathrm{Cs}_q(x) \equiv \cos\left\{\frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q}\right\} = \cos[x_q(x)], \tag{2.170}$$

e consequentemente,

$$\mathrm{Sn}_q(x) \equiv \mathrm{sen}\left\{\frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q}\right\} = \mathrm{sen}\,[x_q(x)]. \tag{2.171}$$

As expressões acima são idênticas àquelas obtidas por Chung [64] em um contexto diferente, onde o autor utilizou uma transformada de Laplace deformada para definir estas funções. Das expressões acima, notemos que estas funções oscilam no intervalo $[-1,1]$, mas devido à função logaritmo no argumento das funções trigonométricas usuais, estas funções trigonométricas deformadas não são periódicas. Para $q>1$ e $q<1$, as funções acima são bem definidas respectivamente nos intervalos $(-\infty,(q-1)^{-1})$ e $((q-1)^{-1},\infty)$. A Figura 2.6 mostra os gráficos das funções trigonométricas deformadas $\mathrm{Cs}_q(x)$ e $\mathrm{Sn}_q(x)$ para valores de $q = 1.05$ e 0.80.

Da propriedade (2.163), temos que

$$\mathrm{Cs}_q(-x) = \mathrm{Cs}_{2-q}(x), \qquad \text{e} \qquad \mathrm{Sn}_q(-x) = -\mathrm{Sn}_{2-q}(x). \tag{2.172}$$

A partir da relação dada pela Eq. (2.77), temos que $\exp_q^{\pm i}(x) = \exp_q[\pm i \odot_q x]$. Em termos da função q-exponencial, as funções (2.170) e (2.171) podem ser escritas como:

$$\begin{aligned}\mathrm{Cs}_q(x) &= \frac{[\exp_q(x)]^i + [\exp_q(x)]^{-i}}{2} \\ &= \frac{\exp_q(i\odot_q x) + \exp_q(-i\odot_q x)}{2},\end{aligned} \tag{2.173a}$$

e

$$\begin{aligned} \mathrm{Sn}_q(x) &= \frac{[\exp_q(x)]^i - [\exp_q(x)]^{-i}}{2i} \\ &= \frac{\exp_q(i \odot_q x) - \exp_q(-i \odot_q x)}{2i}. \end{aligned} \tag{2.173b}$$

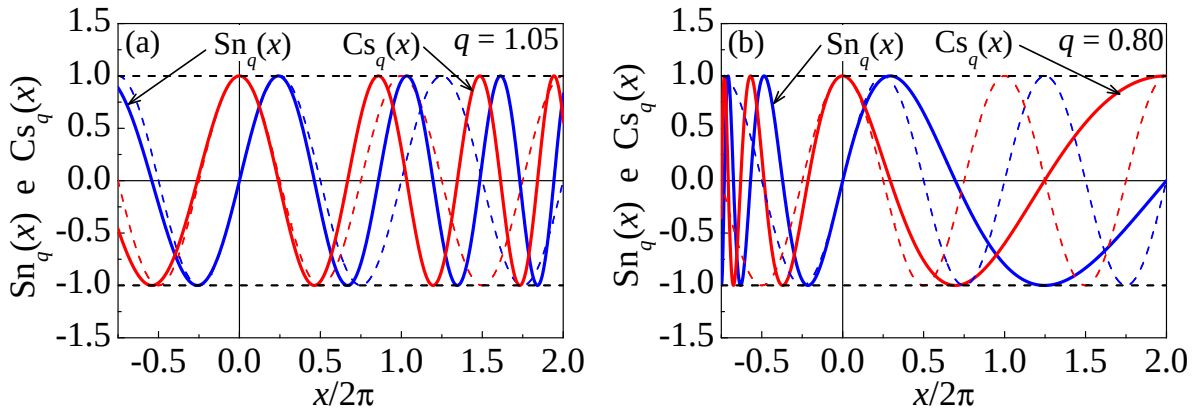


Figura 2.6: Gráficos das funções trigonométricas generalizadas $\mathrm{Cs}_q(x)$ e $\mathrm{Sn}_q(x)$ para (a) $q = 1.05$ e (b) $q = 0.80$. As funções usuais $\cos(x)$ e $\mathrm{sen}(x)$ (curvas pontilhadas) são mostradas para comparação.

As soluções da equação diferencial deformada

$$D_q^2 y(x) + y(x) = 0, \tag{2.174}$$

tem a forma das funções trigonométricas deformadas $\mathrm{Cs}_q(x)$ ou $\mathrm{Sn}_q(x)$, e que podem ser aplicadas para descrever um oscilador harmônico deformado. Pode-se verificar que esta equação, por ser explicitamente linear em relação a $y(x)$, admite como solução a combinação linear $a\mathrm{Cs}_q(x) + b\mathrm{Sn}_q(x)$. Estas funções são utéis no estudo de sistemas com massa dependente da posição no formalismo quântico que analisaremos no Capítulo 5.

Das propriedades (2.86) e (2.87), é imediato mostrar que as funções trigonométricas deformadas $\mathrm{Cs}_q(x)$ e $\mathrm{Sn}_q(x)$ satisfazem as identidades trigonométricas:

$$\begin{aligned} \mathrm{Cs}_q(a \oplus_q b) &= \mathrm{Cs}_q(a)\mathrm{Cs}_q(b) - \mathrm{Sn}_q(a)\mathrm{Sn}_q(b), \\ \mathrm{Cs}_q(a \ominus_q b) &= \mathrm{Cs}_q(a)\mathrm{Cs}_q(b) + \mathrm{Sn}_q(a)\mathrm{Sn}_q(b), \\ \mathrm{Sn}_q(a \oplus_q b) &= \mathrm{Sn}_q(a)\mathrm{Cs}_q(b) + \mathrm{Cs}_q(a)\mathrm{Sn}_q(b), \\ \mathrm{Sn}_q(a \ominus_q b) &= \mathrm{Sn}_q(a)\mathrm{Cs}_q(b) - \mathrm{Cs}_q(a)\mathrm{Sn}_q(b). \end{aligned} \tag{2.175}$$

Pode-se também utilizar as funções trigonométricas deformadas (2.170) e (2.171) para definir outras funções, como por exemplo, uma função tangente deformada dada por

$$\mathrm{Tn}_q\,(x) \equiv \frac{\mathrm{Sn}_q\,(x)}{\mathrm{Cs}_q\,(x)} = \tan[x_q(x)], \tag{2.176}$$

e que satisfaz as identidades:

$$\mathrm{Tn}_q(a \oplus_q b) = \frac{\mathrm{Tn}_q(a) + \mathrm{Tn}_q(b)}{1 - \mathrm{Tn}_q(a)\mathrm{Tn}_q(b)}, \tag{2.177a}$$

$$\mathrm{Tn}_q(a \ominus_q b) = \frac{\mathrm{Tn}_q(a) - \mathrm{Tn}_q(b)}{1 + \mathrm{Tn}_q(a)\mathrm{Tn}_q(b)}. \tag{2.177b}$$

A partir da q-derivada (2.113), também desejamos funções hiperbólicas deformadas que satisfaçam às equações

$$D_q\mathrm{Csh}_q(x) = \mathrm{Snh}_q(x) \qquad \text{e} \qquad D_q\mathrm{Snh}_q(x) = \mathrm{Csh}_q(x), \tag{2.178}$$

e à condição $\mathrm{Csh}_q^2(x) - \mathrm{Snh}_q(x)^2 = 1$. Seguindo os mesmos passos utilizados para obter as funções trigonométricas deformadas (2.170) e (2.171), consideremos $y(x) = \mathrm{Csh}_q(x)$, e portanto, da primeira equação acima, temos que

$$dx_q = \frac{dx}{1 + (1-q)x} = \frac{dy}{\sqrt{y^2 - 1}}, \tag{2.179}$$

e ao integrar a equação acima, obtemos $\mathrm{arccosh}_q(y) = \ln[1 + (1-q)x]/(1-q)$. Segue que:

$$\mathrm{Csh}_q(x) \equiv \cosh\left\{\frac{\ln[1 + (1-q)x]}{1-q}\right\} = \cosh[x_q(x)], \tag{2.180}$$

e consequentemente,

$$\mathrm{Snh}_q(x) \equiv \mathrm{senh}\left\{\frac{\ln[1 + (1-q)x]}{1-q}\right\} = \mathrm{senh}\,[x_q(x)]. \tag{2.181}$$

Em termos da função q-exponencial estas funções são escritas como:

$$\mathrm{Cs}_q(x) = \frac{1}{2}\left(\exp_q(x) + \frac{1}{\exp_q(x)}\right), \tag{2.182a}$$

$$\mathrm{Sn}_q(x) = \frac{1}{2}\left(\exp_q(x) - \frac{1}{\exp_q(x)}\right). \tag{2.182b}$$

Similarmente à propriedade (2.172), temos que:

$$\mathrm{Csh}_q(-x) = \mathrm{Csh}_{2-q}(x), \qquad \text{e} \qquad \mathrm{Snh}_q(-x) = -\mathrm{Snh}_{2-q}(x). \tag{2.183}$$

É imediato mostrar que estas funções satisfazem as identidades:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Csh}_q(a \oplus_q b) &= \mathrm{Csh}_q(a)\mathrm{Csh}_q(b) + \mathrm{Snh}_q(a)\mathrm{Snh}_q(b), \\
\mathrm{Csh}_q(a \ominus_q b) &= \mathrm{Csh}_q(a)\mathrm{Csh}_q(b) - \mathrm{Snh}_q(a)\mathrm{Snh}_q(b), \\
\mathrm{Snh}_q(a \oplus_q b) &= \mathrm{Sn}_q(a)\mathrm{Csh}_q(b) + \mathrm{Csh}_q(a)\mathrm{Snh}_q(b), \\
\mathrm{Snh}_q(a \ominus_q b) &= \mathrm{Snh}_q(a)\mathrm{Csh}_q(b) - \mathrm{Csh}_q(a)\mathrm{Snh}_q(b).
\end{aligned} \tag{2.184}$$

Pode-se também definir a função tangente hiperbólica deformada associada às funções hiberbólicas deformadas $\mathrm{Csh}_q(x)$ e $\mathrm{Snh}_q(x)$ por

$$\mathrm{Tnh}_q(x) \equiv \frac{\mathrm{Snh}_q(x)}{\mathrm{Csh}_q(x)} = \frac{\exp_q(x) - \exp_q^{-1}(x)}{\exp_q(x) + \exp_q^{-1}(x)} = \tanh[x_q(x)]. \tag{2.185}$$

e que satisfaz as propriedades:

$$\mathrm{Tnh}_q(a \oplus_q b) = \frac{\mathrm{Tnh}_q(a) + \mathrm{Tnh}_q(b)}{1 + \mathrm{Tnh}_q(a)\mathrm{Tnh}_q(b)}, \tag{2.186a}$$

$$\mathrm{Tnh}_q(a \ominus_q b) = \frac{\mathrm{Tnh}_q(a) - \mathrm{Tnh}_q(b)}{1 - \mathrm{Tnh}_q(a)\mathrm{Tnh}_q(b)}. \tag{2.186b}$$

Notemos que as funções trigonométricas $\mathrm{Cs}_q(x)$, $\mathrm{Sn}_q(x)$ e $\mathrm{Tn}_q(x)$, e as funções hiperbólicas $\mathrm{Csh}_q(x)$, $\mathrm{Snh}_q(x)$ e $\mathrm{Tnh}_q(x)$ não estão relacionadas respectivamente entre si pela mudança $x \to ix$ para $q \neq 1$. No entanto, a mudança $x_q(x) \to ix_q(x)$, leva funções trigonométricas em funções hiperbólicas e vice-versa.

Funções trigonométricas e hiperbólicas associadas à q-derivada dual

De modo similar, a q-derivada dual (2.116) pode ser utilizada para definir outras funções trigonométricas deformadas que satisfaçam às equações

$$\widetilde{D}_q \mathrm{Cos}_q(x) = -\mathrm{Sen}_q(x) \qquad \text{e} \qquad \widetilde{D}_q \mathrm{Sen}_q(x) = \mathrm{Cos}_q(x), \tag{2.187}$$

com $\mathrm{Sen}_q^2(x) + \mathrm{Cos}_q^2(x) = 1$.

Para obter a forma das funções acima, façamos por exemplo $z(x) = \mathrm{Cos}_q(x)$ e $a_q = 1 - q$. A primeira equação diferencial acima escrita explicitamente nos dá

$$dx = -\frac{dz_q}{\sqrt{1 - z^2}} = -\frac{dz}{(1 + a_q z)\sqrt{1 - z^2}}. \tag{2.188}$$

Seja agora $z = \cos\Theta_q$, e integrando a equação acima, segue que

$$\begin{aligned}
x &= -\int \frac{dz}{(1 + a_q z)\sqrt{1 - z^2}} \\
&= \int \frac{d\Theta_q}{1 + a_q \cos\Theta_q}.
\end{aligned} \tag{2.189}$$

A integral da primeira linha da equação anterior pode ser entendida como a q-integral (2.127) da função $1/\sqrt{1-z^2}$. Da integral indefinida (Eq. (2.553 3) de [107])

$$\int \frac{du}{b+a\cos u} = \begin{cases} \dfrac{2}{\sqrt{b^2-a^2}} \arctan\left[\dfrac{(b-a)}{\sqrt{b^2-a^2}} \tan\left(\dfrac{u}{2}\right)\right], & a^2 < b^2 \\ \dfrac{2}{\sqrt{a^2-b^2}} \operatorname{arctanh}\left[\dfrac{(a-b)}{\sqrt{a^2-b^2}} \tan\left(\dfrac{u}{2}\right)\right], & a^2 > b^2 \end{cases} \tag{2.190}$$

obtemos que

$$\Theta_q(x) = \begin{cases} 2\arctan\left[\sqrt{\dfrac{1+a_q}{1-a_q}} \tan\left(\sqrt{1-a_q^2}\dfrac{x}{2}\right)\right], & |a_q| < 1 \\ 2\arctan\left[\sqrt{\left|\dfrac{a_q+1}{a_q-1}\right|} \tanh\left(\sqrt{a_q^2-1}\dfrac{x}{2}\right)\right], & |a_q| > 1 \end{cases} \tag{2.191}$$

e portanto as soluções das equações diferenciais deformadas (2.187) são as funções trigonométricas deformadas

$$\mathrm{Cos}_q(x) \equiv \cos\left[\Theta_q(x)\right] = \frac{\exp[i\Theta_q(x)] + \exp[-i\Theta_q(x)]}{2}, \tag{2.192a}$$

e

$$\mathrm{Sen}_q(x) \equiv \mathrm{sen}\left[\Theta_q(x)\right] = \frac{\exp[i\Theta_q(x)] - \exp[-i\Theta_q(x)]}{2i}. \tag{2.192b}$$

De acordo com as Eq.'s (2.192) e a fase deformada (2.191), temos que para $q \neq 1$, estas funções têm comportamentos diferentes entre si, e que não são simétricas por uma translação de $\pi/2$, diferentemente como acontece no caso usual. Por outro lado, estas funções preservam as mesmas propriedades de pariedade do caso usual, *i.e.*, $\mathrm{Cos}_q(-x) = \mathrm{Cos}_q(x)$ e $\mathrm{Sen}_q(-x) = -\mathrm{Sen}_q(x)$.

Para $|a_q| < 1$, ou seja, $0 < q < 2$, ambas funções apresentam um comportamento oscilatório entre intervalo $[-1, 1]$ e período nl_q, onde n é um inteiro, e $l_q = 2\pi/\sqrt{1-a_q^2}$. De fato, consideremos por exemplo a função $\mathrm{Cos}_q(x)$, neste caso:

$$\begin{aligned} \mathrm{Cos}_q(x+nl_q) &= \cos\left(2\arctan\left\{\sqrt{\frac{1+a_q}{1-a_q}} \tan\left[\left(\frac{1}{2}\sqrt{1-a_q^2}\right)(x+nl_q)\right]\right\}\right) \\ &= \cos\left(-2\arctan\left[\sqrt{\frac{1+a_q}{1-a_q}} \tan\left(\sqrt{1-a_q^2}\frac{x}{2}\right)\right]\right) \\ &= \cos\left(2\arctan\left[\sqrt{\frac{1+a_q}{1-a_q}} \tan\left(\sqrt{1-a_q^2}\frac{x}{2}\right)\right]\right) \\ &= \mathrm{Cos}_q(x). \end{aligned} \tag{2.193}$$

Analogamente, o mesmo pode ser feito para mostrar que $\mathrm{Sen}_q(x+nl_q) = \mathrm{Sen}_q(x)$.

Estas funções também satisfazem às propriedades:

$$\mathrm{Cos}_{2-q}(x) = -\mathrm{Cos}_q(x - l_q/2), \quad \text{e} \quad \mathrm{Sen}_{2-q}(x) = \mathrm{Sen}_q(x - l_q/2), \quad (0 < q < 2). \quad (2.194)$$

Para demonstrar esta propriedade, notemos que:

$$\begin{aligned}
\Theta_q\left(x - \frac{l_q}{2}\right) &= 2\arctan\left\{\sqrt{\frac{1+a_q}{1-a_q}}\tan\left[\left(\frac{1}{2}\sqrt{1-a_q^2}\right)\left(x - \frac{l_q}{2}\right)\right]\right\} \\
&= 2\arctan\left[\sqrt{\frac{1+a_q}{1-a_q}}\tan\left(\sqrt{1-a_q^2}\frac{x}{2} - \frac{\pi}{2}\right)\right] \\
&= -2\arctan\left(\left[\sqrt{\frac{1-a_q}{1+a_q}}\tan\left(\sqrt{1-a_q^2}\frac{x}{2}\right)\right]^{-1}\right), \qquad (2.195)
\end{aligned}$$

onde utilizamos nesta última equação $\tan(x-\pi/2) = -\mathrm{cotan}\,(x) = -1/\tan(x)$ e $\arctan(-x) = -\arctan(x)$. A partir da propriedade $\arctan(1/x) = \pi/2 - \arctan(x)$ (Eq. (1.627 1) de [107]) e uma vez que $a_{2-q} = -a_q$, a equação acima torna-se

$$\begin{aligned}
\Theta_q\left(x - \frac{l_q}{2}\right) &= 2\arctan\left[\sqrt{\frac{1-a_q}{1+a_q}}\tan\left(\sqrt{1-a_q^2}\frac{x}{2}\right)\right] - \pi \\
&= 2\arctan\left[\sqrt{\frac{1+a_{2-q}}{1-a_{2-q}}}\tan\left(\sqrt{1-a_{2-q}^2}\frac{x}{2}\right)\right] - \pi \\
&= \Theta_{2-q}\left(x - \frac{l_q}{2}\right) - \pi, \qquad (2.196)
\end{aligned}$$

e a partir das Eq.'s (2.192), obtemos as propriedades (2.194), como queríamos demonstrar.

Para $|a_q| > 1$, ou seja, $q < 0$ e $q > 2$, as funções trigonométricas deformadas perdem o comportamento oscilatório, e apresentam um comportamento assintótico para $x \to \pm\infty$, onde $\lim_{x\to\pm\infty}\mathrm{Cos}_q(x) = a_q^{-1} = -(1-q)^{-1}$ e $\lim_{x\to\pm\infty}\mathrm{Sen}_q(x) = \pm\sqrt{1-a_q^{-1}} = \pm\sqrt{1-(1-q)^{-2}}$.

A Figura 2.7 mostra as funções trigonométricas $\mathrm{Sen}_q(x)$ e $\mathrm{Cos}_q(x)$ para valores de (a) $q = 0.30$, (b) $q = 1.7$, (c) $q = 3.0$ e (d) $q = -0.10$.

Conforme veremos adiante as funções trigonométricas deformadas $\mathrm{Sen}_q(x)$ e $\mathrm{Cos}_q(x)$ têm um papel importante no oscilador deformado que trataremos no Capítulo 6, e cuja posição satisfaz à solução da equação diferencial deformada

$$\tilde{D}_q^2 y(x) + y(x) = 0. \qquad (2.197)$$

Uma vez que a equação diferencial acima é não linear em relação a $y(x)$, esta não admite como solução a combinação linear $a\mathrm{Cos}_q(x) + b\mathrm{Sen}_q(x)$.

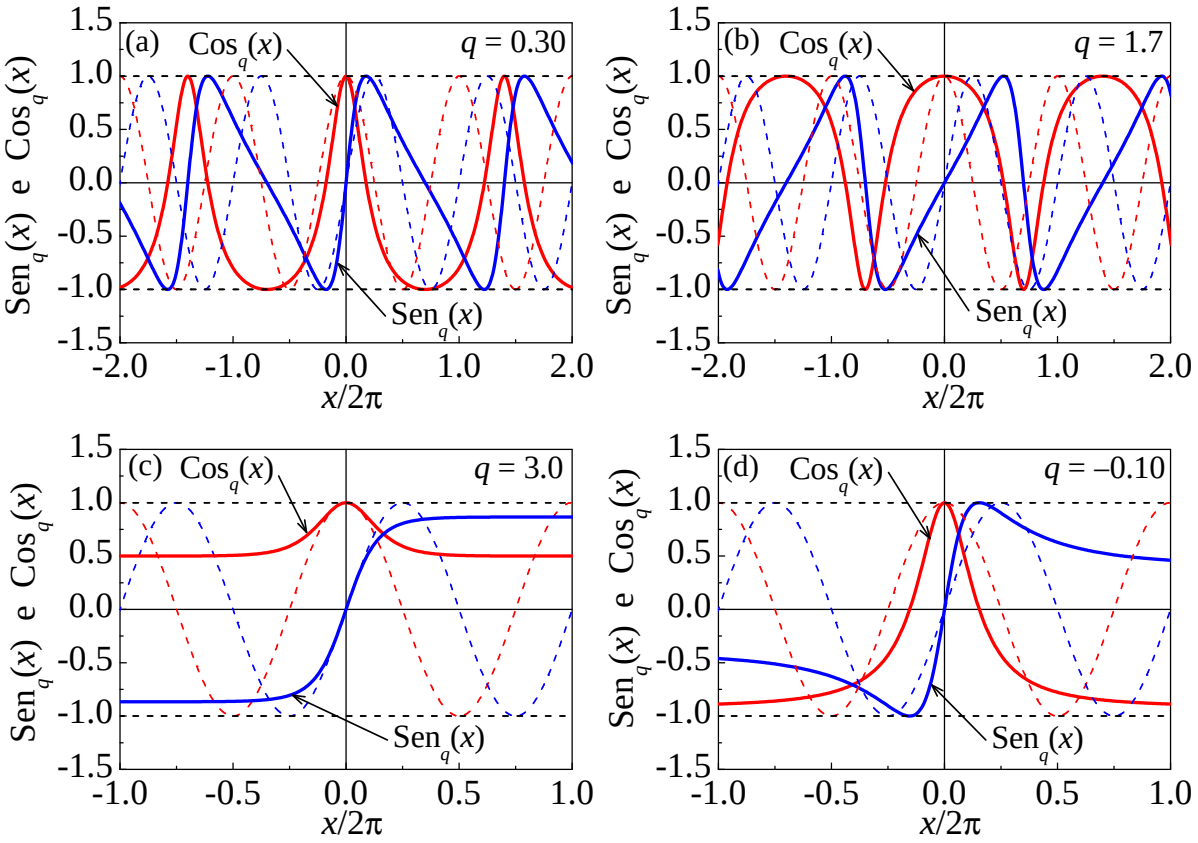


Figura 2.7: Gráficos das funções trigonométricas generalizadas $\mathrm{Sen}_q(x)$ e $\mathrm{Cos}_q(x)$ para (a) $q = 0.30$,(b) $q = 1.7$, (c) $q = 3.0$ e (d) $q = -0.10$. As funções usuais $\mathrm{sen}(x)$ e $\cos(x)$ (curvas pontilhadas) são mostradas para comparação.

Pode-se definir funções trigonométricas deformadas associada às funções trigonométricas (2.192), como por exemplo, a tangente deformada:

$$\mathrm{Tan}_q(x) \equiv \frac{\mathrm{Sen}_q(x)}{\mathrm{Cos}_q(x)} = \frac{\exp[i\Theta_q(x)] - \exp[-i\Theta_q(x)]}{\exp[i\Theta_q(x)] + \exp[-i\Theta_q(x)]} = \tan[\Theta_q(x)]. \tag{2.198}$$

Por fim, pode-se determinar funções hiperbólicas deformadas $\mathrm{Senh}_q(x)$ e $\mathrm{Cosh}_q(x)$ associadas à q-derivada dual que satisfaçam às equações diferenciais

$$\widetilde{D}_q\mathrm{Cosh}_q(x) = \mathrm{Senh}_q(x) \qquad \text{e} \qquad \widetilde{D}_q\mathrm{Senh}_q(x) = \mathrm{Cosh}_q(x), \tag{2.199}$$

e com $\mathrm{Cosh}_q^2(x) - \mathrm{Senh}_q(x)^2 = 1$. Para obter estaas funções hiperbólicas deformadas, consideremos $z(x) = \mathrm{Cosh}_q(x)$, e portanto a primeira equação acima nos dá

$$dx = \frac{dz_q}{\sqrt{z^2-1}} = \frac{dz}{(1+a_q z)\sqrt{z^2-1}}. \tag{2.200}$$

Integrando esta equação e fazendo $z = \cosh\vartheta_q$, obtemos:

$$x = \int \frac{dz}{(1+a_q z)\sqrt{z^2-1}} = \int \frac{d\vartheta_q}{1+a_q\cosh\vartheta_q}, \tag{2.201}$$

onde indentifica-se mais uma vez a q-integral (2.127) na expressão acima.

A partir da integral indefinida (Eq. (2.443 3) de [107])

$$\int \frac{du}{b+a\cosh u} = \begin{cases} \dfrac{2}{\sqrt{b^2-a^2}}\text{arctanh}\left[\dfrac{\sqrt{b^2-a^2}}{b+a}\text{arctanh}\left(\dfrac{u}{2}\right)\right], & a^2<b^2 \\ \dfrac{2}{\sqrt{a^2-b^2}}\arctan\left[\dfrac{\sqrt{a^2-b^2}}{a+b}\tanh\left(\dfrac{u}{2}\right)\right], & a^2>b^2 \end{cases} \tag{2.202}$$

obtemos que

$$\vartheta_q(x) = \begin{cases} 2\text{arctanh}\left[\sqrt{\dfrac{1+a_q}{1-a_q}}\tanh\left(\sqrt{1-a_q^2}\dfrac{x}{2}\right)\right], & |a_q|<1 \\ 2\text{arctanh}\left[\sqrt{\left|\dfrac{a_q+1}{a_q-1}\right|}\tan\left(\sqrt{a_q^2-1}\dfrac{x}{2}\right)\right], & |a_q|>1 \end{cases} \tag{2.203}$$

e portanto as soluções das equações diferenciais deformadas (2.187) são as funções hiperbólicas deformadas

$$\text{Cosh}_q(x) \equiv \cosh\left[\vartheta_q(x)\right] = \frac{\exp[\vartheta_q(x)] + \exp[-\vartheta_q(x)]}{2}, \tag{2.204a}$$

e

$$\text{Senh}_q(x) \equiv \text{senh}\left[\vartheta_q(x)\right] = \frac{\exp[\vartheta_q(x)] - \exp[-\vartheta_q(x)]}{2}. \tag{2.204b}$$

A função tangente hiperbólica associada às funções hiberbólicas deformadas $\text{Cosh}_q(x)$ e $\text{Senh}_q(x)$ é definida por

$$\text{Tanh}_q(x) \equiv \frac{\text{Senh}_q(x)}{\text{Cosh}_q(x)} = \frac{\exp[\vartheta_q(x)] - \exp[-\vartheta_q(x)]}{\exp[\vartheta_q(x)] + \exp[-\vartheta_q(x)]} = \tanh[\vartheta_q(x)]. \tag{2.205}$$

A partir das propriedades $\tan(iu) = i\tanh(u)$ e $\tanh(iu) = i\tan(u)$, temos que as fases deformadas (2.191) e (2.203) satisfazem a relação $i\Theta_q(x) = \vartheta_q(ix)$. Desta forma, as funções trigonométricas (2.192) e hiperbólicas (2.204) deformadas estão relacionadas pelas identidades

$$\begin{aligned} \text{Cos}_q(ix) &= \text{Cosh}_q(x), & \text{Cosh}_q(ix) &= \text{Cosh}_q(x), \\ \text{Sen}_q(ix) &= \text{Senh}_q(ix), & \text{Senh}_q(ix) &= i\text{Sen}_q(x), \\ \text{Tan}_q(ix) &= i\text{Tanh}_q(x), & \text{Tanh}_q(ix) &= i\text{Tan}_q(x). \end{aligned} \tag{2.206}$$

Capítulo 3

Dinâmica quântica q-deformada NRT

Generalizações para cada uma das três principais equações da mecânica quântica – as equações de Schrödinger, Klein-Gordon e Dirac – foram recentemente estudadas em [10, 108, 109, 110, 111, 112, 113, 114, 115]. Nestas equações, existem termos não lineares caracterizados por expoentes dependentes de um parâmetro q, de modo que suas respectivas versões lineares são recuperadas no limite $q \to 1$. Estas equações possuem um tipo em comum de soluções, com propriedades similares às das ondas solitárias (*sólitons*), e na qual são escritas em termos da função q-exponencial (2.13) que emerge naturalmente da mecânica estatística não extensiva.

Desde que estamos interessados em desenvolver e discutir aspectos de recentes aplicações de q-deformações na mecânica quântica não relativística, este Capítulo tem como objetivo uma revisão de literatura sobre uma destas deformações da mecânica quântica baseada no uso de equações não lineares.

Iniciamos com uma breve revisão de duas importantes equações não lineares da física: a equação de Fokker-Planck não linear [116, 117, 118, 119, 120, 121, 122, 123, 124, 125, 126, 127, 128] e a equação de Schrödinger não linear [129].

Uma generalização das ondas planas através da função q-exponencial (2.13) será revisitada [71]. Em seguida, apresentamos uma formulação generalizada da equação fundamental da mecânica quântica não relativística [10], chamada de equação de Schrödinger não linear NRT, cuja sigla é uma refererência aos autores F. D. Nobre, M. A. Rego-Monteiro e C. Tsallis. Discutimos alguns aspectos desta equação, em particular, revisitamos o comportamento de suas soluções sobre a mudança de coordenadas em referenciais inerciais e não inerciais. Em seguida, uma teoria clássica de campos para a equação de Schrödinger não linear NRT é apresentada, bem como algumas de suas características. Como aplicação deste formalismo, revisitamos o problema de uma partícula confinada em um poço de potencial quadrado infinito.

Nas duas últimas Seções (3.7 e 3.8), apresentamos uma contribuição nossa a este formalismo, onde propomos uma equivalente equação de Schrödinger não linear NRT na formulação de vetores de estado ket, ou mais popularmente conhecida como formalismo

na notação Dirac.

Apresentamos também uma possível conexão entre a equação de Schrödinger não linear NRT e a mecânica estatística não extensiva em consequência da definição de um propagador de Feymann deformado. A partir da equação de Schrödinger não linear obtemos naturalmente uma equação de von Neumann deformada, e que tem como solução uma função matriz densidade deformada que foi utilizada anteriormente por Vidiella-Barranco *et al.* para explicar processos de decoerência em mecânica quântica [130].

Introduzimos um operador de rotação deformado, e como aplicação, revisitamos o problema de precessão de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ em um campo magnético externo.

3.1 Algumas equações lineares e não lineares da física

De modo geral, a dinâmica de sistemas físicos utilizam equações diferenciais lineares para calcular as variações temporal e espacial de uma determinada grandeza física. Além da equação de Schrödinger (1.1) discutida no Capítulo 1, destacamos aqui a equação de Fokker-Planck em uma variável [131]

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left[F(x)P(x,t) - \frac{1}{2}D\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}\right], \tag{3.1}$$

que descreve processos de difusão de partículas, onde $P(x,t)$ é a função densidade, $F(x) \equiv -dV(x)/dx$ é uma espécie de força externa associada ao potencial confinante $V(x)$, e D é uma constante positiva chamada de coeficiente de difusão.

Para o caso particular em que $F(x) = 0$, temos

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{2}D\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2}, \tag{3.2}$$

comumente conhecida como equação de difusão normal (ou equação do calor). A solução da equação acima para a condição inicial $P(x,0) = \delta(x)$, sendo $\delta(x)$ a função delta de Dirac (todas as partículas concentradas em $x = 0$ no instante $t = 0$), é uma função gaussiana dada por

$$P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}}e^{-x^2/(2Dt)}. \tag{3.3}$$

Pode-se verificar que

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx = 1 \qquad (t \geq 0), \tag{3.4}$$

e

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 P(x,t)dx = Dt. \tag{3.5}$$

Esta solução da equação de difusão normal maximiza a entropia de Boltzmann-Gibbs

[117]

$$S_{BG} = -k \int P(x,t) \ln[\sigma P(x,t)] dx, \tag{3.6}$$

onde $\sigma > 0$ é uma constante com unidade de comprimento que leva a uma consistência dimensional da versão contínua de S_{BG},

A aplicabilidade de equações lineares na física é usualmente restrita a sistemas idealizados, sendo válidas para meios caracterizados por condições específicas como homogeneidade, isotropia, invariância translacional, e partículas interagindo através de forças de curto alcance e com um comportamento dinâmico de memória com curta duração temporal. No entanto, muitos sistemas reais, especialmente aqueles dentro do campo dos sistemas complexos, não preenchem estas condições, e usualmente estão associados a fenômenos não lineares. Diante disso, o estudo de fenômenos não lineares tem aberto uma nova área na física capaz de descrever diversos fenômenos, e as equações diferenciais não lineares constituem importantes ferramentas para a descrição de uma larga quantidade de sistemas e processos físicos como aqueles em óptica não linear, supercondutividade, física de plasmas e mecânica estatística fora do equilíbrio [132, 133]. Uma vez que a determinação de soluções analíticas para equações não lineares nem sempre são obtidas de forma trivial, frequentemente utiliza-se métodos perturbativos ou númericos para obter um comportamento destas soluções, onde neste último caso, recentes avanços na tecnologia de computadores tem contribuído consideravelmente para o progresso deste método.

Em muitos casos, as equações não lineares são propostas a partir de generalizações dos respectivos casos lineares, de forma que estas últimas possam ser recuperadas para certos limites. No geral, existem dois métodos mais utilizados na literatura para se introduzir não linearidades de equações generalizadas:
(i) adição de termos não lineares à equação linear;
(ii) através da modificação dos termos presentes na equação linear.

Como exemplos dos procedimentos acima, poderíamos citar a equação de Schrödinger não linear (NLSE, do inglês *Nonlinear Schrödinger Equation*) e a equação de Fokker-Planck não linear para os métodos (*i*) e (*ii*), respectivamente.

Para o primeiro exemplo acima, uma das mais comuns formulações para uma equação de Schrödinger não linear [52, 53, 54, 129] tem um termo extra, de modo que

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Phi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\Phi(\vec{r},t) + U(|\Phi(\vec{r},t)|^2)\Phi(\vec{r},t). \tag{3.7}$$

O termo adicional nesta equação, cúbico na maioria dos casos estudados na literatura, é responsável pela modulação da função de onda para alguns tipos de soluções particulares. Especificamente, temos que as soluções estacionárias são caracterizadas por uma dependência temporal linear, *i.e.*, $e^{i\omega t}$, de modo que a não linearidade é essencialmente manifestada através da parte espacial da função de onda.

Uma aplicação importante desta equação pode ser encontrada no estudo de sistemas quânticos em física do estado sólido, especificamente para modelar a dinâmica de um elétron em uma rede metálica ou semicondutora. Neste modelo, uma aproximação comumente utilizada é considerar o metal ou semicondutor como um arranjo periódico de íons pesados e circundados por uma nuvem eletrônica de modo que o sistema é mantido ligado através de forças eletrostáticas[1]. O elétron por sua vez tem sua dinâmica fortemente influenciada pela periodicidade do potencial gerado pelos íons da rede. O fato do elétron possuir carga elétrica negativa e os íons carga elétrica positiva, faz com que ambos interajam durante o deslocamento do elétron. Esta interação elétron-íons podem causar uma deformação na rede, de forma que este elétron diante desta deformação local formem uma quasi-partícula chamada de *pólaron*[2]. Quando a deformação na rede torna-se bastante intensa, pode ocorrer um fenômeno chamado de *self-trapping*, onde o elétron pode permanecer preso no potencial criado pela deformação causada por ele mesmo, dando origem ao termo cúbico na equação de Schrödinger.

Por outro lado, o procedimento (*ii*) tem sido bastante utilizado para descrever fenômenos de difusão anômala por meio da equação de Fokker-Planck não linear em uma variável [116, 117, 121, 122, 123]:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left\{F(x)\Psi[P(x,t)] - \Omega[P(x,t)]\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}\right\}, \qquad (D>0). \tag{3.8}$$

onde os funcionais $\Psi[P(x,t)]$ e $\Omega[P(x,t)]$ são ambas quantidades positivas, diferenciáveis e integráveis [122]. Esta equação evidentemente satisfaz uma equação de continuidade, e leva à conservação da probabilidade. O termo entre chaves corresponde a uma densidade de corrente.

Um caso particular para a equação de difusão não linear acima pode ser obtida considerando que os funcionais da Eq. (3.8) sejam $\Psi[P(x,t)] = P(x,t)$ e $\Omega[P(x,t)] = D_q(2-q)[P(x,t)]^{1-q}$, e consequentemente

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\{F(x)[P(x,t)]\} + D_q\frac{\partial^2}{\partial x^2}[P(x,t)]^{2-q}, \tag{3.9}$$

onde a constante de difusão $D_q > 0$ depende do parâmetro q a fim de garantir a dimensionalidade correta da equação acima. A Eq. (3.9) para uma força linear $F(x)$ foi estudada por Tsallis e Bukman, e sua solução tem a forma de uma função q-gaussiana [117].

Desejando apresentar uma conexão simples da Eq. (3.9) com a mecânica estatística

[1] No caso de semicondutores, as forças de interação dão origem a ligações covalentes.

[2] O conceito de pólaron foi primeiramente proposto em 1933 pelo físico russo L. Landau para descrever o movimento de elétrons em materiais dielétricos [134]. No entanto, o mesmo conceito pode ser aplicado em outros materiais como metais e semicondutores [135], magnetoresistores [136], supercondutores [137] etc.

não extensiva, consideremos o caso de $F(x) = 0$:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = D_q \frac{\partial^2}{\partial x^2}[P(x,t)]^{2-q}, \tag{3.10}$$

onde esta equação não linear é conhecida como *equação dos meios porosos* [9].

A solução desta equação para a condição inicial $P(x,0) = \delta(x)$ é

$$P_q(x,t) = P_q(x/[D_q t]^{1/(3-q)}), \tag{3.11}$$

onde $P_q(u)$ é uma função q-gaussiana dada por

$$P_q(u) = \frac{1}{\sqrt{\pi A_q}} \exp_q\left(-\frac{u^2}{A_q}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi A_q}}\left[1-(1-q)\frac{u^2}{A_q}\right]^{1/(1-q)}, \tag{3.12}$$

com

$$A_q = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{q-1}\,\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}{\Gamma\left(\frac{3-q}{2(q-1)}\right)}, & 1 < q < 3 \\ 2, & q = 1 \\ \dfrac{\sqrt{1-q}\,\Gamma\left(\frac{5-3q}{2(1-q)}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}, & q < 1 \end{cases} \tag{3.13}$$

Temos que a integral $\int_{-\infty}^{\infty} P_q(x,t)dx$ converge se $q < 3$, e diverge para outros valores.

Conforme mencionamos anteriormente, para o fenômeno da difusão normal temos que o valor médio de x cresce linearmente com o tempo de acordo com a Eq. (3.5), *i.e.*, $\langle x^2 \rangle \propto t$. Evidentemente, outros tipos de funções de $\langle x^2 \rangle(t)$ podem existir. A mais comum delas é

$$\langle x^2 \rangle \propto t^{\alpha}, \tag{3.14}$$

onde x pode ser uma grandeza d-dimensional. Se $\alpha < 1$, tem-se a *subdifusão* (a simples localização corresponde a $\alpha = 0$); e se $\alpha > 1$, tem-se a *superdifusão* (o caso particular $\alpha = 2$ é chamado de *difusão balística*). A difusão é normal para $\alpha = 1$.

A partir da função densidade da difusão anômala (3.12), mostra-se que para $\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 P_q(x,t)dx$ finito, temos:

$$\langle x^2 \rangle \propto t^{\frac{2}{3-q}}, \tag{3.15}$$

ou seja,

$$\alpha = \frac{2}{3-q}. \tag{3.16}$$

Consequentemente, temos a subdifusão para $q < 1$ (localização para $q \to -\infty$), e a superdifusão para $1 < q < 3$ (balística para $q = 2$). Para $q = 1$ recuperamos a difusão

normal.

A solução (3.12) da equação de difusão anômala (3.10) extremiza (maximiza para $q > 0$, e minimiza para $q < 0$) a entropia generalizada

$$S_q = -\frac{k}{1-q}\left\{1 - \int [\sigma P(x,t)]^q d(x/\sigma)\right\}, \tag{3.17}$$

onde mais uma vez $\sigma > 0$ é uma constante que garante a consistência dimensional da entropia acima.

Portanto, vemos que a mecânica estatística não extensiva e a aplicação de funções generalizadas podem ser importantes ferramentas para a descrição de processos não lineares, como a difusão anômala.

3.2 Ondas q-planas

Da mesma forma que a função q-exponencial pode ser aplicada a processos de difusão não linear, é possível mostrar que esta função também torna-se uma importante ferramenta em fenômenos ondulatórios não lineares. Consideremos inicialmente a equação de onda linear unidimensional

$$\frac{\partial^2 \Phi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \Phi(x,t)}{\partial t^2} \tag{3.18}$$

cuja solução é qualquer função duplamente diferenciável do tipo $\Phi(x,t) = \Phi(x-ct)$. Em particular, como solução da equação de onda acima, pode-se ter uma onda q-plana [71] dada por

$$\Phi(x,t) = \Phi_0 \exp_q[i(kx - \omega t)], \tag{3.19}$$

com $\Phi_0 \equiv \Phi(0,0)$ e relação de dispersão $k = \omega/c$.

Diferentemente do que acontece no caso usual, as ondas q-planas para $q \neq 1$ não podem ser separadas em fatores espacial e temporal. Por outro lado, enquanto as ondas planas usuais não podem ser normalizadas, as ondas q-planas são normalizáveis para $1 < q < 3$. De fato, consideremos por simplicidade a função $\varphi(x) = N_q \exp_q(i\kappa x)$, onde N_q é uma constante de normalização e κ é um número real. Pela condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x)\varphi(x)dx = 1, \tag{3.20}$$

temos que

$$\frac{1}{N_q^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp_q(-i\kappa x)\exp_q(i\kappa x)dx, \tag{3.21}$$

e a partir da relação (2.147), obtemos

$$\frac{1}{N_q^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{[1+(q-1)^2\kappa^2x^2]^{1/(q-1)}}. \tag{3.22}$$

Pela mudança de variável $\tan\theta = (q-1)|\kappa|x$, esta última expressão torna-se

$$\frac{1}{N_q^2} = \frac{2}{(q-1)|\kappa|}\int_0^{\pi/2} (\cos\theta)^{\frac{4-2q}{q-1}}\, d\theta. \tag{3.23}$$

Lembrando que a função beta pode ser escrita na forma trigonométrica [138]

$$B(n,m) = 2\int_0^{\pi/2} (\operatorname{sen}\theta)^{2n-1}(\cos\theta)^{2m-1} d\theta, \tag{3.24}$$

e que satisfaz a relação

$$B(n,m) = \frac{\Gamma(n)\Gamma(m)}{\Gamma(n+m)}, \tag{3.25}$$

onde $\Gamma(n)$ é a função gama [138]; vemos que a integral do lado direito da Eq. (3.23) pode ser escrita como uma função beta com $n = \frac{1}{2}$ e $m = \frac{3-q}{2(q-1)}$. Portanto, da Eq. (3.23) segue que:

$$\frac{N_q}{\sqrt{|\kappa|}} = \left[\frac{(q-1)\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}{\sqrt{\pi}\,\Gamma\left(\frac{3-q}{2(q-1)}\right)}\right]^{1/2}. \tag{3.26}$$

Uma vez que $\Gamma(n) > 0$ para $n > 0$, temos que a constante de normalização N_q é positiva no intervalo $q \in]1,3[$. A Figura 3.1 mostra a constante de normalização N_q para $1 < q < 3$. N_q aproxima-se assintoticamente de 0 no limite de $q \to 1$, recuperando assim a não normalização das ondas planas.

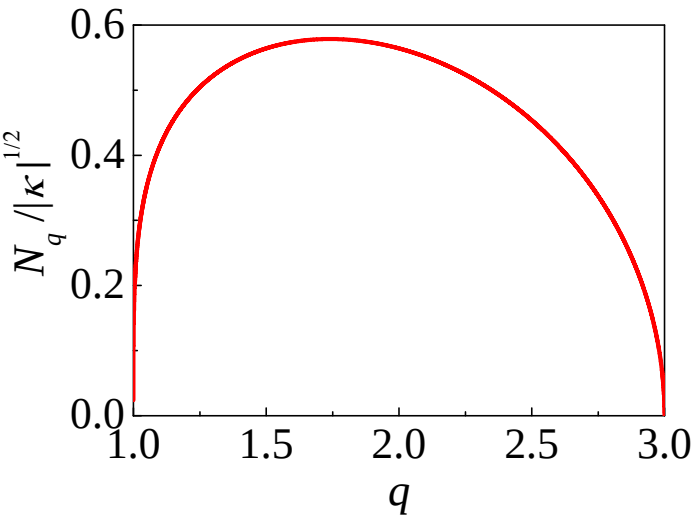


Figura 3.1: Gráfico da constante de normalização N_q da função $\varphi(x) = N_q \exp_q(i\kappa x)$ para diferentes valores de q no intervalo $]1,3[$.

Devido às propriedades da função q-exponencial de um argumento imaginário puro, a amplitude da onda q-plana para $1 < q < 3$ diminui quando a fase $(kx - \omega t)$ aumenta. Um dado sistema físico pode ser caracterizado por um simples valor de q. Se $1 < q < 3$, temos $\Phi(\pm\infty, t) = 0$ $(\forall t)$, e o valor do parâmetro q está associado à taxa de decaimento da amplitude da onda q-plana. Para $q = 1$, recuperamos as soluções usuais (ondas planas).

Ressaltamos ainda que configurações de campo com energia finita e localizadas, que se deslocam sem mudança no seu perfil e velocidade constante, são chamadas de ondas solitárias [141]. Desta forma, consideremos a situação particular da função de onda (3.19) com $x = ct$. Neste caso, temos $\Phi(x, t) = \Phi_0(\forall t)$, de modo que a onda q-plana comporta-se como uma onda solitária propagando-se com velocidade $c = \omega/k$. Isto permite que as ondas q-planas possam ser utilizadas na descrição de fenômenos não lineares nos quais a não deformação das ondas torna-se importante, *e.g.*, em óptica não linear e física de plasmas.

Analisemos a seguir mais algumas propriedades das ondas q-planas. Uma vez que a Eq. (3.18) corresponde a uma equação diferencial linear, tem-se que combinações lineares

$$\Phi(x, t) = \sum_j \Phi_{0j} \exp_{q_j}[i(kx - \omega t)], \tag{3.27}$$

também são soluções da Eq. (3.18) satisfazendo a mesma relação de dispersão $k = \omega/c$ para todas as ondas q-planas.

Outra importante característica das ondas q-planas está relacionada à sua extensão para um espaço de d dimensões, cuja expressão é

$$\Phi(\vec{x}, t) = \Phi_0 \exp_q[i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)], \tag{3.28}$$

que exibe uma invariância rotacional em virtude das propriedades do produto escalar $\vec{k} \cdot \vec{x} = \sum_{n=1}^{d} k_n x_n$.

Observando que $d \exp_q(z)/dz = [\exp_q(z)]^q$ e $d^2 \exp_q(z)/dz^2 = q[\exp_q(z)]^{2q-1}$, obtemos o seguinte laplaciano d-dimensional

$$\vec{\nabla}^2 \Phi(\vec{x}, t) = -q \left(\sum_{n=1}^{d} k_n^2 \right) \Phi_0 \{\exp_q[i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)]\}^{2q-1}. \tag{3.29}$$

Similarmente, temos que

$$\frac{\partial^2 \Phi(\vec{x}, t)}{\partial t^2} = -q\omega^2 \Phi_0 \{\exp_q[i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)]\}^{2q-1}. \tag{3.30}$$

A partir das equações (3.29) e (3.30), podemos observar que a onda q-plana dada por

(3.28) satisfaz a equação de onda linear d-dimensional

$$\vec{\nabla}^2\Phi(\vec{x},t) = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Phi(\vec{x},t)}{\partial t^2}, \tag{3.31}$$

com $k^2 = \sum_{n=1}^{d} k_n^2$, e relação de dispersão $\omega = ck$ independente do parâmetro q.

3.3 A equação de Schrödinger não linear NRT

Vimos na Seção anterior que as ondas q-planas (3.28) são soluções da usual equação de onda em um espaço de d dimensões (3.31). Para esta solução, a relação de dispersão $\omega = ck$ é satisfeita. A partir das hipóteses de de Broglie, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ e $E = \hbar\omega$, temos que as ondas q-planas satisfazem a equação de onda (3.31) e podem ser utilizadas para descrever partículas que obedecem a relação entre momento e energia $E = cp$, típica de partículas com massa de repouso nula $m = 0$ (*e.g.* fótons).

Para uma partícula não relativística de massa m, a energia total da partícula é $E = p^2/2m + V$, onde $V = V(\vec{x},t)$ é a energia potencial. A partir das relações de de Broglie, a relação de dispersão é

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m} + V. \tag{3.32}$$

Considerando que a função de onda q-plana (3.28) em um espaço d-dimensional é solução de uma equação de onda para um potencial constante $V(\vec{x},t) = V_0$, e preserva a relação de dispersão acima. Da Eq. (2.115), observemos que

$$\begin{aligned} -i\hbar\vec{\nabla}\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{\nu} &= -i\hbar\vec{\nabla}\{\exp_q[i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)]\}^{\nu} \\ &= \nu\hbar\vec{k}\{\exp_q[i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)]\}^{\nu+q-1} \\ &= \nu\hbar\vec{k}\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{\nu+q-1}, \end{aligned} \tag{3.33}$$

e

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{\nu} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\{\exp_q[i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)]\}^{\nu} \\ &= \nu(\nu+q-1)\frac{\hbar^2k^2}{2m}\{\exp_q[i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)]\}^{\nu+2q-2} \\ &= \nu(\nu+q-1)\frac{\hbar^2k^2}{2m}\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{\nu+2q-2}. \end{aligned} \tag{3.34}$$

Similarmente, temos que

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{\mu} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\{\exp_q[i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)]\}^{\mu} \\ &= \mu\hbar\omega\{\exp_q[i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)]\}^{\mu+q-1} \\ &= \mu\hbar\omega\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{\mu+q-1}. \end{aligned} \tag{3.35}$$

A partir da relação de dispersão $\hbar\omega = \hbar^2k^2/2m + V_0$, e das equações (3.34) e (3.35), podemos escrever

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{\mu} &= -\frac{\mu}{\nu(\nu+q-1)}\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{1-\nu+\mu-q}\vec{\nabla}^2\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{\nu} \\ &\quad +\mu V_0\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{\mu+q-1}. \end{aligned} \tag{3.36}$$

Considerando que a equação acima tenha os termos independentes da função de onda $\Phi(\vec{x},t)$, impõe-se $1-\nu+\mu-q=0$. Desta forma,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{\mu} = -\frac{\mu}{1+\mu-q}\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{1+\mu-q} + \mu V_0\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{\mu+q-1}. \tag{3.37}$$

Para $\mu = 1$, temos:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right] = -\frac{1}{2-q}\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{2-q} + V_0\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{q}. \tag{3.38}$$

Generalizando de um potencial constante V_0 para um potencial com dependência espacial e temporal $V(\vec{x},t)$, postula-se a seguinte equação de Schrödinger não linear [10]:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right] = -\frac{1}{2-q}\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{2-q} + V(\vec{x},t)\left[\frac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0}\right]^{q}. \tag{3.39}$$

Diferentemente do caso usual, esta equação de Schrödinger deformada, denominada de equação de Schrödinger não linear NRT, tem a função de onda escalonada pela amplitude Φ_0. Esta dependência da amplitude garante a dimensionalidade da equação de forma que todos os termos têm unidade de energia. Uma interpretação física da dependência insólita da Eq. (3.39) com a amplitude da função de onda merece ainda uma análise mais aprofundada. Outra característica desta equação está no fato dela não ser auto-adjunta. A equação de Schödinger usual (linear) é recuperada para $q = 1$, e a constante Φ_0 torna-se irrelevante. Como podemos notar, a equação de Schrödinger não linear NRT tem uma estrutura similar à equação de Fokker-Planck não linear (3.9) da qual está associada a mecânica estatística não extensiva.

Uma das consequências da equação de Schrödinger não linear NRT para partículas na

presença de um potencial externo $V(\vec{x},t) \neq 0$ é que as soluções não admitem a decomposição da função de onda em partes espacial e temporal do tipo $\Phi(\vec{x},t) = f(t)\varphi(\vec{x})$.

Notemos também que a não linearidade desta equação está presente nas potências da função de onda $\Phi(\vec{x},t)$, diferentemente da equação (3.7), onde um termo não linear foi adicionado aos dois termos lineares existentes. Além disso, diferentemente das soluções típicas de (3.7), as soluções de (3.39), expressa pelas ondas q-planas (3.28) no caso de um potencial constante, apresentam efeitos não lineares em ambos espaço e tempo, através de uma modulação destas duas variáveis, e na qual mantém para $1 < q < 3$ a norma de $\Phi(\vec{x},t)$ finita em todo espaço-tempo $(\vec{x},t)$.

3.4 Equação de Schrödinger não linear NRT em sistemas de coordenadas móveis

Seguindo [109], apresentamos uma revisão de literatura de como a solução de onda q-plana para a equação de Schrödinger NRT é transformada sobre dois tipos básicos de mudança de referencial. Iniciemos primeiramente investigando a transformação de Galileu, que conecta referenciais inerciais. Em seguida, analisamos o aspecto das soluções de ondas q-planas quando observadas através de um referencial uniformemente acelerado (referencial não inercial). Por simplicidade, consideremos o caso da equação de Schrödinger não linear unidimensional. A extensão destas ideias para o caso d-dimensional pode ser imediatamente obtida.

Consideremos a equação de Schrödinger não linear de uma partícula livre,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\left[\frac{\Psi(x',t')}{\Psi_0}\right] = -\frac{1}{2-q}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\left[\frac{\Psi(x',t')}{\Psi_0}\right]^{2-q}, \tag{3.40}$$

em relação a um referencial inercial caracterizado por coordenadas espaço-tempo (x',t'). Conforme vimos anteriormente, este sistema tem como solução a onda q-plana

$$\Psi(x',t') = \Psi_0 \exp_q[i(kx' - \omega t')]. \tag{3.41}$$

Seja a transformação de Galileu

$$t = t' \qquad \text{e} \qquad x = x' - vt', \tag{3.42}$$

que relaciona as coordenadas espaço-tempo (x',t') de um referencial inercial R' com as coordenadas (x,t) de um referencial inercial R que move-se em relação ao primeiro com velocidade v constante.

Para obtermos uma "nova" solução $\Phi(x,t)$ para a equação de Schrödinger não linear

NRT expressa em termos das coordenadas espaço-tempo (x,t), correspondente à "antiga" solução dada pela Eq. (3.41), poderia se pensar simplesmente que é apenas necessário aplicar a mudança de variáveis (3.42) em (3.41):

$$\begin{aligned}\Psi(x',t') \to \Phi(x,t) &= \Psi(x+vt,t) \\ &= \Phi_0 \exp_q\{i[k(x+vt)-\omega t]\}, \qquad \Phi_0 = \Psi_0. \end{aligned} \tag{3.43}$$

No entanto, este procedimento leva a uma solução que não satisfaz a equação de Schrödinger não linear NRT expressa em termos das novas variáveis (x,t). No caso usual $(q=1)$, por exemplo, esta transformação envolve não apenas a substituição de coordenadas (x',t') por (x,t) em (3.41), mas também uma transformação unitária de $\Psi(x',t')$, adicionando um termo de fase na nova função de onda $\Phi(x,t)$ (para mais detalhes vide página 246 da referência [139]). De fato, se considerarmos a transformação

$$\Psi(x',t') \to \Phi(x,t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(mvx+\frac{1}{2}mv^2t\right)\right]\Psi(x+vt,t), \tag{3.44}$$

temos que $\Phi(x,t)$ satisfaz a equação de Schrödinger usual $(q=1)$ no sistema de coordenadas espaço-tempo (x,t).

Desta forma, mostra-se que no caso da equação de Schrödinger não linear NRT, esta transformação entre as funções de onda nas coordenadas espaço-tempo (x',t') e (x,t) pode ser escrita curiosamente em termos de um q-produto (2.42c):

$$\frac{\Psi(x',t')}{\Psi_0} \to \frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0} = \left\{\exp_q\left[-\frac{i}{\hbar}\left(mvx+\frac{1}{2}mv^2t\right)\right]\right\} \otimes_q \left\{\frac{\Psi(x+vt,t)}{\Psi_0}\right\}, \tag{3.45}$$

onde o fator da Eq. (3.44) escrito em termos de uma função exponencial foi substituído por uma função q-exponencial. Analisando a transformação (3.45), temos que tomando o limite $q \to 1$, recuperamos a transformação unitária do caso usual (3.44).

Para o problema de uma partícula livre no sistema de coordenadas R', a transformação acima leva a

$$\begin{aligned}\frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0} &= \left\{\exp_q\left[-\frac{i}{\hbar}\left(mvx+\frac{1}{2}mv^2t\right)\right]\right\} \otimes_q \left\{\exp_q[ik(x+vt)-\omega t)]\right\} \\ &= \left\{1-i(1-q)\left[\omega t - k(x+vt)+\frac{1}{\hbar}\left(mvx+\frac{1}{2}mv^2t\right)\right]\right\}^{\frac{1}{1-q}} \\ &= \left\{1-i(1-q)\left[\left(\omega - kv + \frac{mv^2}{2\hbar}\right)t - \left(k-\frac{mv}{\hbar}\right)x\right]\right\}^{\frac{1}{1-q}}. \end{aligned} \tag{3.46}$$

A fim de darmos uma interpretação física para a solução (3.46), pode-se observar que esta tem a forma de uma onda q-plana com a frequência angular $\tilde{\omega}$ e o vetor de onda $\tilde{k}$ dados

respectivamente por

$$\tilde{\omega} = \omega - kv + \frac{mv^2}{2\hbar}, \qquad \text{e} \qquad \tilde{k} = k - \frac{mv}{\hbar}, \tag{3.47}$$

ou seja,

$$\Phi(x,t) = \Phi_0 \exp_q[i(\tilde{k}x - \tilde{\omega}t)], \tag{3.48}$$

e que satisfaz a equação de Schrödinger não linear NRT

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0}\right] = -\frac{1}{2-q}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0}\right]^{2-q}. \tag{3.49}$$

Conforme mostrado na Seção anterior, a solução da onda q-plana (3.46) para a equação de Schrödinger não linear NRT é compatível com as relações de de Broglie, conectando frequência à energia, e vetor de onda ao momento linear. De fato, combinando (3.47) e as relações de de Broglie $E = \hbar\omega$ e $p = \hbar k$, obtemos

$$\tilde{E} = E - pv + \frac{1}{2}mv^2 \qquad \text{e} \qquad \tilde{p} = p - mv, \tag{3.50}$$

que corresponden à transformação de Galileu para a energia cinética e momento linear de uma partícula não relativística cuja relação momento-energia é $E = p^2/2m$.

Consideremos agora um referencial uniformemente acelerado R em relação ao referencial inercial R'. A correspondente transformação de coordenadas espaço-tempo é

$$t = t' \qquad \text{e} \qquad x = x' - \frac{1}{2}at'^2 = x' - \frac{1}{2}\frac{F}{m}t'^2, \tag{3.51}$$

onde (x', t') são as variáveis associadas a um referencial inercial R', $a = F/m$ é a aceleração (constante) do referencial R cujas variáveis são (x, t).

Como fizemos anteriormente, assumimos que a equação de Schrödinger não linear NRT (3.40) torna-se válida no referencial (x', t'), e que neste sistema de coordenadas, o sistema é descrito pela solução de onda q-plana dada pela Eq. (3.41). Mais uma vez, se escrevermos $\Psi(x', t')$ diretamente em termos de (x, t), esta não satisfaz a equação de Schrödinger não linear NRT em relação às "novas" variáveis espaço-tempo.

Similar ao efeito de uma transformação galileliana (3.42) no caso usual ($q = 1$) da equação de Schrödinger, a transformação (3.51) envolve não apenas a substituição das variáveis (x', t') por (x, t) em (3.41), mas também uma transformação unitária sobre $\Psi(x', t')$ através de um termo de fase na nova função de onda $\Phi(x, t)$, dada por:

$$\Psi(x', t') \to \Phi(x, t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(Fxt + \frac{F^2t^3}{6m}\right)\right]\Psi\left(x + \frac{Ft^2}{2m}, t\right). \tag{3.52}$$

No caso geral, consideremos o seguinte *ansatz*:

$$\frac{\Psi(x',t')}{\Psi_0} \to \frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0} = \left\{ \exp_q \left[-\frac{i}{\hbar} \left(Fxt + \frac{F^2t^3}{6m} \right) \right] \right\} \otimes_q \left\{ \frac{\Psi\left(x + \frac{Ft^2}{2m}, t \right)}{\Psi_0} \right\}. \tag{3.53}$$

Para uma partícula livre no referencial R', a função de onda $\Psi(x',t')$ é dada pela onda q-plana (3.41), e assim:

$$\begin{aligned} \frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0} &= \left\{ \exp_q \left[-\frac{i}{\hbar} \left(Fxt + \frac{F^2t^3}{6m} \right) \right] \right\} \otimes_q \left(\exp_q \left\{ i \left[k \left(x + \frac{Ft^2}{2m} \right) - \omega t \right] \right\} \right) \\ &= \left\{ 1 - i(1-q) \left[\omega t - k \left(x + \frac{Ft^2}{2m} \right) + \frac{1}{\hbar} \left(Fxt + \frac{F^2t^3}{6m} \right) \right] \right\}^{\frac{1}{1-q}}. \end{aligned} \tag{3.54}$$

Notemos que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0} \right] = \left(\hbar\omega - \frac{\hbar k F t}{m} + Fx + \frac{F^2t^2}{2m} \right) \left[\frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0} \right]^q, \tag{3.55}$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2-q} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0} \right]^{2-q} = \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - \frac{\hbar k F t}{m} + Fx + \frac{F^2t^2}{2m} \right) \left[\frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0} \right]^q. \tag{3.56}$$

Da relação de dispersão $\hbar\omega = \hbar^2k^2/2m$ para uma partícula livre no sistema de referência R', e a partir das Eq.'s (3.55) e (3.56), podemos escrever a seguinte equação diferencial não linear para $\Phi(x,t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0} \right] = -\frac{1}{2-q} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0} \right]^{2-q} + V(x) \left[\frac{\Phi(x,t)}{\Phi_0} \right]^q. \tag{3.57}$$

Portanto, a Eq. (3.57) corresponde à equação de Schrödinger não linear NRT unidimensional para o potencial $V(x) = Fx$. Esta equação pode ser interpretada como a descrição do movimento de uma partćula de massa m sob uma força constante $-F$. Este resultado é consistente com o fato do comportamento de uma partícula livre em relação a um referencial uniformemente acelerado ser equivalente ao comportamento de uma partícula em relação a um referencial inercial movendo-se sob efeito de uma força constante.

No limite $F \to 0$, a Eq. (3.57) reduz-se à equação de Schrödinger não linear para uma partícula livre (3.49), e a solução (3.54) torna-se a onda q-plana $\Phi(x,t) = \Phi_0 \exp_q[i(kx - \omega t)]$. Para $q \to 1$, da Eq. (3.57) obtemos a equação de Schrödinger usual para uma partícula de massa m movendo-se sob uma força constante $-F$.

Estes mesmos resultados também são satisfeitos para uma partícula submetida a um potencial constante V_0 no referencial (x',t') cuja relação de dispersão é $\hbar\omega = \hbar k^2/2m + V_0$. Neste caso, o potencial da partícula no referencial R torna-se $V(x) = V_0 + Fx$.

Observamos nesta Seção algumas características da função de onda q-plana e a equação de Schrödinger não linear NRT para dois casos comuns de transformação entre referenciais móveis: primeiramente relacionando referenciais inerciais (transformação de Galileu), e em seguida os efeitos de um referencial acelerado em relação a um referencial inercial. Em ambos os casos, concluímos que a transformação $\Psi(x',t') \to \Phi(x,t)$ entre as funções de onda se dá de forma similar ao da equação de Schrödinger usual, mas com o produto do fator de módulo unitário $\exp[-if(x,t)/\hbar]$ substituído por um q-produto (2.42c) de função deformada $\exp_q[-if(x,t)/\hbar]$, onde $f(x,t)$ é uma função que depende do tipo de transformação entre o sistema de coordenadas: vide Eq.'s (3.45) e (3.53).

3.5 Teoria clássica de campos para a equação de Schrödinger não linear NRT

Sistemas contínuos, como ondas mecânicas, eletromagnéticas ou de matéria, apresentam um número infinito de graus de liberdade e são descritos por campos. A dinâmica destes sistemas podem ser descritas através da teoria clássica de campos[3] pelos formalismos de Lagrange ou Hamilton [141, 142]. Por sua vez, as interações das partículas elementares, constituintes básicas da matéria, podem ser expressas por meio da teoria quântica de campos, que é um referencial teórico que agrega os conceitos de relatividade restrita e mecânica quântica [143]. Neste formalismo, as partículas são descritas como excitações de campos quantizados no espaço-tempo, e recebem o nome de *quanta de excitação*. A construção das teorias quânticas das interações fundamentais da natureza depende crucialmente da possibilidade de primeiro formulá-las como teoria clássicas de campos nas linguagens lagrangiana e hamiltoniana.

Nesta Seção, apresentamos uma revisão de literatura de uma teoria clássica de campos associada à equação de Schrödinger não linear NRT (3.39). Esta formulação foi inicialmente proposta por Nobre *et al.* [108], e restringia-se ao caso de partícula sob um potencial nulo. Plastino *et al.* [113] complementaram em seguida esta formulação para uma partícula submetida a um potencial não nulo.

Consideremos uma partícula de massa m confinada em um volume finito $\mathcal{V}$. Desta forma, para a constante Φ_0 que garante a dimensionalidade correta dos termos da equação (3.39), temos $\Phi_0 = (1/\sqrt{\mathcal{V}})$. Portanto, pode-se definir uma função adimensional $\bar{\Phi}(\vec{x},t) = \Phi(\vec{x},t)/\Phi_0$, cuja solução para a equação de Schrödinger não linear NRT de uma partícula

[3] Alguns autores utilizam simplesmente o termo "teoria de campos" (*field theory*, veja por exemplo [140]). Aqui seguiremos o termo "teoria clássica de campos" (*classical field theory*) conforme utilizado nas referências [108, 112].

sujeita a um potencial constante $V(\vec{x},t)=V_0$ é a onda q-plana

$$\bar{\Phi}(\vec{x},t)=\exp_q[i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)]. \tag{3.58}$$

Conforme será mostrado adiante, diferentemente do caso usual $q=1$, a aplicação das equações de Euler-Lagrange usuais para uma densidade lagrangiana escrita em termos dos campos $\bar{\Phi}(\vec{x},t)$ e $\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)$ não resulta nas equações de Schrödinger não linear NRT para estes campos. Por esta razão, propõe-se campos adicionais $\bar{\Psi}(\vec{x},t)$ e $\bar{\Psi}^*(\vec{x},t)$, onde $\bar{\Psi}(\vec{x},t)=\Psi(\vec{x},t)/\Psi_0$, com $\Psi_0=1/\sqrt{\mathcal{V}}=\Phi_0$.

As equações de movimento destes campos são obtidas a partir da aplicação das equações de Euler-Lagrange sobre uma densidade lagrangiana $\mathcal{L}$ que depende dos campos adimensionais $\bar{\Phi}(\vec{x},t)$ e $\bar{\Psi}(\vec{x},t)$, seus complexos conjugados, suas derivadas espaciais e temporais, e das coordenadas espacial-temporal $(\vec{x},t)$:

$$\mathcal{L}=\mathcal{L}\left(\bar{\Phi},\vec{\nabla}\bar{\Phi},\partial_t\bar{\Phi},\bar{\Psi},\vec{\nabla}\bar{\Psi},\partial_t\bar{\Psi},\bar{\Phi}^*,\vec{\nabla}\bar{\Phi}^*,\partial_t\bar{\Phi}^*,\bar{\Psi}^*,\vec{\nabla}\bar{\Psi}^*,\partial_t\bar{\Psi}^*,\vec{x},t\right). \tag{3.59}$$

Considerando heuristicamente a densidade lagrangiana

$$\begin{aligned}\mathcal{L} \;=\; & A\Big\{i\hbar\bar{\Psi}(\vec{x},t)\partial_t\bar{\Phi}(\vec{x},t)-i\hbar\bar{\Psi}^*(\vec{x},t)\partial_t\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)\\ & -\frac{\hbar^2}{2m}[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{1-q}[\vec{\nabla}\bar{\Psi}(\vec{x},t)]\cdot[\vec{\nabla}\bar{\Phi}(\vec{x},t)]-\frac{\hbar^2}{2m}[\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)]^{1-q}[\vec{\nabla}\bar{\Psi}^*(\vec{x},t)]\cdot[\vec{\nabla}\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)]\\ & -V(\vec{x},t)\bar{\Psi}(\vec{x},t)[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^q-V(\vec{x},t)\bar{\Psi}^*(\vec{x},t)[\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)]^q\Big\},\end{aligned} \tag{3.60}$$

onde $A\equiv 1/(2q\mathcal{V})$ é uma constante multiplicativa, pode-se construir uma ação clássica, da qual ao ser extremizada leva às equações de Euler-Lagrange para cada campo. Neste caso, para o campo $\bar{\Psi}$ temos que a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\bar{\Psi}}-\vec{\nabla}\cdot\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\vec{\nabla}\bar{\Psi})}\right]-\partial_t\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\bar{\Psi})}\right]=0, \tag{3.61}$$

nos leva a

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\bar{\Phi}(\vec{x},t)}{\partial t} \;=\; & -\frac{\hbar^2}{2m}(1-q)[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{-q}[\vec{\nabla}\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^2\\ & -\frac{\hbar^2}{2m}[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{1-q}\vec{\nabla}^2\bar{\Phi}(\vec{x},t)+V(\vec{x},t)[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^q,\end{aligned} \tag{3.62}$$

e que corresponde à Eq. (3.39) para o campo $\bar{\Phi}(x,t)$, *i.e.*,

$$i\hbar\frac{\partial\bar{\Phi}(\vec{x},t)}{\partial t}=-\frac{1}{2-q}\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\left[\bar{\Phi}(\vec{x},t)\right]^{2-q}+V(\vec{x},t)\left[\bar{\Phi}(\vec{x},t)\right]^q. \tag{3.63}$$

Similarmente, para o campo $\bar{\Phi}$ temos que a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\Phi}} - \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \bar{\Phi})} \right] - \partial_t \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \bar{\Phi})} \right] = 0 \tag{3.64}$$

resulta em

$$i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}(\vec{x},t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} [\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{1-q} \vec{\nabla}^2 \bar{\Psi}(\vec{x},t) - qV(\vec{x},t)[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{q-1}[\bar{\Psi}(\vec{x},t)], \tag{3.65}$$

e com correspondentes equações complexas conjugadas (3.63) e (3.65) para os campos $\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)$ e $\bar{\Psi}^*(\vec{x},t)$. Notemos que as Eq.'s (3.62) e (3.65) apresentam uma assimetria dependente de q em relação ao termo de energia potencial. Em termos dos campos $\Phi(\vec{x},t)$ e $\Psi(\vec{x},t)$, temos portanto que a descrição quântica de um sistema físico é dada através das equações acopladas

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t} \left[\dfrac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0} \right] &= -\dfrac{1}{2-q} \dfrac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \left[\dfrac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0} \right]^{2-q} + V(\vec{x},t) \left[\dfrac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0} \right]^{q}, \\ i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t} \left[\dfrac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0} \right] &= \dfrac{\hbar^2}{2m} \left[\dfrac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0} \right]^{1-q} \vec{\nabla}^2 \left[\dfrac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0} \right] \\ & \quad -qV(\vec{x},t) \left[\dfrac{\Phi(\vec{x},t)}{\Phi_0} \right]^{q-1} \left[\dfrac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0} \right], \end{cases} \tag{3.66}$$

e suas respectivas equações complexas conjugadas. Observa-se que a Eq. (3.65) é apenas o complexo conjugado da Eq. (3.63), *i.e.*, $\Psi(\vec{x},t) = \Phi^*(\vec{x},t)$, para $q = 1$. Por outro lado, para $q \neq 1$, tem-se que $\Psi(\vec{x},t)$ difere de $\Phi^*(\vec{x},t)$, e com os campos acoplados pela Eq. (3.65).

A partir da lagrangiana (3.60), os momentos canônicos conjugados aos campos descritos acima são

$$\begin{aligned} \Pi_{\bar{\Phi}} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \bar{\Phi})} = i\hbar A \bar{\Psi}, & \Pi_{\bar{\Phi}^*} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \bar{\Phi}^*)} = -i\hbar A \bar{\Psi}^*, \\ \Pi_{\bar{\Psi}} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \bar{\Psi})} = 0, & \Pi_{\bar{\Psi}^*} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \bar{\Psi}^*)} = 0. \end{aligned} \tag{3.67}$$

Segue que a densidade hamiltoniana é

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \Pi_{\bar{\Phi}} \partial_t \bar{\Phi} + \Pi_{\bar{\Phi}^*} \partial_t \bar{\Phi}^* + \Pi_{\bar{\Psi}} \partial_t \bar{\Psi} + \Pi_{\bar{\Psi}^*} \partial_t \bar{\Psi}^* - \mathcal{L} \\ &= A \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ [\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{1-q} [\vec{\nabla} \bar{\Psi}(\vec{x},t)] \cdot [\vec{\nabla} \bar{\Phi}(\vec{x},t)] + [\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)]^{1-q} [\vec{\nabla} \bar{\Psi}^*(\vec{x},t)] \cdot [\vec{\nabla} \bar{\Phi}^*(\vec{x},t)] \right\} \\ &\quad + A \left\{ V(\vec{x},t) \bar{\Psi}(\vec{x},t) [\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^q + V(\vec{x},t) \bar{\Psi}^*(\vec{x},t) [\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)]^q \right\}. \end{aligned} \tag{3.68}$$

Como uma aplicação, consideremos uma partícula sujeita a um potencial constante $V(\vec{x},t) = V_0$. Substituindo a solução da Eq. (3.63), *i.e.*, a função de onda (3.58) na

Eq. (3.65), obtemos que:

$$\bar{\Psi}(\vec{x},t) = \{\exp_q[i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)]\}^{-q} = [\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{-q}. \tag{3.69}$$

Neste caso, as soluções das Eq.'s (3.58) e (3.69) para este problema satisfazem as propriedades:

$$[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{1-q}[\vec{\nabla}\bar{\Psi}(\vec{x},t)]\cdot[\vec{\nabla}\bar{\Phi}(\vec{x},t)] = [\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)]^{1-q}[\vec{\nabla}\bar{\Psi}^*(\vec{x},t)]\cdot[\vec{\nabla}\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)] = q\sum_i k_i^2 = qk^2, \tag{3.70a}$$

e

$$[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^q\bar{\Psi}(\vec{x},t) = [\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)]^q\bar{\Psi}^*(\vec{x},t) = 1. \tag{3.70b}$$

Portanto, utilizando a Eq. (3.68) e as propriedades (3.70), a energia total do sistema torna-se

$$E = \int \mathcal{H}d\mathcal{V} = \frac{\hbar^2k^2}{2m} + V_0, \tag{3.71}$$

que, independentemente do valor de q, corresponde a energia espectral de uma partícula sujeita a um potencial constante V_0.

Definindo a densidade do momento linear por

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{P}} &= \frac{1}{2\mathcal{V}}\left\{-i\hbar[\vec{\nabla}\bar{\Phi}(\vec{x},t)]\bar{\Psi}(\vec{x},t) + i\hbar[\vec{\nabla}\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)]\bar{\Psi}^*(\vec{x},t)\right\} \\ &= -q\left\{\Pi_{\bar{\Phi}}\vec{\nabla}\bar{\Phi}(\vec{x},t) + \Pi_{\bar{\Phi}^*}\vec{\nabla}\bar{\Phi}^*(\vec{x},t)\right\},\end{aligned} \tag{3.72}$$

esta preserva propriedades similares à densidade hamiltoniana, ou seja, usando a propriedade

$$-q\Pi_{\bar{\Phi}}\vec{\nabla}\bar{\Phi}(\vec{x},t) = -q\Pi_{\bar{\Phi}^*}\vec{\nabla}\bar{\Phi}^*(\vec{x},t) = \frac{\hbar\vec{k}}{2\mathcal{V}}, \tag{3.73}$$

temos o momento linear total

$$\vec{p} = \int \vec{\mathcal{P}}d\mathcal{V} = \hbar\vec{k}. \tag{3.74}$$

As Eq.'s (3.71) e (3.74) nos mostram que apesar da não linearidade das Eq.'s (3.66) aplicadas a uma partícula submetida a um potencial constante $V(\vec{x},t) = V_0$, a energia e o momento linear preservam a mesma forma para todos os valores de q. No entanto, os aspectos não lineares das Eq.'s (3.66) manifestam-se na forma da função de onda é descrita por meio de dois campos acoplados escritos como funções de onda q-planas.

Consistente com as propriedades descritas acima, define-se uma densidade de probabilidade para encontrar a partícula no instante de tempo t, em uma posição $\vec{x}$, e dentro

de um volume finito $d\mathcal{V}$, por

$$\rho(\vec{x},t)=\frac{1}{2\mathcal{V}}[\bar{\Phi}(\vec{x},t)\bar{\Psi}(\vec{x},t)+\bar{\Phi}^{*}(\vec{x},t)\bar{\Psi}^{*}(\vec{x},t)], \tag{3.75}$$

para qualquer valor de q. No caso particular de uma partícula sob potencial constante, cujos campos são dados pelas Eq.'s (3.58) e (3.69), a densidade de probabilidade (3.75) é dada por $\rho(\vec{x},t)=1/\mathcal{V}$, idêntico ao que acontece no caso $q=1$, e normalizada para um volume $\mathcal{V}$ como esperado.

A partir da derivada temporal de $\rho(\vec{x},t)$, temos:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\rho(\vec{x},t)}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2\mathcal{V}}\left[\frac{\partial\bar{\Phi}(\vec{x},t)}{\partial t}\bar{\Psi}(\vec{x},t)+\bar{\Phi}(\vec{x},t)\frac{\partial\bar{\Psi}(\vec{x},t)}{\partial t}\right. \\ &\quad \left.\frac{\partial\bar{\Phi}^{*}(\vec{x},t)}{\partial t}\bar{\Psi}^{*}(\vec{x},t)+\bar{\Phi}^{*}(\vec{x},t)\frac{\partial\bar{\Psi}^{*}(\vec{x},t)}{\partial t}\right]. \end{aligned} \tag{3.76}$$

Substituindo as Eq.'s (3.63) e Eq.'s (3.65) na equação acima, pode-se escrever a seguinte equação de balanço

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{J}=R, \tag{3.77}$$

onde a densidade de corrente $\vec{J}$ é dada por

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \frac{i\hbar}{4m\mathcal{V}}\Big\{-[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{1-q}[\vec{\nabla}\bar{\Phi}(\vec{x},t)]\bar{\Psi}(\vec{x},t)+[\bar{\Phi}^{*}(\vec{x},t)]^{1-q}[\vec{\nabla}\bar{\Phi}^{*}(\vec{x},t)]\bar{\Psi}^{*}(\vec{x},t) \\ &\quad +[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{2-q}[\vec{\nabla}\bar{\Psi}(\vec{x},t)]-[\bar{\Phi}^{*}(\vec{x},t)]^{2-q}[\vec{\nabla}\bar{\Psi}^{*}(\vec{x},t)]\Big\}, \end{aligned} \tag{3.78}$$

e

$$\begin{aligned} R &= \frac{i(1-q)\hbar}{4m\mathcal{V}}\Big\{[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{1-q}[\vec{\nabla}\bar{\Phi}(\vec{x},t)]\cdot[\vec{\nabla}\bar{\Psi}(\vec{x},t)] \\ &\quad -[\bar{\Phi}^{*}(\vec{x},t)]^{1-q}[\vec{\nabla}\bar{\Phi}^{*}(\vec{x},t)]\cdot[\vec{\nabla}\bar{\Psi}^{*}(\vec{x},t)]\Big\} \\ &\quad +\frac{(1-q)}{2i\hbar\mathcal{V}}\left\{[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{q}\bar{\Psi}(\vec{x},t)-[\bar{\Phi}^{*}(\vec{x},t)]^{q}\bar{\Psi}^{*}(\vec{x},t)\right\}V(\vec{x},t). \end{aligned} \tag{3.79}$$

Conforme podemos observar, a equação de balanço (3.77) tem a forma de uma equação de continuidade para $q=1$. De fato, quando o termo anômolo R é diferente de zero, a densidade de probabilidade $\rho(\vec{x},t)$ não é conservada. No entanto, para soluções em que

$$[\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{1-q}[\vec{\nabla}\bar{\Phi}(\vec{x},t)]\cdot[\vec{\nabla}\bar{\Psi}(\vec{x},t)]\in\mathbb{R} \qquad \text{e} \qquad [\bar{\Phi}(\vec{x},t)]^{q}\Psi(\vec{x},t)\in\mathbb{R}, \tag{3.80}$$

tem-se $R=0$, e a conservação da probabilidade é satisfeita independente do valor de q. Para o caso de uma partícula em um potencial constante, esta condição é satisfeita pelas propriedades (3.70) das soluções (3.58) e (3.69). Desde que estamos tratando com equações não lineares, que apresentam geralmente mais do que uma solução, algumas

outras possíveis soluções podem não satisfazer a condição dada pela Eq. (3.80), da qual é imediatamente satisfeita para o caso usual $q = 1$.

Para os casos em que as condições (3.80) são satisfeitas, a equação de balanço pode ser escrita na forma da equação de continuidade usual

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0, \tag{3.81}$$

mas com as densidades de probabilidade e de corrente dadas pelas Eq.'s (3.75) e (3.78), respectivamente. Conforme pode ser visto, as definições acima para $\rho(\vec{x}, t)$ e $\vec{J}(\vec{x}, t)$ recuperam o caso usual para $q = 1$, *i.e.*, $\rho(\vec{x}, t) = \Phi^*(\vec{x}, t)\Phi(\vec{x}, t)$ e

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2im}\left[\Phi^*(\vec{x}, t)\vec{\nabla}\Phi(\vec{x}, t) - \Phi(\vec{x}, t)\vec{\nabla}\Phi^*(\vec{x}, t)\right]. \tag{3.82}$$

Portanto, de acordo com o que foi exposto, concluímos que os resultados acima mostram que a equação de Schrödinger não linear NRT apesar de apresentar, para $1 < q < 3$, modulação e uma integral finita para o produto $\Phi^*(\vec{x}, t)\Phi(\vec{x}, t)$ sobre o espaço, não se pode aplicar a propriedade de partículas localizadas através da função de onda. De fato, mostra-se que é importante considerar uma densidade de probabilidade $\rho(\vec{x}, t)$ definida por (3.75) em termos dos campos acoplados $\Phi(\vec{x}, t)$, $\Psi(\vec{x}, t)$, e de seus respectivos complexos conjugados, cujas equações de movimento são dadas por (3.66) e pelas suas equações complexas conjugadas. Para soluções de uma partícula submetida a potencial constante em um volume $\mathcal{V}$, temos $\rho(\vec{x}, t) = 1/\mathcal{V}$, similar ao que acontece no caso usual $q = 1$.

3.6 Estados estacionários para uma partícula em um potencial quadrado infinito

De modo geral, considerando um potencial independente do tempo $V(x)$, a resolução da equação de Schrödinger linear (1.1) é realizada através da aplicação do método de separação de variáveis temporal e espacial, e permite determinar os estados estacionários, *i.e.*, estados na qual a densidade de probabilidade não depende do tempo. Por outro lado, conforme vimos para uma partícula em um potencial externo, as soluções da equação de Schrödinger não linear NRT (3.39) não podem ser separadas em partes espacial e temporal como no caso usual ($q = 1$). No entanto, uma exceção é o problema do poço quadrado infinito unidimensional, conforme resolvido em [113], e que revisitaremos a seguir.

Consideremos primeiramente uma partícula submetida a um potencial nulo, onde as Eq.'s (3.66) para $\Phi(x, t) = f(t)\varphi(x)$ e $\Psi(x, t) = g(t)\psi(x)$ podem ser escritas na forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m(2-q)}\frac{\varphi_0}{\varphi(x)}\frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{\varphi(x)}{\varphi_0}\right]^{2-q} = i\hbar\left[\frac{f_0}{f(t)}\right]^{2-q}\frac{d}{dt}\left[\frac{f(t)}{f_0}\right] = \epsilon, \tag{3.83a}$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_0}{\psi(x)}\left[\frac{\varphi(x)}{\varphi_0}\right]^{1-q}\frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{\psi(x)}{\psi_0}\right]=-i\hbar\left[\frac{g_0}{g(t)}\right]^{1-q}\frac{\psi_0}{\psi(t)}\frac{d}{dt}\left[\frac{g(t)}{g_0}\right]=\chi, \tag{3.83b}$$

onde ϵ, χ, φ_0, ψ_0, f_0 e g_0 são constantes.

Para $\chi=\epsilon$, obtém-se $[\psi(x)/\psi_0]=[\varphi(x)/\varphi_0]^{-1}$ e $[g(t)/g_0]=[f(t)/f_0]^{-1}$, cuja densidade de probabilidade $\rho(x,t)$, definida por (3.75), associada a este caso é constante para todos os valores de q.

A extensão destes resultados para o caso d-dimensional também pode ser verificada. As soluções da equação de Schrödinger não linear NRT em um espaço d-dimensional também pode ser decomposta em fatores espacial e temporal. Porém, a parte espacial da função de onda não pode ser decomposta em d diferentes componentes para cada uma das coordenadas, como é possível no caso usual. No caso d-dimensional, temos que a densidade de probabilidade para estados estacionários é $\rho(\vec{x},t)=1/\mathcal{V}$, onde $\mathcal{V}$ é o volume onde a partícula está confinada.

Da Eq. (3.83a), podemos escrever que

$$\frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{\varphi(x)}{\varphi_0}\right]^{2-q}+\frac{2m\epsilon(2-q)}{\hbar^2}\left[\frac{\varphi(x)}{\varphi_0}\right]=0, \tag{3.84}$$

e

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{f(t)}{f_0}\right]+\frac{i\epsilon}{\hbar}\left[\frac{f(t)}{f_0}\right]^{2-q}=0. \tag{3.85}$$

A partir de um cálculo direto, as Eq. (3.84) e (3.85) possuem soluções dadas respectivamente por:

$$\varphi(x)=\varphi_0\exp_{(q+1)/2}\left[i\sqrt{\frac{4m\epsilon}{(3-q)\hbar^2}}x\right], \tag{3.86}$$

e

$$f(t)=f_0\exp_{2-q}(-i\epsilon t/\hbar). \tag{3.87}$$

Desta forma, levando em conta as soluções (3.86) e (3.87), obtém-se que:

$$\Phi(x,t)=\Phi_0\left[\frac{1+(1-q)ikx\sqrt{\frac{2}{3-q}}-(1-q)^2\frac{k^2x^2}{2(3-q)}}{1+i(1-q)\frac{i\epsilon t}{\hbar}}\right]^{1/(1-q)}, \tag{3.88}$$

e que tem a forma de uma onda q-plana (3.19) no limite $(1-q)\to 0$.

Consideremos o problema de uma partícula confinada em um poço de potencial quadrado infinito cuja energia potencial é dada por

$$V(x)=\begin{cases}0, & 0\le x\le L\\ \infty, & \text{outros valores}\end{cases} \tag{3.89}$$

As condições de contorno deste problema asseguram que $\varphi(x)$ deve ser um número real, diferentemente da solução Eq. (3.86) que consequentemente não pode ser aplicada ao potencial $V(x)$ acima. Por outro lado, uma vez que a Eq. (3.84) é não linear, temos que o princípio da superposição não pode ser aplicado. Uma alternativa é escrever $\varphi(x)$ como uma família de soluções, na qual através da definição $\phi(x) = [\varphi(x)/\varphi_0]^{3-q}$, tem-se que

$$\frac{d\phi(x)}{dx} = \sqrt{2\left\{1 - \frac{2m\epsilon(2-q)^2[\phi(x)]^{(3-q)/(2-q)}}{(3-q)\hbar^2}\right\}}. \tag{3.90}$$

Podemos utilizar esta última expressão para escrever

$$\sqrt{2}\left[\frac{2m\epsilon(2-q)^2}{(3-q)\hbar^2}\right]^{(2-q)/(3-q)} x + \delta = \int_0^{\phi/A_q} \frac{dz}{\sqrt{1-z^{(3-q)/(2-q)}}}, \tag{3.91}$$

onde A_q e δ são constantes de integração e $|z| < 1$. Em [113], foi definido a seguinte generalização da função arco-seno:

$$u \equiv \mathrm{SEN}_q^{-1}(y) = \int_0^y \frac{dz}{\sqrt{1-z^{(3-q)/(2-q)}}}, \tag{3.92}$$

pode-se escrever uma função trigonométrica deformada $y(u) = \mathrm{SEN}_q(u)$ da qual possui período $4\tau_q$, onde

$$\begin{aligned} \tau_q &= \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{1-z^{(3-q)/(2-q)}}} \\ &= \frac{(2-q)\Gamma\left(\frac{2-q}{3-q}\right)}{(3-q)\Gamma\left(\frac{7-3q}{6-2q}\right)}. \end{aligned} \tag{3.93}$$

A função $\mathrm{SEN}_q(u)$ é uma generalização da função trigonométrica $\mathrm{sen}(u)$, da qual é recuperarada no limite $q = 1$, *i.e.*, $\mathrm{SEN}_1(u) = \mathrm{sen}(u)$. Pode-se observar que esta generalização difere das funções deformadas que discutimos na Seção 2.6. Temos que $|\mathrm{SEN}_q(u)| \leq 1$ para $1 \leq q < 2$, conforme pode ser visto na Figura 3.2, onde mostra-se a função $\mathrm{SEN}_q(u)$ para diferentes valores de q. A Figura 3.3 ilustra a grandeza τ_q associada ao período da função $\mathrm{SEN}_q(u)$. Pode-se também definir funções trigonométricas generalizadas $\mathrm{COS}_q(u)$ e $\mathrm{TAN}_q(u)$, onde $\mathrm{SEN}_q^2(u) + \mathrm{COS}_q^2(u) = 1$ e $\mathrm{TAN}_q(u) = \mathrm{SEN}_q(u)/\mathrm{COS}_q(u)$.

Considerando

$$k_q \equiv \sqrt{2}\left[\frac{2m\epsilon(2-q)^2}{(3-q)\hbar^2}\right]^{(2-q)/(3-q)}, \tag{3.94}$$

das Eq.'s (3.91) e (3.92) temos que $(k_q x + \delta) = \mathrm{SEN}_q^{-1}[\phi(x)/A_q]$, ou ainda, $\phi(x) = A_q \mathrm{SEN}_q(k_q x + \delta)$, e a solução estacionária para a equação de Schrödinger não linear

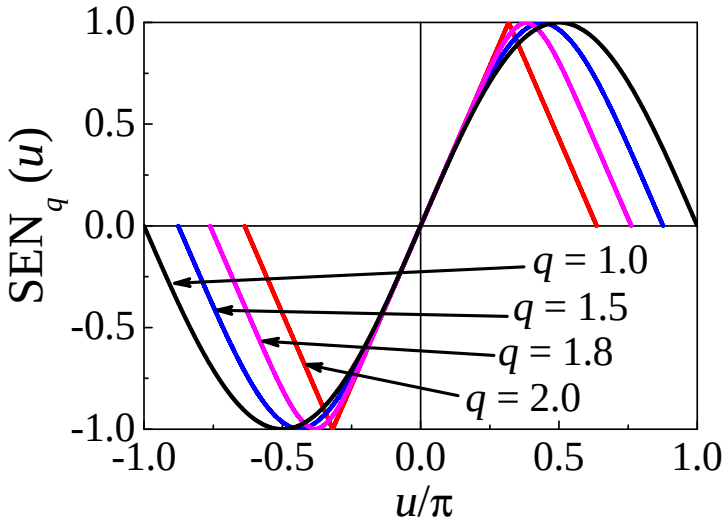


Figura 3.2: Função trigonométrica generalizada $\mathrm{SEN}_q(u)$ definida pela Eq. (3.92) para valores $q = 1.0, 1.5, 1.8$ e 2.0, de modo que u é mostrado no intervalo $u \in [-2\tau_q, 2\tau_q]$ em cada caso.

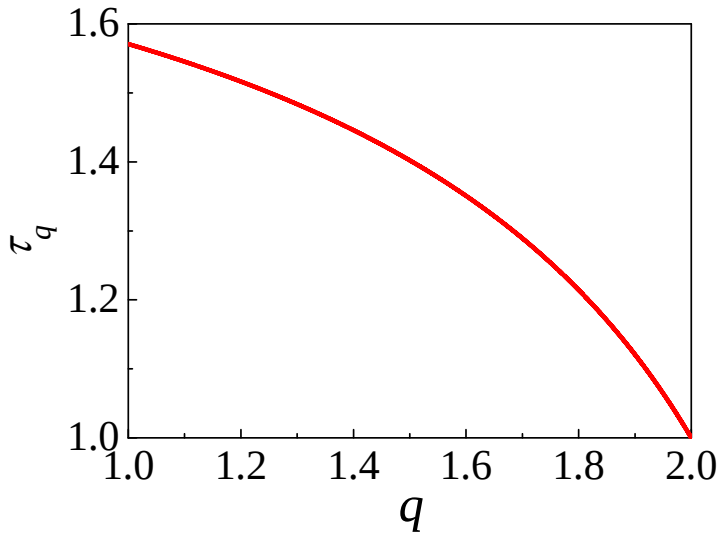


Figura 3.3: Grandeza adimensional τ_q definida pela Eq. (3.93), associada a periodocidade da função $\mathrm{SEN}_q(u)$ (na qual apresenta período $4\tau_q$), é mostrada no intervalo $1 \leq q < 2$, tal que como casos particulares temos $\tau_1 = \pi/2$ e $\tau_2 = 1$.

NRT pode ser escrita como

$$\varphi(x) = \varphi_0[A_q \mathrm{SEN}_q(k_q x + \delta)]^{1/(2-q)}. \tag{3.95}$$

Pelas condições de contorno $\varphi(0) = \varphi(L) = 0$, temos que $\delta = 0$ e $k_q L = 2\tau_q n$, onde $n = 1, 2, 3, ..$ são os números quânticos que especificam o estado do sistema. Portanto, podemos escrever

$$\varphi(x) = \varphi_{n,q}(x) = \left[\tilde{A}_{q,n} \mathrm{SEN}_q\left(\frac{2n\tau_q x}{L}\right)\right]^{1/(2-q)}, \tag{3.96}$$

e que

$$\epsilon_n(q) = \frac{(3-q)\hbar^2}{2m(2-q)^2}\left(\frac{\sqrt{2}n\tau_q}{L}\right)^{(3-q)/(2-q)}. \tag{3.97}$$

A Eq. (3.97) é uma generalização dos níveis de energia de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito, onde $\epsilon_n(1) = \pi^2\hbar^2n^2/2mL^2$. Na Figura 3.4 é mostrada a grandeza adimensional $\eta_n(q) \equiv [\epsilon_n(q)/\epsilon_n(1)]L^{(7-3q)/(2-q)}$ em função do parâmetro q para números quânticos $n = 1, 2, ..., 5$. Podemos observar que $\epsilon_n(q)$ aumenta à medida que n aumenta para qualquer que seja o valor de q. Porém, para $q = 2$, $\epsilon_n(q)$ diverge para todos os valores de n.

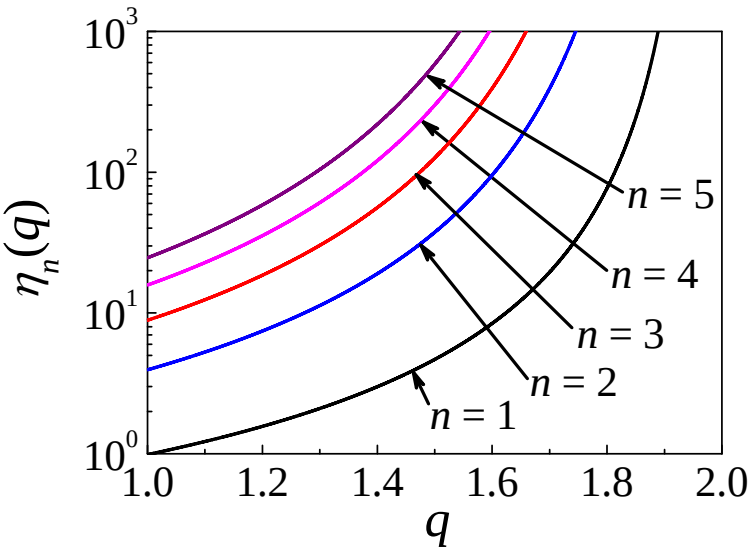


Figura 3.4: Grandeza adimensional $\eta_n(q) = \epsilon_n(q)/\epsilon_n(1)L^{(7-3q)/(2-q)}$, associada à solução da equação de Schrödinger não linear NRT para o problema de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito unidimensional de largura L. A figura ilustra $\eta_n(q)$ para números quânticos $n = 1, 2, ..., 5$.

O campo $\psi(x)$ é obtido substituindo a solução $\varphi(x)$ dada pela Eq. (3.96) em (3.83b). Escolhendo $\chi = (2-q)\epsilon$, obtém-se que

$$\psi(x) = [\varphi(x)]^{2-q}. \tag{3.98}$$

Para estas soluções, a densidade de probabilidade (3.75) torna-se:

$$\rho(x) = \frac{\mathrm{Re}\left\{[\mathrm{SEN}_q(2n\tau_q x/L)]^{(3-q)/(2-q)}\right\}}{L\int_0^L \mathrm{Re}\left\{[\mathrm{SEN}_q(2n\tau_q x/L)]^{(3-q)/(2-q)}\right\}dx}. \tag{3.99}$$

Na Figura 3.5 é apresentada a densidade de probabilidade $\rho(x)$ para uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito de largura L nos casos (a) $n = 1$ e (b) $n = 2$ para valores de $q = 1$, 1.3 e 1.5. Para $n = 1$, $\rho(x)$ é simétrica em torno de $x = L/2$, e

possui um máximo neste ponto que torna-se mais acentuado para maiores valores de q no intervalo $]1, 2[$. Para $n = 2$, a correspondente densidade de probabilidade é nula em $x = L/2$ e simétrica em torno deste ponto com máximos em $x = L/4$ e $x = 3L/4$. Observa-se também que para maiores valores de q no intervalo $]1, 2[$, a densidade de probabilidade $\rho(x)$ torna-se mais acentuada em torno dos pontos de máximo, uma consequência da não linearidade do sistema. A aplicação deste formalismo pode ser útil em sistemas em que as partículas nos níveis de baixa energia possuem a mesma probabilidade para serem encontradas em diferentes regiões e simetricamente localizadas em torno de uma região central.

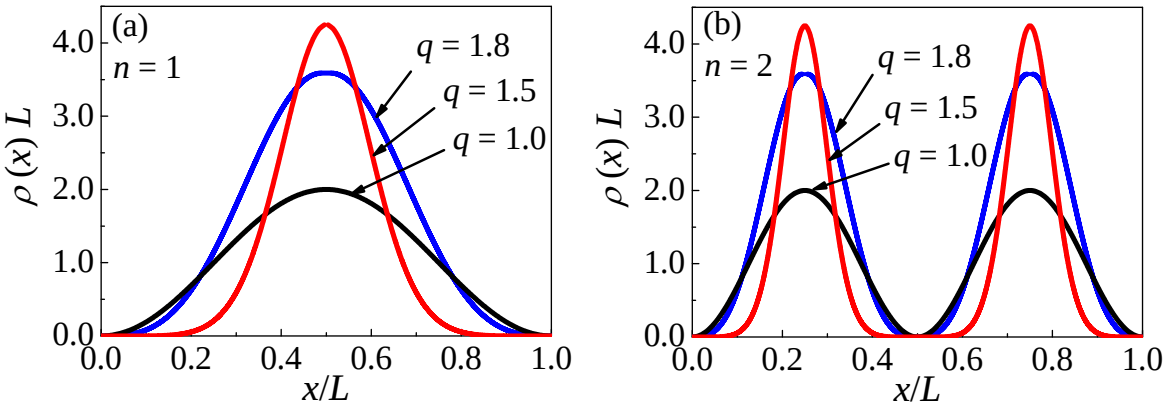


Figura 3.5: Densidade de probabilidade $\rho(x)$ para uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito de largura L e para valores $q = 1.0$, 1.5 e 1.8 nos estados (a) $n = 1$ e (b) $n = 2$. Em (a), todas as densidades de probabilidade tem um máximo em $x = L/2$ e apresentam uma simetria em torno deste ponto. Em (b), a simetria é preservada em torno de $x = L/2$ onde $\rho(x)$ é nulo neste ponto, e apresentam máximos em $x = L/4$ e $x = 3L/4$.

É importante ressaltar que a função $\rho(x)$ seja positiva para poder ser interpretada como uma densidade de probabilidade. Da Eq. (3.99), para $1 < q < 4/3$, temos que $\mathrm{Re}\{[\mathrm{SEN}_q(2n\tau_q x/L)]^{(3-q)/(2-q)}\} > 0$, e consequentemente $\rho(x) > 0$. Esta condição também pode ser satisfeita para outros valores de q fora deste intervalo devido às propriedades de potenciação de números complexos. Por outro lado, para $4/3 < q < 2$, temos que $\rho(x) < 0$, o que representa situações que merecem ainda uma análise mais aprofundada. Conforme os autores de [113] afirmam, tais casos podem ser comparados ao comportamento das funções de Wigner, que são uma ferramenta importante para estudar a mecânica quântica no espaço de fase. As funções de Wigner podem assumir valores negativos, portanto não podem ser consideradas como distribuições de probabilidade simples, e portanto são denominadas de "quase-distribuições" [144, 145, 146, 147, 148].

3.7 Operador evolução temporal q-deformado

Nesta e na próxima Seção, em uma contribuição nossa ao tema, propomos uma equivalente equação de Schrödinger não linear NRT na formulação de ket de estados e analisamos algumas de suas consequências.

Suponhamos que temos um sistema físico cujo vetor de estado, ou ket de estado, no instante de tempo t_0 seja representado por $|\alpha\rangle_q$. Este ket de estado pertence ao espaço vetorial de Hilbert, e pode evidentemente evoluir no tempo t.

A fim de desejarmos trabalhar com uma variável adimensional, ao invés do tempo t, definimos a quantidade $\tilde{t} \equiv t/\tau$, com τ sendo uma constante com unidade de tempo. O fato da q-adição, que será utilizada adiante, dever ser aplicada em quantidades sem unidades físicas nos leva a utilizar a quantidade adimensional $\tilde{t}$. Desta forma, o ket correspondente ao instante de tempo t é representado por

$$|\alpha, \tilde{t}_0; \tilde{t}\rangle_q, \quad (\tilde{t} > \tilde{t}_0). \tag{3.100}$$

Desde que o tempo é um parâmetro contínuo, temos

$$\lim_{\tilde{t}\to\tilde{t}_0} |\alpha, \tilde{t}_0; \tilde{t}\rangle_q = |\alpha\rangle_q, \tag{3.101}$$

e que pode-se utilizar a notação abreviada

$$|\alpha, \tilde{t}_0; \tilde{t}_0\rangle_q = |\alpha, \tilde{t}_0\rangle_q. \tag{3.102}$$

Consideremos um operador evolução temporal infinitesimal deformado $\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t}_2, \tilde{t}_1)$ definido por

$$|\alpha, \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}\rangle_q = \hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}, \tilde{t})|\alpha, \tilde{t}\rangle_q \tag{3.103}$$

onde $\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t} = \tilde{t} + d\tilde{t} + (1-q)\tilde{t}d\tilde{t}$. Este operador deformado $\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}, \tilde{t})$ satisfaz a propriedade

$$\lim_{d\tilde{t}\to 0} \hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}, \tilde{t}) = \hat{1}. \tag{3.104}$$

Podemos observar que o operador $\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t}_2, \tilde{t}_1)$ obedece a propriedades de grupo. De fato, seja

$$|\alpha, \tilde{t}; \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1\rangle_q = \hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1, \tilde{t})|\alpha, \tilde{t}; \tilde{t}\rangle_q \tag{3.105}$$

e aplicando o operador $\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1 \oplus_q d\tilde{t}_2, \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1)$ em ambos os lados da equação acima, temos que

$$\begin{gathered}\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1 \oplus_q d\tilde{t}_2, \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1)|\alpha, \tilde{t}; \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1\rangle_q = \\ \hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1 \oplus_q d\tilde{t}_2, \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1)\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1, \tilde{t})|\alpha, \tilde{t}; \tilde{t}\rangle_q.\end{gathered} \tag{3.106}$$

Pela definição (3.103), o lado esquerdo da equação acima é igual a $|\alpha, \tilde{t}; \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1 \oplus_q d\tilde{t}_2\rangle_q$,

e assim, podemos escrever:

$$|\alpha, \tilde{t}; \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1 \oplus_q d\tilde{t}_2\rangle_q = \hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1 \oplus_q d\tilde{t}_2, \tilde{t}d \oplus_q \tilde{t}_1)\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1, \tilde{t})|\alpha, \tilde{t}; \tilde{t}\rangle_q. \tag{3.107}$$

Por outro lado,

$$|\alpha, \tilde{t}; \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1 \oplus_q d\tilde{t}_2\rangle_q = \hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1 \oplus_q d\tilde{t}_2, \tilde{t})|\alpha, \tilde{t}; \tilde{t}\rangle_q. \tag{3.108}$$

Comparando as equações (3.107) e (3.108), obtemos

$$\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1 \oplus_q d\tilde{t}_2, \tilde{t}) = \hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1 \oplus_q d\tilde{t}_2, \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1)\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1, \tilde{t}), \tag{3.109}$$

e fazendo $\tilde{t}'_1 = \tilde{t}$, $\tilde{t}'' = \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1$, e $\tilde{t}''' = \tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}_1 \oplus_q d\tilde{t}_2$, mais compactamente temos

$$\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t}''', \tilde{t}') = \hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t}''', \tilde{t}'')\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t}'', \tilde{t}'). \tag{3.110}$$

Seja $\hat{\Omega}_q$ o gerador de translações temporais deformadas, a aproximação até a primeira ordem em $d\tilde{t}$ para $\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}, \tilde{t})$ é

$$\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}, \tilde{t}) = \hat{1} - i\hat{\Omega}_q d\tilde{t}. \tag{3.111}$$

A partir da propriedade dada pela Eq. (3.110) e a definição acima para o operador $\hat{\Omega}_q$, temos que

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}, \tilde{t}_0) &= \hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}, \tilde{t})\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t}, \tilde{t}_0) \\ &= \left(\hat{1} - i\hat{\Omega}_q dt\right)\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t}, \tilde{t}_0), \end{aligned} \tag{3.112}$$

ou ainda,

$$\frac{\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t}, \tilde{t}_0) - \hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t}, \tilde{t}_0)}{d\tilde{t}} = -i\hat{\Omega}_q\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t}, \tilde{t}_0). \tag{3.113}$$

O lado esquerdo da equação acima é uma das formas de se escrever a q-derivada D_q (2.113). Esta derivada deformada torna-se uma interessante ferramenta para processos que envolvem correlações na variável independente, neste caso, o parâmetro adimensional $\tilde{t}$. Conforme vimos no Capítulo 2, a função q-exponencial é autofunção do operador q-derivada D_q dada pela Eq. (2.113). No entanto, a função q-exponencial também é autofunção do operador derivada deformada $\hat{D}_q$ dado pela Eq. (2.131). Por conveniência, usamos o *ansatz* que a q-derivada D_q pode ser trocada pela derivada deformada $\hat{D}_q$, ou seja, nossas possíveis soluções serão assumidas a serem funções do tipo q-exponencial. Este *ansatz* justifica-se pelo fato da Eq. (3.111) ser a expansão da função q-exponencial em primeira ordem, e onde esta é autofunção de ambos operadores D_q e $\hat{D}_q$ (vide Eq. (2.132)).

Consequentemente, a equação (3.113) pode ser reescrita como

$$\hat{D}_{q,\tilde{t}}\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t},\tilde{t}_0) = -i\hat{\Omega}_q\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t},\tilde{t}_0) \tag{3.114}$$

onde $\hat{\Omega}_q$ é considerado independente do parâmetro $\tilde{t}$. A equação acima, pode também ser reescrita em termos do operador derivada usual:

$$\frac{d\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t},\tilde{t}_0)}{d\tilde{t}} = -i\hat{\Omega}_q[\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t},\tilde{t}_0)]^q. \tag{3.115}$$

A solução da equação diferencial não linear acima é

$$\hat{\mathcal{U}}_q(\tilde{t},\tilde{t}_0) = \exp_q\left[-i\hat{\Omega}_q(\tilde{t}-\tilde{t}_0)\right]. \tag{3.116}$$

Decidindo dar agora um significado físico à equação diferencial (3.115) e à sua solução (3.116), consideremos a troca de $\tilde{t}$ por t. Neste caso, o operador $\hat{\Omega}_q$ deve ter unidade de inverso de tempo ou de frequência. Uma vez que o operador hamiltoniano $\hat{H}$ é fisicamente o gerador de translações temporais, e com o uso do postulado de de Broglie $E = \hbar\omega$, consideremos a mudança $\hat{\Omega}_q \longrightarrow \hat{H}/\hbar$, e portanto, a Eq. (3.116) pode ser reescrita como

$$i\hbar\hat{D}_{q,t}\hat{\mathcal{U}}_q(t,t_0) = \hat{H}\hat{\mathcal{U}}_q(t,t_0). \tag{3.117}$$

A equação acima que descreve a evolução temporal de $\hat{\mathcal{U}}_q(t,t_0)$ nos leva imediatamente a uma equação de Schrödinger não linear para o estado $|\alpha,t\rangle_q$. De fato, multiplicando ambos os lados da equação acima por $|\alpha,t_0\rangle_q$, obtemos que

$$i\hbar\hat{D}_{q,t}|\alpha,t\rangle_q = \hat{H}|\alpha,t\rangle_q, \tag{3.118}$$

onde o operador de evolução temporal deformado é

$$\hat{\mathcal{U}}_q(t,t_0) = \exp_q\left[-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right]. \tag{3.119}$$

Fazendo $t = \tau(\tilde{t} \oplus_q d\tilde{t})$ e $t_0 = \tau\tilde{t}$, podemos ver que o operador evolução temporal acima satisfaz a propriedade dada pela Eq. (3.104) e é portanto localmente unitário. No entanto, este operador evolução temporal é não unitário ($\hat{\mathcal{U}}_q^\dagger\hat{\mathcal{U}}_q \neq \hat{1}$) para intervalos de tempo não infinitesimais. A não unitariedade do operador evolução temporal $\hat{\mathcal{U}}_q(t,t_0)$ pode ser utilizada para descrever fenômenos de decoerência quântica, conforme afirma os autores de [149]. Mais especificamente, decoerência quântica é o fenômeno associado a perda de informação do estado inicial de um sistema físico devido à interação com o ambiente. Isto inclui (mas não está limitado a) ambas contribuições de dissipação e defasagem, tradicionalmente conhecidas como processos de T_1 e T_2, respectivamente. Dissipação refere-se

a processos em que as populações dos estados quânticos (representadas pelos elementos da diagonal principal da matriz densidade) são modificadas por interações com o meio ambiente, enquanto defasagem refere-se a processos aleatórios entre as fases relativas dos estados quânticos (representadas pelos elementos fora da diagonal principal da matriz densidade) (vide página 157 da referência [150] para mais detalhes). Ambos são causados pelo emaranhamento do sistema com graus de liberdade do ambiente, levando a dinâmica não unitária do sistema. O parâmetro q pode ser utilizado para medir a taxa de perda de informação do sistema.

A exploração de outros operadores evolução temporal não unitários pode ser encontradas na literatura. Por exemplo, em [106], a partir de uma anologia entre a equação de Fokker-Planck não linear (3.9) e uma equação de Schrödinger não linear (equivalente à Eq. (3.39) para o caso unidimensional e potencial nulo), Lavagno considerando a definição

$$\Psi(t) = \hat{U}_q(t, t_0)\Psi(t_0) \tag{3.120}$$

introduz também um operador evolução temporal dado por

$$\begin{aligned} \hat{U}_q(t, t_0) &= \exp_q\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\frac{t - t_0}{(\Psi(t_0))^{q-1}}\right] \\ &= \left[\exp_q\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\frac{t_0 - t}{(\Psi(t))^{q-1}}\right)\right]^{-1} \end{aligned} \tag{3.121}$$

que difere de (3.119). A partir das expressões acima, podemos ver que a evolução temporal do operador $\hat{U}_q(t, t_0)$ depende explicitamente do estado inicial e do estado final, e não apenas da diferença de tempo $t - t_0$. Este comportamento, similarmente como acontece na equação de Fokker-Planck não linear, está relacionado a efeitos de memória [117]. Por outro lado, em [151] Tirnakli *et al.* obtiveram o operador evolução temporal (3.119) em um contexto similar ao que apresentamos aqui.

A Eq. (3.118) corresponde a uma equação de evolução temporal deformada para o ket $|\alpha, t\rangle_q$ na descrição de Schrödinger (consideraremos a aplicação da equação diferencial deformada (3.118) sobre cada componente do vetor $|\alpha, t\rangle_q$). Esta equação pode ser aplicada para sistemas com hamiltonianos que tenham ou não análogos clássicos, como por exemplo, uma partícula de spin s em um campo magnético externo. Consequentemente, seja $\{|n\rangle\}$ a base ortonormal de autoestados do hamiltoniano $\hat{H}$ e E_n suas respectivas energias, o efeito do operador evolução temporal é levar o estado $|\alpha, t_0\rangle_q = |\alpha\rangle_q$ a um estado final, tal que

$$\begin{aligned} |\alpha(t)\rangle_q = |\alpha, t\rangle_q &= \exp_q\left[\frac{-i\hat{H}(t - t_0)}{\hbar}\right]|\alpha, t_0\rangle_q \\ &= \sum_n |n\rangle\langle n|\alpha_q\rangle \exp_q\left[-\frac{iE_n(t - t_0)}{\hbar}\right]. \end{aligned} \tag{3.122}$$

Seja $c_n(t) \equiv \langle n|\alpha\rangle_q \exp_q\left[-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}\right]$, observe que o estado $|\alpha,t\rangle_q$ não está normalizado: $\sum_n |c_n(t)|^2 \neq 1$. Desta forma, os valores esperados devem ser tomados a partir da relação

$$\langle\hat{\Omega}\rangle = \frac{{}_q\langle\alpha(t)|\hat{\Omega}|\alpha(t)\rangle_q}{{}_q\langle\alpha(t)|\alpha(t)\rangle_q}. \tag{3.123}$$

Para a função de onda $\Psi(\vec{x},t)/\Psi_0 \equiv \langle\vec{x}|\alpha,t\rangle_q$, a equação de onda de Schrödinger deformada este estado é

$$i\hbar\hat{D}_{q,t}\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right] = \hat{H}\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right]. \tag{3.124}$$

A equação de Schrödinger acima corresponde a definição do operador energia proposto em [10]

$$i\hbar\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right]^{1-q}\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right] = \hat{H}\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right]. \tag{3.125}$$

Para um sistema com hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}_q^2 + \hat{V}(\vec{x}), \tag{3.126}$$

e o usando o operador momento deformado também definido em [10]

$$\hat{P}_q\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right] = -i\hbar\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right]^{1-q}\vec{\nabla}\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right] \tag{3.127}$$

temos que

$$\begin{aligned} i\hbar\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right]^{1-q}\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right] &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right]^{1-q}\vec{\nabla}\left\{\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right]^{1-q}\vec{\nabla}\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right]\right\} \\ &\quad + V(\vec{x})\left[\frac{\Psi(\vec{x},t)}{\Psi_0}\right], \end{aligned} \tag{3.128}$$

e que resulta na equação de Schrödinger não linear NRT (3.39), demonstrando portanto uma equivalência entre a equação de Schrödinger não linear na forma matricial (3.118) e na forma acima originalmete proposta.

Equação de von Neumann q-deformada

Uma possível conexão com a mecânica estatística não extensiva é apresentada a seguir. Primeiramente, multiplicando a equação (3.122) por $\langle\vec{x}|$, temos que a função de onda pode ser reescrita como

$$\bar{\Psi}(\vec{x},t) = \int d\vec{x}' K_q(\vec{x},t;\vec{x}',t_0)\bar{\Psi}(\vec{x}',t_0) \tag{3.129}$$

onde

$$\begin{aligned} K_q(\vec{x},t;\vec{x}',t_0) &= \sum_n \langle\vec{x}|n\rangle\langle n|\vec{x}'\rangle \exp_q\left[-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}\right] \\ &= \langle\vec{x}|\exp_q\left[-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right]|\vec{x}'\rangle \end{aligned} \tag{3.130}$$

é um propagador de Feymann deformado ou função de Green que diferente do caso usual, onde a exponencial usual é trocada por uma q-exponencial.

Consideremos agora por simplicidade o caso $t_0 = 0$ e a condição $\vec{x}' = \vec{x}$. Segue que

$$\begin{aligned} G_q(t) &\equiv \int d\vec{x}' K_q(\vec{x}',t;\vec{x}',0) \\ &= \int d\vec{x}' \sum_n |\langle\vec{x}'|n\rangle|^2 \exp_q\left(-\frac{iE_nt}{\hbar}\right) \\ &= \sum_n \exp_q\left(-\frac{iE_nt}{\hbar}\right) \end{aligned} \tag{3.131}$$

onde $G_q(t)$ é uma soma sobre todos estados possíveis. Como no caso usual, a função de partição é obtida trocando $it/\hbar$ por um imaginário puro β [152], e assim, chegamos em

$$Z_q = \sum_n \exp_q\left(-\beta E_n\right) \tag{3.132}$$

que corresponde a q-função de partição a menos de uma constante de normalização.

A equação de Schrödinger não linear naturalmente nos leva a uma equação de evolução temporal deformada para o operador matriz densidade $\hat{\varrho} = \overline{|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|}$, com $|\Psi(t)\rangle = |\alpha,t\rangle_q$ e $\hat{\varrho}_{nm} = \overline{c_n^*(t)c_m(t)}$, tal que

$$\hat{D}_{q,t}\hat{\varrho} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\hat{\varrho}] \tag{3.133}$$

que corresponde a uma equação de von Neumann deformada. Seja $i\hbar\hat{\mathcal{L}} \equiv [\hat{H},\hat{\varrho}]$, a solução formada para (3.133) é dada por

$$\hat{\varrho}(t) = [1+(1-q)\hat{\mathcal{L}}t]_+^{1/(1-q)}\hat{\varrho}(0), \tag{3.134}$$

originalmente proposta por Vidiella-Barranco *et al.* [130] para descrever processos de decoerência em mecânica quântica através de um tratamento dentro da mecânica estatística não extensiva. Esta decoerência estaria relacionada a efeitos de memória e interações de longo alcance (característica de processos não markovianos na qual a mecânica estatícia não extensiva torna-se uma importante ferramenta para descrevê-los). Em [130], a Eq. (3.134) foi obtida através de *ansatz* sobre a solução do caso usual $\hat{\varrho}(t) = \exp(\hat{\mathcal{L}}t)\hat{\varrho}(0)$

trocando a função exponencial pela função q-exponencial. Aqui, obtemos que a equação de von Neumann deformada e sua solução com o uso do operador $\hat{\mathcal{L}}$ são consequências diretas da não linearidade presentes na equação de Schrödinger deformada dada pela Eq. (3.118).

3.8 Dinâmica não linear q-deformada para sistemas de spin $\frac{1}{2}$

Operador rotação q-deformado para sistema de spin $\frac{1}{2}$

Como aplicação do operador evolução temporal deformado, investigamos o problema de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ em um campo magnético externo, cuja dinâmica do sistema obedece a equação de Schrödinger não linear NRT. Analisamos algumas propriedades da dinâmica deste sistema e comparamos com o caso usual.

Desta forma, propomos um operador rotação q-deformado definido por

$$\hat{\mathcal{R}}_q(\phi) \equiv \exp_q\left(-\frac{i\vec{J}\cdot\vec{\phi}}{\hbar}\right), \tag{3.135}$$

com $\vec{\phi} \equiv \phi\hat{\phi}$, onde ϕ é o ângulo de rotação, e $\vec{J}$ é o gerador de rotações da qual são válidas as relações de comutação para o momento angular

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar\hat{J}_k. \tag{3.136}$$

Dada uma operação de rotação deformada $\hat{\mathcal{R}}_q(\phi)$ sobre um estado $|\alpha\rangle_q$, o estado transformado é representado por $|\alpha\rangle_{q,R}$, tal que

$$|\alpha\rangle_{q,R} = \hat{\mathcal{R}}_q(\phi)|\alpha\rangle_q. \tag{3.137}$$

Consideremos como exemplo um rotação generalizada por um ângulo finito ϕ em torno do eixo Oz. Para o ket $|\alpha\rangle_q$ de um sistema de spin $\frac{1}{2}$, e com $\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$, onde σ_i são as matrizes de Pauli [152]

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{3.138}$$

temos que efeito da rotação neste estado é

$$|\alpha\rangle_{q,R} = \hat{\mathcal{R}}_{z,q}(\phi)|\alpha\rangle_q, \tag{3.139}$$

com

$$\hat{\mathcal{R}}_{z,q}(\phi) = \exp_q\left(-\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right). \tag{3.140}$$

Seja o estado inicialmente normalizado e dado por $|\alpha\rangle_q = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$ (com $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$), temos que

$$|\alpha\rangle_{q,R} = \exp_q\left(-\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right)|\alpha\rangle_q = c_+\exp_q\left(-\frac{i\phi}{2}\right)|+\rangle + c_-\exp_q\left(\frac{i\phi}{2}\right)|-\rangle. \tag{3.141}$$

A norma quadrática deste vetor de estado rotacionado é

$$\begin{aligned} ||\alpha||^2_{q,R} = {}_{q,R}\langle\alpha|\alpha\rangle_{q,R} &= (|c_+|^2 + |c_-|^2)\exp_q\left(\frac{i\phi}{2}\right)\exp_q\left(-\frac{i\phi}{2}\right) \\ &= \left[1 + (1-q)^2\frac{\phi^2}{4}\right]_+^{1/(1-q)} \\ &= \rho_q(\phi/2), \end{aligned} \tag{3.142}$$

onde utilizamos a Eq. (2.147) nesta última. Notemos que o efeito do operador $\hat{\mathcal{R}}_q(\phi)$ não altera a norma do estado para rotações infinitesimais $\delta\phi$ consideradas até a primeira ordem. No entanto, uma vez que o operador rotação é não unitário, para uma rotação finita sobre um estado $|\alpha\rangle_q$, o resultado é uma alteração da norma do próprio estado. Para uma rotação deformada $\vec{\phi} = \phi\hat{k}$, o vetor de estado rotacionado e devidamente normalizado é

$$\begin{aligned} |\bar{\alpha}\rangle_{q,R} &= \frac{1}{\sqrt{{}_{q,R}\langle\alpha|\alpha\rangle_{q,R}}}|\alpha\rangle_{q,R} \\ &= c_+e^{i\varphi_q(\phi/2)}|+\rangle + c_-e^{-i\varphi_q(\phi/2)}|-\rangle \end{aligned} \tag{3.143}$$

onde

$$\varphi_q(\phi/2) = \frac{\operatorname{atan}\left((1-q)\frac{\phi}{2}\right)}{1-q} \tag{3.144}$$

de acordo com a expressão dada pela Eq. (2.148).

O efeito do operador (3.140) sobre o valor esperado de uma das compoentes $\hat{S}_i$ do spin é

$$\langle\hat{S}_i\rangle \longrightarrow \langle\hat{S}_i\rangle_{q,R} = \frac{{}_{q,R}\langle\alpha|\hat{S}_i|\alpha\rangle_{q,R}}{{}_{q,R}\langle\alpha|\alpha\rangle_{q,R}}. \tag{3.145}$$

Calculemos a seguir o termo

$$\begin{aligned}\langle\hat{S}_x\rangle'_{q,R} &= {}_{q,R}\langle\alpha|\hat{S}_x|\alpha\rangle_{q,R} \\ &= {}_q\langle\alpha|\hat{\mathcal{R}}^\dagger_{z,q}(\phi)\hat{S}_x\hat{\mathcal{R}}_{z,q}(\phi)|\alpha\rangle_q \\ &= {}_q\langle\alpha|\exp_q\left(\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right)\hat{S}_x\exp_q\left(-\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right)|\alpha\rangle_q. \end{aligned} \tag{3.146}$$

A partir da expansão em série de Taylor para a função q-exponencial [31]

$$\exp_q(x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{Q_{n-1}(q)}{n!}x^n, \tag{3.147}$$

com $Q_n(q) = \prod_{k=1}^{n}[1+(1-q)k]$, temos que

$$\begin{aligned}\exp_q\left(\pm\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right)|+\rangle &= \left[\hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{Q_{n-1}(q)}{n!}\left(\pm\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right)^n\right]|+\rangle \\ &= \left[\hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{Q_{n-1}(q)}{n!}\left(\pm\frac{i\phi}{2}\right)^n\right]|+\rangle, \end{aligned} \tag{3.148}$$

ou ainda,

$$\exp_q\left(\pm\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right)|+\rangle = \exp_q\left(\pm\frac{i\phi}{2}\right)|+\rangle. \tag{3.149}$$

Similarmente

$$\exp_q\left(\pm\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right)|-\rangle = \exp_q\left(\mp\frac{i\phi}{2}\right)|-\rangle. \tag{3.150}$$

Portanto

$$\begin{aligned}\exp_q\left(\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right)\hat{S}_x\exp_q\left(-\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right) &= \frac{\hbar}{2}\exp_q\left(\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right)[|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|]\exp_q\left(-\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right) \\ &= \frac{\hbar}{2}\exp_q\left(\frac{i\phi}{2}\right)|+\rangle\langle-|\exp_q\left(\frac{i\phi}{2}\right) \\ &\quad + \frac{\hbar}{2}\exp_q\left(\frac{-i\phi}{2}\right)|-\rangle\langle+|\exp_q\left(\frac{-i\phi}{2}\right). \end{aligned} \tag{3.151}$$

Das propriedades da função q-exponencial, podemos escrever que

$$[\exp_q(\pm i\phi/2)]^2 = \exp_{q'}(\pm i\phi) \tag{3.152}$$

com $q' = (1+q)/2$, e assim

$$\begin{aligned}
\exp_q\left(\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right)\hat{S}_x\exp_q\left(-\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}\right) &= \frac{\hbar}{2}\left[\exp_{q'}(i\phi)|+\rangle\langle -| + \exp_{q'}(-i\phi)|-\rangle\langle +|\right] \\
&= \left(\frac{\hbar}{2}\right)(|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|)\cos_{q'}(\phi) \\
&\quad + \left(\frac{i\hbar}{2}\right)(|+\rangle\langle -| - |-\rangle\langle +|)\,\mathrm{sen}_{q'}(\phi) \\
&= \hat{S}_x\cos_{q'}(\phi) - \hat{S}_y\,\mathrm{sen}_{q'}(\phi). \qquad (3.153)
\end{aligned}$$

A partir das relações (2.146), segue que o resultado do operador (3.140) sobre o valor esperado de $\hat{S}_x$ é

$$\begin{aligned}
\langle\hat{S}_x\rangle \longrightarrow \langle\hat{S}_x\rangle'_{q,R} &= \langle\hat{S}_x\rangle\cos_{q'}(\phi) - \langle\hat{S}_y\rangle\mathrm{sen}_{q'}(\phi) \\
&= \rho_{q'}(\phi)\left[\langle\hat{S}_x\rangle\cos(\varphi_{q'}(\phi)) - \langle\hat{S}_y\rangle\mathrm{sen}(\varphi_{q'}(\phi))\right], \qquad (3.154)
\end{aligned}$$

onde obtemos das Eq.'s (2.147) e (2.148) que

$$\begin{aligned}
\varphi_{q'}(\phi) &= \frac{\mathrm{atan}((1-q')\phi)}{1-q'} \\
&= \frac{\mathrm{atan}\left(\dfrac{1-q}{2}\phi\right)}{\dfrac{1-q}{2}} \\
&= \varphi_{\frac{1+q}{2}}(\phi), \qquad (3.155)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\rho^2_{q'}(\phi) &= [1+(1-q')^2\phi^2]^{1/(1-q')} \\
&= \left[1+(1-q)^2\frac{\phi^2}{4}\right]_+^{2/(1-q)} \\
&= \left[1+\left(\frac{1-q}{2}\right)^2\phi^2\right]_+^{2/(1-q)} \\
&= \rho^2_{\frac{1+q}{2}}(\phi). \qquad (3.156)
\end{aligned}$$

Comparando as Eq.'s (3.142) e (3.156), temos que:

$$||\alpha||^2_{q,R} = {}_{q,R}\langle\alpha|\alpha\rangle_{q,R} = \rho_{\frac{1+q}{2}}(\phi) = \rho_q(\phi/2). \qquad (3.157)$$

Analogamente obtemos

$$\begin{aligned}\langle\hat{S}_y\rangle \longrightarrow \langle\hat{S}_y\rangle'_{q,R} &= \langle\hat{S}_x\rangle \mathrm{sen}_{q'}(\phi) + \langle\hat{S}_y\rangle \cos_{q'}(\phi) \\ &= \rho_{q'}(\phi)\left[\langle\hat{S}_x\rangle \mathrm{sen}(\varphi_{q'}(\phi)) + \langle\hat{S}_y\rangle \cos(\varphi_{q'}(\phi))\right], \end{aligned} \tag{3.158}$$

e

$$\langle\hat{S}_z\rangle \longrightarrow \langle\hat{S}_z\rangle'_{q,R} = \rho_{q'}(\phi)\langle\hat{S}_z\rangle. \tag{3.159}$$

Através do uso de uma matriz de rotação deformada, temos que:

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} \langle\hat{S}_x\rangle' \\ \langle\hat{S}_y\rangle' \\ \langle\hat{S}_z\rangle' \end{pmatrix}_{q,R} &= \begin{pmatrix} \cos_{q'}(\phi) & -\mathrm{sen}_{q'}(\phi) & 0 \\ \mathrm{sen}_{q'}(\phi) & \cos_{q'}(\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\hat{S}_x\rangle \\ \langle\hat{S}_y\rangle \\ \langle\hat{S}_z\rangle \end{pmatrix} \\ &= \rho_{\frac{1+q}{2}}(\phi) \begin{pmatrix} \cos(\varphi_{\frac{1+q}{2}}(\phi)) & -\mathrm{sen}(\varphi_{\frac{1+q}{2}}(\phi)) & 0 \\ \mathrm{sen}(\varphi_{\frac{1+q}{2}}(\phi)) & \cos(\varphi_{\frac{1+q}{2}}(\phi)) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\hat{S}_x\rangle \\ \langle\hat{S}_y\rangle \\ \langle\hat{S}_z\rangle \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.160}$$

Substituindo as Eq.'s (3.157) e (3.160) em (3.145), obtemos que os valores esperados das componentes de $\vec{S}$ para o estado de ket q-rotacionado $|\alpha\rangle_{q,R}$ são dados por

$$\begin{pmatrix} \langle\hat{S}_x\rangle \\ \langle\hat{S}_y\rangle \\ \langle\hat{S}_z\rangle \end{pmatrix}_{q,R} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi_{\frac{1+q}{2}}(\phi)) & -\mathrm{sen}(\varphi_{\frac{1+q}{2}}(\phi)) & 0 \\ \mathrm{sen}(\varphi_{\frac{1+q}{2}}(\phi)) & \cos(\varphi_{\frac{1+q}{2}}(\phi)) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\hat{S}_x\rangle \\ \langle\hat{S}_y\rangle \\ \langle\hat{S}_z\rangle \end{pmatrix}. \tag{3.161}$$

A partir das Eq.'s (3.144) e (3.155), podemos ver que para uma rotação q-deformada do sistema em ϕ, o spin $\vec{S}$ rotaciona de um ângulo deformado $\varphi_{\frac{1+q}{2}}(\phi) = 2\varphi_q(\phi/2)$, enquanto o ket de estado "rotaciona" em metade deste ângulo, *i.e.*, $\varphi_q(\phi/2)$, similar ao caso usual.

Precessão q-deformada

Consideremos o operador evolução temporal deformado definido por:

$$\hat{\mathcal{U}}_q(t,0) \equiv \exp_q\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right). \tag{3.162}$$

Seja um sistema de dois níveis, o operador hamiltoniano do sistema é dado por

$$\hat{H} = -\left(\frac{e}{mc}\right)\vec{S}\cdot\vec{B} = \omega_0\hat{S}_z, \tag{3.163}$$

onde $\omega_0 \equiv |e|B/mc$ é a frequência de Larmor. Para este problema, o operador evolução temporal deformado é

$$\hat{\mathcal{U}}_q(t,0) = \exp_q\left(-\frac{i\hat{S}_z\omega_0 t}{\hbar}\right). \tag{3.164}$$

Comparando as Eq.'s (3.135) e (3.164), vemos que o operador evolução temporal deformado tem a mesma forma de um operador rotação deformado, na qual o ângulo $\theta = \omega_0 t$ do primeiro corresponde ao ângulo ϕ do segundo.

De acordo com a Eq. (3.122), a evolução temporal do estado é

$$|\alpha\rangle_{q,t} = c_+ \exp_q\left(-\frac{i\omega_0 t}{2}\right)|+\rangle + c_- \exp_q\left(\frac{i\omega_0 t}{2}\right)|-\rangle. \tag{3.165}$$

Normalizando este vetor de estado, obtemos

$$|\bar{\alpha}\rangle_{q,t} = c_+ e^{i\varphi_q(\omega_0 t/2)}|+\rangle + c_- e^{-i\varphi_q(\omega_0 t/2)}|-\rangle, \tag{3.166}$$

com

$$\theta_q(\omega_0 t) = \frac{\operatorname{atan}\left[(1-q)\omega_0 t/2\right]}{1-q}. \tag{3.167}$$

Por outro lado, da Eq. (3.161), vemos que a evolução temporal de cada um dos valores esperados das componentes de $\vec{S}$ é

$$\begin{aligned}
\langle\hat{S}_x\rangle_t &= \langle\hat{S}_x\rangle_0 \cos[\Theta_{\frac{1+q}{2}}(\omega_0 t)] - \langle\hat{S}_y\rangle_0 \operatorname{sen}[\Theta_{\frac{1+q}{2}}(\omega_0 t)], && \text{(3.168a)}\\
\langle\hat{S}_y\rangle_t &= \langle\hat{S}_x\rangle_0 \operatorname{sen}[\Theta_{\frac{1+q}{2}}(\omega_0 t)] + \langle\hat{S}_y\rangle_0 \cos[\Theta_{\frac{1+q}{2}}(\omega_0 t)], && \text{(3.168b)}\\
\langle\hat{S}_z\rangle_t &= \langle\hat{S}_z\rangle_0, && \text{(3.168c)}
\end{aligned}$$

com

$$\Theta_{\frac{1+q}{2}}(\omega_0 t) = \frac{\operatorname{atan}\left[(1-q)\omega_0 t/2\right]}{(1-q)/2}. \tag{3.169}$$

Seja $\langle\vec{S}\rangle_t = \langle\hat{S}_x\rangle_t\hat{i} + \langle\hat{S}_y\rangle_t\hat{j} + \langle\hat{S}_z\rangle_t\hat{k}$ e $\vec{\omega}_0 = \omega_0\hat{k}$, pode-se também verificar que

$$\frac{d\langle\vec{S}\rangle_t}{dt} = \left[\frac{1}{1+\frac{1}{4}(1-q)^2(\omega_0 t)^2}\right]\vec{\omega}_0 \times \langle\vec{S}\rangle_t. \tag{3.170}$$

Podemos portanto notar que devido à forma da fase (3.169), a precessão deformada do spin não é periódica como no caso usual $q = 1$. Quando $t \to \infty$, temos que $d\langle\vec{S}\rangle_t/dt \to 0$, e as componentes do spin x e y atingem os valores estacionários

$$\begin{aligned}
\lim_{t\to\infty}\langle\hat{S}_x\rangle_t &= \langle\hat{S}_x\rangle_0 \cos\left(\frac{\pi}{1-q}\right) - \langle\hat{S}_y\rangle_0 \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{1-q}\right), && \text{(3.171a)}\\
\lim_{t\to\infty}\langle\hat{S}_y\rangle_t &= \langle\hat{S}_x\rangle_0 \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{1-q}\right) + \langle\hat{S}_y\rangle_0 \cos\left(\frac{\pi}{1-q}\right). && \text{(3.171b)}
\end{aligned}$$

As fases do estado do vetor de estado $\theta_q(\omega_0 t)$ e da precessão do spin $\Theta_{\frac{1+q}{2}}(\omega_0 t)$ estão relacionados por $\Theta_{\frac{1+q}{2}}(\omega_0 t) = 2\theta_q(\omega_0 t)$, e recuperam o caso usual para $q = 1$ onde as oscilações são periódicas tal que $\tau_{\text{ket de estado}} = \tau_{\text{precessão}} = 4\pi/\omega_0$.

A Figura 3.6 mostra os gráficos dos valores esperados $\langle\hat{S}_x\rangle_t$ e $\langle\hat{S}_y\rangle_t$, assim como as taxas

de variações temporais $d\langle\hat{S}_x\rangle_t/dt$ e $d\langle\hat{S}_y\rangle_t/dt$, para $q = 1.2$ e condições iniciais $\langle\hat{S}_x\rangle_0 = S_0$ e $\langle\hat{S}_y\rangle_0 = 0$. Conforme podemos ver, o spin do sistema inicialmente rotaciona, mas para tempos muito longos ($t \gg 2\pi/\omega_0$) as evoluções de $\langle\hat{S}_x\rangle_t$ e $\langle\hat{S}_y\rangle_t$ não se cruzam devido a perda de correlação. Esta decoerência pode ser interpretada como uma consequência da evolução temporal do sistema descrita por um operador não unitário. Este modelo teórico estudado aqui poderia ser uma alternativa, por exemplo, para descrever fenômenos envolvendo relaxação e decoerência do spin eletrônico em pontos quânticos semicondutores [153].

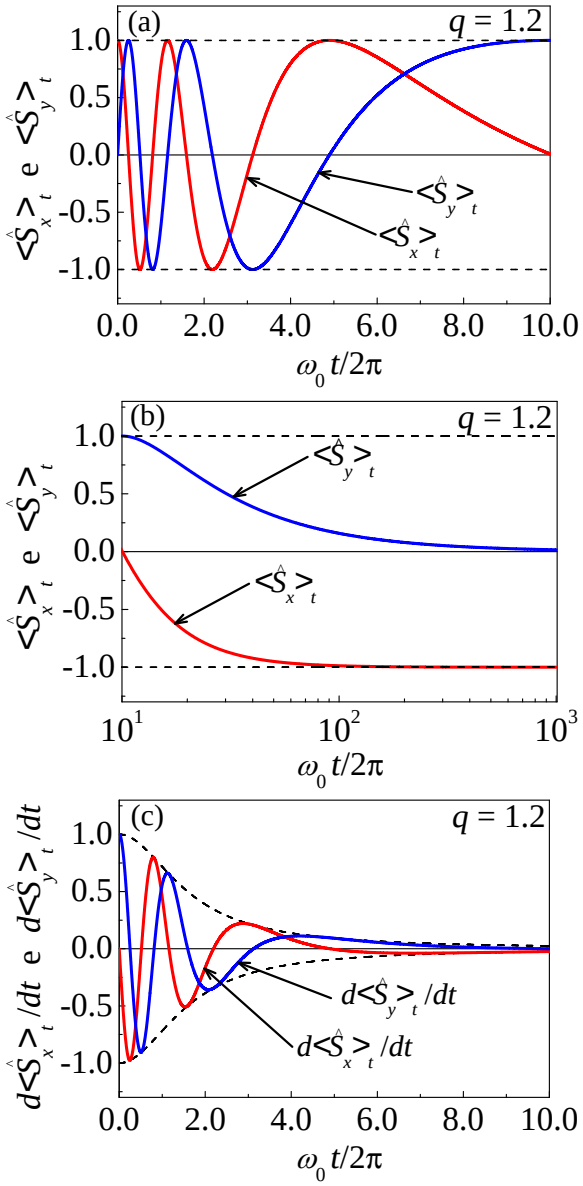


Figura 3.6: Gráficos dos valores esperados $\langle\hat{S}_x\rangle_t$ e $\langle\hat{S}_y\rangle_t$ (em unidades da amplitude S_0) para $q = 1.2$ nos intervalos (a) $0 < \omega_0 t/2\pi < 10$ e (b) $10^1 < \omega_0 t/2\pi < 10^3$ em escala semilogaritmica. A condição inicial escolhida foi $\langle\hat{S}_x\rangle_0 = S_0$ e $\langle\hat{S}_y\rangle_0 = 0$. As curvas $d\langle\hat{S}_x\rangle_t/dt$ e $d\langle\hat{S}_y\rangle_t/dt$ (em unidades da amplitude $\omega_0 S_0$) são mostradas em (c), onde as curvas pontilhadas são $\pm[1 + \frac{1}{4}(1-q)(\omega_0 t)^2]^{-1}$. Observa-se que $\langle\hat{S}_x\rangle_t$ e $\langle\hat{S}_y\rangle_t$ oscilam entre -1 e 1 até atingirem o estado estacionário dado pelas Eq.'s (3.171) no limite $t \to \infty$.

Capítulo 4

Dinâmica quântica q-deformada para um sistema com massa efetiva

Sistemas constituídos de partículas com massa dependente da posição, *i.e.*, uma massa efetiva, têm sido discutidos por diversos pesquisadores nas últimas décadas. Aplicações de tais sistemas podem ser encontradas em teoria de semicondutores [154], impurezas de ^{4}He em ^{3}He líquido [155, 156], óptica não linear [157, 158, 159], estudos de inversão de potencial para moléculas de NH_3 em teoria do funcional de densidade [160], física de partículas [161], e astrofísica [162].

Recentemente Costa Filho *et al.* [11, 32] introduziram um operador translação generalizado que produz deslocamento infinitesimais relacionados a q-álgebra [7, 8] dado por

$$\hat{\mathcal{T}}_\gamma(\varepsilon)|x\rangle \equiv |x + \varepsilon + \gamma x\varepsilon\rangle, \tag{4.1}$$

onde γ é um parâmetro com dimensão de inverso de comprimento. De acordo com os autores, este operador leva a um gerador de translações espaciais correspondente a um operador momento linear dado por[1]

$$\hat{p}'_q = (\hat{1} + \gamma\hat{x})\hat{p}, \tag{4.2}$$

e consequentemente a uma partícula com massa dependente da posição. Este operador tem sido usado para resolver problemas de partículas com massa dependente da posição no formalismo quântico [163, 164, 165, 166]. Este formalismo tem sido aplicado para analisar sistemas com massa efetiva em nanoestruturas [167, 168]. Mais especificamente, o confinamento quântico em nanoestruturas de Si e Ge foram investigadas experimentalmente, e o tratamento teórico com o operador translação deformado tem levado a uma variação na massa efetiva e um aumento na energia de confinamento. Os autores encontraram uma relação entre o parâmetro γ e o diâmetro da nanoestrutura. Uma das características

[1] Originalmente, os autores denotaram o operador momento linear deformado por $\hat{p}_\gamma$. Aqui, por questões que tornar-se-ão claras adiante, o denotaremos por $\hat{p}'_q$.

de $\hat{p}'_q$ está associada ao fato que este operador é não hermitiano. Mazharimousavi [169] introduziu uma modificação no mesmo, de modo a torná-lo hermitiano.

Este Capítulo tem como objetivo discutir as consequências da definição deste operador translação deformado, e que nos leva a introduzir uma outra formulação para uma mecânica quântica q-deformada. Diferentemente da equação de Schrödinger não linear NRT, discutida no Capítulo 3, a formulação que desenvolveremos aqui é constituída por equações lineares em termos de operadores q-deformados apresentados no Capítulo 2.

Desta forma, iniciaremos este Capítulo fazendo uma breve revisão sobre operadores hamiltonianos de sistemas com massa dependente da posição. Em seguida, propomos uma modificação no operador translação Eq. (4.1) e uma demonstração alternativa para o gerador de translações infinitesimais. Introduzimos também um operador espaço generalizado que torna válida a relação de comutação canônica com o operador momento linear generalizado. Estes operadores constituem uma transformação canônica que mapeia um partícula com massa constante em uma outra com massa dependente da posição. Analisamos algumas consequências dos análogos clássicos para os operadores generalizados, e examinamos como o formalismo da mecânica clássica de sistemas com massa dependente da posição é recuperado a partir do formalismo quântico (princípio da correspondência). Também analisamos o teorema de Ehrenfest que é uma importante ferramenta para comparar os resultados obtidos nos formalismos clássico e quântico de sistemas físicos, inclusive aqueles com massa dependente da posição. Investigamos algumas caractertísticas da função de onda para sistemas com massa dependente da posição e desenvolvemos uma aproximação semiclássica. Apresentamos também uma teoria clássica de campos para discutir esta formulação de uma dinâmica quântica q-deformada linear.

4.1 Operadores hamiltonianos para sistemas com massa dependente da posição

Na descrição matemática de sistemas quânticos com massa dependente da posição, os operadores massa $m^* = m(\vec{r})$ e momento linear $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ não comutam, *i.e.*, $[m^*(\vec{r}), \vec{p}] \neq 0$ (a estrela será omitida a partir de agora por simplicidade). Consequentemente, a generalização do operador energia cinética padrão $\hat{T} = \frac{1}{2m_0}\vec{p}^{\,2}$ para sistemas com massa dependente da posição não é trivial. Isto deve-se à necessidade da escolha de ordenação entre os operadores massa e momento linear para que a hermiticidade do operador energia cinética seja assegurada. Além desta restrição, outros problemas precisam de atenção tais como a invariância de Galileu relacionada com o teorema de Bargmann e as regras de conexão para as funções de onda em uma heterojunção abrupta [170, 171, 172, 173].

Existem várias formas de definir o operador energia cinética. Uma forma generalizada

para este operador foi primeiramente sugerida por O. von Roos [154], que é dada por:

$$\hat{T} = \frac{1}{4}\left\{[m(\vec{r})]^{\alpha}\,\vec{p}\,[m(\vec{r})]^{\beta}\,\vec{p}\,[m(\vec{r})]^{\delta} + [m(\vec{r})]^{\delta}\,\vec{p}\,[m(\vec{r})]^{\beta}\,\vec{p}\,[m(\vec{r})]^{\alpha}\right\}. \tag{4.3}$$

As constantes α, β e δ, conhecidas como parâmetros de ambiguidade de von Roos, podem em geral ser escolhidas arbitrariamente, mas devem satisfazer a condição de vínculo

$$\alpha + \beta + \delta = -1. \tag{4.4}$$

Pode-se verificar facilmente que o operador energia cinética (4.3) é hermitiano. Desta forma, seja o operador energia potencial $\hat{V} = \hat{V}(\vec{r}, t)$, tem-se que o operador hamiltoniano $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ também é hermitiano. A descrição de sistemas físicos através de operadores hermitianos lineares possuem algumas vantagens tais como: autovalores reais, autofunções que formam um conjunto completo de funções ortogonais, e conservação da probabilidade [174].

Alguns dos operadores energia cinética $\hat{T}$ mais proeminentes na literatura são casos particulares do operador (4.3). Citemos alguns deles:

(i) Ben Daniel e Duke (BDD) [175]:

$$\hat{T}_{BDD} = \frac{1}{2}\hat{p}\frac{1}{m}\hat{p} \qquad (\alpha = \delta = 0, \beta = -1). \tag{4.5}$$

(ii) Gora e Williams (GW) [176]:

$$\hat{T}_{GW} = \frac{1}{4}\left(\hat{p}^2\frac{1}{m} + \frac{1}{m}\hat{p}^2\right) \qquad (\alpha = -1, \delta = \beta = 0). \tag{4.6}$$

(iii) Zhu e Kroemer (ZK) [177]:

$$\hat{T}_{ZK} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{m}}\hat{p}^2\frac{1}{\sqrt{m}}\right) \qquad \left(\alpha = \delta = -\frac{1}{2}, \beta = 0\right). \tag{4.7}$$

(iv) Li e Kuhn (LK) [178]:

$$\hat{T}_{LK} = \frac{1}{4}\left(\hat{p}\frac{1}{\sqrt{m}}\hat{p}\frac{1}{\sqrt{m}} + \frac{1}{\sqrt{m}}\hat{p}\frac{1}{\sqrt{m}}\hat{p}\right) \qquad \left(\alpha = 0, \beta = \delta = -\frac{1}{2}\right). \tag{4.8}$$

Em [179], Morrow *et al.* mostraram que o único caso admissivelmente viável que satisfaz as condições de continuidade da função de onda nas fronteiras de uma heterojunção de dois cristais é $\alpha = \delta$. Isto implica que a condição de vínculo para os parâmetros de ordenamento se reduzem a

$$2\alpha + \beta = -1. \tag{4.9}$$

Uma classificação completa dos diferentes operadores energia cinética pode ser encontrada em [180].

Na maioria dos trabalhos teóricos relacionados a sistemas com massa dependente da posição, o principal objetivo é obter as autofunções e os níveis de energia da equação de Schrödinger ou de suas generalizações relativísticas, tais como a equação de Klein-Gordon ou a equação de Dirac, para sistemas com uma certa função da massa dependente da posição submetida a um potencial específico [181, 182, 183, 184, 185, 186, 187, 188, 189, 190].

Geralmente, estas equações de onda para um sistema com massa dependente da posição são equações diferenciais lineares não homogêneas. A partir da aplicação de métodos como transformação canônica de ponto [191, 192, 193, 194, 195], mecânica quântica supersimétrica [196, 197, 198] ou integração numérica [199, 200, 201], soluções de equações de onda para diferentes funções de massa têm sido obtidas para diversos potenciais de interesse.

De forma a introduzir o método de transformação canônica o qual estamos interessados neste Capítulo, consideremos o operador hamiltoniano de um sistema unidimensional com massa dependente da posição

$$\hat{H} = \frac{1}{2}[m(\hat{x})]^a\,\hat{p}\,[m(\hat{x})]^{2b}\,\hat{p}\,[m(\hat{x})]^a + V(\hat{x}), \qquad 2a+2b=-1. \tag{4.10}$$

Na representação $\{|\hat{x}\rangle\}$, temos que $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$, e

$$[\hat{p}, F(\hat{x})] = -i\hbar\frac{dF(\hat{x})}{d\hat{x}}. \tag{4.11}$$

A relação de comutação acima permite que possamos escrever o operador hamiltoniano (4.10) como [202]

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{i\hbar}{2m}\frac{m'}{m}\hat{p} - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{a}{m^2}\right)[mm'' - (2+a)(m')^2] + V \\ &= \alpha_1\frac{d^2}{dx^2} + \alpha_2\frac{d}{dx} + \alpha_3,\end{aligned} \tag{4.12}$$

com

$$\alpha_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}, \qquad \alpha_2 = -\alpha_1\left(\frac{m'}{m}\right) = \alpha_1', \qquad \alpha_3 = \alpha_1\left(\frac{a}{2m}\right)[mm'' - (2+a)(m')^2] + V, \tag{4.13}$$

$m = m(x)$, $m' = dm/dx$ e $V = V(x)$.

A equação de autovalores

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \tag{4.14}$$

para o hamiltoniano (4.10) torna-se

$$\alpha_1 \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \alpha_2 \frac{d\psi(x)}{dx} + \alpha_3 \psi(x) = E\psi(x). \tag{4.15}$$

Consideremos primeiramente as autofunções acima escritas como $\psi(x) = f(x)\varphi(x)$, onde $f(x)$ e $\varphi(x)$ são duas funções a serem determinadas, tal que

$$\int_{x_i}^{x_f} |\psi(x)|^2 dx = \int_{x_i}^{x_f} |f(x)\varphi(x)|^2 dx = 1. \tag{4.16}$$

Notando que

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{df(x)}{dx}\varphi(x) + f(x)\frac{d\varphi(x)}{dx}, \tag{4.17}$$

e

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{d^2f(x)}{dx^2}\varphi(x) + 2\frac{df(x)}{dx}\frac{d\varphi(x)}{dx} + f(x)\frac{d\varphi(x)}{dx^2}, \tag{4.18}$$

temos que a Eq. (4.15) torna-se:

$$\alpha_1 \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \left(\frac{2\alpha_1}{f(x)}\frac{df(x)}{dx} + \alpha_2\right)\frac{d\varphi(x)}{dx} + \left(\frac{\alpha_1}{f(x)}\frac{d^2f(x)}{dx^2} + \frac{\alpha_2}{f(x)}\frac{df(x)}{dx} + \alpha_3\right)\varphi(x) = E\varphi(x). \tag{4.19}$$

Seja agora a mudança de variável independente $x \longrightarrow y = y(x)$, temos que:

$$\frac{d\varphi(x)}{dx} = \frac{dy}{dx}\frac{d\varphi(y)}{dy} \tag{4.20}$$

e

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = \frac{d^2y}{dx^2}\frac{d\varphi(y)}{dy} + \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2}. \tag{4.21}$$

Substitutindo as Eq.'s (4.20) e (4.21) em (4.19), obtemos:

$$\begin{aligned}\alpha_1 \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + \left[\alpha_1\frac{d^2y}{dx^2} + \left(\frac{2\alpha_1}{f(x)}\frac{df(x)}{dx} + \alpha_2 f(x)\right)\frac{dy}{dx}\right]\frac{d\varphi(y)}{dy} \\ + \left(\frac{\alpha_1}{f(x)}\frac{d^2f(x)}{dx^2} + \frac{\alpha_2}{f(x)}\frac{df(x)}{dx} + \alpha_3\right)\varphi(y) = E\varphi(y).\end{aligned} \tag{4.22}$$

Para que a equação acima represente uma equação de autovalores de uma partícula com massa constante na representação $\{|\hat{y}\rangle\}$, consideremos

$$\alpha_1 \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_0}, \tag{4.23a}$$

e

$$\alpha_1 \frac{d^2y}{dx^2} + \left(\frac{2\alpha_1}{f(x)}\frac{df(x)}{dx} + \alpha_2 f(x)\right)\frac{dy}{dx} = 0. \tag{4.23b}$$

Da Eq. (4.23a), obtemos que $dy/dx = [m(x)/m_0]^{1/2}$, ou ainda,

$$y(x) = \int \left[\frac{m(x)}{m_0}\right]^{1/2} dx + y_0, \tag{4.24}$$

onde y_0 é uma constante de integração. Uma vez que

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \frac{1}{2m_0}\left[\frac{m(x)}{m_0}\right]^{-1/2}\frac{dm(x)}{dx}, \tag{4.25}$$

da Eq. (4.23b), obtemos

$$\frac{1}{4}\frac{1}{m(x)}\frac{dm(x)}{dx} = \frac{1}{f(x)}\frac{df(x)}{dx}, \tag{4.26}$$

ou ainda,

$$f(x) = \left[\frac{m(x)}{m_0}\right]^{1/4}. \tag{4.27}$$

Portanto, substituindo as condições (4.23) e a Eq. (4.27) em (4.22), obtemos que a equação de autovalores para uma partícula com massa constante m_0 na representação $\{|\hat{y}\rangle\}$ é

$$\hat{H}^{(a)}_{\text{ef}}\varphi(y) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + V^{(a)}_{\text{ef}}(y)\varphi(y) = E\varphi(y), \tag{4.28}$$

onde $V^{(a)}_{\text{ef}}$ é uma energia potencial efetiva dada por:

$$V^{(a)}_{\text{ef}} = V - \frac{\hbar^2}{2m}\left(a+\frac{1}{4}\right)\left[\frac{m''}{m} - \left(a+\frac{7}{4}\right)\left(\frac{m'}{m}\right)^2\right]. \tag{4.29}$$

A função $V^{(a)}_{\text{ef}}$ depende da massa m e do potencial V, ambos na representação $\{|\hat{y}\rangle\}$. Se a massa m for constante, então temos $V^{(a)}_{\text{ef}} = V$. Em geral, $m(x)$ pode levar a um potencial efetivo $V^{(a)}_{\text{ef}}(y)$ que torna nova equação (4.28) tão complicada quanto a Eq. (4.15) para o operador hamiltoniano (4.10). Desta forma, tem-se que a principal simplificação deste método é a transformação de um hamiltoniano $\hat{H}$ de um sistema com massa dependente da posição m no espaço $\{|\hat{x}\rangle\}$ em um hamiltoniano $\hat{H}^{(a)}_{\text{ef}}$ com massa constante no espaço $\{|\hat{y}\rangle\}$, cuja relação $y = y(x)$ depende da função massa $m(x)$ de acordo com a Eq. (4.24). Os campos $\psi(x)$ e $\varphi(y(x))$ estão relacionados através da equação

$$\psi(x) = \left[\frac{m(x)}{m_0}\right]^{1/4}\varphi(x), \tag{4.30}$$

e que satisfazem às condições de normalização

$$\int_{x_i}^{x_f}|\psi(x)|^2dx = \int_{x_i}^{x_f}\left[\frac{m(x)}{m_0}\right]^{1/2}|\varphi(x)|^2dx = 1 \longleftrightarrow \int_{y_i}^{y_f}|\varphi(y)|^2dy = 1. \tag{4.31}$$

Portanto a obtenção das autofunções de $\hat{H}$ nos permite obter as autofunções de $\hat{H}_{\rm ef}^{(a)}$ e vice-versa. Além disso, os sistemas correspondentes às Eq.'s (4.14) e (4.28) apresentam os mesmos autovalores E, *i.e.*, $\hat{H}$ e $\hat{H}_{\rm ef}^{(a)}$ são operadores isoespectrais.

A partir da Eq. (4.29), notemos que em geral $V_{\rm ef}^{(a)}(y) \neq V(y)$. No entanto alguns casos especiais podem ser de interese. Por exemplo, para $a = -1/4$, temos que $V_{\rm ef}^{(-1/4)}(y) = V(y)$ para qualquer função massa $m = m(x)$ bem definida. Por outro lado, uma família de massas para a condição $V_{\rm ef}^{(a)}(y) = V(y)$ pode ser obtida desde que seja satisfeita a condição

$$\frac{m''}{m} = \left(a + \frac{7}{4}\right)\left(\frac{m'}{m}\right)^2. \tag{4.32}$$

Fazendo $q = a + 7/4$, podemos reescrever a equação acima como

$$\frac{m''}{m'} = q\frac{m'}{m}. \tag{4.33}$$

Integrando a equação diferencial acima, obtemos $m'/m^q =$ constante. Realizando mais uma integração, obtemos:

$$m(x) = m_0[1 + (1-q)\lambda x]^{1/(1-q)} = m_0 \exp_q(\lambda x), \tag{4.34}$$

onde m_0 e λ são constantes. Um caso particular ocorre para $a = -1/4$, ou seja, $q = 3/2$. Neste caso, a função massa torna-se

$$m(x) = \frac{m_0}{(1+\gamma x)^2}, \tag{4.35}$$

sendo $\gamma \equiv -\lambda/2$. Para a função massa acima, a transformação canônica de ponto descrita através da função $y(x)$, dada pela Eq. (4.24), torna-se

$$y(x) = \int \frac{dx}{1+\gamma x} = \frac{\ln(1+\gamma x)}{\gamma}, \tag{4.36}$$

onde consideramos a constante $y_0 = 0$. Podemos concluir que a função q-exponencial pode ser utilizada para descrever sistemas com massa dependente da posição. Em particular, massas dependentes da posição na forma (4.34) estão associadas à transformação canônica entre um sistema com massa dependente da posição para outro com massa constante no caso trivial $V_{\rm ef}^{(a)}(y) = V(y)$. Em seguida, reobtemos a transformação de coordenadas $x \longrightarrow y = y(x)$ e a função massa (4.35) associados ao caso $a = -1/4$ em um contexto diferente.

4.2 Operadores translação, momento linear e espaço generalizados hermitianos

Introduzimos um fator de fase não normalizado [33] na Eq. (4.1) de modo que

$$\begin{aligned}\hat{T}_q(\varepsilon)|x\rangle &\equiv \exp_q\left[\frac{ig(x)\varepsilon}{\hbar}\right]\left|x+\varepsilon+\frac{1-q}{\xi}x\varepsilon\right\rangle \\ &= \exp_q\left[\frac{ig(x)\varepsilon}{\hbar}\right]|\xi(\tilde{x}\oplus_q\tilde{\varepsilon})\rangle,\end{aligned} \tag{4.37}$$

onde $g(x)$ é uma função contínua com dimensão de momento linear ($g(x)=0$ recupera a Eq.(4.1)), ε é um deslocamento infinitesimal, ξ é um comprimento característico, e $\tilde{x}\equiv x/\xi$ é uma posição adimensional. O símbolo γ na Eq. (4.1), como aparece em [11], foi trocado aqui por

$$\gamma_q \equiv \frac{1-q}{\xi}, \tag{4.38}$$

uma vez que a q-adição deve ser usada com variáveis adimensionais. O caso usual é recuperado para $q\to 1$ ($\gamma_q\to 0$).

A mecânica estatística não extensiva, proposta por Tsallis e desenvolvida por vários cientistas de diversos países do mundo, tem se mostrado nas últimas décadas uma teoria com grande potencial de aplicabilidade na área de sistemas complexos, e cujo índice entrópico q tem apresentado diversas interpretações físicas. Por exemplo, Tsallis e Lyra em [203] associam q com dimensões fractais. Lutz em [204] calcula analiticamente q em função de parâmetros da difusão anômala. No artigo [205], Burgala e Vinhas relacionam q com parâmetros da heliosfera. Diversas outras interpretações do parâmetro q podem ser encontradas em [9]. Conforme apresentaremos ao longo desta Tese, em muitas de nossas aplicações o parâmetro γ_q estará relacionado a um "volume" típico L do sistema de forma que $\gamma_q L\sim 1$, ou ainda,

$$1-q\propto\frac{\xi}{L}. \tag{4.39}$$

Desta forma podemos interpretar $1-q$ como uma medida de acoplamento entre o comprimento característico ξ e o volume L do sistema, e consequentemente uma medida de correlação entre a posição x e os deslocamentos ε da partícula. Quanto menor for o valor de ξ em relação a L, o que torna os deslocamentos aproximadamente lineares, mais próximo será o valor do parâmetro q de 1.

As funções q-exponencial de um número imaginário puro foram utilizadas para definir as funções trigonométricas generalizadas [31], como vimos no Capítulo 2, e que podem ser escritas como $\exp_q(\pm ix)=\rho_q(x)\exp_1[\pm i\phi_q(x)]$, com $\rho_q(x)$ e $\phi_q(x)$ dados pelas Eq.'s (2.147) e (2.148), respectivamente. Para $q=1$, recupera-se a função exponencial usual e o fator q-exponencial reduz-se a um fator de fase usual com norma unitária.

Similarmente ao operador definido por Eq. (4.1), $\hat{\mathcal{T}}_q(\varepsilon)$ também forma um grupo, *i.e.*,

$$\hat{\mathcal{T}}_q(\xi d\tilde{x}_1)\hat{\mathcal{T}}_q(\xi d\tilde{x}_2)|0\rangle = \hat{\mathcal{T}}_q(\xi(d\tilde{x}_1 \oplus_q d\tilde{x}_2))|0\rangle. \tag{4.40}$$

A aplicação do operador $\hat{\mathcal{T}}_q(\varepsilon)$ repetida n vezes no estado $|0\rangle$ da base $|\hat{x}\rangle$ leva a

$$\hat{\mathcal{T}}_q^n(\varepsilon)|0\rangle = \exp_q\left[n \odot_q \frac{ig(x)\varepsilon}{\hbar}\right]|n \odot_q \varepsilon\rangle, \tag{4.41}$$

onde $n \odot_q x$ é o produto generalizado dado pela Eq. (2.76).

Analisemos a seguir o efeito do operador $\hat{\mathcal{T}}_q$ sobre um vetor de estado $|\psi\rangle$. Seja $|\psi_\varepsilon\rangle \equiv \hat{\mathcal{T}}_q(\varepsilon)|\psi\rangle$, temos que

$$|\psi_\varepsilon\rangle = \hat{\mathcal{T}}_q(\varepsilon)\int |x'\rangle\langle x'|\psi\rangle dx' = \int \exp_q\left[\frac{ig(x')\varepsilon}{\hbar}\right]|x' + \varepsilon + \gamma_q x'\varepsilon\rangle\langle x'|\psi\rangle dx'. \tag{4.42}$$

A partir da mudança de variável $x'' = x' + \varepsilon + \gamma_q x'\varepsilon$, onde $x' = (x'' - \varepsilon)/(1 + \gamma_q\varepsilon)$ e $dx'' = (1 + \gamma_q\varepsilon)dx'$, obtemos que

$$|\psi_\varepsilon\rangle = \int \exp_q\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}g\left(\frac{x-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\right)\right]|\tilde{x}''\rangle\left\langle\frac{x''-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\middle|\psi\right\rangle\frac{dx''}{1+\gamma_q\varepsilon}. \tag{4.43}$$

Dada a função de estado $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, a função de estado q-transladada é dada por:

$$\begin{aligned}
\psi_\varepsilon(x) \equiv \langle x|\hat{\mathcal{T}}_q(\varepsilon)|\psi\rangle &= \int \exp_q\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}g\left(\frac{x-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\right)\right]\langle x|\tilde{x}''\rangle\left\langle\frac{x''-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\middle|\psi\right\rangle\frac{dx''}{1+\gamma_q\varepsilon} \\
&= \int \exp_q\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}g\left(\frac{x-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\right)\right]\delta(x''-x)\psi\left(\frac{x''-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\right)\frac{dx''}{1+\gamma_q\varepsilon} \\
&= \frac{1}{1+\gamma_q\varepsilon}\exp_q\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}g\left(\frac{x-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\right)\right]\psi\left(\frac{x-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\right) \\
&= \frac{1}{1+\gamma_q\varepsilon}\exp_q\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}g\left(\xi(\tilde{x} \ominus_q \tilde{\varepsilon})\right)\right]\psi(\xi(\tilde{x} \ominus_q \tilde{\varepsilon}).
\end{aligned} \tag{4.44}$$

Consideremos a seguir uma simples aplicação: seja $|\psi\rangle$ um estado representado na base $\{|\hat{x}\rangle\}$ por uma função q'-gaussiana normalizada e centrada em $x = 0$, dada por [69]

$$\psi_{q',\varepsilon}(x) = \frac{1}{\sqrt{2C_{q'}^2\sigma^2}}\exp_{q'}\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right), \tag{4.45}$$

com

$$C_{q'} = \begin{cases} \dfrac{2\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{1}{1-q'}\right)}{(3-q')\sqrt{1-q'}\Gamma\left(\frac{3-q'}{2(1-q')}\right)}, & q' < 1 \\ \sqrt{\pi}, & q' = 1 \\ \dfrac{2\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{3-q'}{2(q'-1)}\right)}{\sqrt{q'-1}\Gamma\left(\frac{1}{q'-1}\right)}, & 1 < q' < 3 \end{cases} \tag{4.46}$$

O efeito de $\hat{\mathcal{T}}_q(\varepsilon)$ em $|\psi\rangle$ leva à função de estado:

$$\psi_\varepsilon(x) = \frac{1}{\sqrt{2C_{q'}^2\sigma_q^2}} \exp_{q'}\left[-\frac{(x-\varepsilon)^2}{2\sigma_q^2}\right] \exp_q\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} g\left(\frac{x-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\right)\right], \tag{4.47}$$

com $\sigma_q = \sigma|1+\gamma_q\varepsilon|$, a qual é normalizada para uma aproximação até a primeira ordem em ε. Se $g(x) = 0$, o efeito de $\hat{\mathcal{T}}_q(\varepsilon)$ no pacote q'-gaussiano produz um desvio ε em x e um aumento na sua largura para $|1+\gamma_q\varepsilon| > 1$, ou diminuição para $|1+\gamma_q\varepsilon| < 1$. Como podemos observar, as funções $\psi_{q',\varepsilon}$ permacem normalizadas. A Figura 4.1 mostra o efeito do operador translação deformado sobre o pacote q'-gaussiano (4.45) para valores do parâmetro $q' = 1.0$, 0.5, 2.0 e 2.5, com $g(x) = 0$, $\varepsilon/\sigma = 1.0$, $\gamma_q\sigma = 0$, 0.2, e -0.2.

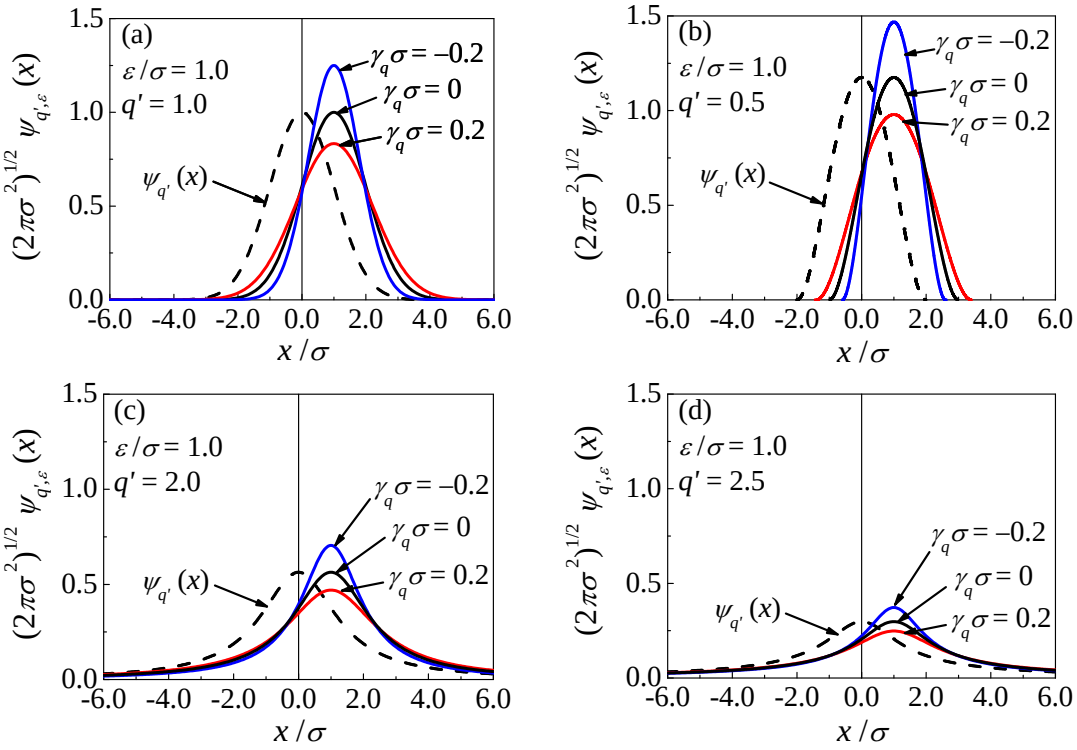


Figura 4.1: Curvas q'-gaussianas para valores de (a) $q' = 1.0$ (caso usual), (b) 0.5, (c) 2.0 e (d) 2.5, com $g(x) = 0$, $\gamma_q\sigma = 0$, 0.2 e -0.2, e $\varepsilon = \sigma$. A curva $\psi_{q'}(x)$ é mostrada de forma pontilhada para comparação.

A Eq. (4.40) naturalmente sugere a definição

$$\hat{\mathcal{T}}_q(\varepsilon) \equiv \exp_q\left(-\frac{i\varepsilon\hat{p}_q}{\hbar}\right), \tag{4.48}$$

onde $\hat{p}_q$ é o gerador de translações infinitesimais generalizado. Expandindo $\hat{\mathcal{T}}_q(\varepsilon)$ até a primeira ordem em ε, obtemos que

$$\hat{\mathcal{T}}_q(\varepsilon) = \hat{1} - \frac{i\varepsilon\hat{p}_q}{\hbar} + ... \tag{4.49}$$

Façamos a seguir, a expansão em série de Taylor da função $\psi\left(\frac{x-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\right)$ em torno de x. Temos que:

$$\begin{aligned}
\psi\left(\frac{x-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\right) &= \psi(x) + \left[\left(\frac{x-\varepsilon}{1+\gamma_q\varepsilon}\right) - x\right]\frac{d\psi(x)}{dx} + ... \\
&= \psi(x) - \varepsilon\left(\frac{1+\gamma_q x}{1+\gamma_q\varepsilon}\right)\frac{d\psi(x)}{dx} + ... \\
&= \psi(x) - \varepsilon(1-\gamma_q\varepsilon+...)(1+\gamma_q x)\frac{d\psi(x)}{dx} + ... \\
&= \psi(x) - \varepsilon(1+\gamma_q x)\frac{d\psi(x)}{dx} + ...
\end{aligned} \tag{4.50}$$

Desta forma, temos que a expansão até a primeira ordem em ε da função de estado transladada $\psi_\varepsilon(x)$ dada pela Eq. (4.44) é

$$\begin{aligned}
\psi_\varepsilon(x) &= (1-\gamma_q\varepsilon+...)(1+\varepsilon C+....)\left[\psi(x) - \varepsilon(1+\gamma_q x)\frac{d\psi}{dx} + ...\right] \\
&= \psi(x) - \left[\gamma_q\psi(x) + (1+\gamma_q x)\frac{d\psi}{dx} - C\psi(x)\right]\varepsilon + ...,
\end{aligned} \tag{4.51}$$

onde C é uma constante obtida a partir da expansão de $\exp_q(ig(x)\varepsilon/\hbar)$ em potências de ε. Substituindo as Eq.'s (4.49) e (4.51) na Eq. (4.44), temos que

$$\psi(x) - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\langle x|\hat{p}_q|\psi\rangle + ... = \psi(x) - \gamma_q\psi(x)\varepsilon - (1+\gamma_q x)\frac{d\psi}{dx}\varepsilon + C\psi(x)\varepsilon + ...$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}
\langle x|\hat{p}_q|\psi\rangle &= -i\hbar\gamma_q\psi(x) - i\hbar(1+\gamma_q x)\frac{d\psi}{dx} + i\hbar C\psi(x) \\
&= -i\hbar\frac{d}{dx}[(1+\gamma_q x)\psi(x)] + i\hbar C\psi(x),
\end{aligned} \tag{4.52}$$

cujo operador $\hat{p}_q$ pode ser explicitamente escrito como

$$\hat{p}_q = \hat{p}(1+\gamma_q\hat{x}) + i\hbar C\hat{1}. \tag{4.53}$$

Ao impor que $\hat{p}_q$ seja um operador hermitiano, obtemos $C = \gamma_q/2$. Portanto

$$\hat{p}_q = \hat{p}(\hat{1} + \gamma_q\hat{x}) + \frac{1}{2}i\hbar\gamma_q\hat{1} = (\hat{1} + \gamma_q\hat{x})\hat{p} - \frac{1}{2}i\hbar\gamma_q\hat{1}, \tag{4.54}$$

i.e.,

$$\hat{p}_q = \frac{(\hat{1} + \gamma_q\hat{x})\hat{p}}{2} + \frac{\hat{p}(\hat{1} + \gamma_q\hat{x})}{2}, \tag{4.55}$$

com $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\hat{1}$.

Seja a derivada deformada dada pela Eq. (2.113), reescrita convenientemente na forma

$$D_{\gamma_q} \equiv (1 + \gamma_q)\frac{d}{dx}. \tag{4.56}$$

Temos que o efeito do operador $\hat{p}_q$ sobre um estado $|\psi\rangle$ na base $\{|\hat{x}\rangle\}$ é

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}_q|\psi\rangle &= -i\hbar(1 + \gamma_q x)\frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{1}{2}i\hbar\gamma_q\psi(x) \\ &= -i\hbar D_{\gamma_q}\psi(x) - \frac{1}{2}i\hbar\gamma_q\psi(x), \end{aligned} \tag{4.57}$$

o que difere do efeito do operador não hermitiano $\hat{p}'_q$ sobre o estado $|\psi\rangle$ na base $\{|\hat{x}\rangle\}$:

$$\langle x|\hat{p}'_q|\alpha\rangle = -i\hbar D_{\gamma_q}\psi(x). \tag{4.58}$$

Usando a propriedade dada pela Eq. (4.11) com $F(\hat{x}) = (\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{1/2}$, temos que

$$[\hat{p}, (\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{1/2}] = -\frac{1}{2}i\hbar\gamma_q(\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{-1/2}, \tag{4.59}$$

ou seja,

$$\hat{p}(\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{1/2} = (\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{1/2}\hat{p} - \frac{1}{2}i\hbar\gamma_q(\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{-1/2}. \tag{4.60}$$

A partir destas relações, podemos reescrever a Eq. (4.54). De fato, temos que:

$$\begin{aligned} \hat{p}_q &= \hat{p}(\hat{1} + \gamma_q\hat{x}) + \frac{1}{2}i\hbar\gamma_q\hat{1} \\ &= \hat{p}(\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{1/2}(\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{1/2} + \frac{1}{2}i\hbar\gamma_q\hat{1} \\ &= \left[(\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{1/2}\hat{p} - \frac{1}{2}i\hbar\gamma_q(\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{-1/2}\right](\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{1/2} + \frac{1}{2}i\hbar\gamma_q\hat{1} \\ &= (\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{1/2}\,\hat{p}\,(\hat{1} + \gamma_q\hat{x})^{1/2}. \end{aligned} \tag{4.61}$$

Portanto uma relação útil que nos dá o efeito do operador $\hat{p}_q$ sob o estado $|\psi\rangle$ é:

$$\langle x|\hat{p}_q|\psi\rangle = \sqrt{1 + \gamma_q x}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\left[\sqrt{1 + \gamma_q x}\psi(x)\right]. \tag{4.62}$$

Uma consequência imediata do fato de trabalharmos com um operador $\hat{p}_q$ hermitiano é que seus autovalores são reais. A equação de autovalores e autoestados

$$\hat{p}_q|\psi\rangle = \hbar k|\psi\rangle, \tag{4.63}$$

fica escrita na base $\{|\hat{x}\rangle\}$ como

$$-i\hbar(1+\gamma_q x)\frac{d\psi_k}{dx} - i\hbar\frac{\gamma_q}{2}\psi_k(x) = \hbar k\psi_k(x), \tag{4.64}$$

onde utilizamos a Eq. (4.57), e que $\psi_k(x) = \langle x|\psi\rangle$ são as autofunções de $\hat{p}_q$ na base $\{|\hat{x}\rangle\}$. Esta equação é separável, e pode ser reescrita na forma

$$\frac{d\psi_k}{\psi_k} = i\left(k + i\frac{\gamma_q}{2}\right)\frac{dx}{1+\gamma_q x}. \tag{4.65}$$

Integrando a equação acima, obtemos $\psi_k(x)$:

$$\ln\psi_k(x) = i\left(k + i\frac{\gamma_q}{2}\right)\frac{\ln(1+\gamma_q x)}{\gamma_q} + \text{constante}, \tag{4.66}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
\psi_k(x) &= A\exp\left[i\left(k+\frac{i\gamma_q}{2}\right)\frac{\ln(1+\gamma_q x)}{\gamma_q}\right] \\
&= A\exp\left[ik\frac{\ln(1+\gamma_q x)}{\gamma_q}\right]\exp\left[-\frac{1}{2}\ln(1+\gamma_q x)\right] \\
&= \frac{A}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\exp\left[ik\frac{\ln(1+\gamma_q x)}{\gamma_q}\right] \\
&= \frac{A}{\sqrt{1+(1-q)x/\xi}}\left[\exp_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right]^{(ik\xi)} \\
&= \frac{A}{\sqrt{1+(1-q)x/\xi}}\exp_q\left[(ik\xi)\odot_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right],
\end{aligned} \tag{4.67}$$

onde utilizamos as relações dadas pelas Eq.'s (2.77) e (4.38). Desta forma, obtemos as autofunções do operador momento linear $\hat{p}_q$.

Desejando explorar mais algumas algumas características do operador $\hat{p}_q$, seja $\hat{x}_q = \hat{x}_q(\hat{x})$ o seu operador espaço canonicamente conjugado, *i.e.*, $[\hat{x}_q, \hat{p}_q] = i\hbar\hat{1}$, e a partir da Eq. (4.54), segue que

$$\begin{aligned}
i\hbar\hat{1} &= \left[\hat{x}_q(\hat{x}), \hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x}) + \frac{1}{2}i\hbar\gamma_q\hat{1}\right] = [\hat{x}_q(\hat{x}),\hat{p}] + [\hat{x}_q(\hat{x}),\gamma_q\hat{p}\hat{x}] \\
&= [\hat{x}_q(\hat{x}),\hat{p}] + \gamma_q[\hat{x}_q(\hat{x}),\hat{p}]\hat{x} + \gamma_q\hat{p}[\hat{x}_q(\hat{x}),\hat{x}] \\
&= [\hat{x}_q(\hat{x}),\hat{p}](\hat{1}+\gamma_q\hat{x}),
\end{aligned} \tag{4.68}$$

onde esta última pode ser escrita como

$$i\hbar(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^{-1} = i\hbar\frac{d\hat{x}_q(\hat{x})}{d\hat{x}}. \tag{4.69}$$

Integrando a última equação com $\hat{x}_q(\hat{x}=0)=0$, obtemos

$$\hat{x}_q = \frac{\ln(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})}{\gamma_q} = \xi\ln[\exp_q(\hat{x}/\xi)], \tag{4.70}$$

que tem a mesma forma do q-número dado pela Eq. (2.85). Portanto vemos que a mudança de espaço $\hat{x}_q \longrightarrow \hat{x}$ leva uma adição usual de duas posições no espaço deformado $\{|\hat{x}_q\rangle\}$ em uma q-adição de duas posições no espaço usual $\{|\hat{x}\rangle\}$, *i.e.*, $(x'_q/\xi)+(x_q/\xi) \longrightarrow (x'/\xi)\oplus_q (x/\xi)$.

Enfatizamos um resultado importante: uma vez que os operadores espaço e momento linear deformados, $\hat{x}_q$ e $\hat{p}_q$, são canonicamente conjugados, estes formam uma transformação canônica $(\hat{x}_q,\hat{p}_q) \longrightarrow (\hat{x},\hat{p})$. A partir das Eq.'s (4.55) e (4.70), temos que a transformação canônica é

$$\begin{cases} \hat{p}_q = \dfrac{(1+\gamma_q\hat{x})\hat{p}}{2} + \dfrac{\hat{p}(1+\gamma_q\hat{x})}{2}, \\ \\ \hat{x}_q = \dfrac{\ln(1+\gamma_q\hat{x})}{\gamma_q} = \xi\ln\left[\exp_q(\hat{x}/\xi)\right]. \end{cases} \tag{4.71}$$

Transformações similares a esta, utilizando os operador momento linear não hermitiano (4.2) e operador posição deformado (4.70), *i.e.* $(\hat{x},\hat{p}'_q) \longleftrightarrow (\hat{x}_q,\hat{p})$, foram utilizadas em [32]. Em uma linha diferente, discutiremos a seguir as implicações físicas desta transformação canônica $(\hat{x}_q,\hat{p}_q) \longrightarrow (\hat{x},\hat{p})$ nos formalismos clássico e quântico.

4.3 Equações lineares q-deformadas da dinâmica no formalismo quântico

Consideremos um sistema quântico descrito pelo operador hamiltoniano $\hat{K}(\hat{x}_q, \hat{p}_q)$ na base de coordenadas $\{|\hat{x}_q\rangle\}$. Para o estado $|\alpha(t)\rangle$, a equação de Schrödinger é

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha(t)\rangle = \hat{K}(\hat{x}_q, \hat{p}_q)|\alpha(t)\rangle \tag{4.72}$$

onde consideraremos

$$\hat{K}(\hat{x}_q, \hat{p}_q) = \frac{1}{2m_0}\hat{p}_q^2 + V(\hat{x}_q), \tag{4.73}$$

i.e., um sistema de massa constante m_0 em um espaço deformado e submetida a um potencial independente do tempo $V(\hat{x}_q)$. Seja $\Phi(x_q, t) \equiv \langle x_q|\alpha(t)\rangle$, então a equação de Schrödinger torna-se:

$$i\hbar\frac{\partial\Phi(x_q,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2\Phi(x_q,t)}{\partial x_q^2} + V(x_q)\Phi(x_q,t). \tag{4.74}$$

Para $\Phi(x_q, t) = \varphi(x_q)e^{-iEt/\hbar}$, onde $\varphi(x_q)$ é a função de estado na base $\{|\hat{x}_q\rangle\}$, temos a seguinte equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\varphi(x_q)}{dx_q^2} + V(x_q)\varphi(x_q) = E\varphi(x_q). \tag{4.75}$$

Evidentemente, sendo a densidade de probabilidade $\varrho(x_q, t) = |\Phi(x_q, t)|^2$, para a equação de onda (4.74), torna-se válida a equação de continuidade

$$\frac{\partial\varrho(x_q,t)}{\partial t} = -\frac{\partial\mathcal{J}(x_q,t)}{\partial x_q}, \tag{4.76}$$

com a densidade de corrente dada por

$$\mathcal{J}(x_q, t) \equiv \mathrm{Re}\left\{\Phi^*(x_q,t)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_q}\right)\left[\frac{1}{m_0}\Phi(x_q,t)\right]\right\}. \tag{4.77}$$

A partir da transformação canônica (4.71), a equação de Schrödinger para o estado $|\alpha(t)\rangle$ na base $\{|\hat{x}\rangle\}$ é

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha(t)\rangle = \hat{H}(\hat{x}, \hat{p})|\alpha(t)\rangle, \tag{4.78}$$

com o operador hamiltoniano

$$\begin{aligned}\hat{H}(\hat{x},\hat{p}) &= \hat{K}(\hat{x}_q(\hat{x},\hat{p}),\hat{p}_q(\hat{x},\hat{p})) \\ &= \frac{1}{2m_0}\left[\frac{(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}}{2}+\frac{\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})}{2}\right]^2+V(\hat{x}) \\ &= \frac{1}{2m_0}\left[(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^{1/2}\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^{1/2}\right]^2+V(\hat{x}) \\ &= \frac{1}{2m_0}\left[(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^{1/2}\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^{1/2}\right]+V(\hat{x}), \qquad (4.79)\end{aligned}$$

onde utilizamos a relação (4.61). Este operador hamiltoniano está de acordo com aquele introduzido por von Roos [154] para sistemas com o operador massa dependente da posição dado por

$$m(\hat{x}) = \frac{m_0}{(1+\gamma_q\hat{x})^2}, \qquad (4.80)$$

e da qual o operador hamiltoniano pode ser reescrito como

$$\hat{H}(\hat{x},\hat{p}) = \frac{1}{2}[m(\hat{x})]^{-1/4}\hat{p}\,[m(\hat{x})]^{-1/2}\hat{p}\,[m(\hat{x})]^{-1/4}+V(\hat{x}). \qquad (4.81)$$

Podemos escrever ainda o operador hamiltoniano de outra forma. A partir da Eq. (4.54), temos que:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m_0}\left[(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}-\frac{1}{2}i\hbar\gamma_q\hat{1}\right]^2+V(\hat{x}) \\ &= \frac{1}{2m_0}\left[(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}-i\gamma_q\hbar(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}-\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{4}\hat{1}\right]+V(\hat{x}). \qquad (4.82)\end{aligned}$$

Notando que $[\hat{p},\hat{1}+\gamma_q\hat{x}] = -i\hbar\gamma_q\hat{1}$, temos que $\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x}) = (\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}-i\hbar\gamma_q\hat{1}$. A partir desta relação, o operador hamiltoniano acima pode ser escrito como:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\hat{p}^2-\frac{i\hbar\gamma_q}{m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}-\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\hat{1}+V(\hat{x}), \qquad (4.83)$$

ou ainda

$$\hat{H} \doteq -\frac{\hbar^2}{2m_0}(1+\gamma_q x)^2\frac{d^2}{dx^2}-\frac{\hbar\gamma_q}{m_0}(1+\gamma_q x)\frac{d}{dx}-\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}+V(x). \qquad (4.84)$$

O operador hamiltoniano acima está de acordo com aquele dado pela Eq. (4.12) para a função massa $m(x)$ dada por (4.80) e $a=-1/4$, conforme pode ser verificado.

Utilizando o operador $\hat{H}$ na forma acima, a equação de Schrödinger (4.78) escrita

explicitamente em termos da função de onda $\Psi(x,t) \equiv \langle x|\alpha(t)\rangle$ torna-se

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2(1+\gamma_q x)^2}{2m_0}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{m_0}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\Psi(x,t) \\ &\quad +V(x)\Psi(x,t). \end{aligned} \tag{4.85}$$

Esta equação de onda é espacialmente não homogêna devido ao efeito da massa dependente da posição, mas mantém propriedades semelhantes ao caso usual: temporalmente homogênea, e linear para o campo $\Psi(x,t)$. Como o termo de energia potencial $V(\hat{x})$ não dependente explicitamente do tempo, podemos aplicar o método de separação de variáveis similar ao caso utilizado para sistemas com massa constante. Desta forma, seja $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, onde $\psi(x)$ é a função de estado na base $\{|\hat{x}\rangle\}$, e E é a energia do sistema, obtemos a seguinte equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2(1+\gamma_q x)^2}{2m_0}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{m_0}\frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{4.86}$$

Seja a densidade de probabilidade $\rho(x,t) \equiv |\Psi(x,t)|^2$, esta obedece a equação de continuidade

$$\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial J(x,t)}{\partial x} = 0, \tag{4.87}$$

onde a densidade de corrente é dada por

$$J(x,t) \equiv \mathrm{Re}\left\{\Psi^*(x,t)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{1}{m(x)}\Psi(x,t)\right]\right\}. \tag{4.88}$$

De fato, para a densidade de probabilidade $\rho(x,t)$ temos que sua taxa de variação temporal é

$$\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} = \Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial t}\Psi(x,t). \tag{4.89}$$

A partir da Eq. (4.85), temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2im_0}(1+\gamma_q x)^2\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\hbar\gamma_q}{im_0}(1+\gamma_q x)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} - \frac{\hbar\gamma^2}{8im_0}\Psi(x,t) \\ &\quad +\frac{1}{i\hbar}V(x)\Psi(x,t), \end{aligned} \tag{4.90a}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial t} &= \frac{\hbar}{2im_0}(1+\gamma_q x)^2\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\hbar\gamma_q}{im_0}(1+\gamma_q x)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x} + \frac{\hbar\gamma^2}{8im_0}\Psi^*(x,t) \\ &\quad -\frac{1}{i\hbar}V(x)\Psi^*(x,t). \end{aligned} \tag{4.90b}$$

Substituindo as Eq.'s (4.90) na Eq. (4.89), obtemos:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2im_0}(1+\gamma_q x)^2\Psi^*(x,t)\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\hbar\gamma_q}{im_0}(1+\gamma_q x)\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} \\ &\quad +\frac{\hbar}{2im_0}(1+\gamma_q x)^2\Psi(x,t)\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\hbar\gamma_q}{im_0}(1+\gamma_q x)\Psi(x,t)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}. \quad (4.91)\end{aligned}$$

Da função massa (4.80), segue que:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2i}\left\{\frac{1}{m(x)}\Psi^*(x,t)\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}\right. \\ &\quad \left. -\frac{1}{m(x)}\Psi(x,t)\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\Psi(x,t)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\right\} \\ &= -\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial x}\left\{\frac{1}{m(x)}\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} - \frac{1}{m(x)}\Psi(x,t)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\right\} \\ &= -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left\{\Psi^*(x,t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{m(x)}\Psi(x,t)\right] - \Psi(x,t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{m(x)}\Psi^*(x,t)\right]\right\} \\ &= -\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{Re}\left\{\Psi^*(x,t)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{1}{m(x)}\Psi(x,t)\right]\right\}, \quad (4.92)\end{aligned}$$

e que pode ser escrita como $\partial\rho(x,t)/\partial t = -\partial J(x,t)/\partial x$, com a densidade de corrente dada pela Eq. (4.88), como queríamos demonstrar.

A Eq. (4.85) pode ser convenientemente reescrita por meio de uma transformação frequentemente utilizada em problemas de sistemas com massa dependente da posição, e que discutimos na Seção 4.1. Da Eq. (4.30), seja $\Psi(x,t) \propto [m(x)]^{1/4}\Phi_q(x,t)$, temos

$$\Psi(x,t) \equiv \frac{\Phi_q(x,t)}{\sqrt{1+\gamma_q x}}. \quad (4.93)$$

Como

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} = -\frac{\gamma_q}{2}(1+\gamma_q x)^{-3/2}\Phi_q(x,t) + (1+\gamma_q x)^{-1/2}\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x}, \quad (4.94)$$

e que

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} &= \frac{3\gamma_q^2}{4}(1+\gamma_q x)^{-5/2}\Phi_q(x,t) - \gamma_q(1+\gamma_q x)^{-3/2}\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x} \\ &\quad +(1+\gamma_q x)^{-1/2}\frac{\partial^2\Phi_q(x,t)}{\partial x^2}. \quad (4.95)\end{aligned}$$

Do operador energia cinética

$$\hat{T}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2(1+\gamma_q x)^2}{2m_0}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{m_0}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\Psi(x,t), \quad (4.96)$$

substituindo as Eq.'s (4.94) e (4.95), segue que

$$\begin{aligned}
\hat{T}\Psi(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}(1+\gamma_q x)^2\left[\frac{3\gamma_q^2}{4}(1+\gamma_q x)^{-5/2}\Phi_q(x,t) - \gamma_q(1+\gamma_q x)^{-3/2}\Phi_q(x,t)\right.\\
&\quad \left.+(1+\gamma_q x)^{-1/2}\frac{\partial^2\Phi_q(x,t)}{\partial x^2}\right]\\
&\quad -\frac{\hbar^2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{m_0}\left[-\frac{\gamma_q}{2}(1+\gamma_q x)^{-3/2}\Phi_q(x,t) + (1+\gamma_q x)^{-1/2}\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x}\right]\\
&\quad -\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}(1+\gamma_q x)^{-1/2}\Phi_q(x,t)\\
&= -\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}(1+\gamma_q x)^{-1/2}\Phi_q(x,t) + \frac{\hbar^2\gamma_q}{2m_0}(1+\gamma_q x)^{1/2}\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x}\\
&\quad -\frac{\hbar^2}{2m_0}(1+\gamma_q x)^{3/2}\frac{\partial^2\Phi_q(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{2m_0}(1+\gamma_q x)^{-1/2}\Phi_q(x,t)\\
&\quad -\frac{\hbar^2\gamma_q}{m_0}(1+\gamma_q x)^{1/2}\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x} - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}(1+\gamma_q x)^{-1/2}\Phi_q(x,t)\\
&= -\frac{\hbar^2}{2m_0}(1+\gamma_q x)^{3/2}\frac{\partial^2\Phi_q(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q}{2m_0}(1+\gamma_q x)^{1/2}\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x}. \qquad (4.97)
\end{aligned}$$

Notando que

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left[(1+\gamma_q x)^{-1/2}\Phi_q(x,t)\right] = (1+\gamma_q x)^{-1/2}\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial t}, \qquad (4.98)$$

temos portanto que a equação de Schrödinger (4.85) para sistemas com massa dependente da posição em termos do campo $\Phi_q(x,t)$ pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
i\hbar(1+\gamma_q x)^{-1/2}\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}(1+\gamma_q)^{3/2}\frac{\partial^2\Phi_q(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q}{2m_0}(1+\gamma_q)^{1/2}\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x}\\
&\quad +V(x)(1+\gamma_q x)^{-1/2}\Phi_q(x,t), \qquad (4.99)
\end{aligned}$$

ou ainda,

$$i\hbar\frac{\partial\Phi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2(1+\gamma_q x)^2}{2m_0}\frac{\partial^2\Phi_q(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{2m_0}\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x} + V(x)\Phi(x,t). \qquad (4.100)$$

A partir da definição da derivada parcial deformada

$$\mathcal{D}_{\gamma_q}\Phi_q(x,t) = (1+\gamma_q x)\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x}, \qquad (4.101)$$

temos que:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\Phi_q(x,t) &= (1+\gamma_q x)\frac{\partial}{\partial x}\left[(1+\gamma_q x)\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x}\right] \\ &= (1+\gamma_q x)^2\frac{\partial^2\Phi_q(x,t)}{\partial x^2}+\gamma_q(1+\gamma_q x)\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x}. \end{aligned} \tag{4.102}$$

Utilizando a relação acima, a Eq. (4.100) pode ser reescrita na forma de uma equação de Schrödinger deformada:

$$i\hbar\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\Phi_q(x,t)+V(x)\Phi_q(x,t). \tag{4.103}$$

A equação acima está associada ao operador hamiltoniano dado em termos do operador momento linear não hermitiano (4.2), *i.e.*,

$$\begin{aligned}\hat{H}' &= \frac{1}{2m_0}(\hat{p}'_q)^2+V(\hat{x}) \\ &= \frac{1}{2m_0}(1+\gamma_q\hat{x})\hat{p}(1+\gamma_q\hat{x})\hat{p}+V(\hat{x}), \end{aligned} \tag{4.104}$$

onde $\hat{H}'$ é um operador hermitiano.

Os estados estacionários para a Eq. (4.103) são obtidos considerando a função de onda $\Phi_q(x,t)=\varphi_q(x)e^{-iEt/\hbar}$, ou ainda, a equação de Schrödinger deformada independente do tempo é

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}D^2_{\gamma_q}\varphi_q(x)+V(x)\varphi_q(x)=E\varphi_q(x). \tag{4.105}$$

A equação de Schrödinger acima possui uma q-derivada (2.113) espacial ao invés de uma derivada espacial usual.

Notemos que existe uma equivalência entre descrever um sistema hamiltoniano hermitiano, com termo de energia cinética de uma massa dependente da posição, e um sistema hamiltoniano não hermitiano com termo de energia cinética deformado em termos da q-derivada espacial. Ademais, o campo $\Psi(x,t)$ é substituído por um novo campo $\Phi_q(x,t)$. Interpretamos isto como o efeito da massa dependente da posição (4.80) poder ser substituído por um operador derivada deformada na equação de Schrödinger que descreve a dinâmica da partícula no espaço usual.

Curiosamente, as Eq.'s (4.85) e (4.103) apresentam o mesmo espectro, ou seja, mesmo utilizando o operador não hermitiano $\hat{H}'$ obtemos um espectro real para este operador. É possível encontrar na literatura outros trabalhos envolvendo operadores não hermitianos que podem apresentar autovalores de energia reais [206, 207].

Esta equação de Schrödinger deformada foi proposta inicialmente em [11], e que corresponde a uma equação similar a equação de Schrödinger para o campo $\Phi_q(x,t)$ usando o operador não hermitiano $\hat{p}'_q$. A Eq. (4.103) também poderia ser obtida diretamente

a partir da Eq. (4.74), e vice-versa, pelas simples mudanças de variável $x \leftrightarrow x_q$, *i.e.*, $\Phi_q(x,t) = \Phi(x_q(x),t)$, ou $\Phi(x_q,t) = \Phi_q(x(x_q),t)$.

Notemos que se o campo $\Phi(x_q,t)$ é a solução da equação de Schrödinger na base $\{|\hat{x}_q\rangle\}$, então o campo $\Psi(x,t)$ é sua solução na base $\{|\hat{x}\rangle\}$. Portanto, a equação de Schrödinger para o campo $\Psi(x,t)$ relativa a um sistema com massa dependente da posição no espaço usual $\{|\hat{x}\rangle\}$ é mapeada em uma equação para o campo $\Phi(x_q,t)$ de um sistema com massa constante em um espaço deformado $\{|\hat{x}_q\rangle\}$. Além disso, observamos que se $\Phi(x_q,t)$ é normalizado, então $\Psi(x,t)$ é também normalizado. De fato, pela Eq. (4.93) temos que

$$\int_{x_{q,i}}^{x_{q,f}} \Phi^*(x_q,t)\Phi(x_q,t)dx_q = \int_{x_i}^{x_f} \frac{\Phi_q^*(x,t)\Phi_q(x,t)}{1+\gamma_q x}dx = 1 \leftrightarrow \int_{x_i}^{x_f} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = 1. \tag{4.106}$$

No entanto, $\int_{x_i}^{x_f} \Phi_q^*(x,t)\Phi_q(x,t)dx \neq 1$, ou seja, $|\Phi_q(x,t)|^2$ não conserva a probabilidade na base $\{|\hat{x}\rangle\}$. Podemos observar que para que a Eq. (4.103) possa ser considerada como uma equação de Schrödinger deformada, o produto interno de duas funções deve ser também deformado de modo que a conservação de probabilidade seja satisfeita. De fato, temos que o campo $\Phi_q(x,t)$ é normalizado através uma q-integral (2.127)

$$\int_{x_i}^{x_f} \Phi_q^*(x,t)\Phi_q(x,t)d_qx = 1, \tag{4.107}$$

o que poderíamos definir como uma condição de normalização deformada, ou seja, normalizada através da q-integral dada pela Eq. (2.127). Isto pode feito através do produto interno q-deformado, conforme definido em [32], tal que:

$$\begin{aligned}
\langle\varphi_b(x)|\varphi_a(x)\rangle_q &\equiv \int_{x_i}^{x_f} \frac{\varphi_b^*(x)\varphi_a(x)}{1+\gamma_q x}dx \\
&= \int_{x_i}^{x_f} \varphi_b^*(x)\varphi_a(x)d_qx \\
&= \int_{x_{q,i}}^{x_{q,f}} \varphi_b^*(x_q)\varphi_a(x_q)dx_q \\
&= \langle\varphi_b(x_q)|\varphi_a(x_q)\rangle.
\end{aligned} \tag{4.108}$$

Pode-se verificar imediatamente que o produto interno $\langle\varphi_b(x)|\varphi_a(x)\rangle_q$ é uma forma bilinear uma vez que satisfaz as propriedades:

$$\langle\varphi_b(x)+\varphi_c(x)|\varphi_a(x)\rangle_q = \langle\varphi_b(x)|\varphi_a(x)\rangle_q + \langle\varphi_c(x)|\varphi_a(x)\rangle_q, \tag{4.109a}$$

$$\langle\varphi_a(x)|\varphi_b(x)+\varphi_c(x)\rangle_q = \langle\varphi_a(x)|\varphi_b(x)\rangle_q + \langle\varphi_a(x)|\varphi_c(x)\rangle_q, \tag{4.109b}$$

$$\alpha\langle\varphi_b(x)|\varphi_a(x)\rangle_q = \langle\alpha\varphi_b(x)|\varphi_a(x)\rangle_q = \langle\varphi_b(x)|\alpha\varphi_a(x)\rangle_q \tag{4.109c}$$

Em termos do campo Φ_q, seja a densidade de probabilidade q-normalizada $\varrho_q(x,t) \equiv$

$|\Phi_q(x,t)|^2$, e uma vez que $|\Psi(x,t)|^2(1+\gamma_q x) = |\Phi_q(x,t)|^2 = |\Phi(x_q(x),t)|^2$, temos

$$\rho(x,t) = \frac{\varrho_q(x,t)}{1+\gamma_q x} = \frac{\varrho(x_q(x),t)}{1+\gamma_q x}. \tag{4.110}$$

A equação de continuidade deformada para $\varrho_q(x,t)$ é

$$\frac{\partial \varrho_q(x,t)}{\partial t} + \mathcal{D}_{\gamma_q}\mathcal{J}_q(x,t) = 0, \tag{4.111}$$

com uma densidade de corrente deformada definida por

$$\mathcal{J}_q(x,t) \equiv \mathrm{Re}\left[\Phi_q^*(x,t)\left(\frac{\hbar}{i}\mathcal{D}_{\gamma_q}\right)\left(\frac{\Phi_q(x,t)}{m_0}\right)\right]. \tag{4.112}$$

A demonstração é similar àquela que fizemos para a densidade de corrente em termos do campo $\Psi(x,t)$. Da Eq. (4.103), temos

$$\frac{\partial \Phi_q(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2im_0}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\Phi_q(x,t) + \frac{1}{i\hbar}V(x)\Phi_q(x,t). \tag{4.113a}$$

e

$$\frac{\partial \Phi_q^*(x,t)}{\partial t} = \frac{\hbar}{2im_0}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\Phi_q^*(x,t) - \frac{1}{i\hbar}V(x)\Phi_q^*(x,t). \tag{4.113b}$$

Segue que, a taxa de variação temporal de $\varrho_q(x,t)$ em termos do campo $\Phi_q(x,t)$ é

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \varrho_q(x,t)}{\partial t} &= \Phi_q^*(x,t)\frac{\partial \Phi_q(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial \Phi_q^*(x,t)}{\partial t}\Phi_q(x,t) \\
&= -\left(\frac{\hbar}{2m_0 i}\right)\left[\Phi_q^*(x,t)\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\Phi_q(x,t) - \Phi_q(x,t)\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\Phi_q^*(x,t)\right] \\
&= -\left(\frac{\hbar}{2m_0 i}\right)\mathcal{D}_{\gamma_q}\left[\Phi_q^*(x,t)\mathcal{D}_{\gamma_q}\Phi_q(x,t) - \Phi_q(x,t)\mathcal{D}_{\gamma_q}\Phi_q^*(x,t)\right] \\
&= -\mathcal{D}_{\gamma_q}\left\{\mathrm{Re}\left[\Phi_q^*(x,t)\left(\frac{\hbar}{i}\mathcal{D}_{\gamma_q}\right)\left(\frac{\Phi_q(x,t)}{m_0}\right)\right]\right\}.
\end{aligned} \tag{4.114}$$

e que corresponde à equação de continuidade (4.111) para uma densidade de corrente deformada dada pela Eq. (4.112). Este mesmo resultado poderia ter sido obtido fazendo a mudança de variável $x_q \to x$ na equação de continuidade usual em um espaço deformado dada por (4.76). Neste caso, obtemos que $\mathcal{J}_q(x,t) = \mathcal{J}(x_q(x),t)$. Uma outra alternativa seria utilizar a mudança de campos dada pela Eq. (4.93) na expressão da densidade de probabilidade $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$ e da densidade de corrente $J(x,t)$ expressa pela Eq. (4.88) que descreve o sistema com massa dependente da posição. Neste caso, obtém-se imediatamente $\mathcal{J}_q(x,t) = J(x,t)$.

Conforme vimos nesta Seção, o sistema com massa dependente da posição dada pela Eq. (4.80) leva a possíveis deformações das equações da mecânica quântica, onde o ope-

rador derivada usual é substituído pela q-derivada (2.113). Por lado, outras funções $m(x)$ poderiam levar à definição de outras derivadas deformadas, assim como diferentes deformações das equações da mecânica quântica em relação ao que temos apresentado. De fato, dado uma função massa $m(x)$, a partir da Eq. (4.24) podemos determinar uma variável $y(x)$ e consequentemente definir uma derivada generalizada $D_{m(x)}\varphi(x)$ tal que

$$\frac{d\varphi(y)}{dy} = \frac{d\varphi(x)}{dx}\frac{dx}{dy} = \frac{1}{y'(x)}\frac{d\varphi(x)}{dx} = \sqrt{\frac{m_0}{m(x)}}\frac{d\varphi(x)}{dx} = \frac{d\varphi(x)}{d_{m(x)}x} = D_{m(x)}\varphi(x), \tag{4.115}$$

onde $d_{m(x)}x \equiv \sqrt{m(x)/m_0}dx$ é um elemento diferencial generalizado para sistemas com massa dependente da posição. Consequentemente, a equação de Schrödinger independente do tempo generalizada (4.28) para $a = -1/4$ torna-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\sqrt{\frac{m_0}{m(x)}}\frac{d}{dx}\right)\left(\sqrt{\frac{m_0}{m(x)}}\frac{d}{dx}\right)\varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x), \tag{4.116}$$

ou ainda,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}D^2_{m(x)}\varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x). \tag{4.117}$$

Da Eq. (4.31), a pseudofunção de estado $\varphi(x) = [m_0/m(x)]^{1/4}\psi(x)$ satisfaz à condição de normalização através da integral generalizada

$$\int_{x_i}^{x_f} |\varphi(x)|^2 d_{m(x)}x = 1. \tag{4.118}$$

A equação de Schrödinger generalizada pode ser escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\mathcal{D}^2_{m(x)}\Phi(x,t) + V(x)\Phi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Phi(x,t)}{\partial t}, \tag{4.119}$$

com a derivada parcial deformada $\mathcal{D}_{m(x)} \equiv \sqrt{m_0/m(x)}\partial/\partial x$.

Sendo a pseudodensidade de probabilidade generalizada para um sistema com massa dependente da posição dada por $\varrho(x,t) \equiv |\Phi(x,t)|^2$, a equação de continuidade generalizada torna-se

$$\frac{\partial\varrho(x,t)}{\partial t} + \mathcal{D}_{m(x)}\mathcal{J}(x,t) = 0, \tag{4.120}$$

com uma densidade de corrente generalizada definida por

$$\mathcal{J}(x,t) \equiv \mathrm{Re}\left[\Phi^*(x,t)\left(\frac{\hbar}{i}\mathcal{D}_{m(x)}\right)\left(\frac{\Phi(x,t)}{m_0}\right)\right]. \tag{4.121}$$

4.4 Função de onda para partícula livre com massa efetiva

Como simples aplicação do formalismo desenvolvido na Seção anterior, analisemos o caso de uma partícula livre em um potencial nulo ($V = 0$). Iniciaremos nossa análise, considerando um sistema quântico descrito pelo operador hamiltoniano $\hat{H}(\hat{x}, \hat{p})$ para sistemas com massa dependente da posição dado por (4.81). A equação de Schrödinger independente do tempo (4.86) para uma partícula representada pela função de estado $\psi(x) = \langle \hat{x}|\alpha\rangle$ torna-se

$$-\frac{\hbar^2(1+\gamma_q x)^2}{2m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{m_0}\frac{d\psi}{dx} - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\psi(x) = E\psi(x). \tag{4.122}$$

A equação diferencial acima pode ser reescrita como

$$u^2\frac{d^2\psi(u)}{du^2} + au\frac{d\psi(u)}{du} + b\psi(u) = 0, \tag{4.123}$$

com $u(x) = 1 + \gamma_q x$, $a = 2$, e $b = \frac{2m_0}{\hbar^2{\gamma_q}^2}\left(E + \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\right)$. A Eq. (4.123) é conhecida como equação de Cauchy-Euler [208]. De modo mais geral, uma equação diferencial ordinária de segunda ordem de Cauchy-Euler é uma equação não homogênea do tipo

$$a_2x^2\frac{d^2y(x)}{dx^2} + a_1x\frac{dy(x)}{dx} + a_0y(x) = f(x), \tag{4.124}$$

e que pode ser transformada em uma equação diferencial linear com coeficientes constantes através da transformação $x = e^t$. De fato, através da regra da cadeia verifica-se que

$$x\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dt} \quad \text{e} \quad x^2\frac{d^2y}{dx^2} = \frac{d^2y}{dt^2} - \frac{dy}{dt}.$$

Portanto, a equação de Cauchy-Euler é transformada em uma equação diferencial ordinária de coeficientes constantes

$$a_2\frac{d^2y(t)}{dt^2} + (a_2 - a_1)\frac{dy(t)}{dt} + a_0y(t) = f(e^t). \tag{4.125}$$

Desta forma, utilizando a trasformação $z = e^u$, a Eq. (4.123) torna-se

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \frac{d\psi(z)}{dz} + b\psi(z) = 0, \tag{4.126}$$

e que tem como solução geral $\psi(z) = c_+e^{r_+z}+c_-e^{r_-z}$, sendo r_+ e r_- raízes de $r^2+r+b=0$, ou seja, $r_\pm = -\frac{1}{2} \pm i\frac{k}{\gamma_q}$ com $E = \hbar^2k^2/2m_0$. Segue que:

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{c_+}{\sqrt{1+\gamma_q x}} \exp\left[\frac{ik}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right] + \frac{c_-}{\sqrt{1+\gamma_q x}} \exp\left[-\frac{ik}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{1+(1-q)(x/\xi)}} \left\{ c_+ \left[\exp_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right]^{ik\xi} + c_- \left[\exp_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right]^{-ik\xi} \right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{1+(1-q)(x/\xi)}} \left\{ c_+ \exp_q\left[(ik\xi)\odot_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right] \right. \\
&\qquad \left. + c_- \exp_q\left[(-ik\xi)\odot_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right] \right\}, \qquad (4.127)
\end{aligned}$$

onde $\psi(x) = 0$ para valores de $x \leq -1/\gamma_q$ em virtude da definição da q-exponencial. Como esperado, a solução geral de uma partícula livre e massa dependente da posição é uma combinação linear das autofunções (4.67) do operador momento linear deformado $\hat{p}_q$ na representação $\{|\hat{x}\rangle\}$. Notemos também que não existem soluções fisicamente possíveis se $E < 0$, já que isso implicaria em um vetor de onda complexo, e consequentemente a função de onda divergiria em $x \to \pm\infty$.

Através da equação de Schrödinger deformada (4.105), as funções de estado $\varphi_q(x)$ satisfazem à equação diferencial

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} D^2_{\gamma_q}\varphi_q(x) = E\varphi_q(x), \qquad (4.128)$$

ou mais explicitamente,

$$-\frac{\hbar^2(1+\gamma_q x)^2}{2m_0}\frac{d^2\varphi_q(x)}{dx^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{2m_0}\frac{d\varphi_q(x)}{dx} = E\varphi_q(x). \qquad (4.129)$$

Similar à solução da (4.122), fazendo mais uma vez $u(x) = 1+\gamma_q x$, obtemos uma equação de Cauchy-Euler similar à (4.123) para a equação acima, mas com $\psi(u) \to \varphi(u)$ e $a = 2 \to a = 1$, cuja solução geral é

$$\begin{aligned}
\varphi_q(x) &= c_+ \exp\left[\frac{ik}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right] + c_- \exp\left[-\frac{ik}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right] \\
&= c_+ \left[\exp_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right]^{ik\xi} + c_- \left[\exp_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right]^{-ik\xi} \\
&= c_+ \exp_q\left[(ik\xi)\odot_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right] + c_- \exp_q\left[(-ik\xi)\odot_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right], \qquad (4.130)
\end{aligned}$$

que poderia ser obtida resolvendo diretamenta a Eq. (4.128), ou através da relação entre os campos (4.93), *i.e.*, $\varphi_q(x) = \sqrt{1+\gamma_q x}\psi(x)$. Evidentemente, para o mesmo ket de estado $|\alpha\rangle$ na representação $\{|\hat{x}_q\rangle\}$, a função de estado $\varphi(x_q) = \langle\hat{x}_q|\alpha\rangle$, satisfaz a equação

diferencial trivial

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\varphi_q(x_q)}{dx_q^2} = E\varphi_q(x_q), \tag{4.131}$$

cuja solução geral é uma combinação linear de onda planas em um espaço deformado dada por $\varphi(x_q) = c_+e^{ikx_q} + c_-e^{-ikx_q}$, de modo que $\varphi_q(x) = \varphi(x_q(x))$. Portanto, vemos que o uso da equação de Schrödinger deformada em um espaço usual (ou sua respectiva equação usual em um espaço deformado) pode ser uma importante ferramenta para auxiliar na obtenção funções de onda de sistemas com massa dependente da posição no espaço usual.

Analisemos a seguir as implicações das funções de onda $\Psi(x,t)$, $\Phi_q(x,t)$ e $\Phi(x_q,t)$ para uma partícula livre utilizando as equações de continuidade. Seja a função de onda com massa dependente da posição no espaço usual $\{|\hat{x}\rangle\}$ dada por

$$\Psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\exp\left\{i\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x) - \omega t\right]\right\} \tag{4.132}$$

para $x > -1/\gamma_q$, e nula para outros valores. A partícula tem um espectro de energia contínuo $E = \hbar\omega = \hbar^2k^2/2m_0$, e a correspondente densidade de probabilidade é dada por $\rho(x,t) = |A|^2/(1+\gamma_q x)$, ou seja, uma função independente do tempo (estado estacionário), mas espacialmente não uniforme. A partir da Eq. (4.88), obtemos a densidade de corrente

$$J(x,t) = |A|^2\frac{\hbar k}{m_0} = (1+\gamma_q x)\rho(x,t)v_g, \tag{4.133}$$

onde $v_g = \partial\omega/\partial k = \hbar k/m_0$ é a velocidade de grupo para o pacote de onda associado com o momento linear $p = \hbar k$. Podemos notar que, como no caso usual, a densidade de corrente é proporcional ao produto entre a velocidade de grupo e a densidade de probabilidade, no entanto $J(x,t)$ também possui um fator que a faz variar linearmente com a posição que a torna espacialmente homogênea.

Em termos do campo

$$\Phi_q(x,t) = A\exp\left\{i\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x) - \omega t\right]\right\}, \tag{4.134}$$

os resultados são idênticos ao caso usual, *i.e.*, a densidade de probabilidade é $\varrho_q(x,t) = |A|^2$, e a densidade de corrente, definida por (4.112), é

$$\mathcal{J}_q(x,t) = |A|^2\frac{\hbar k}{m_0} = \varrho_q(x,t)v_g. \tag{4.135}$$

Evidentemente, no espaço deformado $\{|\hat{x}_q\rangle\}$, o caso usual é recuperado, onde as função de estado são as ondas planas $\Phi(x_q,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$. A densidade de probabilidade é $\varrho(x_q,t) = \varrho_q(x(x_q),t)$, e a densidade de corrente satisfaz $\mathcal{J}(x_q,t) = \mathcal{J}_q(x(x_q),t)$, como esperado.

Similarmente ao que acontece para o caso usual ($q = 1$) de partículas livres, a função de onda dada pela Eq. (4.132) é não normalizável, uma vez que a integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x,t)dx$ diverge. Isto é uma consequência do fato da partícula livre não possuir energia bem definida. No entanto, a função de onda (4.132) pode ser utilizada para definir um pacote de ondas para partículas com massa dependente da posição, dado por:

$$\psi(x) = \Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma_q x}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} dk, \tag{4.136}$$

onde $\phi(k)$ é uma função de distribuição dos vetores de onda k. Da relação (4.93), temos que

$$\varphi_q(x) = \sqrt{1+\gamma_q x}\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} dk,$$

e pela mudança de variável $x \to x_q$ obtemos um pacote de ondas planas em um espaço deformado

$$\varphi(x_q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx_q} dk, \tag{4.137}$$

como esperado. Pelo teorema de Plancherel [6] e mudança de variável $x_q \to x$, obtém-se imediatamente

$$\begin{aligned}
\phi(k) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x_q) e^{-ikx_q} dx_q \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_q(x) e^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} d_q x \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi(x)}{\sqrt{1+\gamma_q x}} e^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} dx.
\end{aligned} \tag{4.138}$$

Considerando que as funções $\psi(x)$ ou $\varphi_q(x)$ são nulas para $x < -1/\gamma_q$, as integrais acima podem ser definidas no intervalo $(-\infty, +\infty)$.

Desde que a aplicação das transformadas de Fourier e sua inversa tornam-se ferramentas matemáticas importantes para descrever funções periódicas, assim como levam à forma integral da famosa função delta de Dirac, a seguir apresentamos algumas possíveis deformações destas relações associadas às equações acima.

Uma vez que $e^{\pm ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} = [\exp_q(x/\xi)]^{\pm ik/\xi}$, podemos definir a seguinte transformada de Fourier q-deformda $\phi(k)$ e sua transformada de Fourier inversa q-deformada $f(x)$:

$$g(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \left[\exp_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right]^{-ik/\xi} dx, \tag{4.139a}$$

e

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \left[\exp_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right]^{ik/\xi} dk. \tag{4.139b}$$

Estas relações, juntamente com a definição dos q-números (2.85) e (2.149), podem ser uti-

lizadas para definir uma função delta de Dirac deformada. A seguir, mostraremos algumas propriedades que exploramos. Como é sabido, substituindo $\phi(k)$ em termos da primeira linha da Eq. (4.138) em (4.137), evidentemente obtemos

$$\begin{aligned}\varphi(x_q) &= \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(x'_q)e^{-ikx'_q}dx'_q\right]e^{ikx_q}dk \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ik(x_q-x'_q)}dk\right]\varphi(x'_q)dx'_q \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x_q-x'_q)\varphi(x'_q)dx'_q \end{aligned} \tag{4.140}$$

de forma que, como esperado, temos a função delta de Dirac de números q-deformados na forma integral

$$\delta(x_q-x'_q)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ik(x_q-x'_q)}dk. \tag{4.141}$$

Definimos a delta de Dirac q-deformada

$$\begin{aligned}\delta_q(x,x') &\equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ik\gamma_q^{-1}[\ln(1+\gamma_q x)-\ln(1+\gamma_q x')]}dk \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp_q\left\{\left[(ik\xi)\odot_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right]\oplus_q\left[(-ik\xi)\odot_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right]\right\}dk. \end{aligned} \tag{4.142}$$

Utilizando a mudança de variável $x\to x_q$ na Eq. (4.141), obtemos imediatamente

$$\begin{aligned}\delta_q(x,x')=\delta(x_q(x)-x'_q(x)) &= \delta\left(\frac{\ln(1+\gamma_q x)}{\gamma_q}-\frac{\ln(1+\gamma_q x')}{\gamma_q}\right) \\ &= \delta\left(\xi\ln\exp_q\left(\frac{x}{\xi}\ominus_q\frac{x'}{\xi}\right)\right), \end{aligned} \tag{4.143}$$

com $\delta_q(x,x')=\delta_q(x',x)$ e $\delta_q(x,x')\neq\delta_q(x-x')$. Notemos que a equação acima tem em seu argumento a mesma estrutura do q-número (2.96).

Substituindo a segunda linha da Eq. (4.138) em (4.137), tem-se

$$\begin{aligned}\varphi_q(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_q(x')e^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x')}d_qx'\right]e^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}dk \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ik\gamma_q^{-1}[\ln(1+\gamma_q x)-\ln(1+\gamma_q x')]}dk\right\}\varphi_q(x')d_qx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_q(x')\delta_q(x,x')d_qx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(x'_q)\frac{\delta_q(x,x')}{1+\gamma_q x'}dx'. \end{aligned} \tag{4.144}$$

Por outro lado, utilizando o mesmo procedimento, substituindo a terceira linha de (4.138)

em (4.136) e dividindo a equação por $\sqrt{1+\gamma_q x}$, tem-se:

$$\begin{aligned}\frac{\psi(x)}{\sqrt{1+\gamma_q x}} &= \frac{1}{1+\gamma_q x}\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\psi(x')}{\sqrt{1+\gamma_q x'}}e^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x')}dx'\right\}e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}dk \\ &= \frac{1}{1+\gamma_q x}\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ik\gamma_q^{-1}[\ln(1+\gamma_q x)-\ln(1+\gamma_q x')]}dk\right\}\frac{\psi(x')}{\sqrt{1+\gamma_q x'}}dx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\psi(x')}{\sqrt{1+\gamma_q x'}}\frac{\delta_q(x,x')}{1+\gamma_q x}dx'. \end{aligned} \tag{4.145}$$

Da propriedade fundamental da função delta de Dirac, $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a)$, temos que

$$\delta_q(x,x') = (1+\gamma_q x')\delta(x-x') = (1+\gamma_q x)\delta(x-x'). \tag{4.146}$$

A relação acima poderia ser obtida alternativamente através da propriedade $\delta(f(x)) = \delta(x-x_0)/|f'(x_0)|$, com $f(x_0)=0$ e $f'(x_0)\neq 0$, aplicada à Eq. (4.143). Portanto temos que a delta de Dirac q-deformada definida pela Eq. (4.142) satisfaz a propriedade

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta_q(x,x_0)f(x)dx = (1+\gamma_q x_0)f(x_0). \tag{4.147}$$

Fazendo $g(x) = (1+\gamma_q x)f(x)$, a relação acima pode ser reescrita como

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\delta_q(x,x_0)g(x)}{1+\gamma_q x}dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\delta_q(x,x_0)g(x)d_q x = g(x_0), \tag{4.148}$$

e que leva à definição de um q-produto interno

$$\langle f(x)|g(x)\rangle_q = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f^*(x)g(x)}{1+\gamma_q x}dx = \int_{-\infty}^{+\infty}f^*(x)g(x)d_q x, \tag{4.149}$$

originalmente proposto em [32].

4.5 Análogos clássicos dos operadores deformados

É intuitivamente claro que quando a mecânica quântica é aplicada a um sistema macroscópico, este deverá reproduzir os resultados da mecânica clássica, de modo similar que a dinâmica relativística, quando aplicada a sistemas movendo-se em baixas velocidades, reproduza a dinâmica Newtoniana. A seguir examinaremos como o formalismo da mecânica clássica de sistemas com massa dependente da posição é recuperado a partir do formalismo quântico que temos tratado aqui para condições apropriadas.

Tipicamente sistemas com massa variável não conservam a energia mecânica, como por exemplo, o problema da queda de uma gota de chuva [209]. Um caso particular é apresentado em [210], onde Cruz y Cruz *et al.* mostraram que a transformação canônica $(Q, P) \longrightarrow (x, p)$, com

$$Q = \int \sqrt{\frac{m(x)}{m_0}} dx + Q_0, \qquad \text{e} \qquad P = \sqrt{\frac{m_0}{m(x)}} p, \tag{4.150}$$

mapeia a função hamiltoniana de uma partícula com massa constante m_0 dada por

$$K(Q, P) = \frac{P^2}{2m_0} + V(Q) \tag{4.151}$$

para a função hamiltoniana de uma partícula com massa dependente da posição $m(x)$,

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m(x)} + V(Q(x)) \tag{4.152}$$

tal que ambos os hamiltonianos são constantes de movimento.

Por outro lado, em virtude da hermiticidade dos operadores espaço e momento linear deformados que constituem a transformação canônica quântica (4.71), estes apresentam os seguintes análogos clássicos:

$$\begin{cases} p_q = (1 + \gamma_q x) p, \\ \\ x_q = \dfrac{\ln(1 + \gamma_q x)}{\gamma_q} = \xi \ln\left[\exp_q(x/\xi)\right], \end{cases} \tag{4.153}$$

cujo comutador é trocado agora pelos parênteses de Poisson

$$\{x_q, p_q\}_{(x,p)} = \frac{\partial x_q}{\partial x}\frac{\partial p_q}{\partial p} - \frac{\partial p_q}{\partial x}\frac{\partial x_q}{\partial p} = 1. \tag{4.154}$$

Para obter a função geradora da transformação canônica (4.153), consideremos que

esta é do tipo $F = F(p, x_q)$, e portanto temos que [142]

$$x = -\frac{\partial F}{\partial p}, \qquad \text{e} \qquad p_q = -\frac{\partial F}{\partial x_q}. \tag{4.155}$$

Escrevendo p_q como função de x_q e p, da segunda equação acima obtemos

$$\frac{\partial F}{\partial x_q} = -pe^{\gamma_q x_q}, \tag{4.156}$$

e ao ser integrada, temos

$$F(p, x_q) = -\frac{pe^{\gamma_q x_q}}{\gamma_q} + f(p). \tag{4.157}$$

Substituindo a equação acima na primeira equação de (4.155) obtemos $f(p) = -p/\gamma_q$, e portanto temos que a função geradora da transformação canônica é dada por

$$F(x_q, p) = -\frac{p(e^{\gamma_q x_q} + 1)}{\gamma_q}. \tag{4.158}$$

Consideremos uma partícula de massa constante m_0 e momento linear p_q sob a influência de um campo de forças conservativas com energia potencial $V(x_q)$. A hamiltoniana deste sistema é

$$K(x_q, p_q) = \frac{p_q^2}{2m_0} + V(x_q). \tag{4.159}$$

A aplicação da transformação canônica (4.153) sobre a hamiltoniana $K(x_q, p_q)$ leva à nova hamiltoniana

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m(x)} + V(x), \tag{4.160}$$

onde a massa da partícula depende da posição através da função

$$m(x) = \frac{m_0}{(1 + \gamma_q x)^2}. \tag{4.161}$$

Vemos portanto que a transformação canônica (4.153) está em acordo com as Eq.'s (4.150) para a massa (4.161). Notemos que as equações (4.159), (4.160) e (4.161) são respectivamente as versões clássicas de (4.73), (4.79) e (4.80). A partir da transformação canônica clássica (4.153), analisaremos a seguir algumas de suas implicações.

A partir das equações de Hamilton ($\dot{x} = \partial H/\partial p$ e $\dot{p} = -\partial H/\partial x$), obtemos as equações de movimento

$$\dot{x} = \frac{p}{m(x)} = \frac{(1 + \gamma_q x)^2 p}{m_0}, \tag{4.162}$$

e

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]p^2 - \frac{dV(x)}{dx} \\ &= -\frac{\gamma_q(1+\gamma_q x)p^2}{m_0} - \frac{dV(x)}{dx}.\end{aligned} \tag{4.163}$$

A partir das equações de movimento, observamos que, como acontece no caso usual, o momento linear p da partícula é simplesmente o produto entre a massa dependente da posição $m(x)$ e a velocidade escalar $\dot{x} = dx/dt$: $p = m(x)\dot{x}$. A taxa de variação temporal do momento linear é igual a força resultante de duas contribuições no lado direito da Eq. (4.163). O primeiro termo está associado à força de reação $R = -\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]p^2 = -\frac{1}{2}m'(x)\dot{x}^2$ devido ao efeito da massa variável, e o segundo está associado a energia potencial $V(x)$, onde $F(x) = -dV/dx$.

Substituindo $p = m(x)\dot{x}$ na Eq. (4.163), temos que:

$$m_0\left[\frac{\ddot{x}}{(1+\gamma_q x)^2} - \frac{\gamma_q\dot{x}^2}{(1+\gamma_q x)^3}\right] = -\frac{dV(x)}{dx}. \tag{4.164}$$

Entretanto a equação de movimento Eq. (4.164) pode ser reescrita na forma mais conveniente

$$m_0\widetilde{D}^2_{\gamma_q}x(t) = F(x), \tag{4.165}$$

que corresponde a uma deformação da lei de Newton para o movimento em um espaço com deslocamentos não lineares, onde $\widetilde{D}^2_{\gamma_q}$ é um operador associado à q-derivada dual, definida pela Eq. (2.116). Note que a evolução temporal é governada pela derivada dual generalizada

$$\widetilde{D}_{\gamma_q}x = \frac{1}{1+\gamma_q x}\frac{dx}{dt} \tag{4.166}$$

.

Portanto, o efeito da transformação canônica $(x,p) \longrightarrow (x_q,p_q)$ é mapear o deslocamento generalizado $(d_q x)$ de uma partícula com massa dependente da posição $m(x)$ em um espaço usual para uma partícula de massa constante m_0 em um espaço deformado com deslocamento usual (dx_q), onde:

$$d_q x \equiv \xi\left[\left(\frac{x+dx}{\xi}\right)\ominus_q\left(\frac{x}{\xi}\right)\right] = \frac{dx}{1+\gamma_q x} \equiv dx_q. \tag{4.167}$$

Uma vez que $K(x_q,p_q)$ descreve a hamiltoniana de um sistema conservativo, *i.e.*, $K(x_q,p_q) = E$ é uma integral de movimento, temos que a transformação canônica (4.153) gera uma nova hamiltoniana da qual $H(x,p) = E$ é também uma integral de movimento.

Desta forma, temos

$$\begin{aligned} E &= \frac{p^2}{2m(x)} + V(x) \\ &= \frac{1}{2}m(x)\dot{x}^2 + V(x) \end{aligned} \tag{4.168}$$

A velocidade da partícula pode ser escrita como

$$v = \dot{x} = \frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m(x)}[E - V(x)]}, \tag{4.169}$$

assim como uma velocidade generalizada pode ser definida por

$$\widetilde{D}_{\gamma_q} x = \frac{1}{1+\gamma_q x}\frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m_0}[E - V(x)]}, \tag{4.170}$$

cuja equação diferencial acima pode ser separada e integrada para obter a posição da partícula em função do tempo:

$$\begin{aligned} t - t_0 &= \pm\int_{x_0}^{x} \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m(x)}[E - V(x)]}} \\ &= \pm\int_{x_0}^{x} \frac{dx}{(1+\gamma_q x)\sqrt{\frac{2}{m_0}[E - V(x)]}} \\ &= \pm\int_{x_0}^{x} \frac{d_q x}{\sqrt{\frac{2}{m_0}[E - V(x)]}}. \end{aligned} \tag{4.171}$$

Notemos inicialmente que, enquanto no formalismo quântico para descrever sistemas com massa dependente da posição em termos do campo $\Phi(x,t)$, os operadores usuais derivada e integral em relação à variável x foram substituídos respectivamente pelas generalizações da q-derivada e q-integral Eq.'s (4.103) e (4.107). Já no formalismo clássico para o respectivo problema, o mesmo acontece, contudo, as equações tomam uso da q-derivada dual $\widetilde{D}_{\gamma_q}$ (4.166) ao invés da q-derivada D_{γ_q} (4.56). Isto está relacionado ao fato de que no formalismo quântico, as equações dinâmicas, como por exemplo a equação de Schrödinger dada por (4.103), levam em consideração variações espaciais não lineares na variável independente x do campo $\Phi(x,t)$, e que está diretamente associado a definição da q-derivada (2.113). Por outro lado, no formalismo clássico, as variações não lineares do espaço estão presentes na variável dependente do tempo $x(t)$, e que está diretamente associada à definição da q-derivada dual (2.116).

4.6 Equações de Ehrenfest para sistema com massa dependente da posição

Em um artigo publicado em 1927 [211], Paul Ehrenfest derivou equações que permitem fazer uma elegante analogia entre a evolução temporal de valores esperados para operadores no formalismo quântico e a evolução temporal dos seus respectivos análogos clássicos [212]. Ehrenfest derivou estas equações utilizando o formalismo da mecânica quântica através da formulação ondulatória, baseada na equação de Schrödinger. No entanto, sua forma final é a mesma se for utilizada a formulação de Heisenberg para a mecânica quântica.

Apesar de Ehrenfest ter obtido originalmente estes resultados especificamente para operadores posição e momento linear de um sistema com massa constante, a mesma análise pode ser feita para qualquer operador $\hat{A}(\hat{x},\hat{p},t)$, cujo análogo clássico é a variável dinâmica $A(x,p,t)$. É possível mostrar que a taxa de variação temporal de operadores no formalismo quântico tem uma forma similar à taxa de variação temporal do seu análogo clássico. Seja $\hat{H}$ o operador hamiltoniano do sistema, a partir da equação de Schrödinger na forma (1.3) temos que

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} &= \frac{d}{dt}\langle\alpha(t)|\hat{A}|\alpha(t)\rangle \\ &= \langle\dot{\alpha}(t)|\hat{A}|\alpha(t)\rangle + \langle\alpha(t)|\hat{A}|\dot{\alpha}(t)\rangle + \left\langle\alpha(t)\left|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right|\alpha(t)\right\rangle \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\langle\alpha(t)|\hat{H}\hat{A}|\alpha(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\alpha(t)|\hat{A}\hat{H}|\alpha(t)\rangle + \left\langle\alpha(t)\left|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right|\alpha(t)\right\rangle, \quad (4.172)\end{aligned}$$

ou ainda,

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle. \quad (4.173)$$

A equação acima tem uma estrutura similar à evolução temporal de A, dada por

$$\frac{dA}{dt} = \{A,H\} + \frac{\partial A}{\partial t}, \quad (4.174)$$

cujo parênteses de Poisson $\{\ .\ ,\ .\ \}$ é substituído por $\frac{1}{i\hbar}[\ .\ ,\ .\ ]$, e as variáveis dinâmicas pelos seus respectivos operadores. Para sistemas dinâmicos com massa constante, as taxas de variação temporal dos valores esperados para os operadores posição e momento linear são dados, respectivamente, por:

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{1}{m_0}\langle\hat{p}\rangle, \quad (4.175a)$$

e

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = -\left\langle \frac{dV}{d\hat{x}} \right\rangle, \tag{4.175b}$$

similar às correspondentes taxas de variações temporais clássicas $\dot{x} = p/m_0$ e $\dot{p} = -dV/dx$.

Conforme demonstraremos a seguir, para sistemas com massa dependente da posição, dada por (4.80), temos que:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} &= \frac{1}{2}\left(\left\langle \hat{p}\frac{1}{m(\hat{x})}\right\rangle + \left\langle \frac{1}{m(\hat{x})}\hat{p}\right\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2m_0}\langle\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\rangle + \frac{1}{2m_0}\langle(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\hat{p}\rangle, \end{aligned} \tag{4.176a}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= -\frac{1}{2}\left\langle \hat{p}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(\hat{x})}\right]\hat{p}\right\rangle - \left\langle \frac{dV}{d\hat{x}}\right\rangle \\ &= -\frac{\gamma_q}{m_0}\langle\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}\rangle - \left\langle \frac{dV}{d\hat{x}}\right\rangle. \end{aligned} \tag{4.176b}$$

Consequentemente, vemos que as equações acima têm uma forma similar à taxa de evolução temporal da posição e do momento linear obtidas no formalismo clássico (vide Eq.'s (4.162) e (4.163)). Apesar do resultado ter sido obtido para a massa (4.80), acreditamos que cálculos semelhantes possam ser feitos para outros tipos de sistemas com massa dependente da posição. O caso usual (4.175) é recuperado para $\gamma_q \to 0$. É possível também mostrar que a relação

$$\int J(x,t)dx = \frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} \tag{4.177}$$

continua válida mesmo para a massa dependente da posição. Como aplicação simples, consideremos o caso de uma partícula livre cuja densidade de corrente é dada por (4.133) ou densidade de corrente deformada (4.135). Desta forma, temos

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} &= \frac{\hbar k}{m_0}\int_{-\infty}^{+\infty}(1+\gamma_q x)\rho(x,t)dx \\ &= \frac{\hbar k}{m_0}\int_{-\infty}^{+\infty}(1+\gamma_q x)^2\rho(x,t)\frac{dx}{1+\gamma_q x} \\ &= \frac{\hbar k}{m_0}\int_{-\infty}^{+\infty}(1+\gamma_q x)\varrho_q(x,t)d_q x \\ &= \frac{\hbar k}{m_0}(1+\gamma_q\langle\hat{x}\rangle). \end{aligned} \tag{4.178}$$

Integrando a equação cima, obtemos

$$\langle\hat{x}\rangle_t = \frac{e^{(\hbar k\gamma_q/m_0)(t-t_0)}-1}{\gamma_q}. \tag{4.179}$$

O correspondente resultado no espaço deformado $\{|\hat{x}_q\rangle\}$ nos dá $d\langle\hat{x}_q\rangle/dt = \hbar k/m_0$, ou ainda, $\langle\hat{x}_q\rangle_t = (\hbar k/m_0)(t-t_0)$, de forma que a Eq. (4.179) está de acordo a mudança de variável $\hat{x} \to \hat{x}_q$.

Demonstração das equações (4.176a), (4.176b):

Calculemos a seguir a taxa de variação temporal do valor esperado de $\langle\hat{x}\rangle$ para o sistema com massa dependente da posição que temos tratado. A demonstração feita aqui será realizada através da da formulação de Heisenberg para a mecânica quântica. No entanto, uma demonstração destes resultados é feita através da formulação ondulatória no Apêndice B. Da Eq. (4.173) aplicada para o operador posição $\hat{x}$, temos:

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x},\hat{H}]\rangle, \tag{4.180}$$

onde a relação de comutação da equação acima é obtida utilizando o operador hamiltoniano de um sistema com massa dependente da posição dado por (4.82).

Segue que:

$$\begin{aligned}
[\hat{x},\hat{H}] &= \left[\hat{x}, \frac{1}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} - \frac{i\gamma_q\hbar}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\hat{1} + V(\hat{x})\right] \\
&= \frac{1}{2m_0}[\hat{x},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}] - \frac{i\gamma_q\hbar}{2m_0}[\hat{x},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}]
\end{aligned} \tag{4.181}$$

Da relação de comutação $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$, temos

$$\begin{aligned}
[\hat{x},\hat{H}] &= \frac{1}{2m_0}[\hat{x},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}](\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} + \frac{1}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}[\hat{x},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}] \\
&\quad -\frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}[\hat{x},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}].
\end{aligned} \tag{4.182}$$

Notando que

$$\begin{aligned}
[\hat{x},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}] &= [\hat{x},\hat{p}] + \gamma_q[\hat{x},\hat{x}\hat{p}] \\
&= i\hbar\hat{1} + \gamma_q[\hat{x},\hat{x}]\hat{p} + \gamma_q\hat{x}[\hat{x},\hat{p}] \\
&= i\hbar(\hat{1}+\gamma_q\hat{x}),
\end{aligned} \tag{4.183}$$

e substituindo em (4.181), obtemos

$$[\hat{x},\hat{H}]=\frac{i\hbar}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\hat{p}+\frac{i\hbar}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})-\frac{\gamma_q(i\hbar)^2}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x}). \tag{4.184}$$

Uma vez que os operadores $\hat{x}$ e $\hat{p}$ são canonicamente conjugados, temos $\hat{x}\hat{p}=\hat{p}\hat{x}+i\hbar\hat{1}$. Logo, $[\hat{x},\hat{H}]$ torna-se:

$$\begin{aligned}
[\hat{x},\hat{H}] &= \frac{i\hbar}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\hat{p}+\frac{i\hbar}{2m_0}(\hat{p}+\gamma_q\hat{x}\hat{p})(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})-\frac{\gamma_q(i\hbar)^2}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\\
&= \frac{i\hbar}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\hat{p}+\frac{i\hbar}{2m_0}(\hat{p}+\gamma_q\hat{p}\hat{x}+i\hbar\gamma_q)(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})-\frac{\gamma_q(i\hbar)^2}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\\
&= \frac{i\hbar}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\hat{p}+\frac{i\hbar}{2m_0}\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2+\frac{\gamma_q(i\hbar)^2}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})-\frac{\gamma_q(i\hbar)^2}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\\
&= \frac{i\hbar}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\hat{p}+\frac{i\hbar}{2m_0}\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2.
\end{aligned} \tag{4.185}$$

Da Eq. (4.180), para a massa (4.80), obtemos

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt}=\frac{1}{2m_0}\langle\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\rangle+\frac{1}{2m_0}\langle(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\hat{p}\rangle=\frac{1}{2}\left(\left\langle\hat{p}\frac{1}{m(\hat{x})}\right\rangle+\left\langle\frac{1}{m(\hat{x})}\hat{p}\right\rangle\right), \tag{4.186}$$

como queríamos demonstrar.

Por outro lado, da equação anterior temos que:

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} &= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{1}{m(x)}\Psi(x,t)dx\\
&\quad+\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{1}{m(x)}\left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx\\
&= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{1}{m(x)}\Psi(x,t)dx\\
&\quad+\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{\hbar}{i}\right)\Psi^*(x,t)\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\Psi(x,t)dx\\
&\quad+\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{1}{m(x)}\left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx\\
&\quad+\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\left(\frac{\hbar}{i}\right)\Psi(x,t)dx\\
&= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(-\frac{\hbar}{i}\right)\Psi^*(x,t)\frac{1}{m(x)}\right]\Psi(x,t)dx\\
&\quad+\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{1}{m(x)}\Psi(x,t)\right]dx\\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{Re}\left\{\Psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{1}{m(x)}\Psi(x,t)\right]\right\}dx.
\end{aligned} \tag{4.187}$$

Uma vez que o integrando da equação acima é a densidade de corrente definida pela

Eq. (4.88), temos que $d\langle\hat{x}\rangle/dt = \int J(x,t)dx$, demonstrando asssim a Eq. (4.177).

Similarmente, da Eq. (4.173) aplicada para o operador momento linear $\hat{p}$, temos

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{p},\hat{H}]\rangle. \tag{4.188}$$

Utilizando mais uma vez o operador hamiltoniano (4.82), segue que:

$$\begin{aligned}
[\hat{p},\hat{H}] &= \left[\hat{p}, \frac{1}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} - \frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\hat{1} + V(\hat{x})\right] \\
&= \frac{1}{2m_0}[\hat{p},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}] - \frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}[\hat{p},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}] + [\hat{p},V(\hat{x})] \\
&= \frac{1}{2m_0}[\hat{p},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}](\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} + \frac{1}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}[\hat{p},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}] \\
&\quad -\frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}[\hat{p},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}] + [\hat{p},V(\hat{x})].
\end{aligned} \tag{4.189}$$

E notando que

$$[\hat{p},(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}] = [\hat{p},\hat{p}] + \gamma_q[\hat{p},\hat{x}\hat{p}] = [\hat{p},\hat{p}] + \gamma_q[\hat{p},\hat{x}]\hat{p} + \gamma_q\hat{x}[\hat{p},\hat{p}] = -i\hbar\gamma_q\hat{p},$$

ao substituir a relação acima em (4.189), obtemos

$$[\hat{p},\hat{H}] = -\frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} - \frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}^2 + \frac{(i\hbar\gamma_q)^2}{2m_0}\hat{p} + [\hat{p},V(\hat{x})]. \tag{4.190}$$

Utilizando $\hat{p}\hat{x} = \hat{x}\hat{p} - i\hbar\hat{1}$ e a relação (4.11), temos que:

$$\begin{aligned}
[\hat{p},\hat{H}] &= -\frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} - \frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}(\hat{p}+\gamma_q\hat{x}\hat{p}-i\hbar\gamma_q)\hat{p} - i\hbar\frac{dV(\hat{x})}{d\hat{x}} \\
&= -\frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} - \frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}(\hat{p}+\gamma_q\hat{p}\hat{x})\hat{p} - i\hbar\frac{dV(\hat{x})}{d\hat{x}} \\
&= -\frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} - \frac{i\hbar\gamma_q}{2m_0}\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} - i\hbar\frac{dV(\hat{x})}{d\hat{x}} \\
&= -\frac{i\hbar\gamma_q}{m_0}\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p} - i\hbar\frac{dV(\hat{x})}{d\hat{x}}.
\end{aligned} \tag{4.191}$$

E portanto, substituindo a relação acima na Eq. (4.188), para a massa (4.80) obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= -\frac{\gamma_q}{m_0}\langle\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}\rangle - \left\langle\frac{dV}{d\hat{x}}\right\rangle \\
&= -\frac{1}{2}\left\langle\hat{p}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(\hat{x})}\right]\hat{p}\right\rangle - \left\langle\frac{dV}{d\hat{x}}\right\rangle,
\end{aligned} \tag{4.192}$$

demonstrando assim a Eq. (4.176b).

4.7 Aproximação semiclássica para sistemas com massa dependente da posição

Na Seção 4.5 apresentamos os análogos clássicos para os operadores deformados $\hat{x}_q$ e $\hat{p}_q$, assim como os efeitos da transformação canônica $(x_q, p_q) \longrightarrow (x, p)$ no formalismo clássico, e na Seção 4.6 apresentamos as equações de Ehrenfest para sistemas com massa dependente da posição, onde as formas destas equações são similares àquelas correspondentes no formalismo clássico. A fim de completar esse tratamento, nesta Seção mostramos que a formulação da mecânica clássica para o sistema com massa dependente da posição que estamos tratando está contida na correspondente formulação da mecânica ondulatória.

Para descrever sistemas com massa dependente da posição na representação $\{|x\rangle\}$, podemos utilizar a equação de Schrödinger (4.85) em termos do campo $\Psi(x,t)$ ou a equação de Schrödinger deformada (4.103) em termos do campo $\Phi_q(x,t)$. Optamos por utilizar a segunda, contudo, os mesmos resultados podem ser obtidos utilizando a primeira. Dessa forma, seja a densidade de probabilidade deformada $\varrho_q(x,t) = |\Phi_q(x,t)|^2$. Podemos escrever a função de onda $\Phi_q(x,t)$ como

$$\Phi_q(x,t) = \sqrt{\varrho_q(x,t)}e^{iS(x,t)/\hbar} \tag{4.193}$$

onde $S(x,t)$ é uma fase real, e que será interpretada fisicamente a seguir. Sendo

$$\Phi^*(x,t)\mathcal{D}_{\gamma_q}\Phi(x,t) = \sqrt{\varrho_q(x,t)}\mathcal{D}_{\gamma_q}\left[\sqrt{\varrho_q(x,t)}\right] + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\varrho_q(x,t)\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t), \tag{4.194}$$

obtemos a densidade de corrente dada pela Eq. (4.112) em termos de $S(x,t)$ como

$$\mathcal{J}_q(x,t) = \frac{\varrho_q(x,t)}{m_0}\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t) = \frac{\rho(x,t)}{m(x)}\frac{\partial S(x,t)}{\partial x} = J(x,t), \tag{4.195}$$

onde utilizamos (4.110) na expressão acima. Como no caso para massa constante, a variação espacial da fase da onda está relacionada com o fluxo de probabilidade. Quanto mais a fase da onda varia, mais intenso é o fluxo de probabilidade. Pela equação de continuidade deformada (4.111), obtemos a relação

$$\frac{\partial\varrho_q(x,t)}{\partial t} + \mathcal{D}_{\gamma_q}\left[\frac{\varrho_q(x,t)}{m_0}\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t)\right] = 0, \tag{4.196}$$

ou

$$\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\rho(x,t)}{m(x)}\frac{\partial S(x,t)}{\partial x}\right] = 0. \tag{4.197}$$

Notando que

$$\frac{\partial\Phi(x,t)}{\partial t} = e^{iS(x,t)/\hbar}\sqrt{\varrho_q(x,t)}\left[\frac{1}{\sqrt{\varrho_q}}\frac{\partial\sqrt{\varrho_q}}{\partial t} + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\frac{\partial S(x,t)}{\partial t}\right], \tag{4.198}$$

e

$$\begin{aligned}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\Phi(x,t) &= e^{iS(x,t)/\hbar}\Bigg\{\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\left[\sqrt{\varrho_q(x,t)}\right] + 2\left(\frac{i}{\hbar}\right)\mathcal{D}_{\gamma_q}\left[\sqrt{\varrho_q(x,t)}\right][\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t)] \\ &\quad + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\sqrt{\varrho_q(x,t)}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}S(x,t) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\sqrt{\varrho_q(x,t)}[\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t)]^2\Bigg\},\end{aligned} \tag{4.199}$$

substituindo as Eq.'s (4.198) e (4.199) na equação de Schrödinger deformada (4.103), obtemos

$$\begin{aligned}&e^{iS(x,t)/\hbar}i\hbar\sqrt{\varrho_q(x,t)}\left[\frac{1}{\sqrt{\varrho_q}}\frac{\partial\sqrt{\varrho_q}}{\partial t} + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\frac{\partial S(x,t)}{\partial t}\right] = \\ &-e^{iS(x,t)/\hbar}\frac{\hbar^2}{2m_0}\Bigg\{\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\left[\sqrt{\varrho_q(x,t)}\right] + 2\left(\frac{i}{\hbar}\right)\mathcal{D}_{\gamma_q}\left[\sqrt{\varrho_q(x,t)}\right][\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t)] \\ &+\left(\frac{i}{\hbar}\right)\sqrt{\varrho_q(x,t)}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}S(x,t) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\sqrt{\varrho_q(x,t)}[\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t)]^2\Bigg\} + e^{iS(x,t)/\hbar}\sqrt{\varrho_q(x,t)}V(x).\end{aligned}$$

Dividindo a equação acima por $\sqrt{\varrho_q(x,t)}e^{iS(x,t)/\hbar}$, e agrupando as partes real e imaginária puras da equação acima, temos:

$$\begin{aligned}&\left\{\frac{1}{2m_0}[\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t)]^2 + V(x) - \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{\sqrt{\varrho_q(x,t)}}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\left[\sqrt{\varrho_q(x,t)}\right] + \frac{\partial S(x,t)}{\partial t}\right\} \\ &+\frac{1}{2\varrho_q(x,t)}\left(\frac{i}{\hbar}\right)\left\{\frac{\partial\varrho_q(x,t)}{\partial t} + \frac{2}{m}\sqrt{\varrho_q(x,t)}\mathcal{D}_{\gamma_q}\left[\sqrt{\varrho_q(x,t)}\right] + \frac{1}{m}\varrho_q(x,t)\mathcal{D}^2_{\gamma_q}S(x,t)\right\} = 0,\end{aligned}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}&\left\{\frac{1}{2m_0}[\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t)]^2 + V(x) - \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{\sqrt{\varrho_q}}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\left[\sqrt{\varrho_q(x,t)}\right] + \frac{\partial S(x,t)}{\partial t}\right\} \\ &+\frac{1}{2\varrho_q(x,t)}\left(\frac{i}{\hbar}\right)\left\{\frac{\partial\varrho_q(x,t)}{\partial t} + \mathcal{D}_{\gamma_q}\left[\frac{\varrho_q(x,t)}{m_0}\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t)\right]\right\} = 0.\end{aligned}$$

Observando que os termos da parte imaginária satisfazem a relação dada pela equação (4.196), obtemos a seguinte equação de Hamilton-Jacobi para a dinâmica de uma partícula com massa dependente da posição no formalismo quântico:

$$\frac{1}{2m_0}[\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t)]^2 + V(x) + Q_q(x,t) + \frac{\partial S(x,t)}{\partial t} = 0, \tag{4.200}$$

onde $Q_q(x,t)$ é um potencial quântico de Bohm deformado, dado por

$$\begin{aligned} Q_q(x,t) &\equiv -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{|\Phi_q(x,t)|}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}|\Phi_q(x,t)| \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{\sqrt{\varrho_q}}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\sqrt{\varrho_q} \\ &= \frac{\hbar^2}{4m_0}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\varrho_q}\mathcal{D}_{\gamma_q}\varrho_q\right)^2 - \frac{1}{\varrho_q}\mathcal{D}^2_{\gamma_q}\varrho_q\right]. \end{aligned} \tag{4.201}$$

O potencial acima, para o caso $q = 1$, foi proposto originalmente numa interpretação alternativa da mecânica quântica através do conceito de onda piloto introduzida por de Broglie [213] pouco mais de duas décadas anteriores da aplicação de Bohm [214]. Esta interpretação permite conceituar a existência simultânea do comportamento de onda e partícula, e abre uma forma elegante no estudo de processos físicos nos formalismos clássico e quântico, conforme é analisado em [215] para alguns problemas típicos da física. Aplicações de onda piloto também têm sido aplicadas na formulação da equação de Schrödinger não linear NRT por Pennini *et al.* [114]. Aqui, vimos que a equação de Schrödinger deformada (4.103) leva a um potencial de Bohm deformado e que pode ser utilizado como uma alternativa para resolver problemas em mecânica quântica de sistemas com massa dependente da posição.

Uma das consequências da Eq. (4.200) ocorre no limite $\hbar \to 0$, onde obtemos

$$\frac{1}{2m_0}[\mathcal{D}_{\gamma_q}S(x,t)]^2 + V(x) + \frac{\partial S(x,t)}{\partial t} = 0, \tag{4.202}$$

e que em termos da função massa, temos

$$\frac{1}{2m(x)}\left[\frac{\partial S(x,t)}{\partial x}\right]^2 + V(x) + \frac{\partial S(x,t)}{\partial t} = 0, \tag{4.203}$$

da qual corresponde a equação de Hamilton-Jacobi na mecânica clássica para um sistema com massa dependente da posição, e onde a fase de onda $S(x,t)$ torna-se a conhecida função principal de Hamilton, conectada diretamente com ação clássica de um sistema com massa dependente da posção.

De fato, considerando o método de seperação de variáveis [142], onde $S(x,t) = W(x) - Et$, e $W(x)$ é a função característica de Hamilton, temos que

$$W(x) = \pm\int^x \sqrt{2m(x')[E - V(x')]}dx', \tag{4.204}$$

cujo momento clássico dado por

$$p = \partial S(x,t)/\partial x = dW(x)/dx = \sqrt{2m(x)[E - V(x)]}, \tag{4.205}$$

como poderia ser obtido diretamente da Eq. (4.168).

Segue que a função $S(x,t)$ pode ser escrita como

$$S(x,t) = \pm \int^{x} \sqrt{2m(x')[E - V(x')]}dx' - Et. \tag{4.206}$$

Uma vez que

$$\frac{dS(x,t)}{dt} = \frac{\partial S}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial S}{\partial t} = p\dot{x} - H = L \tag{4.207}$$

onde utilizamos as relações $p = \partial S/\partial x$ e $H(x, \partial S/\partial x) + \partial S/\partial t = 0$, temos que $S(x,t)$ coincide com a ação na descrição clássica. Logo, a menos de uma constante de integração, temos que

$$S = \int L(x,\dot{x})dt \tag{4.208}$$

com a função lagragiana dada por

$$L(x,\dot{x}) = \frac{1}{2}m(x)\dot{x}^2 - V(x). \tag{4.209}$$

Como esperado, no limite $\hbar \to 0$, a dinâmica clássica de um sistema com massa dependente da posição está contida na equação de Schrödinger para o respectivo problema. Assim como em sistemas de massa constante, para o sistema com massa dependente da posição analisado neste trabalho, vemos que o limite clássico da mecânica quântica na formulação de Heisenberg é a dinâmica hamiltoniana. Do mesmo modo, a mecânica quântica na formulação de Schrödinger é a teoria de Hamilton-Jacobi no limite clássico.

Para a função de onda dos estados estacionários ($\partial\rho/\partial t = 0$) pode ser obtida uma aproximação semiclássica. A partir da relação (4.197) decorrente da equação de continuidade, obtemos

$$\frac{\partial J(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\rho(x,t)}{m(x)}\frac{\partial S}{\partial x}\right] = 0, \tag{4.210}$$

que implica

$$\frac{\rho(x,t)}{m(x)}\frac{dW}{dx} = \rho(x,t)\sqrt{\frac{2}{m(x)}[E - V(x)]} = \text{constante}. \tag{4.211}$$

A partir da Eq. (4.169), obtemos

$$\sqrt{\rho} = \frac{\text{constante}}{\sqrt[4]{\frac{2}{m(x)}[E - V(x)]}} \propto \frac{1}{\sqrt{v}}. \tag{4.212}$$

Podemos observar que na aproximação semiclássica, a probabilidade $\mathcal{P}(x)dx = \rho(x,t)dx$ para encontrar a partícula entre x e $x+dx$ deve tornar-se idêntica à probabilidade clássica $\mathcal{P}_{\text{clássica}}(x)dx \propto dx/v$, como esperado pelo princípio da correspondência.

Consequentemente, substituindo (4.212) em (4.193), e utilizando a relação (4.110),

temos que a função de onda (4.193) na aproximação semiclássica é

$$\begin{aligned}\Phi_q(x,t) &\propto \frac{1}{\sqrt[4]{E-V(x)}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\pm\int^x\sqrt{2m(x')[E-V(x')]}dx'-Et\right]\right\}\\ &\propto \frac{1}{\sqrt[4]{E-V(x)}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\pm\int^x p(x')dx'-Et\right]\right\},\end{aligned}\tag{4.213}$$

que é similar à conhecida solução WKB (G. Wentzel, A. Krameres e L. Brillouin) com a massa constante m substituída por $m(x)$. Como uma aplicação, considerando um sistema sob potencial nulo ($V(x)=0$), temos

$$\Phi_q(x,t)=A\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\pm\frac{p_0\ln(1+\gamma_q x)}{\gamma_q}-Et\right]\right\},\tag{4.214}$$

e assim

$$\Psi(x,t)=\frac{A}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\pm\frac{p_0\ln(1+\gamma_q x)}{\gamma_q}-Et\right]\right\},\tag{4.215}$$

onde A e $p_0=\sqrt{2m_0E}$ são constantes, e portanto recuperamos as funções de onda $\Psi(x,t)$ e $\Phi_q(x,t)$ de uma partícula livre dadas pelas Eq.'s (4.132) e (4.134) respectivamente.

4.8 Teoria clássica de campos para equação de Schrödinger linear q-deformada

Na Seção anterior, desenvolvemos uma aproximação semiclássica para a dinâmica de um sistema quântico com massa dependente da posição, e obtemos que a fase $S(x,t)$ da função de onda $\Phi_q(x,t)$ (ou $\Psi(x,t)$) é a função principal de Hamilton no limite $\hbar\to 0$. Como é sabido, $S(x,t)$ coincide com a ação na descrição clássica, cuja função lagragiana com massa dependente da posição é dada pela Eq. (4.209). Esta lagrangiana corresponde a uma função com apenas um grau de liberdade em virtude de restrigirmos o formalismo para um movimento unidimensional. Por outro lado, a dinâmica quântica do correspondente problema é descrita através de campos contínuos que evoluem no espaço-tempo através da equação de Schrödinger para o campo $\Psi(x,t)$ em termos de operadores usuais ou $\Phi_q(x,t)$ em termos de operadores deformados. Neste caso, a ação deve ser expressa como a integral de uma função densidade lagrangiana $\mathcal{L}$.

M. A. Rego-Monteiro *et al.* [163, 164] introduziram uma teoria clássica de campos por meio de uma função densidade lagrangiana de dois campos acoplados (aqui representados por $\Phi_q(x,t)$ e $\tilde{\Phi}_q(x,t)$) e seus complexos conjugados, na qual leva a duas equações de Schrödinger deformadas associadas a operadores hamiltonianos não hermitianos. Mais

especificamente, considerando a densidade lagrangiana

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &\equiv \mathcal{L}(\Phi_q, \partial_x\Phi_q, \partial_x^2\Phi_q, \partial_t\Phi_q, \tilde{\Phi}_q, \partial_x\tilde{\Phi}_q, \partial_t\tilde{\Phi}_q, \Phi_q^*, \partial_x\Phi_q^*, \partial_x^2\Phi_q^*, \partial_t\Phi_q^*, \tilde{\Phi}_q^*, \partial_x\tilde{\Phi}_q^*, \partial_t\tilde{\Phi}_q^*) \\ &= \frac{i\hbar}{2}\tilde{\Phi}_q(x,t)\partial_t\Phi_q(x,t) + \frac{\hbar^2}{8}\left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\right]\tilde{\Phi}_q(x,t)\partial_x\Phi_q(x,t) \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{4m(x)}\tilde{\Phi}_q(x,t)\partial_x^2\Phi_q(x,t) - \frac{1}{2}V(x)\Phi_q(x,t)\tilde{\Phi}_q(x,t) \\ &\quad - \frac{i\hbar}{2}\tilde{\Phi}_q^*(x,t)\partial_t\Phi_q^*(x,t) + \frac{\hbar^2}{8}\left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\right]\tilde{\Phi}_q^*(x,t)\partial_x\Phi_q^*(x,t) \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{4m(x)}\tilde{\Phi}_q^*(x,t)\partial_x^2\Phi_q^*(x,t) - \frac{1}{2}V(x)\Phi_q^*(x,t)\tilde{\Phi}_q^*(x,t), \end{aligned} \tag{4.216}$$

das equações de de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\tilde{\Phi}_q} - \partial_x\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_x\tilde{\Phi}_q)}\right] - \partial_t\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\tilde{\Phi}_q)}\right] = 0, \tag{4.217}$$

e

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Phi_q} - \partial_x\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_x\Phi_q)}\right] - \partial_t\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\Phi_q)}\right] - \partial_x^2\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_x^2\Phi_q)}\right] = 0. \tag{4.218}$$

obtém-se as seguintes equações de onda

$$i\hbar\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m(x)}\frac{\partial^2\Phi_q(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\right]\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial x} + V(x)\Phi_q(x,t), \tag{4.219}$$

e

$$\begin{aligned}-i\hbar\frac{\partial\tilde{\Phi}_q(x,t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m(x)}\frac{\partial^2\tilde{\Phi}_q(x,t)}{\partial x^2} - \frac{3\hbar^2}{4}\left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\right]\frac{\partial\tilde{\Phi}_q(x,t)}{\partial x} - \frac{\hbar^2\gamma^2}{2m_0}\tilde{\Phi}_q(x,t) \\ &\quad + V(x)\tilde{\Phi}_q(x,t). \end{aligned} \tag{4.220}$$

Para a massa (4.80), temos claramente que a Eq. (4.219) corresponde a Eq. (4.103), e com a primeira e a segunda equação acima podendo ser escritas respectivamente como

$$i\hbar\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial t} = \hat{H}'\Phi_q(x,t) \qquad \text{e} \qquad -i\hbar\frac{\partial\tilde{\Phi}_q(x,t)}{\partial t} = (\hat{H}')^\dagger\tilde{\Phi}_q(x,t), \tag{4.221}$$

onde $\hat{H}'$ é o operador hamiltoniano (4.104) dado em termos do operador momento linear não hermitiano $\hat{p}'_q$. O operador $(\hat{H}')^\dagger$ é complexo conjugado de $\hat{H}'$, onde $(\hat{H}')^\dagger \neq \hat{H}'$ para $\gamma_q \neq 0$.

Devido à não hermiticidade do operador hamiltoniano $\hat{H}'$, os campos $\Phi_q(x,t)$ e $\tilde{\Phi}_q(x,t)$ não são complexos conjugados um do outro. Em particular, o caso usual ocorre com $\gamma_q = 0$, onde $\tilde{\Phi}_1(x,t) = \Phi_1^*(x,t)$ e $[(\hat{H}')^\dagger]_{\gamma_q=0} = [\hat{H}']_{\gamma_q=0}$.

A densidade de probabilidade definida por

$$\rho_q(x,t) \equiv \frac{1}{2}[\Phi_q(x,t)\tilde{\Phi}_q(x,t) + \Phi_q^*(x,t)\tilde{\Phi}_q^*(x,t)], \tag{4.222}$$

satisfaz a equação de continuidade

$$\frac{\partial \rho_q}{\partial t} + \frac{\partial j_q(x,t)}{\partial x} = 0, \tag{4.223}$$

com a densidade de corrente dada por

$$\begin{aligned} j_q(x,t) \;=\; & \frac{\hbar}{8i}\left\{\frac{2}{m(x)}\tilde{\Phi}_q(x,t)\frac{\partial \Phi_q(x,t)}{\partial x} - \frac{2}{m(x)}\Phi_q(x,t)\frac{\partial \tilde{\Phi}_q(x,t)}{\partial x}\right. \\ & \left. - \left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\right]\Phi_q(x,t)\tilde{\Phi}_q(x,t) + \left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\right]\Phi_q^*(x,t)\tilde{\Phi}_q^*(x,t)\right\}. \end{aligned} \tag{4.224}$$

Para campos do tipo $\Phi_q(x,t) = \varphi_q(x)e^{-iEt/\hbar}$ e $\tilde{\Phi}_q(x,t) = \tilde{\varphi}_q(x)e^{i\tilde{E}t/\hbar}$, e massa dada por (4.80), os estados estacionários ($\partial\rho_q/\partial t = 0$) são obtidos apenas se $E = \tilde{E}$. Desta forma, obtém-se $\tilde{\varphi}_q(x) = \varphi_q^*(x)/(1+\gamma_q x)$, e consequentemente, $\rho_q(x,t) = |\varphi_q(x)|^2/(1+\gamma_q x) = |\tilde{\varphi}_q(x)|^2$. O caso usual é recuperado para $q = 1$ ($\gamma_q = 0$).

Para a densidade lagrangiana (4.216), pode-se definir a densidade hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \Pi_{\Phi_q}\dot{\Phi}_q + \Pi_{\Phi_q^*}\dot{\Phi}_q^* + \Pi_{\tilde{\Phi}_q}\dot{\tilde{\Phi}}_q + \Pi_{\tilde{\Phi}_q^*}\dot{\tilde{\Phi}}_q^* + \Pi_{\dot{\Phi}_q}\ddot{\Phi}_q + \Pi_{\dot{\Phi}_q^*}\ddot{\Phi}_q^* + \Pi_{\dot{\tilde{\Phi}}_q}\ddot{\Phi}_q + \Pi_{\dot{\tilde{\Phi}}_q^*}\ddot{\Phi}_q^* - \mathcal{L}, \tag{4.225}$$

e se obtém os seguintes momentos canônicos

$$\begin{aligned} \Pi_{\Phi_q} \;&=\; \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_q} - \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \ddot{\Phi}_q} - 2\partial_x \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x \dot{\Phi}_q)}, \quad \Pi_{\tilde{\Phi}_q} \;=\; \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\tilde{\Phi}}_q} - \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \ddot{\tilde{\Phi}}_q} - 2\partial_x \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x \dot{\tilde{\Phi}}_q)}, \\ \Pi_{\dot{\Phi}_q} \;&=\; \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \ddot{\Phi}_q}, \qquad\qquad\qquad\qquad\quad \Pi_{\dot{\tilde{\Phi}}_q} \;=\; \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \ddot{\tilde{\Phi}}_q}. \end{aligned} \tag{4.226}$$

com expressões similares para os correspondentes complexos conjugados. No caso, obtém-se $\Pi_{\Phi_q} = i\hbar\Phi_q/2$ e $\Pi_{\tilde{\Phi}_q^*} = -i\hbar\Phi_q^*/2$, e demais momentos canônicos nulos. Portanto, tem-se a seguinte densidade hamiltoniana

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \;=\; & -\frac{\hbar^2}{8}\left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\right]\Phi_q(x,t)\partial_x\tilde{\Phi}_q(x,t) - \frac{\hbar^2}{4m(x)}\Phi_q(x,t)\partial_x^2\tilde{\Phi}_q(x,t) \\ & + \frac{1}{2}V(x)\Phi_q(x,t)\tilde{\Phi}_q(x,t) - \frac{\hbar^2}{8}\left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\right]\Phi_q{*}(x,t)\partial_x\tilde{\Phi}_q^*(x,t) \\ & - \frac{\hbar^2}{4m(x)}\Phi_q^*(x,t)\partial_x^2\tilde{\Phi}_q^*(x,t) + \frac{1}{2}V(x)\Phi_q^*(x,t)\tilde{\Phi}_q^*(x,t). \end{aligned} \tag{4.227}$$

Como simples exemplo, Rego-Monteiro *et al.* [163] consideraram uma partícula sujeita a um potencial constante $V(x) = V_0$. O resultado obtido é $\mathcal{H} = \hbar^2k^2/2m_0$, com $k =$

$\sqrt{2m_0(E-V_0)}/\hbar$.

Recentemente, Plastino *et al.* [216] formularam uma teoria clássica de campos alternativa, onde é necessário apenas o uso de um campo (Φ_q ou Ψ). A seguir, apresentamos uma formulação alternativa à proposta de [216], mas que também utiliza um único campo para a descrição lagrangiana (ou hamiltoniana) de sistemas com massa efetiva. Mais especificamente, propomos densidades lagrangianas que levam às equações de Schrödinger que apresentamos na Seção (4.3). Também mostramos que o uso de apenas um campo é suficiente para obter o espectro de sistemas quântico em potenciais que dependem da posição. Iniciemos nossa análise considerando a ação em um espaço deformado, e dada por

$$S = \int_{t_i}^{t_f}\int_{x_{q,i}}^{x_{q,f}} \mathcal{L}_q(x_q,t)dx_q dt, \tag{4.228}$$

com a densidade lagrangiana

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_q &= \mathcal{L}_q\left(\Phi,\Phi^*,\partial_{x_q}\Phi,\partial_{x_q}\Phi^*,\partial_t\Phi,\partial_t\Phi^*,x_q,t\right)\\ &= \frac{i\hbar}{2}\left[\Phi^*(x_q,t)\frac{\partial\Phi(x_q,t)}{\partial t}-\frac{\partial\Phi^*(x_q,t)}{\partial t}\Phi(x_q,t)\right]\\ &\quad -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{\partial\Phi^*(x_q,t)}{\partial x_q}\right]\left[\frac{\partial\Phi(x_q,t)}{\partial x_q}\right]-V(x_q)\Phi^*(x_q,t)\Phi(x_q,t).\end{aligned} \tag{4.229}$$

A Eq. (4.74) é obtida aplicando a equação de Euler-Lagrange usual para o espaço deformado x_q:

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Phi}-\partial_{x_q}\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_{x_q}\Phi)}\right]-\partial_t\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\Phi)}\right]=0. \tag{4.230}$$

Através da mudança de variável $x_q\to x$, e considerando a invariância da ação S, a densidade lagrangiana $\mathcal{L}\equiv\mathcal{L}_q/(1+\gamma_q x)$ no espaço de coordenadas x pode ser escrita como

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \frac{i\hbar}{2}\frac{1}{1+\gamma_q x}\left[\Phi_q^*(x,t)\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial t}-\frac{\partial\Phi_q^*(x,t)}{\partial t}\Phi_q(x,t)\right]\\ &\quad -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{1+\gamma_q x}\mathcal{D}_{\gamma_q}\Phi_q(x,t)\mathcal{D}_{\gamma_q}\Phi_q^*(x,t)-V(x)\frac{\Phi_q^*(x,t)\Phi_q(x,t)}{1+\gamma_q x},\end{aligned} \tag{4.231}$$

onde utilizamos $\Phi_q(x,t)=\Phi(x_q(x),t)$. Podemos observar que a lagrangiana acima é equivalente à Eq. (4.216) utilizando $\tilde{\Phi}_q(x,t)=\Phi_q^*(x,t)/(1+\gamma_q x)$. Através desta mudança de variável, temos a equação de Euler-Lagrange deformada

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Phi_q}-\mathcal{D}_{\gamma_q}\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\mathcal{D}_{\gamma_q}\Phi_q)}\right]-\partial_t\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\Phi_q)}\right]=0, \tag{4.232}$$

e a partir da lagrangiana (4.231), obtemos a equação de Schrödinger deformada (4.103).

A densidade hamiltoniana definida por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}\left(\Phi_q, \Phi_q^*, \partial_x\Phi_q, \partial_x\Phi_q^*, \dot{\Phi}_q, \dot{\Phi}_q^*, x, t\right) = \Pi_{\Phi_q}\dot{\Phi}_q + \Pi_{\Phi_q^*}\dot{\Phi}_q^* - \mathcal{L}, \tag{4.233}$$

onde os momentos canônicos conjugados aos campos Φ_q e Φ_q^* são

$$\Pi_{\Phi_q} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\Phi}_q} = \frac{i\hbar}{2}\frac{\Phi_q^*(x,t)}{1+\gamma_q x}, \qquad \text{e} \qquad \Pi_{\Phi_q^*} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\Phi}_q^*} = -\frac{i\hbar}{2}\frac{\Phi_q(x,t)}{1+\gamma_q x}. \tag{4.234}$$

Segue que

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{1+\gamma_q x}\mathcal{D}_{\gamma_q}\Phi_q(x,t)\mathcal{D}_{\gamma_q}\Phi_q^*(x,t) + V(x)\frac{\Phi_q(x,t)\Phi_q^*(x,t)}{1+\gamma_q x} \tag{4.235}$$

Integrando a densidade hamiltoniana acima em relação a coordenada espacial x e utilizando no primeiro termo uma integração por partes, obtemos

$$\begin{aligned}
\int_{x_i}^{x_f}\mathcal{H}dx &= \int_{x_i}^{x_f}\left[\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{1+\gamma_q x}\mathcal{D}_{\gamma_q}\Phi_q(x,t)\mathcal{D}_{\gamma_q}\Phi_q^*(x,t) + V(x)\frac{\Phi_q(x,t)\Phi_q^*(x,t)}{1+\gamma_q x}\right]dx \\
&= \int_{x_i}^{x_f}\Phi_q^*(x,t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\mathcal{D}_{\gamma_q}^2\Phi_q(x,t) + V(x)\frac{\Phi_q(x,t)}{1+\gamma_q x}\right]\frac{dx}{1+\gamma_q x} \\
&= \int_{x_i}^{x_f}\frac{1}{1+\gamma_q x}\Phi_q^*(x,t)i\hbar\frac{\partial\Phi_q(x,t)}{\partial t} \\
&= E,
\end{aligned} \tag{4.236}$$

onde utilizamos $\Phi_q(x,t) = \varphi_q(x)e^{-iEt/\hbar}$.

Em termos do campo $\Psi(x,t) = \sqrt{1+\gamma_q x}\Phi_q(x,t)$, a densidade lagrangiana torna-se

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} = &\frac{i\hbar}{2}\left[\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial t}\Psi(x,t)\right] \\
&-\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{\sqrt{m(x)}}\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\Psi^*(x,t)}{\sqrt[4]{m(x)}}\right]\right\}\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\Psi(x,t)}{\sqrt[4]{m(x)}}\right]\right\} - V(x)\Psi^*(x,t)\Psi(x,t),
\end{aligned} \tag{4.237}$$

onde obtemos a Eq. (4.85) pelo uso da equação de Euler-Lagrange usual

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Psi} - \partial_x\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_x\Psi)}\right] - \partial_t\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\Psi)}\right] = 0, \tag{4.238}$$

que é equivalente a lagrangiana (4.216) fazendo $\Phi_q(x,t) = \sqrt{1+\gamma_q x}\Psi(x,t)$ e $\tilde{\Phi}_q(x,t) = \Psi^*(x,t)/\sqrt{1+\gamma_q x}$.

Para a densidade lagrangiana (4.237), temos que a densidade hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H} = \Pi_\Psi\dot{\Psi} + \Pi_{\Psi^*}\dot{\Psi}^* - \mathcal{L}, \tag{4.239}$$

cujos momentos canônicos são os seguintes:

$$\Pi_{\Psi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} = \frac{i\hbar}{2}\Psi^* \qquad \text{e} \qquad \Pi_{\Psi^*} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} = -\frac{i\hbar}{2}\Psi. \tag{4.240}$$

A densidade hamiltoniana em termos dos campos $\Psi(x,t)$ e $\Psi^*(x,t)$ torna-se

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{\sqrt{m(x)}}\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\Psi^*(x,t)}{\sqrt[4]{m(x)}}\right]\right\}\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\Psi(x,t)}{\sqrt[4]{m(x)}}\right]\right\} + V(x)\Psi^*(x,t)\Psi(x,t), \tag{4.241}$$

a qual poderia ser obtida através da substituição de Φ_q em termos de Ψ em (4.235). Integrando a densidade hamiltoniana, e aplicando uma integração por partes , temos

$$\begin{aligned}
\int_{x_i}^{x_f}\mathcal{H}dx &= \int_{x_i}^{x_f}\left\{\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{\sqrt{m(x)}}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\Psi^*(x,t)}{\sqrt[4]{m(x)}}\right]\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\Psi(x,t)}{\sqrt[4]{m(x)}}\right] + V(x)\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\right\}dx \\
&= \int_{x_i}^{x_f}\frac{\hbar^2}{m_0}(1+\gamma_q x)\frac{\partial}{\partial x}\left[\sqrt{1+\gamma_q x}\Psi^*(x,t)\right]\frac{\partial}{\partial x}\left[\sqrt{1+\gamma_q x}\Psi(x,t)\right]dx \\
&\quad + \int_{x_i}^{x_f}V(x)\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx \\
&= -\int_{x_i}^{x_f}\frac{\hbar^2}{2m_0}[\sqrt{1+\gamma_q x}\Psi^*(x,t)]\frac{\partial}{\partial x}\left\{(1+\gamma_q x)\frac{\partial}{\partial x}\left[\sqrt{1+\gamma_q x}\Psi(x,t)\right]\right\}dx \\
&\quad + \int_{x_i}^{x_f}V(x)\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx \\
&= \int_{x_i}^{x_f}\Psi^*(x,t)\left[-\frac{\hbar^2(1+\gamma_q x)^2}{2m_0}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q x(1+\gamma_q x)}{m_0}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx\right. \\
&\quad \left. -\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t)\right]dx \\
&= \int_{x_i}^{x_f}\Psi^*(x,t)i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}dx \\
&= E,
\end{aligned} \tag{4.242}$$

onde utilizamos $\Psi(x,t) = \psi(x,t)e^{-iEt/\hbar}$. Desta forma, mostramos que existe uma equivalência entre a formulação de uma teoria clássica de campos para descrever a dinâmica dos campos acoplados $\Phi_q(x,t)$ e $\tilde{\Phi}_q(x,t)$ proposta em [163] e esta que apresentamos em termos um dos campos $\Phi_q(x,t)$ ou $\Psi(x,t)$, similarmente ao que foi feito em [216]. Apresentamos que para a formulação com um único campo, $\Phi_q(x,t)$ ou $\Psi(x,t)$, estes apresentam uma relação com os dois campos utilizados em [163] na situação de estados estacionários. Vimos ainda que existe uma equivalência entre a aplicação dos campos $\Phi_q(x,t)$ ou $\Psi(x,t)$ para descrever sistemas com massa dependente da posição em potenciais não constantes $V(x)$.

Capítulo 5

Aplicações da dinâmica quântica q-deformada para massa efetiva

A seguir faremos algumas aplicações do formalismo de equações q-deformadas da mecânica quântica associadas a sistemas com massa efetiva. Em particular, analisamos neste Capítulo os problemas típicos como confinamento em poços de potenciais e barreiras de potenciais.

Iniciamos estudando o problema de uma partícula com massa dependente da posição e confinada em um poço de potencial quadrado infinito, cujo problema é analisado em ambos formalismos clássico e quântico, e com seus resultados comparados.

Diferentemente do potencial quadrado infinito, problemas de barreiras de potenciais permitem efeitos de penetração quando a energia da partícula é menor do que a energia potencial na região ($E < V$). Similar ao que é feito para partículas de massa constante, estes problemas são comparados com a propagação de ondas eletromagnéticas em meios homogêneos. Apresentamos uma analogia entre ondas eletromagéticas em meios não homogêneos e a dinâmica quântica q-deformada para massa efetiva, e em seguida resolvemos os problemas do potencial degrau, tunelamento quântico e poço de potencial quadrado finito.

5.1 Partícula com massa efetiva em um poço de potencial quadrado infinito

O problema de uma partícula confinada em um poço de potencial quadrado infinito para a massa (4.80) foi primeiramente analisado por Schmidt [217] no formalismo quântico. Costa-Filho *et al.* [11] também resolveu este problema através da equação de Schrödinger deformada (4.103), e que está associada ao operador momento linear deformado não hermitinano (4.2). Rego-Monteiro *et al.* [163] reanalisaram este problema como aplicação de uma teoria clássica de campos que discutimos na Seção 4.8. Mazharimousavi [169] ana-

lisou o mesmo problema utilizando o operador momento linear hermitiano (4.54). Aqui, revisitamos este problema, primeiramente através do formalismos clássico, e em seguida no quântico [33].

Partícula com massa efetiva em poço de potencial quadrado infinito – formalismo clássico:

Consideremos uma partícula de massa $m(x)$ dada pela Eq. (4.80), energia E, e confinada em uma caixa de comprimento L, isto é, $0 \leq x \leq L$. A hamiltoniana desta partícula é dada por

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m(x)} = \frac{(1+\gamma_q x)^2 p^2}{2m_0}. \tag{5.1}$$

Seja $H(x,p) = E$ uma integral de movimento, segue que o momento linear desta partícula é

$$p(x) = \pm \frac{\sqrt{2m_0 E}}{|1+\gamma_q x|}. \tag{5.2}$$

A Figura 5.1 mostra o espaço de fase (x,p) da partícula confinada em uma caixa de comprimento L para diferentes valores de $\gamma_q L$. Para $\gamma_q L = 0$ ($q = 1$), reobtemos o caso usual. Quanto maior o valor de $|\gamma_q L|$, maior é o efeito da variação da massa $m(x)$ e do momento linear p da partícula ao longo do movimento no interior da caixa. Para $\gamma_q L > 0$ ($-1 < \gamma_q L < 0$), os valores da massa $m(x)$ e do momento linear p da partícula diminuem (aumentam) à medida que a partícula move-se de $x = 0$ para $x = L$.

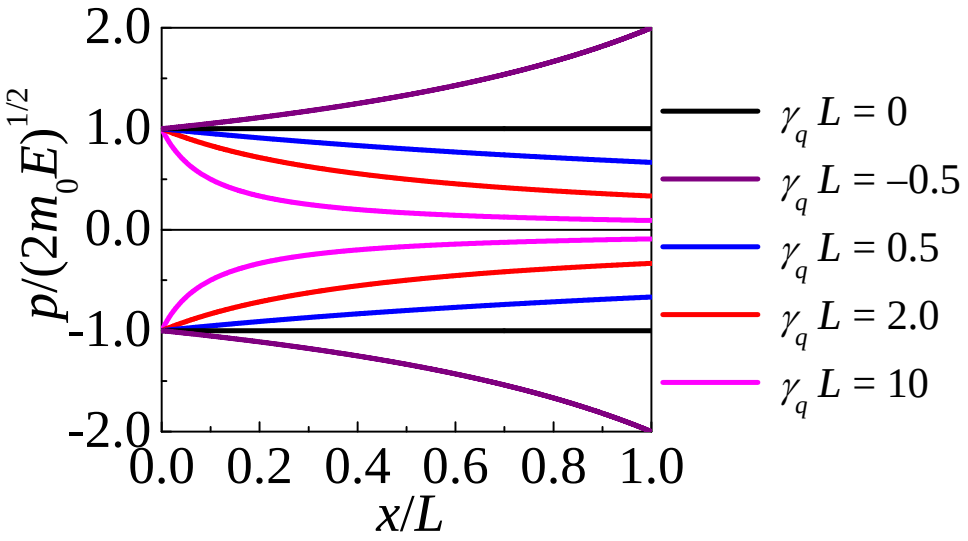


Figura 5.1: Espaço de fase de uma partícula com energia E, posição $0 \leq x \leq L$ e massa dependente da posição para $\gamma_q L = 0$ (caso usual), -0.5, 0.5, 2.0 e 10.

Da Eq. (4.169), a velocidade da partícula na caixa é

$$\begin{aligned} v(x) &= \pm\sqrt{\frac{2E}{m(x)}} = \pm\sqrt{\frac{2E}{m_0}(1+\gamma_q x)^2} \\ &= \pm v_0|1+\gamma_q x|, \end{aligned} \tag{5.3}$$

onde $v_0 = \sqrt{2E/m_0}$ corresponde à velocidade da partícula para o caso $\gamma_q = 0$. A constante v_0 também pode ser entendida como a velocidade da partícula em $x = 0$. Podemos observar que, a velocidade da partícula diferentemente do caso usual não é constante, em virtude do efeito da massa variável. Por exemplo, para $\gamma_q > 0$ $(-1/L < \gamma_q < 0)$, o módulo da velocidade da partícula aumenta (diminui) quando desloca-se de $x = 0$ para $x = L$.

Para $v > 0$ e $0 < x < L$, a posição em função do tempo pode ser obtida integrando a equação anterior. Segue que:

$$x(t) = \frac{e^{\gamma_q(v_0 t)} - 1}{\gamma_q} = \xi \ln_q\left[\exp\left(\frac{v_0 t}{\xi}\right)\right], \tag{5.4}$$

que tem a mesma estrutura do antinúmero (2.96).

A probabilidade $P_{\text{clássica}}(x)dx \propto dx/v$ para a partícula estar localizada entre x e $x+dx$ pode ser escrita como

$$P_{\text{clássica}}(x)dx = \frac{C}{1+\gamma_q x}dx. \tag{5.5}$$

onde C é uma constante de proporcionalidade obtida a partir da condição de normalização $\int_0^L P_{\text{clássica}}(x)dx = 1$. Destarte, encontramos $C = \gamma_q/\ln(1+\gamma_q L)$, e portanto

$$P_{\text{clássica}}(x)dx = \frac{\gamma_q}{(1+\gamma_q x)\ln(1+\gamma_q L)}dx. \tag{5.6}$$

Como pode-se observar, a densidade de probabilidade $P_{\text{clássica}}(x)dx$ é independente da condição inicial, e a distribuição uniforme $P_{\text{clássica}}(x) \to 1/L$ é recuperada no limite $\gamma_q \to 0$. A Figura 5.2 mostra a densidade de probabilidade $P_{\text{clássica}}(x)$ para diferentes valores $\gamma_q L$. Quando $\gamma_q L > 0$ $(-1 < \gamma_q L < 0)$, a densidade de probabilidade é maior (menor) para valores de x próximos de 0 devido ao fato da partícula apresentar menor (maior) velocidade.

Através da transformação canônica $x_q = \gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)$ e $p_q = (1+\gamma_q x)p$, a nova hamiltoniana torna-se $K(x_q, p_q) = p_q^2/2m_0$, o que corresponde a uma partícula de momento linear $p_q = m_0\dot{x}_q$ de módulo constante no interior de uma caixa com comprimento deformado

$$L_q = \frac{\ln(1+\gamma_q L)}{\gamma_q}. \tag{5.7}$$

A Figura 5.3 ilustra a razão L_q/L entre em função de $\gamma_q L$. A largura da caixa L_q no espaço x_q é contraído (dilatado) em relação à largura L no espaço x para valores

de $\gamma_q > 0$ ($-1/L < \gamma_q < 0$). Consequentemente, pela mudança de variável $x \to x_q$, a densidade probabilidade (5.6) torna-se uniforme, e é dada por $P_{\text{clássica}}(x_q) = 1/L_q$ para $0 < x < L_q$.

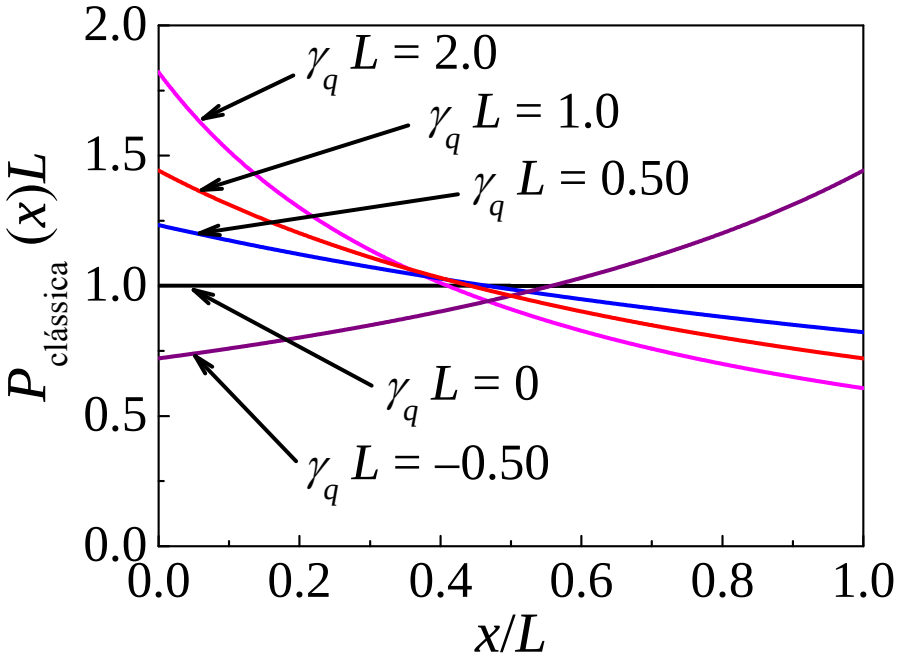


Figura 5.2: Densidade de probabilidade clássica para uma partícula em uma caixa entre $0 \leq x \leq L$ e massa dependente da posição para $\gamma_q L = 0$ (caso usual), -0.5, 0.5, 1.0 e 2.0.

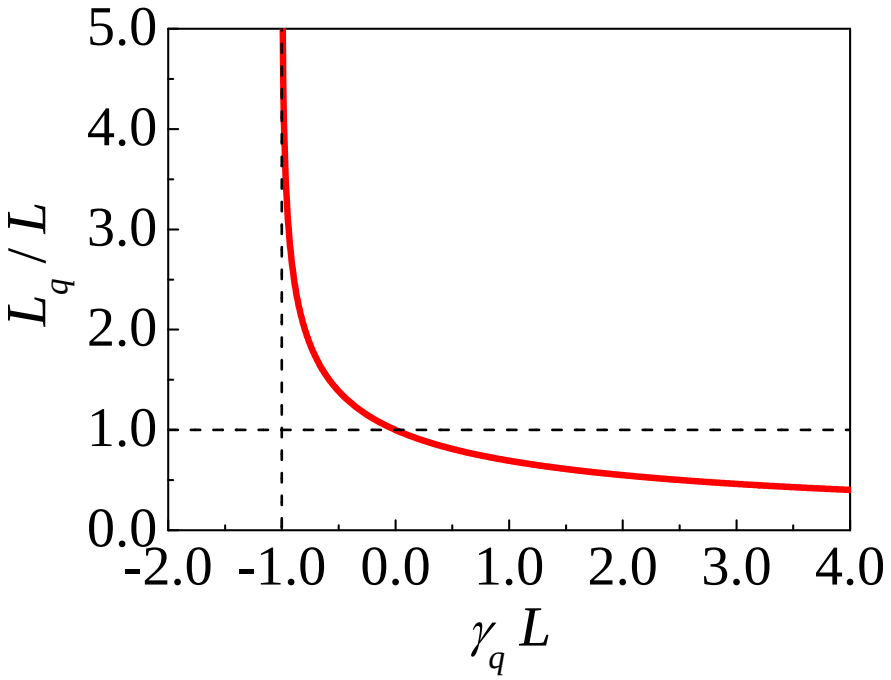


Figura 5.3: Razão L_q/L entre o comprimento do espaço deformado e do espaço usual em função de $\gamma_q L$. Para $\gamma_q L > 1$ ($0 < \gamma_q L < -1$), temos $L_q < L$ ($L_q > L$). Para $\gamma_q = 0$ ($q = 1$), temos $L_q = L$.

Os primeiros momentos da posição e do momento linear para a distribuição clássica dada pela Eq. (5.6) são

$$\overline{x} = \frac{\gamma_q L - \ln(1+\gamma_q L)}{\gamma_q \ln(1+\gamma_q L)}, \tag{5.8a}$$

$$\overline{x^2} = \frac{\gamma_q^2 L^2 - 2\gamma_q L + 2\ln(1+\gamma_q L)}{2\gamma_q^2 \ln(1+\gamma_q L)}, \tag{5.8b}$$

$$\overline{p} = 0, \tag{5.8c}$$

$$\overline{p^2} = 2m_0 E \frac{[(1+\gamma_q L)^2 - 1]}{2(1+\gamma_q L)^2 \ln(1+\gamma_q L)}, \tag{5.8d}$$

onde $\lim_{\gamma_q \to 0} \overline{x} = L/2$, $\lim_{\gamma_q \to 0} \overline{x^2} = L^2/3$, $\lim_{\gamma_q \to 0} \overline{p^2} = 2m_0 E$, como esperado para o caso em que os deslocamentos da partícula são lineares.

Demonstração:

O valor médio da posição da partícula é dado por:

$$\begin{aligned}
\overline{x} &= \int_0^L x P_{\text{clássica}}(x) dx = \int_0^L \frac{\gamma_q x}{(1+\gamma_q x)\ln(1+\gamma_q L)} dx \\
&= \int_0^L \frac{1}{\ln(1+\gamma_q L)} \left[1 - \frac{1}{1+\gamma_q x}\right] dx = \left[\frac{x}{\ln(1+\gamma_q L)} - \frac{\ln(1+\gamma_q x)}{\gamma_q \ln(1+\gamma_q L)}\right]\Bigg|_0^L \\
&= \frac{\gamma_q L - \ln(1+\gamma_q L)}{\gamma_q \ln(1+\gamma_q L)}.
\end{aligned} \tag{5.9}$$

O valor médio do quadrado da posição é

$$\begin{aligned}
\overline{x^2} &= \int_0^L x^2 P_{\text{clássica}}(x) dx = \int_0^L \frac{\gamma_q x^2}{(1+\gamma_q x)\ln(1+\gamma_q L)} dx \\
&= \int_0^L \frac{1}{\gamma_q \ln(1+\gamma_q L)} \left[\gamma_q x - \frac{\gamma_q x}{1+\gamma_q x}\right] dx \\
&= \frac{1}{\ln(1+\gamma_q L)} \int_0^L x dx - \frac{1}{\gamma_q} \int_0^L \frac{\gamma_q x}{(1+\gamma_q x)\ln(1+\gamma_q L)} dx = \frac{L^2}{2\ln(1+\gamma_q L)} - \frac{\overline{x}}{\gamma_q} \\
&= \frac{\gamma_q^2 L^2 - 2\gamma_q L + 2\ln(1+\gamma_q L)}{2\gamma_q^2 \ln(1+\gamma_q L)}.
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Para calcular $\overline{p}$, observemos que a partícula em uma posição x pode ter momento linear igual $p_+ = +\sqrt{2m_0 E}/(1+\gamma_q x) > 0$ ou $p_- = -\sqrt{2m_0 E}/(1+\gamma_q x) < 0$ com probabilidades

iguais à $\frac{1}{2}P_{\text{clássica}}(x)dx$. Portanto, o valor médio do momento linear é

$$\begin{aligned}\overline{p} &= \int_0^L p(x)P_{\text{clássica}}(x)dx = \frac{1}{2}\int_0^L p_+P_{\text{clássica}}(x)dx + \frac{1}{2}\int_0^L p_-P_{\text{clássica}}(x)dx \\ &= \frac{1}{2}\int_0^L \frac{\sqrt{2m_0E}}{1+\gamma_q x}P_{\text{clássica}}(x)dx - \frac{1}{2}\int_0^L \frac{\sqrt{2m_0E}}{1+\gamma_q x}P_{\text{clássica}}(x)dx \\ &= 0. \end{aligned} \tag{5.11}$$

Por fim, a partir da Eq. (5.2), o valor médio do quadrado do momento linear é

$$\begin{aligned}\overline{p^2} &= \int_0^L [p(x)]^2P_{\text{clássica}}(x)dx = \int_0^L \left[\frac{2m_0E}{(1+\gamma_q x)^2}\right]\left[\frac{\gamma_q}{(1+\gamma_q x)\ln(1+\gamma_q L)}\right]dx \\ &= 2m_0E\frac{\gamma_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^L \frac{1}{(1+\gamma_q L)^3}dx = 2m_0E\frac{\gamma_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\left[-\frac{1}{2\gamma_q(1+\gamma_q x)^2}\right]\Bigg|_0^L \\ &= 2m_0E\frac{[(1+\gamma_q L)^2-1]}{2(1+\gamma_q L)^2\ln(1+\gamma_q L)}, \end{aligned} \tag{5.12}$$

como queríamos demonstrar.

Partícula com massa efetiva em poço de potencial quadrado infinito – formalismo quântico:

No formalismo quântico, consideremos uma partícula com massa dependente da posição (4.80) em um potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le L, \\ \infty, & \text{outros valores.} \end{cases} \tag{5.13}$$

Em termos do campo $\psi_q(x)$, temos que fora do poço este torna-se nulo, e dentro do poço satisfaz a equação de de Schrödinger independente do tempo (4.86)

$$-\frac{\hbar^2(1+\gamma_q x)^2}{2m_0}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{m_0}\frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\psi(x) = E\psi(x). \tag{5.14}$$

uma vez que $V = 0$. Conforme vimos na Seção 4.3, a solução para a equação acima é dada por (4.127):

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\left\{c_+\exp\left[\frac{ik}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right] + c_-\exp\left[-\frac{ik}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right]\right\}, \tag{5.15}$$

com $\psi(x) = 0$ para $x < -1/L_q$, e $E = \hbar^2k^2/2m_0$.

Seja $c_\pm = (B \mp iA)/2$, a função de estado $\psi(x)$ pode ser escrita como

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\text{sen}\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right] + \frac{B}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\cos\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right]. \tag{5.16}$$

Das condições de contorno $\psi(0) = 0$ e $\psi(L) = 0$, obtemos $B = 0$ e

$$k_{q,n} = \frac{n\pi\gamma_q}{\ln(1+\gamma_q L)} = \frac{n\pi}{L_q}, \qquad (\text{n} = 1,2,3,...). \tag{5.17}$$

Os níveis de energia são dados por

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2\gamma_q^2 n^2}{2m_0 \ln^2(1+\gamma_q L)} = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2m_0 L_q^2}, \tag{5.18}$$

e consequentemente a diferença de energia entre dois estados consecutivos é

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{(2n+1)\hbar^2\pi^2\gamma_q^2}{2m_0 \ln^2(1+\gamma_q L)} = (2n+1)\left(\frac{L}{L_q}\right)^2 \varepsilon_0, \tag{5.19}$$

com $\varepsilon_0 = \hbar^2\pi^2/2m_0L^2$. A Figura 5.4 ilustra os níveis de energia E_n da partícula dados pela Eq. (5.18) em função do número quântico n para diferentes valores de $\gamma_q L$. Para uma contração (dilatação) do espaço, onde $\gamma_q > 0$ ($\gamma_q < 0$), os níveis de energia da partícula tornam-se maiores (menores) em relação àqueles do caso usual. A variação de energia ΔE_n entre dois estados consecutivos torna-se o tanto maior, quanto maior for o valor de $\gamma_q L$. Estes resultados são consequência da dependência da massa efetiva com a posição. De fato, para maiores valores de γ_q, temos uma massa efetiva $m(x)$ dada pela Eq. (4.80) menor para cada posição x, e uma maior energia cinética da partícula, portanto isto leva a um aumento de E_n com γ_q conforme mostra a Figura 5.4.

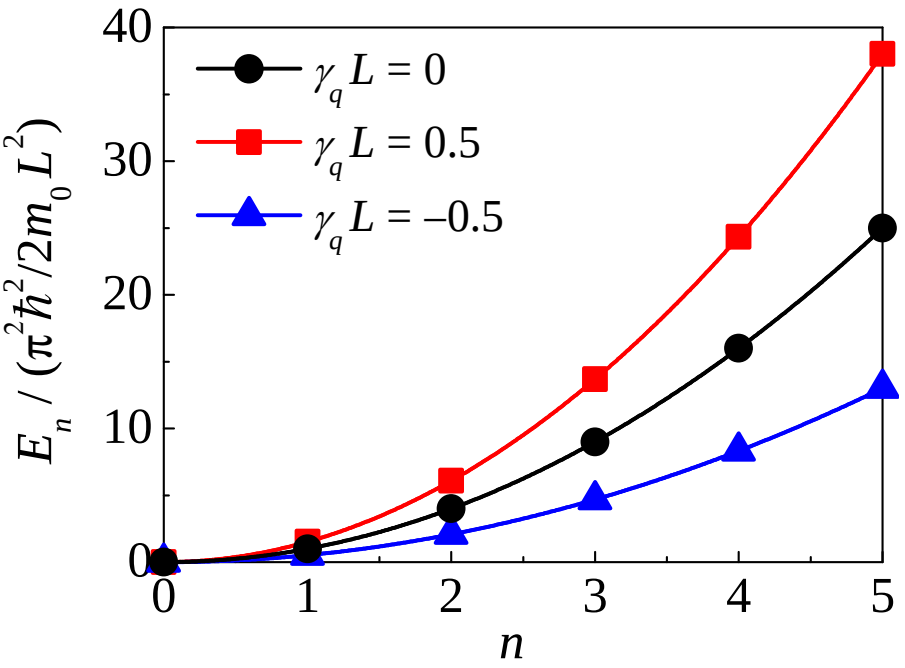


Figura 5.4: Níveis de energia da partícula (5.18) confinada em uma caixa unidimensional em função do número quântico n para diferentes valores de $\gamma_q L$ (0, -0.50 e 0.50).

Pela condição de normalização, podemos calcular a constante A. De fato,

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^L |\psi(x)|^2 dx \\ &= A^2 \int_0^L \frac{1}{1+\gamma_q x} \text{sen}^2 \left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q} \ln(1+\gamma_q x) \right] dx \\ &= A^2 \int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} \text{sen}^2 \left[\frac{n\pi\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)} \right] dx_q \\ &= A^2 \frac{\ln(1+\gamma_q L)}{2\gamma_q}, \end{aligned} \tag{5.20}$$

onde utilizamos a mudança de variável $x \to x_q = \gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)$. Escrevendo de forma conveniente $A = A_q$, obtemos

$$A_q = \sqrt{\frac{2\gamma_q}{\ln(1+\gamma_q L)}} = \sqrt{\frac{2}{L_q}}. \tag{5.21}$$

Portanto, as autofunções são

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2\gamma_q}{\ln(1+\gamma_q L)}} \dfrac{1}{\sqrt{1+\gamma_q x}} \text{ sen} \left[\dfrac{n\pi \ln(1+\gamma_q x)}{\ln(1+\gamma_q L)} \right], & 0 < x < L \\ 0, & \text{outros valores.} \end{cases} \tag{5.22}$$

Esta função de onda é similar àquela obtida em [217]. Resolvendo o correspondente problema em termos do campo $\varphi_q(x)$ a partir da equação de Schrödinger deformada independente do tempo (4.105), obtém-se

$$\varphi_{q,n}(x) = \sqrt{1+\gamma_q x}\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2\gamma_q}{\ln(1+\gamma_q L)}} \text{ sen} \left[\dfrac{n\pi \ln(1+\gamma_q x)}{\ln(1+\gamma_q L)} \right], & 0 < x < L \\ 0, & \text{outros valores.} \end{cases} \tag{5.23}$$

conforme feito em [11], onde se utilizou o operador linear deformado não hermitiano $\hat{p}'_q = (1+\gamma_q \hat{x})\hat{p}$. Notemos que a função de onda acima tem uma estrutura similar à função trigonométrica deformada $\text{Sn}(x)$ que apresentamos na Seção 2.6.

No espaço $\{|\hat{x}_q\rangle\}$, o correspondente problema é mapeado em uma partícula confinada em uma poço de potencial quadrado infinito, mas de largura L_q, e funções de onda idênticas àquelas do caso usual

$$\varphi_n(x_q) = \varphi_{q,n}(x_q(x)) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{L_q}} \text{ sen} \left(\dfrac{n\pi x_q}{L_q} \right), & 0 < x_q < L_q \\ 0, & \text{outros valores.} \end{cases} \tag{5.24}$$

A função de onda dos estados estacionários e os níveis de energia (5.18) de uma partícula com massa dependente da posição em um poço de potencial quadrado infinito se reduzem aos resultados do caso usual no limite $\gamma_q \to 0$.

A Figura 5.5 mostra as funções de onda $\psi_n(x)$ e suas respectivas densidades de probabilidade para os três estados de menor energia ($n = 1$, 2 e 3) para difentes valores de $\gamma_q L$. Diferentemente da generalização para o problema de uma partícula confinada em um poço de potencial quadrado infinito obtida através da equação de Schrödinger não linear NRT, que apresentamos na Seção (3.6), para o respectivo problema q-deformado aqui tratado, podemos observar que existe uma assimetria em decorrência da massa dependente da posição. As densidades de probabilidade tornam-se maiores em torno de $x = 0$ para valores de $\gamma_q L$ maiores. A aplicação do formalismo apresentado aqui pode ser útil em sistemas em que as partículas nos níveis de baixa energia não possuem a mesma probabilidade para serem encontradas em diferentes regiões, apresentando portanto uma distribuição assimétrica em torno de uma região central.

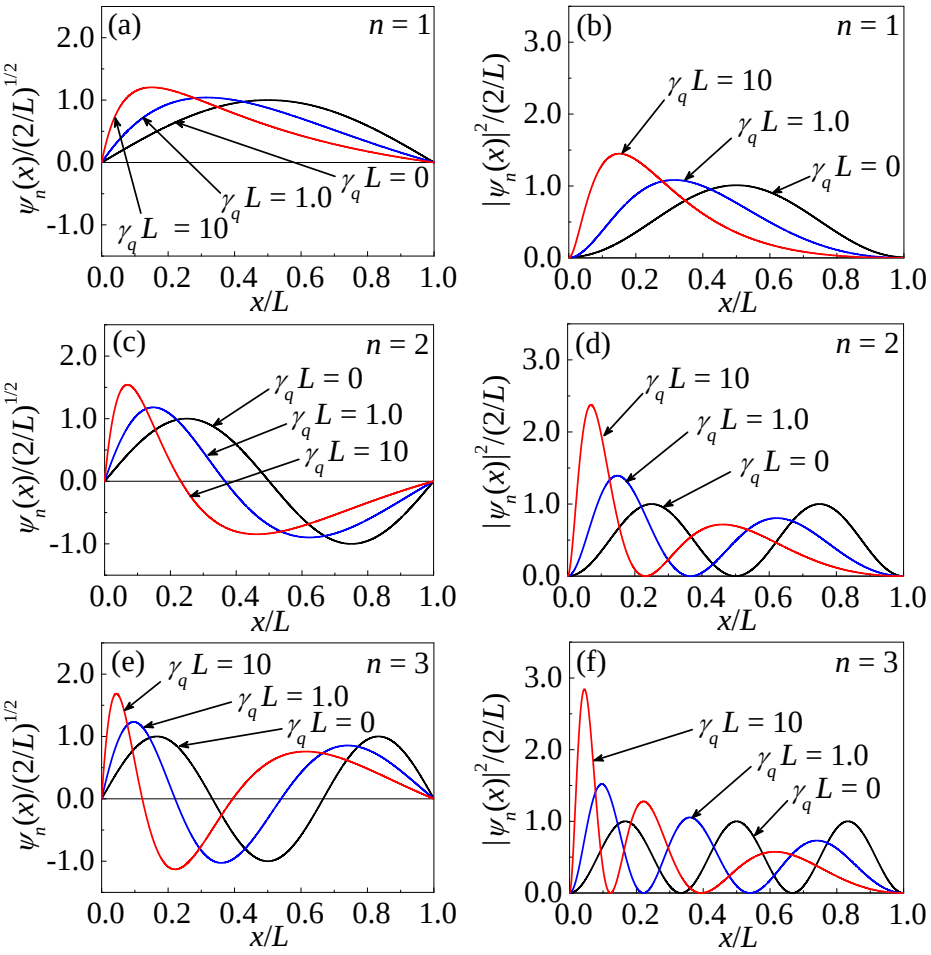


Figura 5.5: Autofunções $\psi_n(x)$ (coluna da esquerda) e suas respectivas densidades de probabilidade $|\psi_n(x)|^2$ (coluna da direita), convenientemente escalonadas, de uma partícula com massa dependente da posição confinada em um poço de potencial quadrado infinito, para valores de $\gamma_q L = 0$ (caso usual), 1.0 e 10, em diferentes estados. (a) e (b): $n = 1$ (estado fundamental), (c) e (d): $n = 2$ (primeiro estado excitado), (e) e (f): $n = 3$ (segundo estado excitado).

Conforme se espera, de acordo com o princípio da correspondência, considerando o limite de números quânticos grandes, os resultados obtidos no formalismo quântico devem recuperar aqueles obtidos no formalismo clássico. Desta forma, podemos observar através da Figura 5.6 que o valor médio da densidade de probabilidade quântica $\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2$, exemplificada aqui para $n = 10$, aproxima-se da correspondente densidade de probabilidade clássica $P_{\text{clássica}}(x)$ dada pela Eq. (5.5), o que é consistente com o princípio da correspondência.

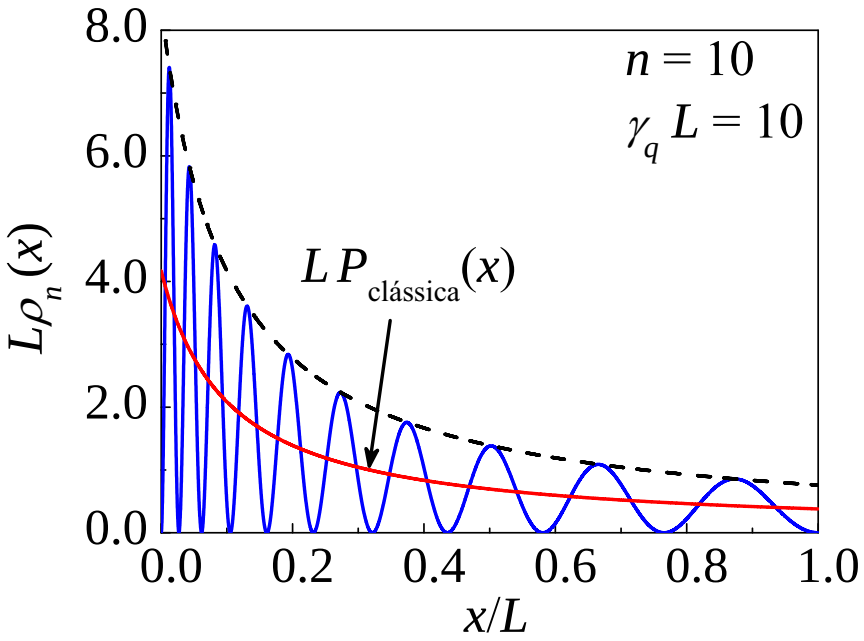


Figura 5.6: Densidade de probabilidade de uma partícula com massa dependente da posição confinada em poço de potencial quadrado infinito com $\gamma_q L = 10$ no estado $n = 10$. A curva superior pontilhada é dada por $2\gamma_q L/[(1+\gamma_q x)\ln(1+\gamma_q L)]$.

Estendendo os resultados aqui apresentados para uma partícula em uma caixa bidimensioanal, as densidades de probabilidade são dadas por

$$\begin{aligned}\rho_{n_1,n_2}(x,y) &= |\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)|^2 \\ &= \frac{4\gamma_q^2}{\ln^2(1+\gamma_q L)}\frac{1}{(1+\gamma_q x)(1+\gamma_q y)} \\ &\quad \times \text{sen}^2\left[\frac{n_1\pi\ln(1+\gamma_q x)}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]\text{sen}^2\left[\frac{n_2\pi\ln(1+\gamma_q y)}{\ln(1+\gamma_q L)}\right] \end{aligned} \tag{5.25}$$

Da Figura 5.7 à 5.10 são mostradas as densidades de probabilidade (5.25) para diferentes valores de $\gamma_q L$ em diferentes estados (n_1, n_2). A Figura 5.7 ilustra o caso usual ($\gamma_q L = 0$), cuja partícula tem massa constante, para comparação. Como no caso unidimensional, a densidade de probabilidade torna-se assimétrica devido ao efeito da massa dependente da posição. $\rho_{n_1,n_2}(x,y)$ torna-se maior em torno da posição $(x = 0, y = 0)$ quanto maior for o valor de $\gamma_q L$.

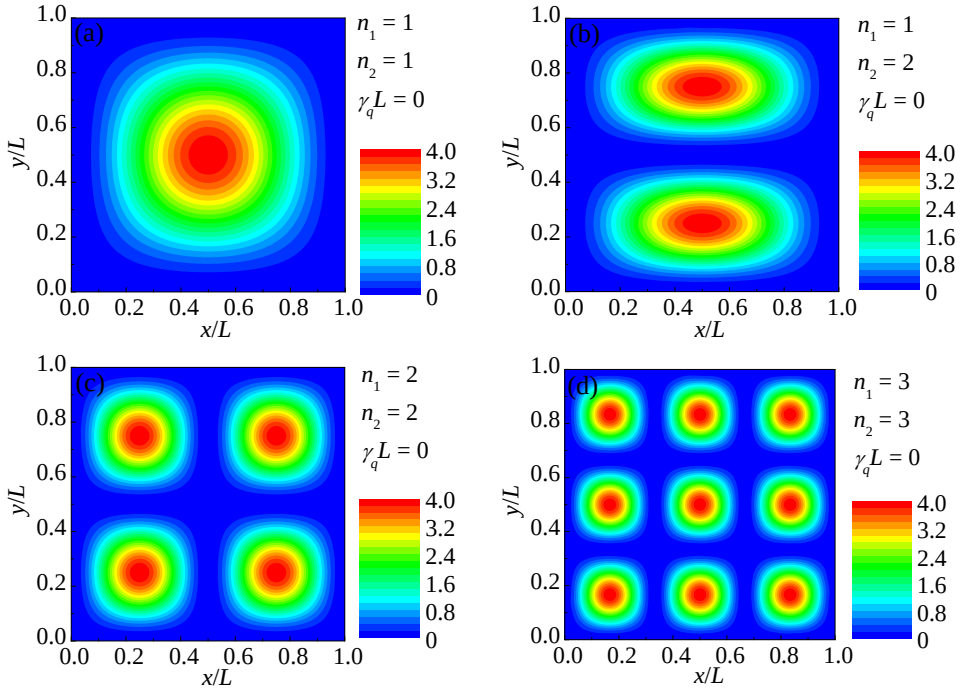


Figura 5.7: Densidade de probabilidade $\rho_{n_1,n_2}(x,y) = |\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)|^2$ em unidades de L^{-2} para uma partícula com massa constante ($\gamma_q L = 0$) confinada em uma caixa bidimensional nos estados (a) $(n_1, n_2) = (1,1)$, (b) $(2,1)$, (c) $(2,2)$ e (d) $(3,3)$. A escala de cores varia de azul (baixa densidade de probabilidade) para vermelho (alta densidade de probabilidade).

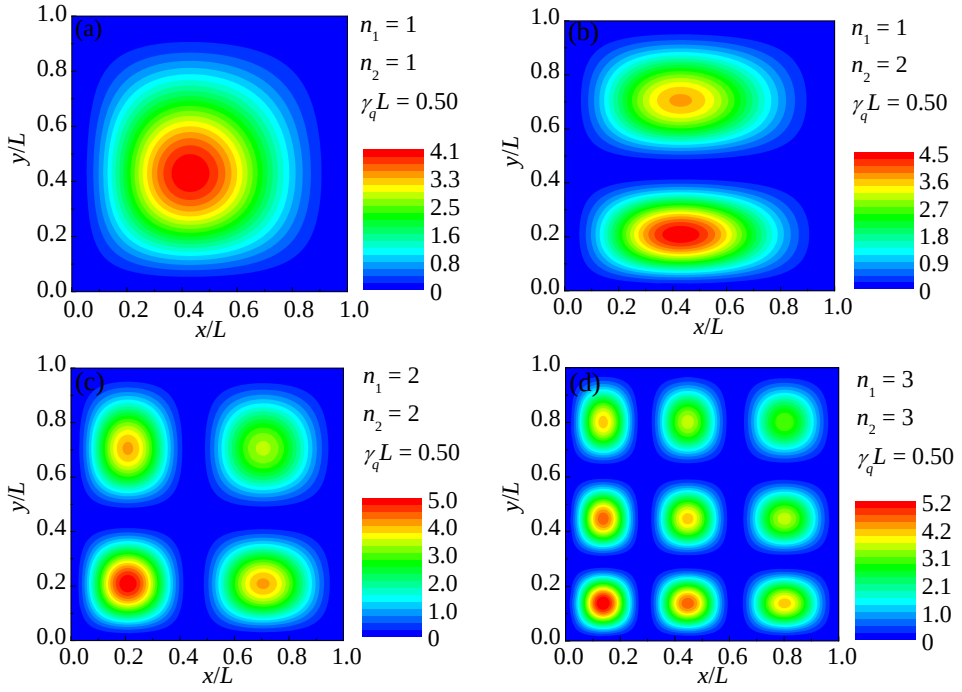


Figura 5.8: Densidade de probabilidade $\rho_{n_1,n_2}(x,y) = |\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)|^2$ em unidades de L^{-2} para uma partícula com massa dependente da posição com $\gamma_q L = 0.5$ confinada em uma caixa bidimensional nos estados (a) $(n_1, n_2) = (1,1)$, (b) $(2,1)$, (c) $(2,2)$ e (d) $(3,3)$. A escala de cores varia de azul (baixa densidade de probabilidade) para vermelho (alta densidade de probabilidade).

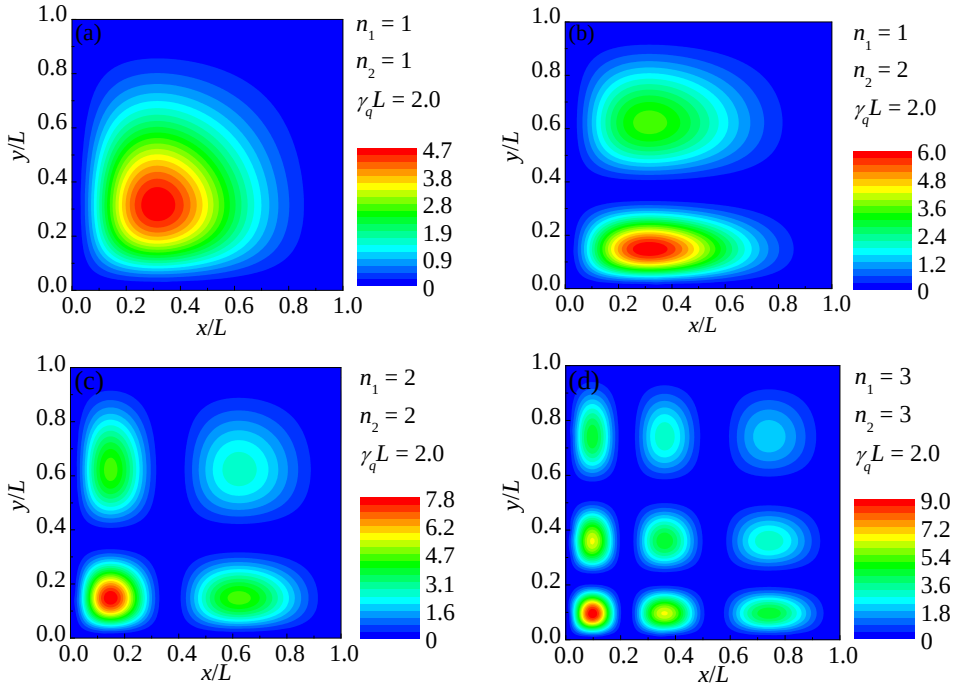


Figura 5.9: Densidade de probabilidade $\rho_{n_1,n_2}(x,y) = |\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)|^2$ em unidades de L^{-2} para uma partícula com massa dependente da posição com $\gamma_q L = 2.0$ confinada em uma caixa bidimensional nos estados (a) $(n_1, n_2) = (1,1)$, (b) $(2,1)$, (c) $(2,2)$ e (d) $(3,3)$. A escala de cores varia de azul (baixa densidade de probabilidade) para vermelho (alta densidade de probabilidade).

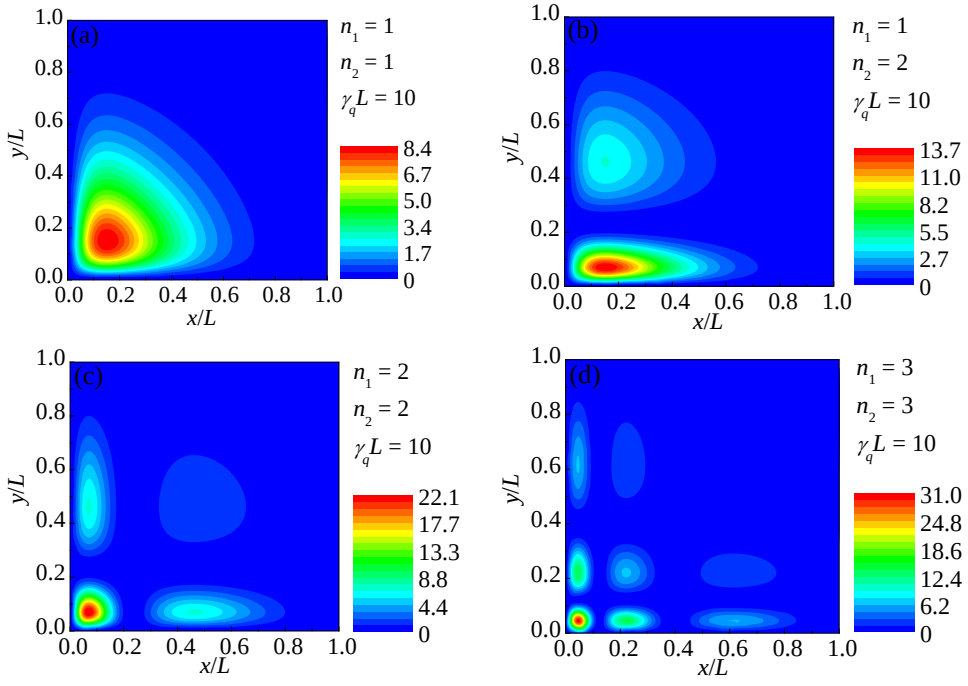


Figura 5.10: Densidade de probabilidade $\rho_{n_1,n_2}(x,y) = |\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)|^2$ em unidades de L^{-2} para uma partícula com massa dependente da posição com $\gamma_q L = 10$ confinada em uma caixa bidimensional nos estados (a) $(n_1, n_2) = (1,1)$, (b) $(2,1)$, (c) $(2,2)$ e (d) $(3,3)$. A escala de cores varia de azul (baixa densidade de probabilidade) para vermelho (alta densidade de probabilidade).

Conforme demonstraremos a seguir, os valores esperados de $\langle\hat{x}\rangle$, $\langle\hat{x}^2\rangle$, $\langle\hat{p}\rangle$ e $\langle\hat{p}^2\rangle$ para uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito são dados por:

$$\langle\hat{x}\rangle = \frac{\gamma_q L - \ln(1+\gamma_q L)}{\gamma_q \ln(1+\gamma_q L)} - \frac{L\ln(1+\gamma_q L)}{\ln^2(1+\gamma_q L)+(2\pi n)^2}, \tag{5.26a}$$

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{\gamma_q^2 L^2 - 2\gamma_q L + 2\ln(1+\gamma_q L)}{2\gamma_q^2 \ln(1+\gamma_q L)} + \frac{[1-(1+\gamma_q L)^2]\ln(1+\gamma_q L)}{2\gamma_q^2[\ln^2(1+\gamma_q L)+n^2\pi^2]} + \frac{2\gamma_q L \ln(1+\gamma_q L)}{\gamma_q^2[\ln^2(1+\gamma_q L)+4n^2\pi^2]}, \tag{5.26b}$$

$$\langle\hat{p}\rangle = 0, \tag{5.26c}$$

$$\langle\hat{p}^2\rangle = \frac{\hbar^2 k_{q,n}^2[(1+\gamma_q L)^2-1]}{2(1+\gamma_q L)^2\ln(1+\gamma_q L)}\left[1+\frac{\gamma_q^2}{4(k_{q,n}^2+\gamma_q^2)}\right]. \tag{5.26d}$$

Claramente, podemos ver que no limite $n \to \infty$, as Eq.'s (5.26) coincidem com as Eq.'s (5.8), obtidas para o problema analógo descrito no formalismo clássico. Ademais, pode-se facilmente mostrar que no limite $\gamma_q \to 0$, recuperamos os resultados do problema usual de uma partícula de massa constante: $\langle\hat{x}\rangle \to \frac{L}{2}$, $\langle\hat{x}^2\rangle \to \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2n^2\pi^2}$ e $\langle\hat{p}^2\rangle \to \hbar^2 k_n^2$, com $E_n = \hbar^2 k_n^2/2m_0$ ($k_n \equiv k_{1,n} = 2\pi n/L$). Em relação aos operadores deformados $\hat{x}_q$ e $\hat{p}_q$, é trivial mostrar que $\langle\hat{x}_q\rangle = \frac{L_q^2}{2}$, $\langle\hat{x}_q^2\rangle = \frac{L_q^2}{3} - \frac{L_q^2}{2n^2\pi^2}$, $\langle\hat{p}_q\rangle = 0$ e $\langle\hat{p}_q\rangle = \hbar^2 k_{q,n}^2$, como acontece para uma partícula confinada em um poço de potencial quadrado infinito unidimensional de comprimento L_q.

A Figura 5.11 mostra os gráficos de (a) $\langle\hat{x}\rangle/L$ e (b) $\langle\hat{x}^2\rangle/L^2$ em função de $\gamma_q L$ para os estados $n = 1$, 2 e 3 (o caso clássico $n \to \infty$ também é mostrado para comparação). Observa-se que $\langle\hat{x}\rangle/L$ e $\langle\hat{x}^2\rangle/L^2$ diminuem quando $\gamma_q L$ aumenta. Existe uma pequena variação entre os diferentes casos, e os comportamentos das curvas são aproximadamente idênticos. Em ambos os gráficos, observamos que a linha vertical $\gamma_q L = 0$ corresponde ao caso usual, e para $\gamma_q L = -1$, os respectivos valores de $\langle\hat{x}\rangle/L$ e $\langle\hat{x}^2\rangle/L^2$ aproximam-se de 1, o que está em acordo com o fato da massa da partícula divergir em $x = L$ neste caso, e o que corresponde à localização da partícula para esta posição.

De modo similar, para os mesmos números quânticos $n = 1$, 2 e 3, a Figura 5.12 mostra em função de $\gamma_q L$ as razões (a) $\langle\hat{p}^2\rangle/2m_0E_n$ e (b) $\langle\hat{p}^2\rangle/(\hbar^2\pi^2L^{-2})$. No primeiro, podemos observar que $\lim_{\gamma_q L\to 0}(\langle\hat{p}^2\rangle/2m_0E_n) = 1$, independente do valor de n, conforme esperado para o caso usual. Para todos os estados quânticos, observa-se que $\langle\hat{p}^2\rangle/2m_0E_n$ diminui quando $\gamma_q L$ aumenta. No segundo, temos que $\langle\hat{p}^2\rangle$ é mínimo em $\gamma_q L = 0$, cresce (decresce) para $\gamma_q L > 0$ ($-1 < \gamma_q L < 0$). Em ambos os gráficos e para todos os estados quânticos, temos uma divergência quando $\gamma_q L \to -1$.

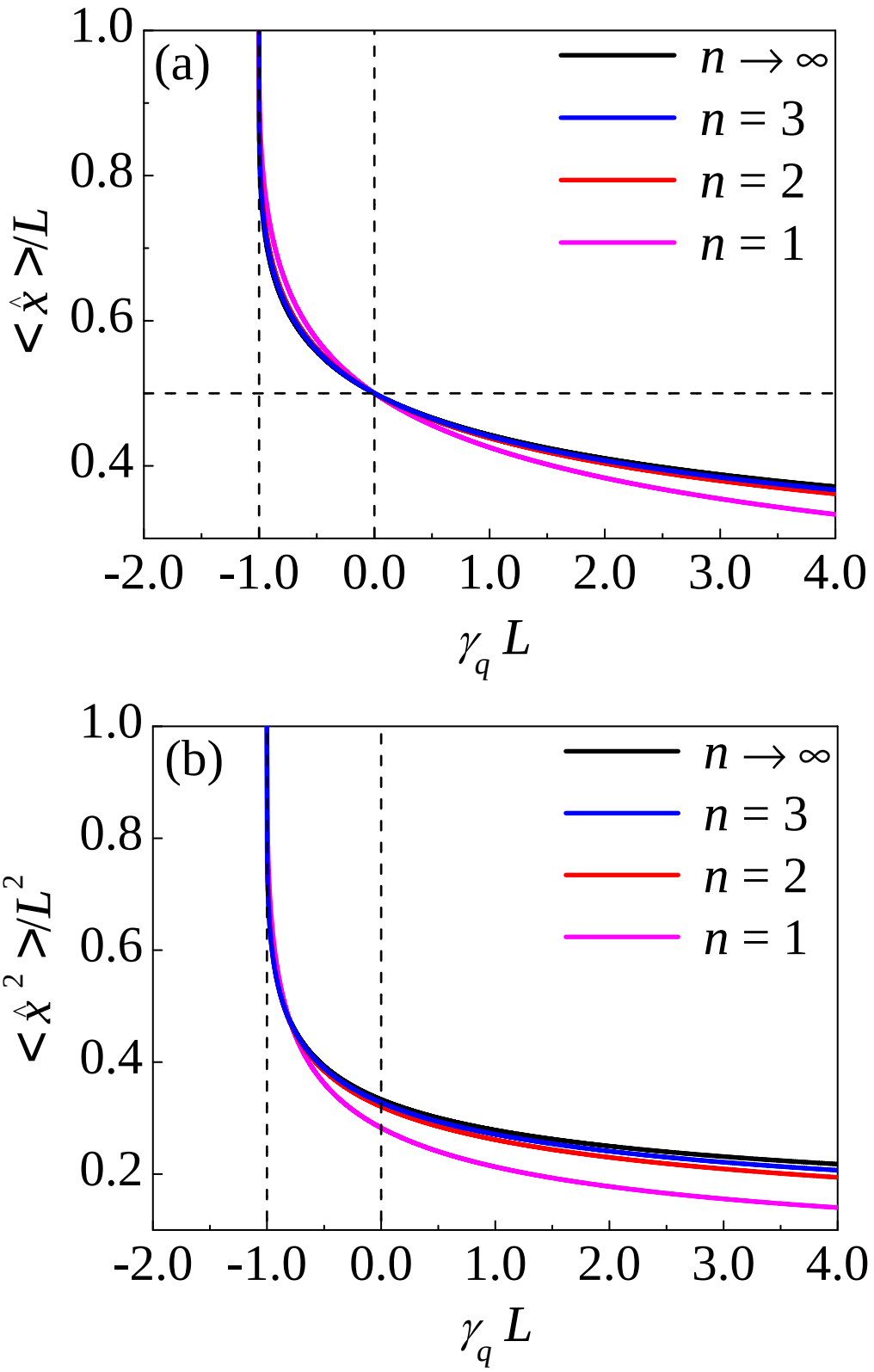


Figura 5.11: Valores esperados (a) $\langle\hat{x}\rangle$ e (b) $\langle\hat{x}^2\rangle$ para uma partícula com massa dependente da posição em um poço de potencial quadrado infinito em função de $\gamma_q L$ nos estados $n = 1$, 2 e 3. O caso clássico ($n \to \infty$) é também mostrado. Notemos que para $\gamma_q L \to -1$, temos $\langle\hat{x}\rangle/L \to 1$ e $\langle\hat{x}^2\rangle/L^2 \to 1$.

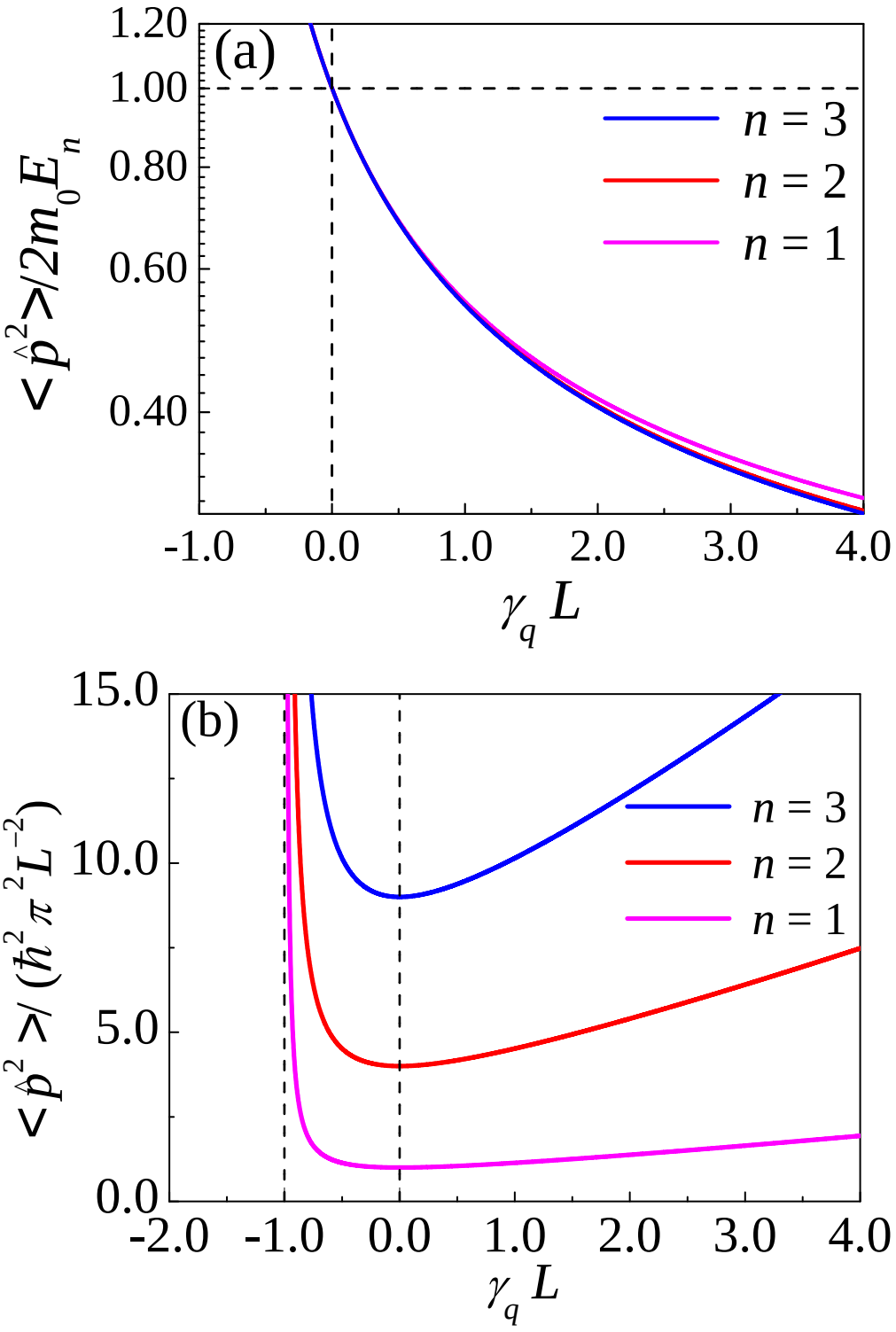


Figura 5.12: Valor esperado $\langle\hat{p}^2\rangle$ para uma partícula com massa dependnente da posição em um poço de potencial quadrado infinito para os estados $n = 1$, 2 e 3. Em (a), é mostrado a razão $\langle\hat{p}^2\rangle/2m_0E_n$ em função de γ_qL. Para $\gamma_qL \to 0$, observa-se $\langle\hat{p}^2\rangle/2m_0E_n \to 1$ independente do valor do número quântico n, em acordo com caso usual. Em (b), temos a razão $\langle\hat{p}^2\rangle/(\hbar^2\pi^2L^{-2})$ em função de γ_qL. Nos diferentes estados, $\langle\hat{p}^2\rangle/(\hbar^2\pi^2L^{-2})$ é mínimo em $\gamma_qL = 0$, e existe uma divergência em $\gamma_qL = -1$ para cada curva.

Em teoria quântica, a incerteza de uma medida para qualquer observável $\hat{\Omega}$ é dada por $\Delta\Omega = \sqrt{\langle\hat{\Omega}^2\rangle - \langle\hat{\Omega}\rangle^2} \geq 0$. Para dois operadores hermitianos $\hat{\Omega}$ e $\hat{\Lambda}$ quaisquer, é possível mostrar que $\Delta\Omega\Delta\Lambda \geq |\frac{1}{2i}\langle[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]\rangle|$, chamado de princípio da incerteza generalizado [6]. Em particular, se os operadores são canonicamente conjugados, ou seja, $[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}] = i\hbar$, temos que $\Delta\Omega\Delta\Lambda \geq \hbar/2$. Esta última relação torna-se válida, seja para o par $\hat{x}$ e $\hat{p}$, ou para o par $\hat{x}_q$ e $\hat{p}_q$, que constituem operadores de coordenadas e momentos canonicamente conjugados entre si.

Aqui estamos interessados em analisar a relação do princípio da incerteza usual para uma partícula confinada em um poço de potencial quadrado infinito com massa dependente da posição, de modo que se espera

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{5.27}$$

Utilizando as expressões (5.26) podemos obter a relação de incerteza para o problema de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito com massa dependente da posição. A Figura 5.13 mostra a relação de incerteza $\Delta x\Delta p$ nos três estados de mais baixa energia ($n = 1$, 2 e 3). Conforme pode ser visto, a relação é evidentemente obedecida para este problema para diferentes valores de $\gamma_q L$. Nota-se que o produto $\Delta x\Delta p$ é mínimo para $\gamma_q L = 0$. Temos também que $\Delta x\Delta p$ diverge em $\gamma_q L = -1$, o que está associado ao fato de $\Delta x \to 0$ (localização da partícula) e $\Delta p \to \infty$ em virtude da massa (e energia cinética) da partícula divergir na posição $x = L$.

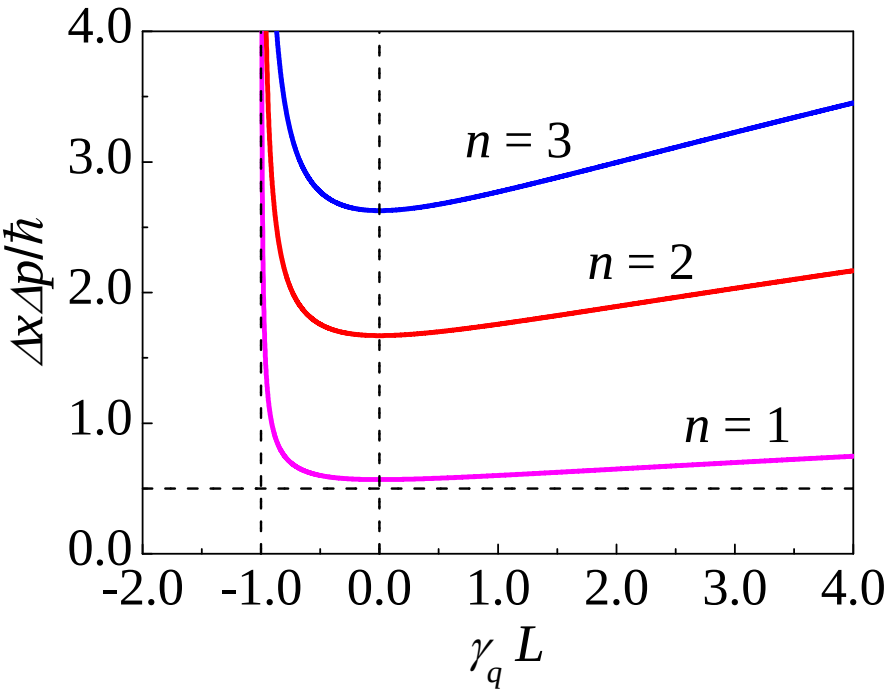


Figura 5.13: Relação de incerteza $\Delta x\Delta p$ de uma partícula confinada em um poço de potencial quadrado infinito em função de $\gamma_q L$ para os estados $n = 1$, 2 e 3.

Algumas outras relações de incerteza podem ser exploradas. Em [11, 32] foram exploradas as relações do tipo $\Delta x \Delta \hat{p}'_q$ para os problemas de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito e um potencial quadrático. Embora os pares de operadores ($\hat{x}$ e $\hat{p}_q$) ou ($\hat{x}_q$ e $\hat{p}$) não sejam canonicamente conjugados, a seguir apresentamos as relações $\Delta x \Delta p_q$ e $\Delta x_q \Delta p$, por completeza. Para os operadores $\hat{x}$ e $\hat{p}_q$ obtém-se

$$\Delta x \Delta p_q \geq \frac{\hbar}{2}|1 + \gamma_q \langle \hat{x} \rangle|, \tag{5.28}$$

que tem a mesma forma daquela obtida em [11, 32] para $\Delta x \Delta \hat{p}'_q$. A equação acima expressa o fato que a relação de incerteza generalizada em uma medida depende de γ_q, assim como do valor esperado $\langle \hat{x} \rangle$. Uma relação de comutação similar a esta é usada pra descrever a mecânica quântica em espaços não comutativos [218]. Ademais, pela propriedade (4.11), temos que

$$\begin{aligned}
\Delta p \Delta x_q &\geq \left| \frac{1}{2i} \langle [\hat{p}, \hat{x}_q] \rangle \right| \\
&\geq \left| \frac{1}{2i} (-i\hbar) \left\langle \frac{d\hat{x}_q}{d\hat{x}} \right\rangle \right| \\
&\geq \frac{\hbar}{2} \left| \langle (\hat{1} + \gamma_q \hat{x})^{-1} \rangle \right| \\
&\geq \frac{\hbar}{2} \left| \langle \hat{1} - \gamma_q \hat{x} + \gamma_q^2 \hat{x}^2 - ... \rangle \right| \\
&\geq \frac{\hbar}{2} \left| 1 - \gamma_q \langle \hat{x} \rangle + \gamma_q^2 \langle \hat{x} \rangle^2 - ... \right|
\end{aligned} \tag{5.29}$$

e assim

$$\Delta p \Delta x_q \geq \frac{\hbar}{2} \frac{1}{|1 + \gamma_q \langle \hat{x} \rangle|}. \tag{5.30}$$

Demonstração das equações (5.26):

• Eq. (5.26a):

O valor esperado do operador posição $\hat{x}$ é dado por:

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}\rangle &= \langle n|\hat{x}|n\rangle = \int_0^L \psi_n^*(x)x\psi_n(x)dx \\ &= \int_0^L \frac{2\gamma_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\frac{x}{1+\gamma_q x}\,\mathrm{sen}^2\left[\frac{n\pi\ln(1+\gamma_q x)}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]dx, \end{aligned} \tag{5.31}$$

onde utilizamos as funções de onda (5.22) sendo $\psi_n(x) = \langle x|\psi\rangle$. Pela mudança de variável $x \to x_q = \gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)$, com $dx_q = dx/(1+\gamma_q x)$ e $x = (e^{\gamma_q x_q}-1)/\gamma_q$, a integral acima é reescrita como

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}\rangle &= \int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} \frac{2}{\ln(1+\gamma_q L)}(e^{\gamma_q x_q}-1)\,\mathrm{sen}^2\left[\frac{n\pi\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]dx_q \\ &= \frac{1}{\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)}(e^{\gamma_q x_q}-1)\left\{1-\cos\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]\right\}dx_q \\ &= \frac{1}{\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)}(e^{\gamma_q x_q}-1)dx_q \\ &\quad + \frac{1}{\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)}\cos\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]dx_q \\ &\quad - \frac{1}{\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{\gamma_q x_q}\cos\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]dx_q. \end{aligned} \tag{5.32}$$

Denominaremos cada uma das três integrais acima, rescpetivamente, por I_A, I_B e I_C. Calculando o primeiro termo, temos

$$I_A = \frac{1}{\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)}(e^{\gamma_q x_q}-1)dx_q = \frac{\gamma_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^L \frac{x}{1+\gamma_q x}dx,$$

e conforme obtido na Eq. (5.9), temos que

$$I_A = \frac{\gamma_q L - \ln(1+\gamma_q L)}{\gamma_q\ln(1+\gamma_q L)}. \tag{5.33}$$

O segundo termo é

$$\begin{aligned} I_B &= \frac{1}{\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)}\cos\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]dx_q \\ &= \frac{1}{2\pi n\gamma_q}\left\{\mathrm{sen}\,\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]\right\}\Bigg|_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} = 0. \end{aligned} \tag{5.34}$$

E o terceiro termo de (5.32) é

$$\begin{aligned} I_C &= -\frac{1}{\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{\gamma_q x_q}\cos\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]dx_q \\ &= -\frac{1}{\ln(1+\gamma_q L)}\left\{\frac{\gamma_q}{\gamma_q^2+[2\pi n\gamma_q/\ln(1+\gamma_q L)]^2}e^{\gamma_q x}\cos\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]\right\}\Bigg|_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} \\ &\quad -\frac{1}{\ln(1+\gamma_q L)}\left\{\frac{[2\pi n\gamma_q/\ln(1+\gamma_q L)]}{\gamma_q^2+[2\pi n\gamma_q/\ln(1+\gamma_q L)]^2}e^{\gamma_q x}\text{sen}\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]\right\}\Bigg|_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} \\ &= -\left\{\frac{\ln(1+\gamma_q L)}{\gamma_q[\ln^2(1+\gamma_q L)+(2\pi n)^2]}[(1+\gamma_q L)-1]\right\}+0 \\ &= -\frac{L\ln(1+\gamma_q L)}{\ln^2(1+\gamma_q L)+(2\pi n)^2}. \end{aligned} \tag{5.35}$$

Segue que:

$$\langle\hat{x}\rangle = I_A + I_B + I_C = \frac{\gamma_q L-\ln(1+\gamma_q L)}{\gamma_q\ln(1+\gamma_q L)} - \frac{L\ln(1+\gamma_q L)}{\ln^2(1+\gamma_q L)+(2\pi n)^2}.$$

• Eq. (5.26b):

O valor esperado do quadrado do operador posição ($\hat{x}^2$) é

$$\begin{aligned} \langle\hat{x}^2\rangle &= \langle n|\hat{x}^2|n\rangle = \int_0^L \psi_n^*(x)x^2\psi_n(x)dx \\ &= \int_0^L \frac{2\gamma_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\frac{x^2}{1+\gamma_q x}\,\text{sen}^2\left[\frac{n\pi\ln(1+\gamma_q x)}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]dx. \end{aligned} \tag{5.36}$$

Utilizando mais uma vez a mudança de variável $x \to x_q = \gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)$, segue que:

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{1}{\gamma_q\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)}(e^{\gamma_q x_q}-1)^2\left\{1-\cos\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]\right\}dx_q. \tag{5.37}$$

A integral acima pode ser separada em quatro termos:

$$\begin{aligned} \langle\hat{x}^2\rangle &= \frac{1}{\gamma_q\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)}(e^{\gamma_q x_q}-1)^2dx_q \\ &\quad -\frac{1}{\gamma_q\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)}\cos\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]dx_q \\ &\quad +\frac{2}{\gamma_q\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)}e^{\gamma_q x_q}\cos\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]dx_q \\ &\quad -\frac{1}{\gamma_q\ln(1+\gamma_q L)}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)}e^{2\gamma_q x_q}\cos\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right]dx_q. \end{aligned} \tag{5.38}$$

Sejam respectivamente I'_A, I'_B, I'_C e I'_D cada um dos quatro termos acima, calcula-se cada uma deles a seguir. O termo I'_A pode ser escrito como

$$I'_A = \frac{1}{\gamma_q \ln(1+\gamma_q L)} \int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} (e^{\gamma_q x_q} - 1)^2 dx_q = \frac{\gamma_q}{\ln(1+\gamma_q L)} \int_0^L \frac{x^2}{1+\gamma_q x} dx, \quad (5.39)$$

e conforme obtido em (5.10)

$$I'_A = \frac{\gamma_q^2 L^2 - 2\gamma_q L + 2\ln(1+\gamma_q L)}{2\gamma_q^2 \ln(1+\gamma_q L)}. \quad (5.40)$$

Para o segundo termo, temos que $I'_B = -I_B = 0$, e para o terceiro, vem que

$$I'_C = -\frac{2I_3}{\gamma_q} = \frac{2\gamma_q L \ln(1+\gamma_q L)}{\gamma_q^2 \ln^2(1+\gamma_q L) + (2\pi n)^2}. \quad (5.41)$$

Do quarto termo, I'_D, segue que

$$\begin{aligned}
I'_D &= -\frac{1}{\gamma_q \ln(1+\gamma_q L)} \int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{2\gamma_q x_q} \cos\left[\frac{2\pi n \gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right] dx_q \\
&= -\frac{1}{\gamma_q \ln(1+\gamma_q L)} \left\{ \frac{2\gamma_q}{(2\gamma_q)^2 + [2\pi n\gamma_q/\ln(1+\gamma_q L)]^2} e^{2\gamma_q x} \cos\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right] \right\} \Bigg|_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} \\
&\quad -\frac{1}{\gamma_q \ln(1+\gamma_q L)} \left\{ \frac{[2\pi n\gamma_q/\ln(1+\gamma_q L)]}{(2\gamma_q)^2 + [2\pi n\gamma_q/\ln(1+\gamma_q L)]^2} e^{2\gamma_q x} \mathrm{sen}\left[\frac{2\pi n\gamma_q x_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\right] \right\} \Bigg|_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} \\
&= -\left\{ \frac{\ln(1+\gamma_q L)}{2\gamma_q^2[\ln^2(1+\gamma_q L) + (\pi n)^2]} [(1+\gamma_q L)^2 - 1] \right\} + 0 \\
&= \frac{[1-(1+\gamma_q L)^2]\ln(1+\gamma_q L)}{2\gamma_q^2[\ln^2(1+\gamma_q L) + n^2\pi^2]}. \quad (5.42)
\end{aligned}$$

Portanto, obtemos

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x}^2 \rangle &= I'_1 + I'_2 + I'_3 + I'_4 \\
&= \frac{\gamma_q^2 L^2 - 2\gamma_q L + 2\ln(1+\gamma_q L)}{2\gamma_q^2 \ln(1+\gamma_q L)} + \frac{[1-(1+\gamma_q L)^2]\ln(1+\gamma_q L)}{2\gamma_q^2[\ln^2(1+\gamma_q L) + n^2\pi^2]} \\
&\quad + \frac{2\gamma_q L \ln(1+\gamma_q L)}{\gamma_q^2[\ln^2(1+\gamma_q L) + 4n^2\pi^2]}.
\end{aligned}$$

• Eq. (5.26c):

O valor esperado do operador momento $\hat{p}$ é

$$\langle\hat{p}\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle = \int_0^L \psi_n^*(x)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\psi_n(x)dx. \tag{5.43}$$

Para as funções de estado

$$\psi_n(x) = \frac{A_q}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\ \text{sen}\left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right],$$

temos que

$$\begin{aligned} -i\hbar\frac{d\psi_n(x)}{dx} &= \frac{i\hbar\gamma_q}{2}\frac{A_q}{(1+\gamma_q x)^{3/2}}\ \text{sen}\left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right] \\ &\quad -i\hbar k_{q,n}\frac{A_q}{(1+\gamma_q x)^{3/2}}\cos\left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right]. \end{aligned} \tag{5.44}$$

Substituindo a Eq. (5.44) em Eq. (5.43), temos

$$\begin{aligned} \langle\hat{p}\rangle &= \frac{i\hbar\gamma_q A_q^2}{2}\int_0^L \frac{1}{(1+\gamma_q x)^2}\ \text{sen}^2\left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right]dx \\ &\quad -i\hbar k_{q,n}A_q^2\int_0^L \frac{1}{(1+\gamma_q x)^2}\ \text{sen}\left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right]\cos\left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right]dx \\ &= \frac{i\hbar\gamma_q A_q^2}{4}\int_0^L \frac{1}{(1+\gamma_q x)^2}\left\{1-\cos\left[\frac{2k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right]\right\}dx \\ &\quad -\frac{i\hbar k_{q,n}A_q^2}{2}\int_0^L \frac{1}{(1+\gamma_q x)^2}\ \text{sen}\left[\frac{2k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right]dx. \end{aligned} \tag{5.45}$$

Pela mudança de variável $x \to x_q = \gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)$, temos:

$$\begin{aligned} \langle\hat{p}\rangle &= \frac{i\hbar\gamma_q A_q^2}{4}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{-\gamma_q x_q}[1-\cos(2k_{q,n}x_q)]dx_q \\ &\quad -\frac{i\hbar k_{q,n}A_q^2}{2}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{-\gamma_q x_q}\ \text{sen}(2k_{q,n}x_q)dx_q \\ &= \frac{i\hbar\gamma_q A_q^2}{4}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{-\gamma_q x_q}dx_q - \frac{i\hbar\gamma_q A_q^2}{4}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{-\gamma_q x_q}\cos(2k_{q,n}x_q)dx_q \\ &\quad -\frac{i\hbar k_{q,n}A_q^2}{2}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{-\gamma_q x_q}\ \text{sen}(2k_{q,n}x_q)dx_q. \end{aligned} \tag{5.46}$$

Nomeando, respectivamente, cada um dos três termos acima por I''_A, I''_B e I''_C, temos:

$$\begin{aligned} I''_A &= \frac{i\hbar\gamma_q A_q^2}{4}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{-\gamma_q x_q}dx_q = \frac{i\hbar\gamma_q A_q^2}{4}\left(-\frac{e^{-\gamma_q x_q}}{\gamma_q}\right)\Bigg|_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} \\ &= \frac{i\hbar A_q^2}{4}\frac{\gamma_q L}{1+\gamma_q L}, \end{aligned} \tag{5.47}$$

$$\begin{aligned} I''_B &= -\frac{i\hbar\gamma_q A_q^2}{4}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{-\gamma_q x_q}\cos(2k_{q,n}x_q)dx_q \\ &\quad -\frac{i\hbar\gamma_q A_q^2}{4}\left[-\frac{\gamma_q e^{-\gamma_q x}}{\gamma_q^2+4k_{q,n}^2}\cos(2k_{q,n}x_q)+\frac{2k_{q,n}e^{-\gamma_q x}}{\gamma_q^2+4k_{q,n}^2}\mathrm{sen}(2k_{q,n}x_q)\right]\Bigg|_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} \\ &= -\frac{i\hbar A_q^2}{4}\frac{\gamma_q L}{1+\gamma_q L}\frac{\gamma_q^2}{\gamma_q^2+4k_{q,n}^2}, \end{aligned} \tag{5.48}$$

e

$$\begin{aligned} I''_C &= -\frac{i\hbar k_{q,n}A_q^2}{2}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{-\gamma_q x_q}\mathrm{sen}(2k_{q,n}x_q)dx_q \\ &\quad -\frac{i\hbar k_{q,n}A_q^2}{2}\left[-\frac{2k_{q,n}}{\gamma_q^2+4k_{q,n}^2}e^{-\gamma_q x}\cos(2k_{q,n}x_q)-\frac{\gamma_q}{\gamma_q^2+4k_{q,n}^2}e^{-\gamma_q x}\mathrm{sen}(2k_{q,n}x_q)\right]\Bigg|_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} \\ &= -\frac{i\hbar A_q^2}{4}\frac{\gamma_q L}{1+\gamma_q L}\frac{4k_{q,n}^2}{\gamma_q^2+4k_{q,n}^2} \end{aligned} \tag{5.49}$$

onde utilizamos $k_{q,n} = n\pi\gamma_q/\ln(1+\gamma_q L)$. Portanto,

$$\langle\hat{p}\rangle = I''_A + I''_B + I''_C = 0. \tag{5.50}$$

• Eq. (5.26d):

O valor esperado do quadrado do operador momento ($\hat{p}^2$) é

$$\langle\hat{p}^2\rangle = \langle n|\hat{p}^2|n\rangle = \int_0^L \psi_n^*(x)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2\psi_n(x)dx. \tag{5.51}$$

Temos que

$$\begin{aligned} -\hbar^2\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} &= \hbar^2\left(k_{q,n}^2-\frac{3\gamma_q^2}{4}\right)\frac{A_q}{(1+\gamma_q x)^{5/2}}\ \mathrm{sen}\left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right] \\ &\quad +2\hbar^2 k_{q,n}\gamma_q\frac{A_q}{(1+\gamma_q x)^{5/2}}\cos\left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right]. \end{aligned} \tag{5.52}$$

Substituindo (5.52) em (5.51), temos

$$\begin{aligned}
\langle\hat{p}^2\rangle &= \left(\hbar^2k_{q,n}^2-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{4}\right)A_q^2\int_0^L\frac{1}{(1+\gamma_qx)^3}\,\mathrm{sen}^2\left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_qx)\right]dx \\
&\quad +2\hbar^2k_{q,n}\gamma_qA_q^2\int_0^L\frac{1}{(1+\gamma_qx)^3}\,\mathrm{sen}\left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_qx)\right]\cos\left[\frac{k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_qx)\right]dx \\
&= \left(\hbar^2k_{q,n}^2-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{4}\right)\frac{A_q^2}{2}\int_0^L\frac{1}{(1+\gamma_qx)^3}\left\{1-\cos\left[\frac{2k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_qx)\right]\right\}dx \\
&\quad +\hbar^2k_{q,n}\gamma_qA_q^2\int_0^L\frac{1}{(1+\gamma_qx)^3}\,\mathrm{sen}\left[\frac{2k_{q,n}}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_qx)\right]dx, \qquad (5.53)
\end{aligned}$$

e pela mudança de variável $x\to x_q=\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_qx)$, segue que

$$\begin{aligned}
\langle\hat{p}^2\rangle &= \left(\hbar^2k_{q,n}^2-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{4}\right)\frac{A_q^2}{2}\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_qL)}e^{-2\gamma_qx_q}[1-\cos(2k_{q,n}x_q)]dx_q \\
&\quad +\hbar^2k_{q,n}\gamma_qA_q^2\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_qL)}e^{-2\gamma_qx_q}\mathrm{sen}(2k_{q,n}x_q)dx_q \\
&= \left(\frac{\hbar^2k_{q,n}^2}{2}-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{8}\right)A_q^2\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_qL)}e^{-2\gamma_qx_q}dx_q \\
&\quad -\left(\frac{\hbar^2k_{q,n}^2}{2}-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{8}\right)A_q^2\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_qL)}e^{-2\gamma_qx_q}\cos(2k_{q,n}x_q)dx_q \\
&\quad +\hbar^2k_{q,n}\gamma_qA_q^2\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_qL)}e^{-2\gamma_qx_q}\mathrm{sen}(2k_{q,n}x_q)dx_q. \qquad (5.54)
\end{aligned}$$

Denominando cada um dos três termos acima rescpetivamente por I_A''', I_B''' e I_C''', temos:

$$\begin{aligned}
I_A''' &= \left(\frac{\hbar^2k_{q,n}^2}{2}-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{8}\right)A_q^2\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_qL)}e^{-2\gamma_qx_q}dx_q \\
&= \left(\frac{\hbar^2k_{q,n}^2}{2}-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{8}\right)\frac{2\gamma_q}{\ln(1+\gamma_qL)}\left(-\frac{e^{-2\gamma_qx_q}}{2\gamma_q}\right)\Bigg|_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_qL)} \\
&= \left(\frac{\hbar^2k_{q,n}^2}{2}-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{8}\right)\frac{(1+\gamma_qL)^2-1}{(1+\gamma_qL)^2\ln(1+\gamma_qL)}, \qquad (5.55)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_B''' &= -\left(\frac{\hbar^2k_{q,n}^2}{2}-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{8}\right)A_q^2\int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_qL)}e^{-2\gamma_qx_q}\cos(2k_{q,n}x_q)dx_q \\
&= -\left(\frac{\hbar^2k_{q,n}^2}{2}-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{8}\right)\frac{2\gamma_q}{\ln(1+\gamma_qL)} \\
&\quad \times\left[-\frac{2\gamma_qe^{-2\gamma_qx}}{4\gamma_q^2+4k_{q,n}^2}\cos(2k_{q,n}x_q)+\frac{2k_{q,n}e^{-2\gamma_qx}}{4\gamma_q^2+4k_{q,n}^2}\mathrm{sen}(2k_{q,n}x_q)\right]\Bigg|_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_qL)} \\
&= -\left(\frac{\hbar^2k_{q,n}^2}{2}-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{8}\right)\left(\frac{\gamma_q^2}{\gamma_q^2+k_{q,n}^2}\right)\frac{(1+\gamma_qL)^2-1}{(1+\gamma_qL)^2\ln(1+\gamma_qL)}, \qquad (5.56)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
I_C''' &= \hbar^2 k_{q,n}\gamma_q A_q^2 \int_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} e^{-2\gamma_q x_q}\mathrm{sen}(2k_{q,n}x_q)dx_q \\
&= \hbar^2 k_{q,n}\gamma_q \frac{2\gamma_q}{\ln(1+\gamma_q L)}\left[-\frac{2k_{q,n}e^{-2\gamma_q x}}{4\gamma_q^2+4k_{q,n}^2}\cos(2k_{q,n}x_q) - \frac{2\gamma_q e^{-2\gamma_q x}}{4\gamma_q^2+4k_{q,n}^2}\mathrm{sen}(2k_{q,n}x_q)\right]\Bigg|_0^{\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q L)} \\
&= \hbar^2\gamma_q^2\left(\frac{k_{q,n}^2}{\gamma_q^2+k_{q,n}^2}\right)\frac{(1+\gamma_q L)^2-1}{(1+\gamma_q L)^2\ln(1+\gamma_q L)}. \qquad (5.57)
\end{aligned}
$$

Segue que

$$
\begin{aligned}
\langle\hat{p}^2\rangle &= I_1''' + I_2''' + I_3''' \\
&= \frac{(1+\gamma_q L)^2-1}{(1+\gamma_q L)^2\ln(1+\gamma_q L)}\left[\left(\frac{\hbar^2 k_{q,n}^2}{2}-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{8}\right)-\left(\frac{\hbar^2 k_{q,n}^2}{2}-\frac{3\hbar^2\gamma_q^2}{8}\right)\left(\frac{\gamma_q^2}{\gamma_q^2+k_{q,n}^2}\right)\right. \\
&\quad \left.+\hbar^2\gamma_q^2\left(\frac{k_{q,n}^2}{\gamma_q^2+k_{q,n}^2}\right)\right] \\
&= \frac{(1+\gamma_q L)^2-1}{(1+\gamma_q L)^2\ln(1+\gamma_q L)}\left(\frac{k_{q,n}^2}{2}-\frac{3\gamma_q^2}{8}+\gamma_q^2\right)\left(\frac{\hbar^2 k_{q,n}^2}{\gamma_q^2+k_{q,n}^2}\right) \\
&= \frac{\hbar^2 k_{q,n}^2[(1+\gamma_q L)^2-1]}{2(1+\gamma_q L)^2\ln(1+\gamma_q L)}\left[\frac{4k_{q,n}^2+5\gamma_q^2}{4(\gamma_q^2+k_{q,n}^2)}\right] \\
&= \frac{\hbar^2 k_{q,n}^2[(1+\gamma_q L)^2-1]}{2(1+\gamma_q L)^2\ln(1+\gamma_q L)}\left[1+\frac{\gamma_q^2}{4(\gamma_q^2+k_{q,n}^2)}\right], \qquad (5.58)
\end{aligned}
$$

conforme queríamos demonstrar.

5.2 Ondas eletromagnéticas em meios não homogêneos

Em meados do século XIX, o físico-matemático escocês J. C. Maxwell [219] conseguiu sintetizar as leis da eletricidade e do magnetismo em quatro equações, conhecidas como *equações de Maxwell*. Em meios materiais, na ausência de cargas livres, em que $\vec{D} = \epsilon\vec{E}$, sendo ϵ a permissividade do elétrica do meio; e $\vec{H} = \mu^{-1}\vec{B}$, sendo μ a permeabilidade magnética do meio, tem-se que

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{D} = 0, \tag{5.59a}$$

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{B} = 0, \tag{5.59b}$$

$$\vec{\nabla}\times\vec{E} = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}, \tag{5.59c}$$

$$\vec{\nabla}\times\vec{H} = \frac{\partial\vec{D}}{\partial t}. \tag{5.59d}$$

Talvez a primeira e mais importante consequência destas equações foi que, aplicada a meios homogêneos, nota-se que o campo elétrico e o campo magnético satisfazem a uma equação análoga à de uma onda em meios elásticos. A propagação dos campos elétrico e magnético são chamadas de ondas eletromagnéticas (OEM). De fato, aplicando o operador rotacional em ambos lados da Eq. (5.59c), obtemos

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla}\cdot\vec{E}) - \vec{\nabla}^2\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t}(\vec{\nabla}\times\vec{B}), \tag{5.60}$$

e na qual leva à

$$\vec{\nabla}[(\vec{\nabla}\epsilon^{-1})\cdot\vec{D} + \epsilon^{-1}(\vec{\nabla}\cdot\vec{D})] - \vec{\nabla}^2\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t}[(\vec{\nabla}\mu)\times\vec{H} + \mu(\vec{\nabla}\times\vec{H})], \tag{5.61}$$

onde utilizamos $\vec{\nabla}\times(f\vec{A}) = f(\vec{\nabla}\times\vec{A}) + (\vec{\nabla}f)\times\vec{A}$.

Considerando ϵ e μ constantes, e que os campos elétrico e magnético são funções do tipo $\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}_0(\vec{r})e^{-i\omega t}$ e $\vec{B}(\vec{r},t) = \vec{B}_0(\vec{r})e^{-i\omega t}$, temos que a parte espacial destes campos obedecem à *equação de Helmholtz*:

$$(\vec{\nabla}^2 + \mu\epsilon\omega^2)\vec{E}_0(\vec{r}) = 0, \qquad \text{e} \qquad (\vec{\nabla}^2 + \mu\epsilon\omega^2)\vec{B}_0(\vec{r}) = 0. \tag{5.62}$$

Considerando que a onda eletromagnética propaga-se na direção x, as soluções das equações acima são as ondas planas do tipo e^{ikx}, e portanto, $\vec{E}(x,t) = \vec{E}_0e^{i(kx-\omega t)}$ e $\vec{B}(x,t) = \vec{B}_0e^{i(kx-\omega t)}$, onde $k = \sqrt{\mu\epsilon}\omega$ é o vetor de onda, e consequentemnte, a velocidade de fase é

dada por $v = c/n$, onde n é o índice de refração definido por

$$n = \sqrt{\frac{\mu\epsilon}{\mu_0\epsilon_0}}, \tag{5.63}$$

sendo $c = 1/\sqrt{\mu_0\epsilon_0}$ a velocidade de propagação das ondas eletromagnéticas no vácuo.

Em termos do índice de refração, as equações de Helmolthz (5.62) podem ser reescritas na forma

$$\left[\vec{\nabla}^2 + \left(\frac{n\omega}{c}\right)^2\right]\psi(\vec{r}) = 0, \tag{5.64}$$

onde $\psi(\vec{r})$ representa a parte espacial do campo elétrico ou do campo magnético.

Por outro lado, a parte espacial da equação de Schrödinger de uma partícula com massa constante m_0 submetida a um potencial $V(\vec{r}) = V_0$ (Eq. (1.4)) pode ser escrita como

$$\left[\vec{\nabla}^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - V_0)\right]\varphi(\vec{r}) = 0 \tag{5.65}$$

A analogia entre as estruturas das Eq.'s (5.64) e (5.65) nos permite associar o problema da mecânica quântica a propagação de ondas eletromagnéticas em meios homogêneos. Comparando as Eq.'s (5.64) e (5.65), pode definir o índice de refração quântico [4]

$$n = \frac{c}{\hbar\omega}\sqrt{2m_0(E - V_0)}. \tag{5.66}$$

Em uma região onde $E > V_0$, n é real e a função de onda é da forma $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ com $|\vec{k}|^2 = 2m_0(E - V_0)/\hbar^2$. Por outro lado, em uma região onde $E < V_0$, n é um imaginário puro e a função de onda é do tipo evanescente. Esta intepretação é útil para compreender problemas de tunelamento quântico e barreiras de potenciais de sistemas com massa constante em mecânica quântica.

A discussão feita acima é bem conhecida (vide [4]), mas observamos que pode-se fazer uma conexão entre propagação de ondas eltromagnéticas em meio não homogêneos e mecânica quântica de sistemas com massa dependente da posição. Em óptica não linear, por exemplo, estudos de coeficientes de absorsação (lineares e não lineares) de pontos quânticos (*quantum dots*) [220] tem sido realizados considerando soluções analíticas ou numéricas da equação de Schrödinger de sistemas com massa efetiva [157, 158, 159].

Façamos inicialmente uma breve revisão da análise feita por Mazharimousavi *et al.* [221], que propôs uma equação de onda para a situação de um meio não homogêneo de forma que a permissividade e permeabilidade são funções da posição. Em particular, consideremos que estas grandezas são funções de x, *i. e.*, $\epsilon = \epsilon(x)$ e $\mu = \mu(x)$. Claramente, as equações de Maxwell em tal meio obedecem a mesma forma. Utilizando o mesmo metódo aplicado ao caso de um meio homogêneo, e notando que

$$\vec{\nabla}\cdot(\epsilon\vec{E}) = \epsilon\vec{\nabla}\cdot\vec{E} + \vec{E}\cdot\vec{\nabla}\epsilon = 0, \tag{5.67}$$

das Eq.'s (5.59) e (5.61), obtém-se

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}^2\vec{E}+\vec{\nabla}(\epsilon^{-1}\vec{\nabla}\epsilon\cdot\vec{E}) &= \vec{\nabla}\mu(x)\times\frac{\partial\vec{H}}{\partial t}+\mu(x)\frac{\partial}{\partial t}(\vec{\nabla}\times\vec{H})\\ &= \frac{1}{\mu(x)}\vec{\nabla}\mu(x)\times\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}+\mu(x)\epsilon(x)\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2}.\end{aligned} \tag{5.68}$$

A partir da identidade

$$\vec{\nabla}(\vec{A}\cdot\vec{B})=\vec{A}\times(\vec{\nabla}\times\vec{B})+\vec{B}\times(\vec{\nabla}\times\vec{A})+(\vec{A}\cdot\vec{\nabla})\vec{B}+(\vec{B}\cdot\vec{\nabla})\vec{A}, \tag{5.69}$$

obtemos

$$\vec{\nabla}^2\vec{E}-\mu(x)\epsilon(x)\frac{\partial\vec{E}}{\partial t^2}=-(\vec{E}\cdot\vec{\nabla})(\epsilon^{-1}\vec{\nabla}\epsilon)-(\epsilon^{-1}\vec{\nabla}\epsilon\cdot\vec{\nabla})\vec{E}-(\epsilon^{-1}\vec{\nabla}\epsilon+\mu^{-1}\vec{\nabla}\mu)\times(\vec{\nabla}\times\vec{E}). \tag{5.70}$$

À princípio, espera-se que campo elétrico seja uma função das coordenadas (x,y,z,t), mas devido à simetria do meio, é evidentemente que $\vec{E}=\vec{E}(x,t)$. Portanto, a equação acima pode ser escrita como

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\mu\epsilon\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)E_x = -\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\epsilon'}{\epsilon}E_x\right), \tag{5.71a}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\mu\epsilon\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)E_y = \frac{\mu'}{\mu}\frac{\partial E_y}{\partial x}, \tag{5.71b}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\mu\epsilon\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)E_z = \frac{\mu'}{\mu}\frac{\partial E_z}{\partial x}. \tag{5.71c}$$

As equações de onda para cada componente podem ser separadas em parte espacial e temporal de modo similar ao caso usual. Seja $\vec{E}(x,t)=\vec{E}_0(x,t)e^{-i\omega t}$, tem-se que as componenentes de $\vec{E}_0(x,t)$ satisfazem às equações

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+\mu\epsilon\omega^2\right)E_{0x} = -\frac{d}{dx}\left(\frac{\epsilon'}{\epsilon}E_{0x}\right), \tag{5.72a}$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+\mu\epsilon\omega^2\right)E_{0y} = \frac{\mu'}{\mu}\frac{dE_{0y}}{dx}, \tag{5.72b}$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+\mu\epsilon\omega^2\right)E_{0z} = \frac{\mu'}{\mu}\frac{dE_{0z}}{dx}. \tag{5.72c}$$

Para as ondas eletromagnéticas transversais ($E_{0x}=0$) e polarizadas ao longo do eixo z ($E_{0y}=0$ e $E_{0z}=\mathcal{E}(x)$), o campo elétrico é $\vec{E}=\mathcal{E}(x)e^{-i\omega t}\hat{z}$, com a parte espacial do campo elétrico satisfazendo a equação

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}+n^2(x)\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right]\mathcal{E}(x)=\lambda(x)\frac{d\mathcal{E}(x)}{dx}, \tag{5.73}$$

onde

$$n(x) = \sqrt{\frac{\mu(x)\epsilon(x)}{\mu_0\epsilon_0}} \tag{5.74}$$

é um índice de refração dependente da posição, e

$$\lambda(x) = \frac{\mu'(x)}{\mu(x)} \tag{5.75}$$

é a variação relativa da permeabilidade magnética. Para ϵ e μ constantes, recuperamos o caso usual descrito pelas Eq.'s (5.62).

De acordo com a equação de Schrödinger deformada (4.105), podemos escrever que

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m(x)}{\hbar^2}[E - V(x)]\right\}\varphi_q(x) = -\frac{\gamma_q}{1+\gamma_q x}\frac{d\varphi_q(x)}{dx}, \tag{5.76}$$

e que apresenta uma estrutura similar à das ondas eletromagnéticas em meios materiais não homogêneos (5.73).

Portanto propomos que pode-se fazer uma analogia entre a mecânica quântica de sistemas com massa dependente da posição e as ondas eletromagnéticas em meios não homogêneos. Comparando as Eq.'s (5.73) e (5.76), definimos um índice de refração quântico deformado

$$\begin{aligned} n_q(x) &\equiv \sqrt{\frac{\mu_q(x)\epsilon_q(x)}{\mu_0\epsilon_0}} \\ &= \frac{c}{\hbar\omega}\sqrt{2m(x)[E - V(x)]}, \end{aligned} \tag{5.77}$$

onde $\epsilon_q(x)$ e $\mu_q(x)$ são, respectivamente, as permissividade elétrica e permeabilidade magnética quântica deformadas, com

$$\frac{\mu_q(x)}{\mu_0} = \frac{1}{1+\gamma_q x} = \sqrt{\frac{m(x)}{m_0}}, \tag{5.78a}$$

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_q(x)}{\epsilon_0} = &= \left(\frac{c}{\hbar\omega}\right)^2 \frac{2m_0[E - V(x)]}{1+\gamma_q x} \\ &= \left(\frac{c}{\hbar\omega}\right)^2 2m_0[E - V(x)]\sqrt{\frac{m(x)}{m_0}}. \end{aligned} \tag{5.78b}$$

O índice de refração deformado $n_q(x)$ pode ser evidentemente utilizado em óptica não linear para modelar a propagação de ondas eletromagnéticas em meios não homogêneos, similarmente como é feito com feixes gaussianos em meios com índices de refração quadrático (vide página 125 da referência [150]). Para regiões onde $E > V$ ($E < V$), $n_q(x)$ é um real

(imaginário) puro, e os problemas de mecânica quântica de sistemas com massa dependente da posição que ocorrem efeitos de penetração da função de onda seguem propriedades similares aos de sistemas com massa constante. Analisamos a seguir alguns destes problemas típicos nas próximas Seções.

Pode-se também definir um vetor de onda deformado $k_q = \sqrt{\mu_q \epsilon_q}\omega$, que satisfaz

$$\hbar k_q(x) = \sqrt{2m(x)[E - V(x)]}, \tag{5.79}$$

e está conectado com aproximação semiclássica (4.213) para sistemas com massa dependente da posição.

A permeabiliade magnética quântica $\mu_q(x)$ está relacionado à massa $m(x)$ do análogo sistema quântico através da relação (5.78a). Por outro lado, a permeabilidade elética quântica do meio $\epsilon_q(x)$ tem sua dependência espacial relacionada às funções $m(x)$ e $V(x)$ através da relação (5.78b).

Esta analogia matemática pode ser útil para obter as soluções das equações de onda eletromagnéticas em óptica a partir das funções de onda em mecânica quântica, e vice-versa. Se por exemplo considerarmos uma partícula de massa constante m_0 ($\gamma_q = 0$) em um potencial $V(x)$, a onda eletromagnética correspondente propaga-se em um meio de permeabilidade constante (como acontece no caso usual) e assim, a dependência espacial do índice de refração está associada apenas com o potencial $V(x)$ do análogo quântico.

Outra situação particular acontece quando $m(x)$ é dada por (4.80) e $V(x) = 0$. Neste caso obtemos que os campos elétrico e magnético são

$$\vec{E} = E_0 e^{i[k_0 \gamma_q^{-1} \ln(1+\gamma_q x) - \omega t]} \hat{z}, \tag{5.80a}$$

$$\vec{B} = \frac{B_0}{1+\gamma_q x} e^{i[k_0 \gamma_q^{-1} \ln(1+\gamma_q x) - \omega t]} (-\hat{y}), \tag{5.80b}$$

onde k_0 e $B_0 = k_0 E_0/\omega$ são constantes. A parte espacial dos campos acima podem ser escritos em termos das ondas deformadas (4.67), de forma que:

$$\vec{E} = E_0 \sqrt{1+\gamma_q x}\, \psi_k(x) e^{-i\omega t} \hat{z}, \tag{5.81a}$$

$$\vec{B} = \frac{B_0}{\sqrt{1+\gamma_q x}} \psi_k(x) e^{-i\omega t} (-\hat{y}). \tag{5.81b}$$

Apesar desta análise, é importante lembrarmos que essa é apenas uma analogia meramente nas estruturas matemáticas da funções de onda. A intepretação das funções de onda na mecânica quântica e óptica ondulatória são fundamentalmente de naturezas diferentes. Por outro lado, este modelo teórico pode ser utilizado para estudos de propagação de ondas eletromagnéticas em meios não homogêneos onde o parâmetro q está associado às propriedades do meio, similarmente como é feito em [222, 223] onde são estudados efeitos de pulsos de ondas eletromagnéticas q-gaussianos em óptica não linear.

5.3 Potencial degrau para partículas com massa efetiva

A seguir, revisitamos uma série de problemas frequentes em mecânica quântica caracterizados por "potenciais contínuos por partes", mas considerando que a partícula tem uma massa dependente da posição. Um destes potenciais é o potencial degrau, ou barreira de potencial, representado pela Figura 5.14, e dado por

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0, & \text{para } x > a \\ 0, & \text{para } x < a \end{cases} \tag{5.82}$$

que possui uma descontinuidade finita apenas em $x = a$. Evidentemente, se $V_0 = 0$, recuperamos o caso de uma partícula livre discutido na Seção 4.3.

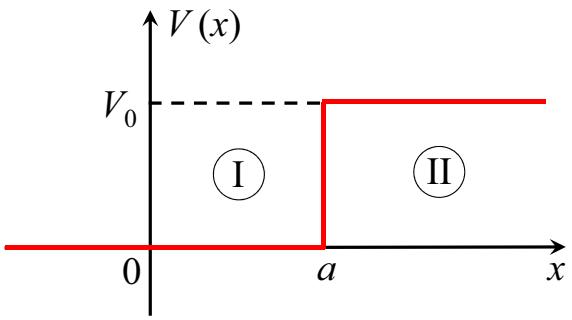


Figura 5.14: Potencial degrau de altura V_0 em $x = a$.

A estratégia para obter a solução deste potencial, e outros que analisamos a seguir, é resolver separadamente a equação de Schrödinger independente do tempo (4.86) para a função de onda $\Psi(x,t)$, mas os mesmos resultados poderiam ser obtidos pela função de onda $\Phi_q(x,t)$ da equação deformada (4.103). Para $x > a$ e $x < a$, as soluções devem satisfazer condições de integrabilidade quadrada da função de onda e continuidade da densidade de corrente (4.88), tal que

$$\lim_{x\to a^-} \psi(x) = \lim_{x\to a^+} \psi(x), \tag{5.83a}$$

$$\lim_{x\to a^-} \frac{d}{dx}\left[\frac{\psi(x)}{m(x)}\right] = \lim_{x\to a^+} \frac{d}{dx}\left[\frac{\psi(x)}{m(x)}\right]. \tag{5.83b}$$

Uma vez que nossa análise está voltada para a massa (4.80), que corresponde a uma função de massa contínua, a segunda condição leva a $\lim_{x\to a^-} d\psi(x)/dx = \lim_{x\to a^+} d\psi(x)/dx$.

Assim como para a partícula livre, não existem soluções para $E < 0$, uma vez que isso levaria à função de onda divergir em $x \to -\infty$. Desta forma, iremos resolver este problema para dois casos: $E > V_0$ e $0 < E < V_0$.

Caso 1: $E > V_0$

Consideremos primeiramente o caso em que a partícula possui energia $E > V_0$. As equações de Schrödinger independente do tempo (4.86) nas regiões $x < a$ (I) e $x > a$ (II) são

$$\text{Região I:} \quad -\frac{\hbar^2(1+\gamma_q x)^2}{2m_0}\frac{d^2\psi_{\rm I}}{dx^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{m_0}\frac{d\psi_{\rm I}}{dx} - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\psi_{\rm I}(x) = E\psi_{\rm I}(x), \tag{5.84a}$$

$$\text{Região II:} \quad -\frac{\hbar^2(1+\gamma_q x)^2}{2m_0}\frac{d^2\psi_{\rm II}}{dx^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{m_0}\frac{d\psi_{\rm II}}{dx} - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\psi_{\rm II}(x) = (E-V_0)\psi_{\rm II}(x). \tag{5.84b}$$

Para $x < a$, o potencial é nulo, e seja $k = \sqrt{2m_0E/}\hbar$, a solução da equação (5.84a) corresponde a de uma partícula livre (4.127), de forma que podemos escrever

$$\psi_{\rm I}(x) = \frac{A}{\sqrt{1+\gamma_q x}}e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} + \frac{B}{\sqrt{1+\gamma_q x}}e^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}. \tag{5.85}$$

Para $x > a$, o potencial é V_0, e portanto, seja $k' = \sqrt{2m_0(E-V_0)/}\hbar$, a equação (5.84b) tem uma forma similar à equação (5.84a), mas com $E - V_0$ ao invés de E. Desta forma, a solução para a função de onda nesta região é

$$\psi_{\rm II}(x) = \frac{C}{\sqrt{1+\gamma_q x}}e^{ik'\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} + \frac{D}{\sqrt{1+\gamma_q x}}e^{-ik'\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}. \tag{5.86}$$

Considerando a situação de que uma partícula de massa $m(x)$ incide no degrau da esquerda para a direita, teremos $D = 0$, pois não existem partículas vindo da direita.

Seja

$$\psi_\pm(x) = \frac{A_\pm}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\exp\left[\pm\frac{ik}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right], \tag{5.87}$$

notemos que

$$\psi'_\pm(x) = \frac{A_\pm}{(1+\gamma_q x)^{3/2}}\left(\pm ik - \frac{\gamma_q}{2}\right)\exp\left[\pm\frac{ik}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right]. \tag{5.88}$$

O próximo passo é impor as condições de contorno em $x = a$

$$\psi_{\rm I}(x=a) = \psi_{\rm II}(x=a) \qquad \text{e} \qquad \left.\frac{d\psi_{\rm I}}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{d\psi_{\rm II}}{dx}\right|_{x=a}, \tag{5.89}$$

onde obtemos

$$Ae^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} + Be^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} = Ce^{ik'\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}, \tag{5.90}$$

e

$$C\left(ik'-\frac{\gamma_q}{2}\right)e^{ik'\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}=A\left(ik-\frac{\gamma_q}{2}\right)e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}+B\left(-ik-\frac{\gamma_q}{2}\right)e^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}. \tag{5.91}$$

Das equações acima, obtém-se que

$$\frac{B}{A}=\frac{k-k'}{k+k'}e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}, \tag{5.92}$$

e

$$\frac{C}{A}=\frac{2k}{k+k'}e^{i(k-k')\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}. \tag{5.93}$$

A partir da densidade de corrente (4.133), podemos determinar a densidade de corrente para as ondas incidente (J_{inc}), refletida (J_{ref}) e transmitida (J_{trs}), de forma que

$$J_{\text{inc}}=|A|^2\frac{\hbar k}{m_0},\qquad J_{\text{ref}}=|B|^2\frac{\hbar k}{m_0},\qquad J_{\text{trs}}=|C|^2\frac{\hbar k'}{m_0}. \tag{5.94}$$

Com estes resultados, obtemos os seguintes coeficientes de reflexão e de transmissão para partículas com massa dependente da posição tratado aqui:

$$R=\frac{J_{\text{ref}}}{J_{\text{inc}}}=\left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2, \tag{5.95}$$

e

$$T=\frac{J_{\text{trs}}}{J_{\text{inc}}}=\frac{4kk'}{(k+k')^2}. \tag{5.96}$$

Claramente, temos $R+T=1$. Os coeficientes de reflexão e transmissão podem ser escritos em termos da razão V_0/E:

$$R=1-T=\left(\frac{1-\sqrt{1-V_0/E}}{1+\sqrt{1-V_0/E}}\right)^2,\qquad (E>V_0). \tag{5.97}$$

Estes resultados também são os mesmos quando uma partícula vem de uma região com potencial constante e incide sobre uma região de potencial, também constante, porém menor.

Apesar da massa dependente da posição, percebemos que as expressões de R e T são idênticas ao caso de uma partícula com massa constante. Os coeficientes de transmissão e reflexão para $V_0>E$ são independentes da posição da descontinuidade para a barreira de potencial, e dependem apenas da razão V_0/E entre a altura da barreira de potencial e a energia da partícula incidente.

Caso 2: $0 < E < V_0$

Consideremos agora o caso em que a partícula possui energia $E < V_0$. As equações de Schrödinger independente do tempo (4.86) são idênticas às Eq.'s (5.84). Na região $x < a$, temos que a solução da equação de onda é inalterada, e dada por (5.85). No entanto, na região $x > a$, a constante $k' = \sqrt{2m_0(E - V_0)}/\hbar$ da solução (5.85) é um imaginário puro, e torna-se interessante escrever a seguinte constante

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m_0(V_0 - E)}}{\hbar} = ik' > 0. \tag{5.98}$$

Portanto, a solução da Eq. (5.84a) pode ser escrita como

$$\psi_{\rm II}(x) = \frac{C}{\sqrt{1+\gamma_q x}} e^{\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} + \frac{D}{\sqrt{1+\gamma_q x}} e^{-\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}. \tag{5.99}$$

Para que $\psi_{\rm II}(x)$ seja uma função finita em $x \to +\infty$, devemos ter $D = 0$, e a solução acima torna-se

$$\psi_{\rm II}(x) = \frac{C}{\sqrt{1+\gamma_q x}} e^{-\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}. \tag{5.100}$$

Utilizando as mesmas condições de contorno do caso anterior em $x = a$, obtemos

$$\begin{aligned} Ae^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} + Be^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} &= Ce^{-\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}, \\ ik[Ae^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} - B^e - ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)] &= -\alpha Ce^{-\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}, \end{aligned}$$

ou ainda,

$$\frac{B}{A} = \frac{k - i\alpha}{k + i\alpha} e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}, \tag{5.101}$$

e

$$\frac{C}{A} = \frac{2k}{k + i\alpha} e^{i(k+i\alpha)\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}. \tag{5.102}$$

Definindo

$$e^{i\delta_q} = \frac{k - i\alpha}{k + i\alpha} e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}, \tag{5.103}$$

temos que δ_q corresponde a diferença de fase entre a onda incidente e a onda refletida.

A solução para a função de onda pode ser escrita como

$$\psi(x) = \begin{cases} 2Ae^{i\frac{\delta_q}{2}} \cos\left[\dfrac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x) - \dfrac{\delta_q}{2}\right], & x < a \\ 2Ae^{i\frac{\delta_q}{2}} \cos\left(\dfrac{\delta_q}{2}\right) \exp\left[-\dfrac{\alpha}{\gamma_q}\ln\left(\dfrac{1+\gamma_q x}{1+\gamma_q a}\right)\right], & x > a. \end{cases} \tag{5.104}$$

e da qual recupera o caso usual para $\gamma_q = 0$.

O coeficiente de reflexão neste caso é

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left|\frac{k - i\alpha}{k + i\alpha} e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}\right|^2 = 1, \tag{5.105}$$

um resultado em concordância com o caso clássico de partículas serem refletidas pela barreira de potencia para $E < V_0$. Notemos ainda que em $x > a$ existe uma onda evanescente deformada, tal que sua densidade probabilidade é

$$\begin{aligned} |\psi_{\rm II}(x)|^2 &= |C|^2 \exp\left[-\frac{2\alpha}{\gamma_q}\ln\left(\frac{1+\gamma_q x}{1+\gamma_q a}\right)\right] \\ &= |C|^2 \exp_q\left[\left(\frac{x}{\xi}\right) \ominus_q \left(\frac{a}{\xi}\right)\right]^{-2\alpha\xi}. \end{aligned} \tag{5.106}$$

Considerando que a barreira está localizada em $x = 0$, o decaimento da densidade de probabilidade para a onda envanscente é proporcional à $[\exp_q(x/\xi)]^{-2\alpha\xi}$. O caso usual é recuperado para $q = 1$. Na região $x > a$, temos $E > V_0$, e portanto classicamente a energia cinética da partícula seria negativa, correspondendo a uma região proibida. Do ponto vista do formalismo quântico, a partícula pode ser encontrada em $x > a$, porém não poderá permanecer nessa região pelo fato do coeficiente de reflexão ser igual a 1 e o coeficiente de transmissão ser nulo. Esta penetração da partícula na região proibida é possível devido ao princípio da incerteza $\Delta E \Delta t \approx \hbar$, onde em um intervalo de tempo muito pequeno, a energia da partícula não é conservada.

5.4 Tunelamento quântico para partícula com massa efetiva

Um problema simples que se pode obter uma solução analítica, e que leva a evidências de fenômenos muito interessantes e aplicações em muitos problemas físicos, é o tunelamento quântico, também conhecido como penetração de barreira retangular ou efeito túnel. Neste problema, uma partícula vindo de $x \to -\infty$ incide em direção a uma barreira de potencial retangular, dada por:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \le x \le a \\ 0, & \text{outros valores.} \end{cases} \tag{5.107}$$

e que está representada pela Figura 5.15.

De modo mais específico a respeito sobre o tunelamento quântico, quando a partícula incide sobre a barreira vindo da esquerda ($x < 0$), esperamos ter, no regime estacionário, ondas incidentes e ondas refletidas à esquerda da barreira, além de ondas saindo da bar-

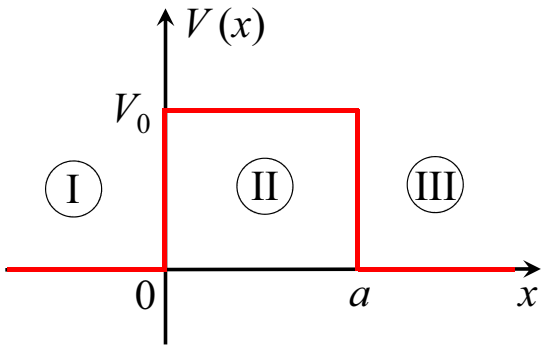


Figura 5.15: Barreira de potencial regular de altura V_0 e largura a.

reira pelo lado direito, indo para $x \to +\infty$. Uma vez que $V(x) = 0$ em $x < 0$ e $x > a$, a partícula é livre nessas regiões, e o problema desta barreira retangular simula, esquematicamente, o espalhamento de uma partícula livre sofrendo influência desse potencial.

Existem diversos processos que ocorrem na natureza cuja explicação está baseada no tunelamento quântico: decaimento radioativo por emissão de partículas alfa [224, 225], diodos de semicondutores [226], processos de fusão nuclear [227], microscópio de varredura por tunelamento [228], reações químicas [229, 230] etc.

Extensões do tunelamento quântico para sistemas com massa dependente da posição podem ser encontrados na literatura. Por exemplo, em [231], os autores desenvolvem uma função de Green para sistemas com massa dependente da posição, e como aplicação resolvem um problema de tunelamento quântico para uma função $m(x)$ específica. Em [232], o problema da barreira de potencial retangular é resolvido através da equação de Schrödinger e das condições de contorno da função de onda. Em [201, 233, 234], o problema de partículas com massa dependente da posição são investigados em heteroestruturas. Similaremente, em [11] o tunelamento quântico de um sistema com massa dependente da posição é resolvido através do uso do operador não hermitiano $\hat{p}'_q$ dado por (4.2).

Nesta Seção revisitamos o problema do tunelamento quântico de um sistema com massa dependente da posição dada pela Eq. (4.80) utilizando o operador momento linear hermitiano $\hat{p}_q$ (4.55).

Similarmentente, como fizemos na Seção anterior, a solução da equação de Schrödinger independente do tempo (4.86) nas diferentes regiões $x < 0$, $0 < x < a$ e $x > a$ serão indicadas por $\psi_{\rm I}(x)$, $\psi_{\rm II}(x)$, e $\psi_{\rm III}(x)$, e obtidas utilizando a solução (4.127) da Eq. (4.122), mas com $k' = \sqrt{2m_0(E - V_0)}/\hbar$ no lugar de $k = \sqrt{2m_0 E}/\hbar$ na região de potencial não nulo (dentro da barreira de potencial retangular). Considerando inicialmente a situação de espalhamento, ou seja, o caso em que a energia da partícula incidente é maior do que

a altura da barreira de potencial retangular, *i.e.*, $E > V_0$, temos:

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{A}{\sqrt{1+\gamma_q x}} e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} + \dfrac{B}{\sqrt{1+\gamma_q x}} e^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}, & x < 0 \\ \dfrac{C}{\sqrt{1+\gamma_q x}} e^{ik'\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} + \dfrac{D}{\sqrt{1+\gamma_q x}} e^{-ik'\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}, & 0 < x < a \\ \dfrac{F}{\sqrt{1+\gamma_q x}} e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}, & x > a. \end{cases} \tag{5.108}$$

Notemos que a solução para $x > a$ possui apenas a função de onda caminhante para direita.

Em particular, desejamos obter o coeficiente de transmissão $T = |F|^2/|A|^2$. Das condições de contorno em $x = 0$ e $x = a$, temos

$$(i) \qquad \psi_{\rm I}(x=0) = \psi_{\rm II}(x=0), \tag{5.109a}$$

$$(ii) \qquad \psi'_{\rm I}(x=0) = \psi'_{\rm II}(x=0), \tag{5.109b}$$

$$(iii) \qquad \psi_{\rm II}(x=a) = \psi_{\rm III}(x=a), \tag{5.109c}$$

$$(iv) \qquad \psi'_{\rm II}(x=a) = \psi'_{\rm III}(x=a). \tag{5.109d}$$

A partir das Eq.'s (5.88) e das condições (5.109a) e (5.109b), respectivamente obtemos que $A + B = C + D$ e $k(A - B) = k'(C - D)$ e que nos dá

$$A = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{k'}{k}\right) C + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{k'}{k}\right) D. \tag{5.110}$$

Das condições (5.109c) e (5.109d), obtemos respectivamente

$$F = Ce^{i(k'-k)\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} + De^{-i(k'+k)\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} \tag{5.111a}$$

e

$$kF = k'Ce^{i(k'-k)\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} - k'De^{-i(k'+k)\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}. \tag{5.111b}$$

Podemos escrever que

$$C = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{k}{k'}\right) e^{-i(k'-k)\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} F \tag{5.112}$$

e

$$D = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{k}{k'}\right) e^{i(k'+k)\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} F. \tag{5.113}$$

Substituindo as Eq.'s (5.112) e (5.113) em (5.110), vem que

$$A = \left[\frac{1}{4}\frac{(k+k')^2}{kk'} e^{-i(k'-k)\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} - \frac{1}{4}\frac{(k-k')^2}{kk'} e^{i(k'+k)\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}\right] F. \tag{5.114}$$

Da equação anterior, segue que o coeficiente de transmisão é dado por

$$\begin{aligned}
T = \frac{|F|^2}{|A|^2} &= \left| \frac{4kk' e^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}}{(k+k')^2 e^{-ik'\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} - (k-k')^2 e^{ik'\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}} \right|^2 \\
&= \left[\frac{4kk'}{(k+k')^2}\right]^2 \left| \frac{e^{i(k'-k)\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}}{1 - \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 e^{i2k'\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}} \right|^2 \\
&= \left[\frac{4kk'}{(k+k')^2}\right]^2 \frac{1}{1 + \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^4 - 2\left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 \cos\left[\frac{2k'\ln(1+\gamma_q a)}{\gamma_q}\right]} \\
&= \left[\frac{4kk'}{(k+k')^2}\right]^2 \frac{1}{\left[1 - \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2\right]^2 + 4\left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 \mathrm{sen}^2\left[\frac{k'\ln(1+\gamma_q a)}{\gamma_q}\right]} \\
&= \frac{1}{\frac{(k+k')^4}{16k^2k'^2}\left\{\frac{16k^2k'^2}{(k+k')^4} + 4\left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 \mathrm{sen}^2\left[\frac{k'\ln(1+\gamma_q a)}{\gamma_q}\right]\right\}} \\
&= \frac{1}{1 + \frac{(k^2-k'^2)^2}{4k^2k'^2}\mathrm{sen}^2\left[\frac{k'\ln(1+\gamma_q a)}{\gamma_q}\right]}.
\end{aligned} \tag{5.115}$$

Seja a largura deformada $a_q = \gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)$, e uma vez que $\mathrm{sen}(iu) = i\mathrm{senh}(u)$, a expressão anterior pode ser aplicada para os casos $E > V_0$ e $E < V_0$. Desta forma, o inverso do coeficiente de transmissão é dado por:

$$T^{-1} = \begin{cases} 1 + \dfrac{V_0^2}{4E(E-V_0)}\mathrm{sen}^2\left[\dfrac{a_q}{\hbar}\sqrt{2m_0(E-V_0)}\right], & E > V_0 \\ 1 + \dfrac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\mathrm{senh}^2\left[\dfrac{a_q}{\hbar}\sqrt{2m_0(V_0-E)}\right], & E < V_0. \end{cases} \tag{5.116}$$

Vemos, portanto, que os resultados apresentados para o tunelamento quântico para a partícula com massa dependente da posição são similares ao caso usual de uma partícula de massa constante, mas com a largura da barreira a substituída pela correspondente largura deformada a_q.

Observemos que $T = 1$ (barreira de potencial retangular transparente) sempre que a função seno é zero, o que corresponde a $a_q\sqrt{2m_0(E-V_0)}/\hbar = n\pi$, onde n é um número inteiro. Portanto, os níveis de energia para tramissão total são dados por

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2\gamma_q^2 n^2}{2m_0\ln^2(1+\gamma_q a)} + V_0 = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2m_0 a_q^2} + V_0, \tag{5.117}$$

que são os mesmos valores para as energias permitidas para uma partícula com massa dependente da posição em um poço de potencial quadrado infinito de largura a, mas adicionados do valor V_0 do potencial da barreira.

A Figura 5.16 (a) ilustra o coeficiente de transmissão em função da razão E/V_0 com $\gamma_q a = 0$ (caso usual), 0.5 e -0.5 para uma barreira de potencial retangular de altura

$V_0/(\hbar^2\pi^2/2m_0a^2) = 10$. Por outro lado, a Figura 5.16 (b) ilustra o coeficiente de transmissão em função do produto $k'a$ para $\gamma_q/k' = 0$ (caso usual), 0.1 e -0.1. Para $\gamma_q \neq 0$, observa-se que T oscila não periodicamente entre seu valor mínimo $T_{\text{mín}} = \frac{4(E-V_0)}{4(E-V_0)+V_0^2}$, e seu valor máximo 1. Podemos observar que à medida que $k'a$ aumenta, o intervalo entre dois valores de $k'a$ consecutivos na qual T é máximo tende a aumentar (dimunuir) para $\gamma_q > 0$ ($\gamma_q < 0$).

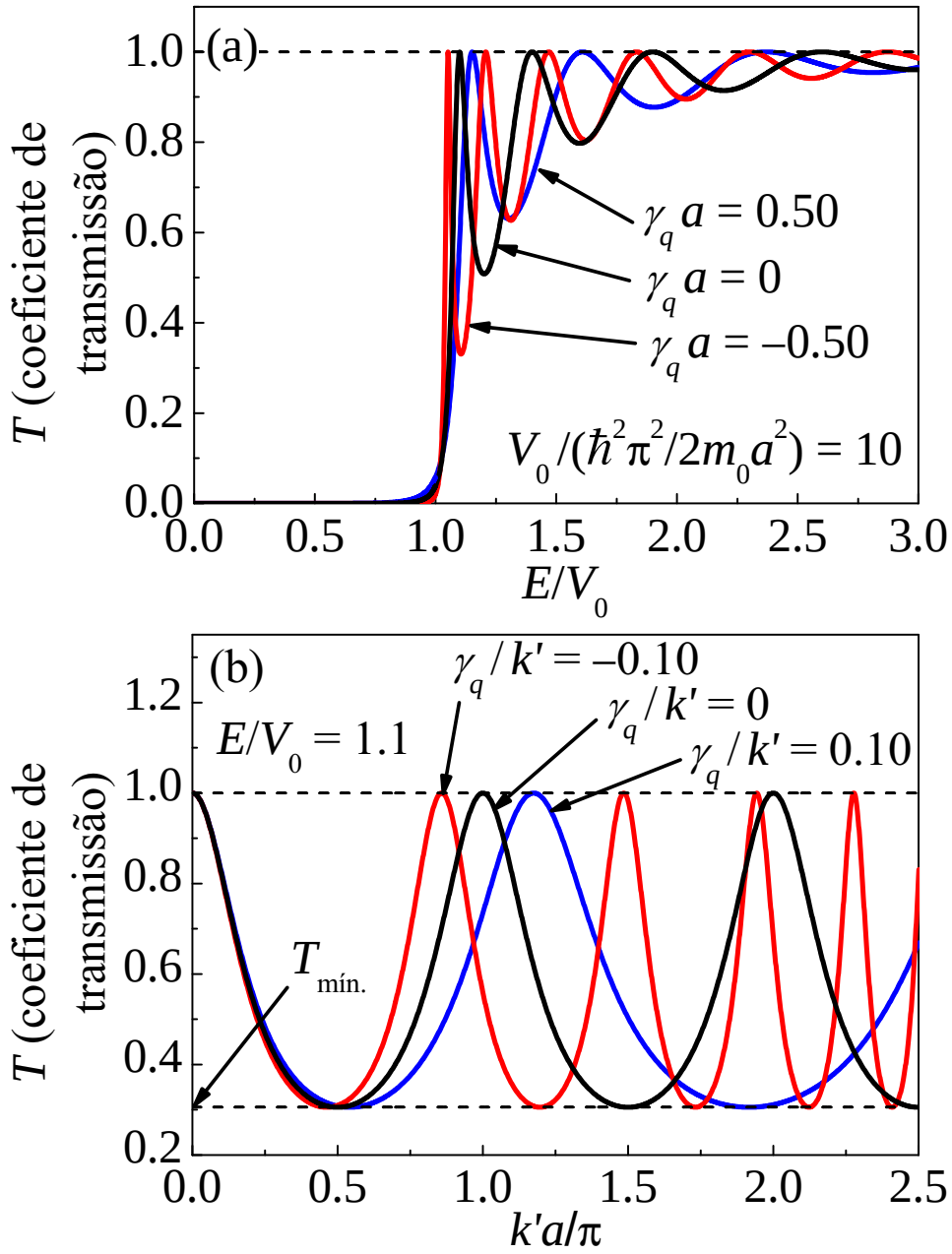


Figura 5.16: (a) Coeficiente de transmissão T como função da energia de uma partícula com massa dependente da posição para $\gamma_q a = 0$ (caso usual), 0.5 e -0.5; e incidindo em uma barreira de potencial retangular (largura a e altura $V_0 = 10(\pi^2\hbar^2/2m_0a^2)$). (b) Coeficiente de transmissão em função do produto $k'a$, onde $k' = \sqrt{2m_0(E-V_0)}/\hbar$, para $\gamma_q/k' = 0$ (caso usual), 0.1 e -0.1. Para $\gamma_q/k' < 0$ ($\gamma_q/k' < 0$), o intervalo entre dois máximos consecutivos aumenta (diminui) à medida que $k'a$ aumenta.

Considerando a situação de baixas energias ($E < V_0$), como vimos para o potencial degrau, a amplitude da função de onda ao atravessar a fronteira das regiões I e II não cai abruptamente para zero, mas apresenta um decaimento que pode ser escrito em termos da função q-exponencial de acordo com a Eq. (5.106). A partir da fronteira das regiões II e III, a função de onda passa a comportar-se como uma onda deformada (4.67), o que resulta em uma probabilidade para que a partícula seja encontrada em $x > a$. Em particular, se $\alpha \ll 1$, com a constante α definida por (5.98), o coeficiente de transmisão pode ser escrito como

$$T \approx \frac{16(V_0 - E)E}{V_0^2} e^{-2\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)} = \frac{16(V_0 - E)E}{V_0^2}[e_q(a/\xi)]^{-2\alpha/\xi}, \tag{5.118}$$

e que no caso usual ($q = 1$), tem inúmeras aplicações em efeito de diodo túnel, efeito Josephson, decaimento de partículas alfa, inversão de potencial em moléculas de amônia, microscopia eletrônica etc. Aqui apresentamos algumas consequências de uma possível generalização aplicada a fenômenos cujo decaimento poderia não ser uma função exponencial usual, evidenciado uma possível dependência da massa das partículas microscópicas com a posição.

5.5 Partícula com massa dependente da posição em poço de potencial finito

Consideremos agora uma partícula com massa $m(x)$ dada por (4.80) em um poço de potencial quadrado finito

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ V_0, & \text{outros valores,} \end{cases} \tag{5.119}$$

representado pela Figura 5.17, sendo V_0 uma constante positiva:

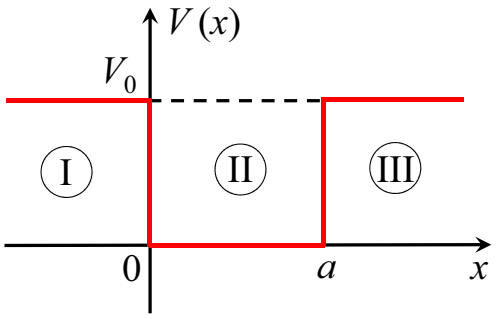


Figura 5.17: Poço de potencial quadrado finito de profundidade V_0 e largura a.

De acordo com o que vimos anteriormente, a solução da equação de Schrödinger em cada uma das regiões $x < 0$ (I), $0 < x < a$ (II) e $x > a$ (III) são indicadas por:

$$\psi_{\rm I}(x) = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\left[Ae^{\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} + Be^{-\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}\right] \quad (x<0), \tag{5.120a}$$

$$\psi_{\rm II}(x) = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\left[C'e^{ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} + D'e^{-ik\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}\right] (0<x<a), \tag{5.120b}$$

$$\psi_{\rm III}(x) = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\left[Fe^{\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} + Ge^{-\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}\right] \quad (x>a). \tag{5.120c}$$

onde $k = \sqrt{2m_0E}/\hbar$ e $\alpha = \sqrt{2m_0(V_0-E)}/\hbar$. Consideremos aqui apenas os estados ligados, onde $E < V_0$, desde que as soluções para $E > V_0$ correspondem a estados não ligados e são similares ao caso do tunelamento quântico que analisamos na Seção anterior.

Desde que a solução seja finita em $x \to \pm\infty$, independente do valor de γ_q, devemos ter $B = 0$ e $F = 0$.

Do mesmo modo, como fizemos para a partícula confinada em um potencial quadrado infinito, consideremos a mudança de constantes dada por $C' = (-iC + D)/2$ e $D' = (iC + D)/2$, e portanto, a solução da equação de Schrödinger independente do tempo (4.86) em cada uma das três regiões é da forma:

$$\psi_{\rm I}(x) = \frac{A}{\sqrt{1+\gamma_q x}}e^{\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} \qquad (x<0), \tag{5.121a}$$

$$\psi_{\rm II}(x) = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma_q x}}\left\{C\,\mathrm{sen}\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right] + D\cos\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right]\right\} \qquad (0<x<a), \tag{5.121b}$$

$$\psi_{\rm III}(x) = \frac{G}{\sqrt{1+\gamma_q x}}e^{-\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)} \qquad (x>a). \tag{5.121c}$$

Consideraremos a seguir as condições de contorno: $\psi(x)$ e $\psi'(x) = d\psi(x)/dx$ contínuas em $x = 0$ e $x = a$. Deste modo, notemos que:

$$\psi'_{\rm I}(x) = A\left(\alpha - \frac{\gamma_q}{2}\right)\frac{e^{\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}}{(1+\gamma_q x)^{3/2}}, \tag{5.122}$$

$$\psi'_{\rm II}(x) = \frac{1}{(1+\gamma_q x)^{3/2}}\left(-\frac{C\gamma_q}{2} - Dk\right)\mathrm{sen}\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right] + \frac{1}{(1+\gamma_q x)^{3/2}}\left(-\frac{D\gamma_q}{2} + Ck\right)\cos\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q x)\right], \tag{5.123}$$

$$\psi'_{\rm III}(x) = G\left(-\alpha - \frac{\gamma_q}{2}\right)\frac{e^{-\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q x)}}{(1+\gamma_q x)^{3/2}}. \tag{5.124}$$

Da condição de contorno $\psi_{\rm I}(x=0) = \psi_{\rm II}(x=0)$, obtemos $A = D$, e da condição $\psi'_{\rm I}(x=0) = \psi'_{\rm II}(x=0)$, vem que $A(\alpha - \gamma_q/2) = -D\gamma_q/2 + Ck$, ou ainda, $Ck = \alpha A$. E das

condições $\psi_{\rm II}(x=a)=\psi_{\rm III}(x=a)$ e $\psi'_{\rm II}(x=a)=\psi'_{\rm III}(x=a)$, obtemos respectivamente:

$$\frac{G}{\sqrt{1+\gamma_q a}}e^{-\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}=\frac{C}{\sqrt{1+\gamma_q a}}\text{sen}\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q a)\right]+\frac{D}{\sqrt{1+\gamma_q a}}\cos\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q a)\right]$$

e

$$\begin{aligned}G\left(-\alpha-\frac{\gamma_q}{2}\right)\frac{e^{-\alpha\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)}}{(1+\gamma_q a)^{3/2}} &= \frac{1}{(1+\gamma_q a)^{3/2}}\left\{\left(-\frac{C\gamma_q}{2}-Dk\right)\text{sen}\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q a)\right]\right.\\ &\left.+\left(-\frac{D\gamma_q}{2}+Ck\right)\cos\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q a)\right]\right\}.\end{aligned}$$

Eliminando a constante G nas duas equações acima, segue que

$$\begin{aligned}&\left(-\frac{C\gamma_q}{2}-Dk\right)\text{sen}\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q a)\right]+\left(-\frac{D\gamma_q}{2}+Ck\right)\cos\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q a)\right]\\ &\quad=\left(-\frac{\gamma_q}{2}-\alpha\right)\left\{C\text{sen}\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q a)\right]+D\cos\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q a)\right]\right\},\end{aligned}\tag{5.125}$$

e de onde se obtém:

$$(C\alpha-Dk)\text{sen}\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q a)\right]=-(Ck+\alpha D)\cos\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q a)\right].\tag{5.126}$$

Da relação acima, temos

$$\tan\left[\frac{k}{\gamma_q}\ln(1+\gamma_q a)\right]=\frac{\text{sen}[k\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)]}{\cos[k\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)]}=-\frac{Ck+\alpha D}{C\alpha-Dk},\tag{5.127}$$

e lembrando que $D=A$, $C=A\alpha/k$, em termos do comprimento deformado $a_q=\gamma_q^{-1}\ln(1+\gamma_q a)$, obtemos que

$$\tan(ka_q)=\frac{2\alpha k}{k^2-\alpha^2},\tag{5.128}$$

ou ainda,

$$\tan\left(\frac{ka_q}{2}\right)=\frac{\alpha}{k}.\tag{5.129}$$

Esta equação transcendental permite calcular os níveis de energia e o número de estados ligados. A sua forma é a mesma do caso usual para $\gamma_q=0$, mas possui o comprimento deformado da caixa a_q no lugar de a. Seja $z=a\sqrt{2m_0E}/\hbar$ e $z_0=a\sqrt{2m_0V_0}/\hbar$, e notando que $(\alpha a)^2=z_0^2-z^2$, a relação acima pode ser escrita como

$$\tan\left(\frac{a_q z}{2a}\right)=\pm\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2-1}.\tag{5.130}$$

O número de estados ligados é igual ao número de intersecções da curva $\tan(a_q z/a)$ com $\pm\sqrt{(z_0/z)^2-1}$. Para $\gamma_q=0$ e $V_0>0$, temos $a_q=a$, e recuperamos o caso usual de

uma partícula com massa constante em um poço de potencial quadrado finito, onde os níveis de energia são obtidos a partir da equação transcendental $\tan(z) = \pm\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$. Por outro lado, se $V_0 \to \infty$, $\tan(ka_q/2) = 0$, o que coresponde a $a_q\sqrt{2m_0E}/\hbar = n\pi$, e assim reobtemos os níveis de energia de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito analisado na Seção 5.1.

A Figura 5.18 ilustra as curvas $\tan(a_qz/a)$ para diferentes valores de a_q/a, e as curvas $\pm\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$. O número de estados ligados para $a_q/a = 0.5$, 1.0 e 1.5 é igual a 3, 5 e 7, respectivamente. Para $\gamma_q a > 0$ ($0 < \gamma_q < -1/a$), o efeito da massa dependente da posição pode ser entendido como uma contração (dilatação) do espaço e permitir uma maior (menor) quantidade de estados ligados possíveis em relação ao caso usual.

Notemos que estes resultados poderiam ter sido obtidos a partir do uso da transformação canônica $(\hat{x}, \hat{p}) \longrightarrow (\hat{x}_q, \hat{p}_q)$, que mapeia a partícula com massa dependente da posição no poço de potencial quadrado com profundidade V_0 e largura igual a a no espaço $\{|\hat{x}\rangle\}$ em uma partícula de massa constante em um poço de potencial com mesma profundidade, mas largua a_q no espaço $\{|\hat{x}_q\rangle\}$.

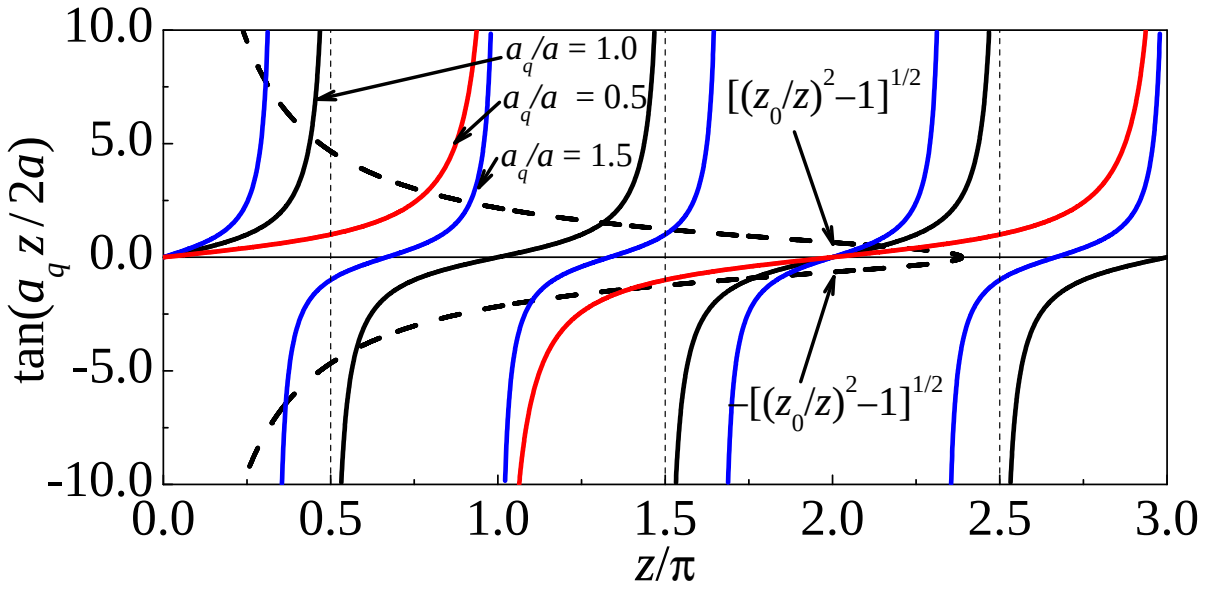


Figura 5.18: Gráfico da função $\tan(a_qz/2a)$ associada aos níveis de energia de uma partícula com massa dependente da posição em um poço de potencial quadrado finito. Na figura são mostradas funções para $a_q/a = 1$ (caso usual), 0.5 e 1.5.

Capítulo 6

Oscilador harmônico q-deformado

Um dos problemas mais básicos da mecânica clássica é o oscilador harmônico simples consistindo de uma partícula de massa constante m sujeita a um força restauradora proporcional ao seu deslocamento x, e que leva a equação de movimento $m\ddot{x} = -kx$, onde k é a constante de força. Um dos primeiros estudos matemáticos deste sistema foi feito pelo físico e matemático suíço Leonhard Euler (1707-1783). Em 1739, Euler utilizou o método das quadraturas para encontrar as soluções do oscilador harmônico [235].

Ademais, é bem conhecido que o problema do oscilador harmônico simples é um dos mais importantes problemas da física [236], tanto devido ao ponto de vista matemático, por causa de suas equações diferenciais lineares com coeficientes constantes e soluções analíticas exatas, bem como suas inúmeras aplicações em física quântica. Contudo, o uso de equações lineares em física é principalmente idealizado a sistemas com características específicas conforme discutidas na Seção 3.1. Assim, generalarizações de equações de movimento na física tornam-se relevantes, bem como a generalização do problema do oscilador harmônico simples.

Em particular, um oscilador harmônico deformado clássico e baseado no uso do cálculo deformado inspirado pela derivada de Jackson (2.18) e das funções trigonométricas (2.30) foi investigado em [237]. No formalismo quântico, uma das características deste oscilador é o fato dele apresentar um espectro não linear, que está associado a efeitos anarmônicos, e que pode ser utilizado, por exemplo, para descrever moléculas diatômicas [238].

Por outro lado, diversos estudos de osciladores com massa dependente da posição também são encontrados na literatura [202, 239, 240, 241, 242, 243, 244, 245, 246, 247, 248, 249]. Especificamente, o problema de um oscilador harmônico quântico em um espaço não linear dado pela Eq. (4.1), e que está associado a sistemas com massa dependente da posição, foi analizado em [32, 250] utilizando o operador não hermitiano $\hat{p}'_q$ dado pela Eq. (4.2). Para este caso, o oscilador apresenta um espectro idêntico ao de um oscilador de Morse [251], que é um oscilador anarmônico. Contudo, uma consequência em ambas formulações citadas acima é a possibilidade de violação do princípio da incerteza, na qual dependendo do valor de algum parâmetro de deformação utilizado, a relação de incerteza

pode ser menor do que $\hbar/2$. Por exemplo, em [32] é mostrado que os operadores $\hat{x}$ e $\hat{p}'_q$ (não canonicamente conjugados) obedecem a relação de incerteza $\Delta x \Delta p'_q \geq (\hbar/2)(1+\gamma_q\langle\hat{x}\rangle)$.

Neste Capítulo revisitamos o problema de um oscilador harmônico simples em um espaço não linear descrito pelo operador translação modificado (4.37), e o operador momento linear generalizado hermitiano $\hat{p}_q$ dado pela Eq. (4.55). Analisamos este problema em ambos formalismos clássico e quântico. Obtemos analiticamente as soluções de um oscilador harmônico simples q-deformado clássico. Investigamos numericamente um oscilador amortecido que recupera o caso usual no limite $q \to 1$. Analisamos os resultados do oscilador harmônico quântico através do princípio da correspondência e da incerteza. Aplicamos o formalismo das variáveis ação-ângulo juntamente com a aproximação WKB para obter os níveis de energia deste oscilador na descrição quântica a partir da descrição clássica. Também aplicamos a teoria de perturbação independente do tempo como uma ferramenta alternativa para obter os níveis de energia do oscilador quântico q-deformado.

6.1 Oscilador harmônico simples q-deformado

Consideremos uma partícula com massa dada pela Eq. (4.80) submetida a um potencial quadrático $V(x) = kx^2/2$. A hamiltoniana desta partícula é

$$\begin{aligned} H(x,p) &= \frac{p^2}{2m(x)} + \frac{1}{2}kx^2 \\ &= \frac{(1+\gamma_q x)^2 p^2}{2m_0} + \frac{1}{2}kx^2. \end{aligned} \tag{6.1}$$

Seja $H(x,p) = E$ a primeira integral de movimento, temos que:

$$E = \frac{1}{2}m(x)\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2. \tag{6.2}$$

A segunda lei de Newton deformada (4.165) para este problema é

$$\widetilde{D}^2_{\gamma_q} x(t) = -\omega_0^2 x, \tag{6.3}$$

onde $\omega_0 = \sqrt{k/m_0}$ é a frequência de oscilação para o correspondente caso usual $\gamma_q = 0$. A equação acima pode ser reescrita explicitamente na forma

$$(1+\gamma_q x)\ddot{x} - \gamma_q^2 \dot{x}^2 + \omega_0^2 x(1+\gamma_q x)^3 = 0, \tag{6.4}$$

que corresponde a uma equação diferencial não linear e com coeficientes variáveis. Apesar da dependência em $\dot{x}^2$, temos que o oscilador deformado é um sistema conservativo (veja Seção 4.5).

Seja $x = A$ quando $\dot{x} = 0$, onde A é a amplitude de oscilação do sistema, temos que a energia do sistema é $E = \frac{1}{2}m\omega_0^2 A^2$. A partir da Eq. (6.2), temos que

$$v(t) = \frac{dx}{dt} = \pm(1 + \gamma_q x)\omega_0\sqrt{A^2 - x^2}, \tag{6.5}$$

e que pode ser reescrita em termos da q-derivada dual como

$$\widetilde{D}_{\gamma_q} x(t) = \pm\omega_0\sqrt{A^2 - x^2}. \tag{6.6}$$

O momento linear $p = m(x)\dot{x}$ do oscilador, em uma posição x, é

$$p(x) = \pm\frac{m_0\omega_0\sqrt{A^2 - x^2}}{1 + \gamma_q x}. \tag{6.7}$$

É interessante notar que a velocidade deformada ($\widetilde{D}_{\gamma_q} x$) e aceleração deformada ($\widetilde{D}^2_{\gamma_q} x$) para este oscilador com massa dependente da posição têm respectivamente as mesmas formas funcionais das usuais velocidade ($v = dx/dt$) e aceleração ($a = d^2x/dt^2$) do oscilador com massa constante. Desta forma, vemos que o efeito da massa dependente da posição pode ser substituído nas equações de movimento por uma derivada com a deformação na variável dependente x. Em particular, para a massa dada pela Eq. (4.161), a derivada deformada é a q-derivada dual (2.116) no lugar das derivadas usuais.

Para obtermos uma expressão para a evolução temporal da posição $x(t)$ da partícula, podemos utilizar a Eq. (6.6), e que pode ser reescrita como

$$dt = \pm\frac{dx}{\omega_0(1 + \gamma_q x)\sqrt{A^2 - x^2}}. \tag{6.8}$$

Seja $t \equiv u/\omega_0$, $z \equiv x(t)/A$ e $\lambda_q \equiv \gamma_q A$, e integrando a equação acima, temos:

$$\begin{aligned} u &= \pm\int \frac{dz}{(1 + \lambda_q z)\sqrt{1 - z^2}} + u_0 \\ &= \pm\int \frac{d_q z}{\sqrt{1 - z^2}} + u_0. \end{aligned} \tag{6.9}$$

onde $d_q z = dz/(1 + \lambda_q z)$. Na equação acima, a integral do lado direito, ou sua correspondente q-integral, é exatamente a mesma que utilizamos no Capítulo 2 para definirmos novas funções trigonométricas deformadas $\mathrm{Sen}_q(u)$ e $\mathrm{Cos}_q(u)$ dadas pela Eq. (2.192). Segue que:

$$u = \mp\mathrm{Cos}_q^{-1}(z) + u_0. \tag{6.10}$$

Invertendo esta última equação, podemos escrever

$$z = \frac{x}{A} = \mathrm{Cos}_q(u - u_0). \tag{6.11}$$

Seja a constante de fase $\delta_0 \equiv -u_0 = -\omega_0 t_0$, e utilizando que $u = \omega_0 t$, obtemos:

$$x(t) = A\,\mathrm{Cos}_q(\omega_0 t + \delta_0) = A\cos\left[\theta_q(t)\right] \tag{6.12}$$

com

$$\theta_q(t) = \begin{cases} 2\tan^{-1}\left\{\sqrt{\dfrac{1+\gamma_q A}{1-\gamma_q A}}\tan\left[\dfrac{1}{2}\sqrt{1-\gamma_q^2 A^2}(\omega_0 t + \delta_0)\right]\right\}, & |\gamma_q A| < 1 \\ \\ 2\tan^{-1}\left\{\sqrt{\left|\dfrac{\gamma_q A+1}{\gamma_q A-1}\right|}\tanh\left[\dfrac{1}{2}\sqrt{\gamma_q^2 A^2-1}(\omega_0 t + \delta_0)\right]\right\}, & |\gamma_q A| > 1 \end{cases} \tag{6.13}$$

Para $|\gamma_q A| < 1$, a posição do oscilador em função do tempo é uma função periódica com período de oscilação dado por

$$\tau_q = \frac{\tau_0}{\sqrt{1-\gamma_q^2 A^2}}, \tag{6.14}$$

com $\tau_0 = 2\pi/\omega_0$ sendo o período de oscilação para o caso usual ($\gamma_q A = 0$). A equação $x(t) = A\cos(\omega_0 t + \delta)$ para o oscilador harmônico simples é recuperada quando $\gamma_q \to 0$.

A Figura 6.1 mostra os gráficos da posição, velocidade, aceleração e fase em função do tempo correspondente a uma partícula com massa dependente da posição dada pela Eq. (4.161) para $0 < \gamma_q A < 1$ (o caso usual $\gamma_q A = 0$ é ilustrado para comparação) e constante de fase $\delta = 0$. Quando $\gamma_q A$ aproxima-se de 1, observamos que a partícula permanece durante intervalos de tempo maiores (menores) em torno da posição $x = -A$ ($x = A$), uma vez que a massa da partícula é maior (menor) em torno daquela região, e consequentemente sua velocidade torna-se menor (maior). Observamos também que as amplitudes da velocidade são maiores do que aquelas no caso usual. Algo similar também acontece com a aceleração. O gráfico de $\theta_q(t)$ mostra que a fase da partícula comporta-se aproximadamente como uma função arco tangente quando $\gamma_q A$ aproxima-se de 1. Por comodidade, estamos ilustrando o gráfico de $\mathrm{mod}(\theta_q, 2\pi)$.

Para $\gamma_q A > 1$, o sistema perde sua natureza oscilatória e a partícula move-se entre $-1/\gamma_q < x \leq A$ conforme ilustrado na Figura 6.2 (a) . Quando $t \gg \tau_0$, temos que x aproxima-se assintoticamente de $-1/\gamma_q$. A Figura 6.2 (b) também mostra a velocidade da partícula como função tempo. Podemos ver que após um instante de tempo $t = t^*$, a partícula desacelera até atingir o repouso no limite $t \to \infty$.

As grandezas dinâmicas momento linear $p(t)$, energia cinética $T(t)$ e energia potencial

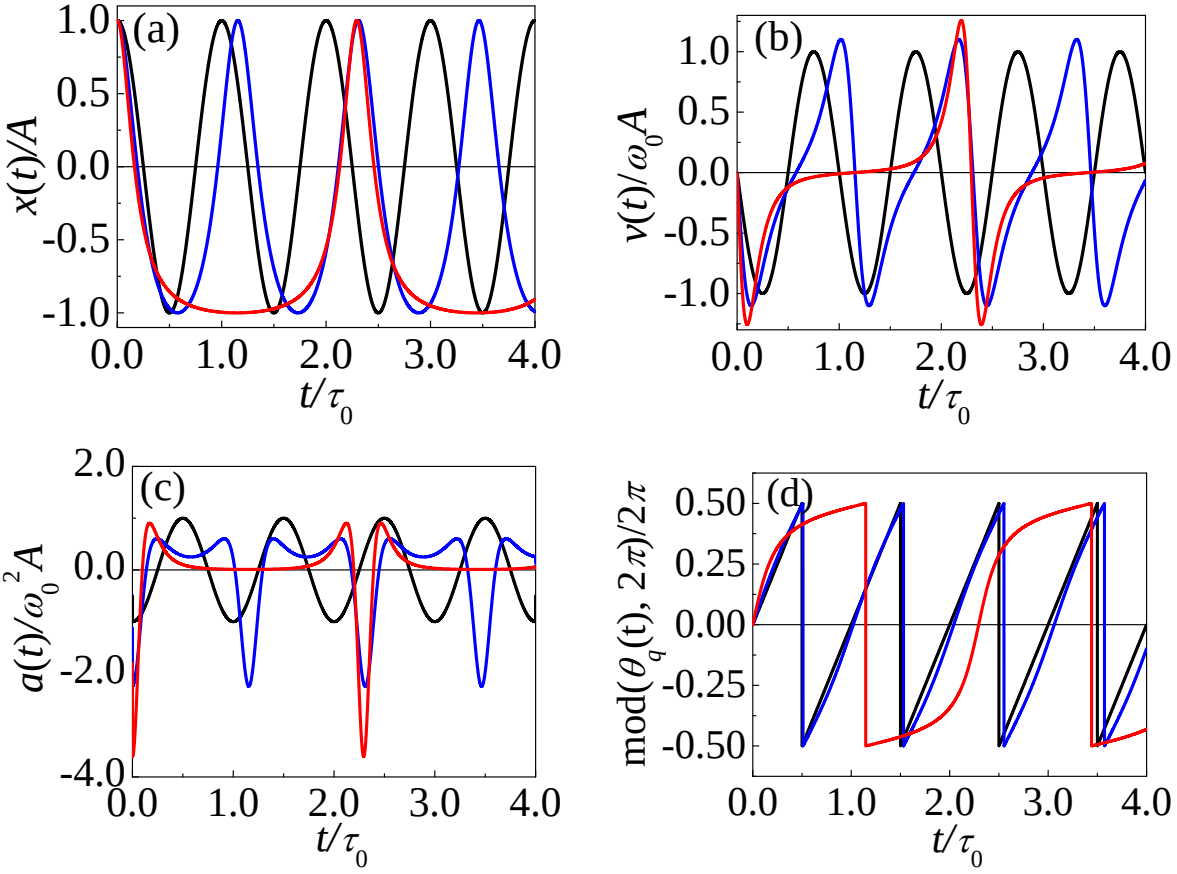


Figura 6.1: Evolução temporal da posição, velocidade, aceleração e fase de um oscilador com massa dependente da posição dada por Eq. (4.80) com $\delta = 0$, para $\gamma_q A = 0$ (preto), 0.5 (azul), e 0.9 (vermelho).

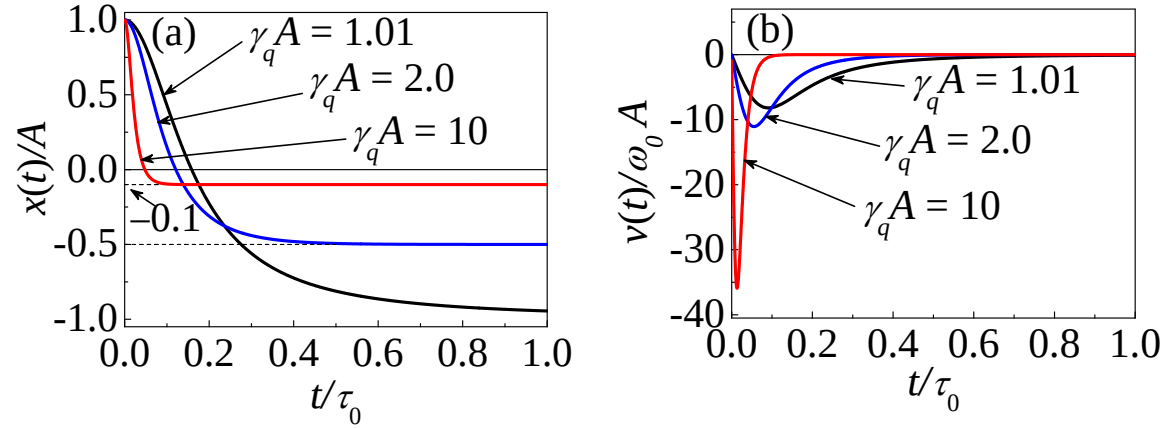


Figura 6.2: Evolução temporal da posição (a) e velocidade (b) de um oscilador com massa dependente da posição para valores de $\gamma_q A = 1.01$ (preto), 2.0 (azul) and 10 (vermelho).

$V(t)$ em função do tempo são dadas, respectivamente, por:

$$p(t) = m_0 \omega_0 A \left(\frac{\text{sen}[\theta_q(t)]}{1 + \gamma_q A \cos[\theta_q(t)]} \right), \tag{6.15a}$$

$$T(t) = \frac{1}{2} m_0 \omega_0^2 A^2 \mathrm{sen}^2[\theta_q(t)], \tag{6.15b}$$

e

$$V(t) = \frac{1}{2} m_0 \omega_0^2 A^2 \cos^2[\theta_q(t)]. \tag{6.15c}$$

A Figura 6.3 mostra a evolução temporal do momento linear $p(t)$. Podemos observar que o momento linear tem um comportamento periódico, cuja amplitude torna-se o tanto maior quanto maior o valor de $\gamma_q A$ no intervalo $(0, 1)$. A Figura 6.4 mostra a evolução temporal da (a) energia cinética $T(t)$ e (b) energia potencial $V(t)$. Da curva (a), observa-se que para valores de $\gamma_q A$ mais próximos de 1, vemos que o intervalo de tempo em torno do instante em que a energia cinética é máxima é cada vez menor do que o intervalo daquele em que a energia cinética é mínima. O efeito inverso ocorre com a energia potencial. Ressaltamos que devido ao efeito da massa dependente da posição, os instantes de tempo em que p e T são máximos não coincidem como no caso usual.

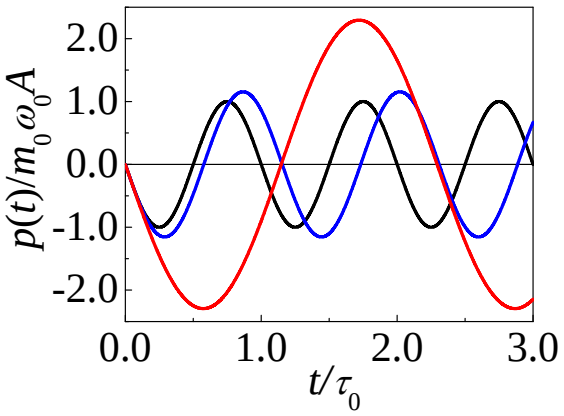


Figura 6.3: Evolução temporal do momento linear para oscilador harmônico simples com massa dependente da posição para $\gamma_q A = 0$ (preto), 0.5 (azul) e 0.9 (vermelho), e fase inicial $\delta = 0$.

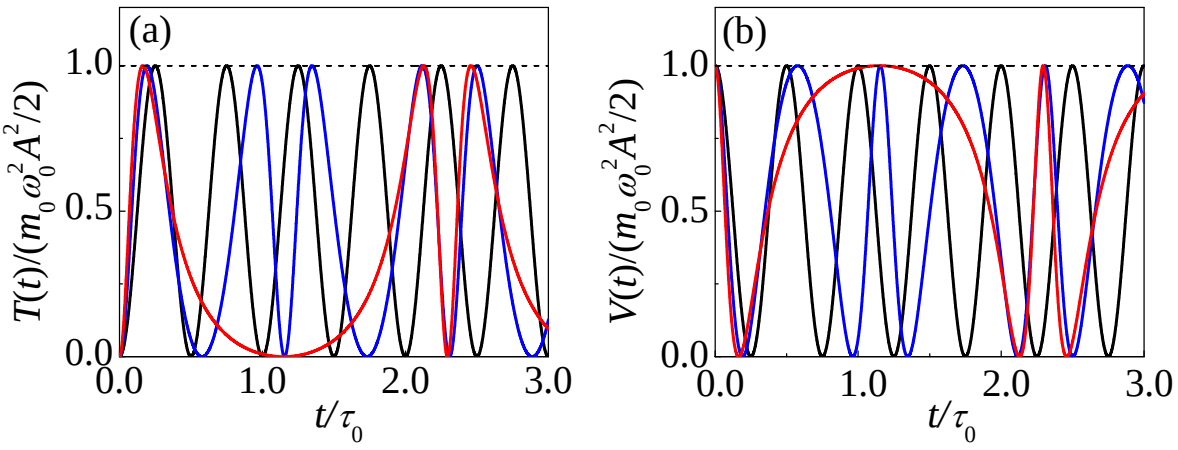


Figura 6.4: Evolução temporal da (a) energia cinética e (b) energia potencial para oscilador harmônico simples com massa dependente da posição para $\gamma_q A = 0$ (preto), 0.5 (azul) e 0.9 (vermelho), e fase inicial $\delta = 0$.

Analisemos a seguir algumas consequências da aplicação da transformação canônica clássica dada pela Eq. (4.153) sobre o oscilador harmônico com massa dependente da posição. Temos que a hamiltoniana $H(x,p)$ dada pela Eq. (6.1) é mapeada em

$$K(x_q,p_q)=\frac{p_q^2}{2m_0}+\frac{m_0\omega_0^2}{2\gamma_q^2}(e^{\gamma_q x_q}-1)^2, \tag{6.16}$$

que corresponde a uma partícula de massa constante m_0 sujeita ao potencial de Morse [251]:

$$V(x_q)=W_q(e^{-\alpha_q x_q}-1)^2, \tag{6.17}$$

onde $W_q\equiv m_0\omega_0^2/2\gamma_q^2$ é a energia de ligação, e $\alpha_q\equiv-\gamma_q$ é um parâmetro que controla a anamorticidade do potencial. Quando $\gamma_q\to 0$, a energia de ligação torna-se muito grande ($W_q\to\infty$), os efeitos de anarmoticidade diminuem, e o potencial de Morse se aproxima do potencial quadrático. A Figura 6.5 mostra o potencial de Morse (6.17) para diferentes valores de $\gamma_q A$. Consequentemente, a transformação canônica clássica Eq. (4.153) mapeia um sistema com massa dependente da posição dada pela Eq. (4.80) sujeita a um potencial quadrático no espaço de fase (x,p) em um sistema de massa constante sujeita a um potencial de Morse em um espaço de fase (x_q,p_q).

Desta forma, a solução dada pela Eq. (6.12) pode ser usada para reobter as solução das equações de movimento de uma partícula sujeita a um potencial de Morse [252]. Desde que $\gamma_q^2A^2=E/W_q$, a trajetória da partícula no espaço de fase (x_q,p_q) é fechada para $E<W_q$ ($|\gamma_q A|<1$) e aberta para $E>W_q$ ($|\gamma_q A|>1$). A Figura 6.6 mostra as trajetórias da partícula nos espaço de fase (x,p) e (x_q,p_q) para diferentes valores de $\gamma_q A>0$ em ambos casos de órbitas fechadas e abertas.

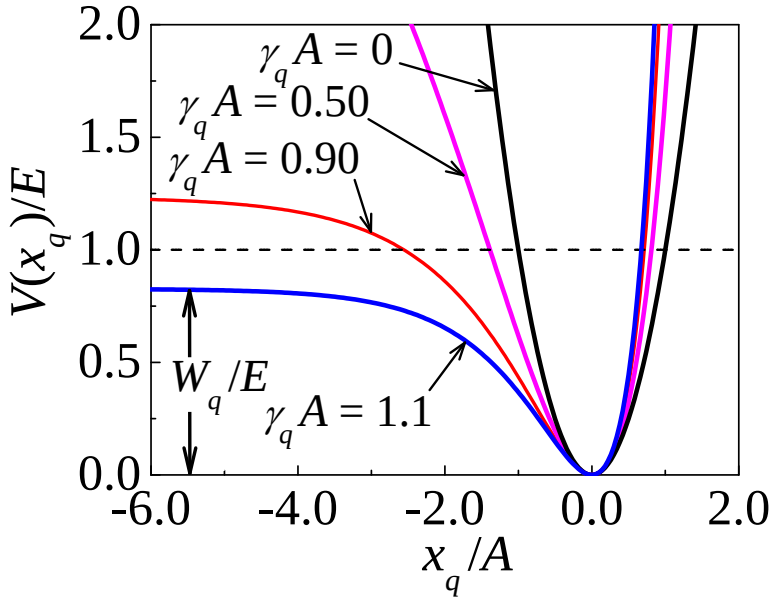


Figura 6.5: Potencial de Morse dado pela Eq. (6.17) em função de x_q/A para valores de $\gamma_q A=0$ (preto), 0.5 (magenta), 0.9 (vermelho) e 1.1 (azul).

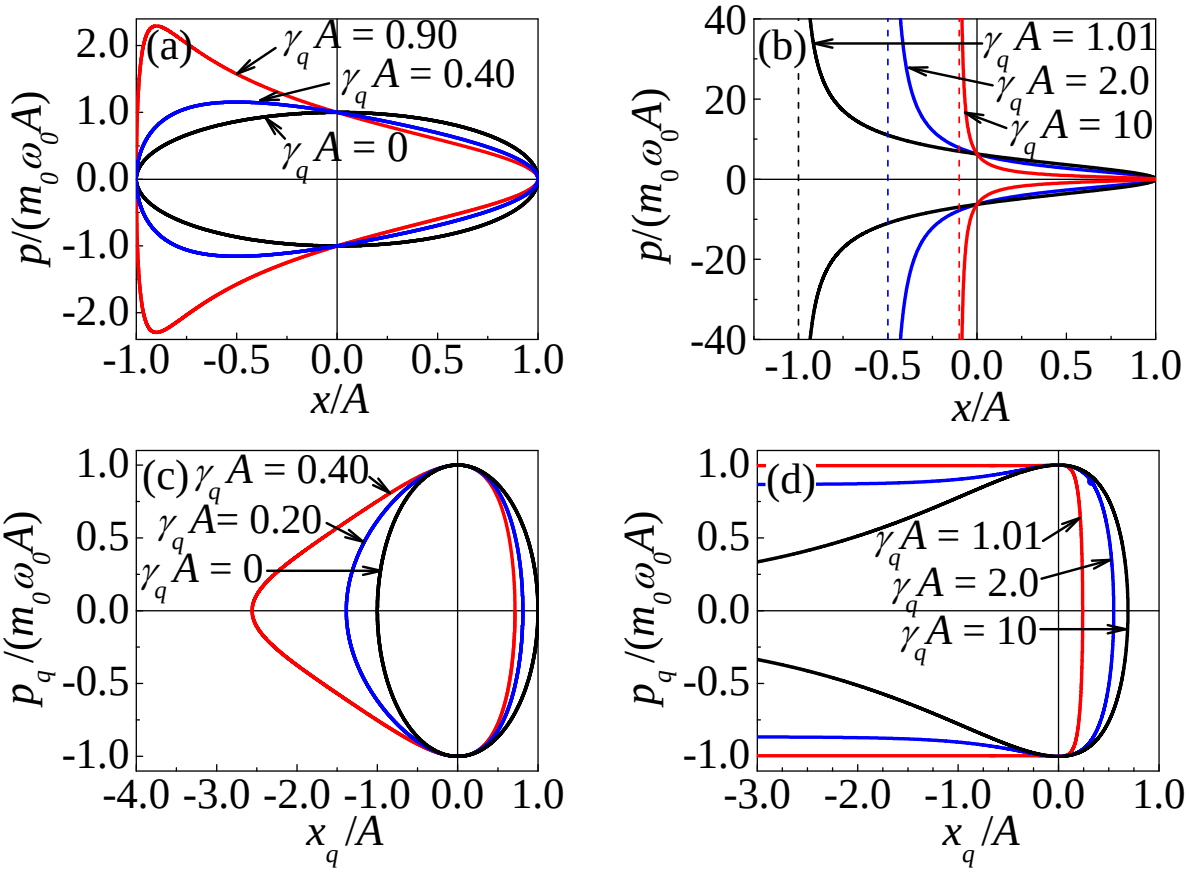


Figura 6.6: Na linha superior são mostrados os espaços de fase (x, p) para o oscilador harmônico simples de uma partícula com massa $m(x)$ da por (4.80) para diferentes valores de $\gamma_q A$, separados nos casos de: (a) órbitas abertas ($\gamma_q A < 1$), e (b) órbitas fechadas ($\gamma_q A > 1$). Na linha inferior são mostrados os espaços de fase (x_q, p_q) de uma partícula com massa constante m_0 submetida a um potencial de Morse (6.17), também separados nos casos de (c) órbitas abertas ($\gamma_q A < 1$), e (d) órbitas fechadas ($\gamma_q A > 1$); e obtitos através da transformação canônica (4.153) e da solução (6.12).

É interessante também obter a probabilidade $P_{\text{clássica}}(x)dx$ para a partícula do oscilador deformado ser localizada entre x e $x + dx$. Neste caso, temos

$$\begin{aligned} P_{\text{clássica}}(x)dx &\propto \frac{dx}{v} \\ &= \frac{Cdx}{(1+\gamma_q x)\sqrt{A^2 - x^2}}. \end{aligned} \tag{6.18}$$

onde utilizamos a equação a Eq. (6.5), e C é uma constante de normalização, obtida a partir de $\int_{-A}^{A} P_{\text{clássica}}(x)dx = 1$. Desta forma, segue que

$$C\int_{-A}^{A} \frac{dx}{(1+\gamma_q x)\sqrt{A^2 - x^2}} = 1. \tag{6.19}$$

Fazendo uma mudança de variável com $x(\theta_q) = A\cos\theta_q$ na integração acima, temos que:

$$\begin{aligned} 1 &= C\int_{\pi}^{0} \frac{(-A \text{ sen } \theta_q)d\theta_q}{(1+\gamma_q A\cos\theta_q)\sqrt{A^2 - A^2\cos\theta_q}} \\ &= C\int_{0}^{\pi} \frac{A \text{ sen } \theta_q d\theta_q}{(1+\gamma_q A\cos\theta_q)(A \text{ sen } \theta_q)} \\ &= \frac{C}{2}\int_{0}^{2\pi} \frac{d\theta_q}{1+\gamma_q A\cos\theta_q}, \end{aligned} \tag{6.20}$$

e utilizando a relação [253]

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{1+\varepsilon\cos\theta} = \frac{2\pi}{\sqrt{1-|\varepsilon|^2}}, \qquad (\varepsilon < 1) \tag{6.21}$$

obtém-se

$$C = \frac{1}{\pi}\sqrt{1-\gamma_q^2 A^2}. \tag{6.22}$$

Portanto, a densidade de probabilidade para o oscilador deformado é

$$P_{\text{clássica}}(x) = \frac{\sqrt{1-\gamma_q^2 A^2}}{\pi(1+\gamma_q x)\sqrt{A^2-x^2}}. \tag{6.23}$$

O caso usual $P(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{A^2-x^2}}$ é recuperado para $\gamma_q A = 0$. A Figura 6.7 mostra a densidade de probabilidade clássica do oscilador deformado para diferentes valores de $\gamma_q A$. Para todas as curvas, $x = \pm A$ são assíntotas verticais. Para valores de $\gamma_q A > 0$ ($\gamma_q A < 0$), a partícula possui uma probabilidade maior de ser encontrada em posições entre $-A < x < 0$ ($0 < x < A$), uma vez que sua massa é maior (menor) e sua velocidade consequentemente menor (maior) nesta região.

Do mesmo modo que foi feito no Capítulo 4 para uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito, obtemos os primeiros momentos da posição e do momento linear para a distribuição clássica dada pela Eq. (6.23) para o oscilador deformado. Conforme demonstraremos no final desta Seção, temos que:

$$\frac{\overline{x}}{A} = -\frac{1-\sqrt{1-\gamma_q^2 A^2}}{\gamma_q A}, \tag{6.24a}$$

$$\frac{\overline{x^2}}{A^2} = \frac{1-\sqrt{1-\gamma_q^2 A^2}}{\gamma_q^2 A^2}, \tag{6.24b}$$

$$\overline{p} = 0, \tag{6.24c}$$

$$\overline{p^2} = \frac{m_0^2\omega_0^2 A^2}{2(1-\gamma_q^2 A^2)}. \tag{6.24d}$$

onde $\lim_{\gamma_q\to 0}\overline{x} = 0$, $\lim_{\gamma_q\to 0}\overline{x^2} = A^2/2$, $\lim_{\gamma_q\to 0}\overline{p^2} = m_0^2\omega_0^2 A^2/2$, como esperado.

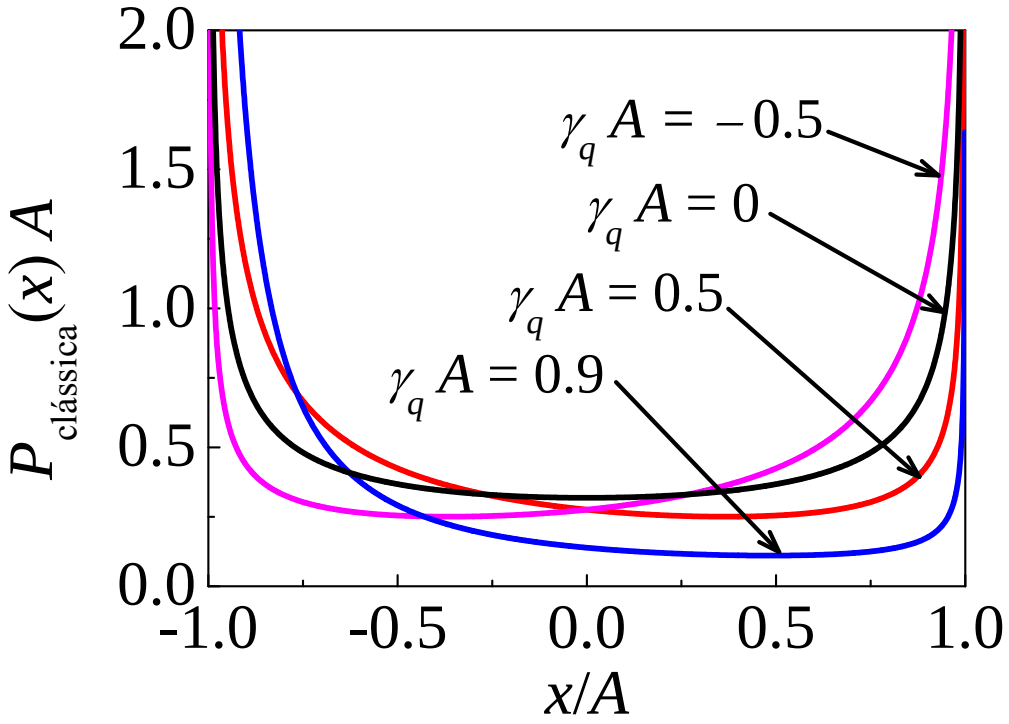


Figura 6.7: Densidade de probabilidade clássica do oscilador deformado para $\gamma_q A = 0$ (preto), 0.5 (vermelho), -0.5 (magenta) e 0.9 (azul). Para todas as curvas, temos que $x/A = \pm 1$ são assíntotas verticais.

Podemos ainda analisar algumas consequências dos efeitos da massa dependente da posição do oscilador deformado aqui apresentado. Por exemplo, os valores médios da energias potencial $\overline{V}$ e cinética $\overline{T}$ são dados por:

$$\begin{aligned} \overline{V} &= \frac{1}{2} m_0 \omega_0^2 \overline{x^2} \\ &= \frac{1}{2} m_0 \omega_0^2 A^2 \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \gamma_q^2 A^2}}{\gamma_q^2 A^2} \right), \end{aligned} \tag{6.25a}$$

e

$$\begin{aligned} \overline{T} &= E - \overline{V} \\ &= \frac{1}{2} m_0 \omega_0^2 A^2 \left[\frac{\sqrt{1 - \gamma_q^2 A^2} - (1 - \gamma_q^2 A^2)}{\gamma_q^2 A^2} \right] \\ &= \frac{1}{2} m_0 \omega_0^2 A^2 \sqrt{1 - \gamma_q^2 A^2} \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \gamma_q^2 A^2}}{\gamma_q^2 A^2} \right) \\ &= \sqrt{1 - \gamma_q^2 A^2}\, \overline{V}. \end{aligned} \tag{6.25b}$$

A Figura 6.8 ilustra os valores médios da energia potencial $\overline{V}$ e da energia cinética $\overline{T}$ do oscilador deformado em função do parâmetro de deformação γ_q. Quando $\gamma_q A = 0$, reobtemos $\overline{V} = \overline{T}$, *i.e.*, as energias potencial e cinética médias são iguais e a energia do oscilador divide-se igualmente entre essas duas durante cada período de oscilação, em acordo com o teorema de Virial [142]. Quanto maior o valor do módulo de $\gamma_q A$, observamos que a energia potencial média torna-se maior em relação a energia cinética média. Para $|\gamma_q A| \to 1$, temos que a energia do oscilador tende a se distribuir integralmente na forma de energia potencial. Isto está relacionado ao fato de que quando $\gamma_q A \to \pm 1$, a partícula encontra-se na região próxima de $x = \mp A$ durante intervalos de tempo maiores, o que tende a aumentar a energia potencial média $\overline{V}$ em relação a energia cinética média $\overline{T}$.

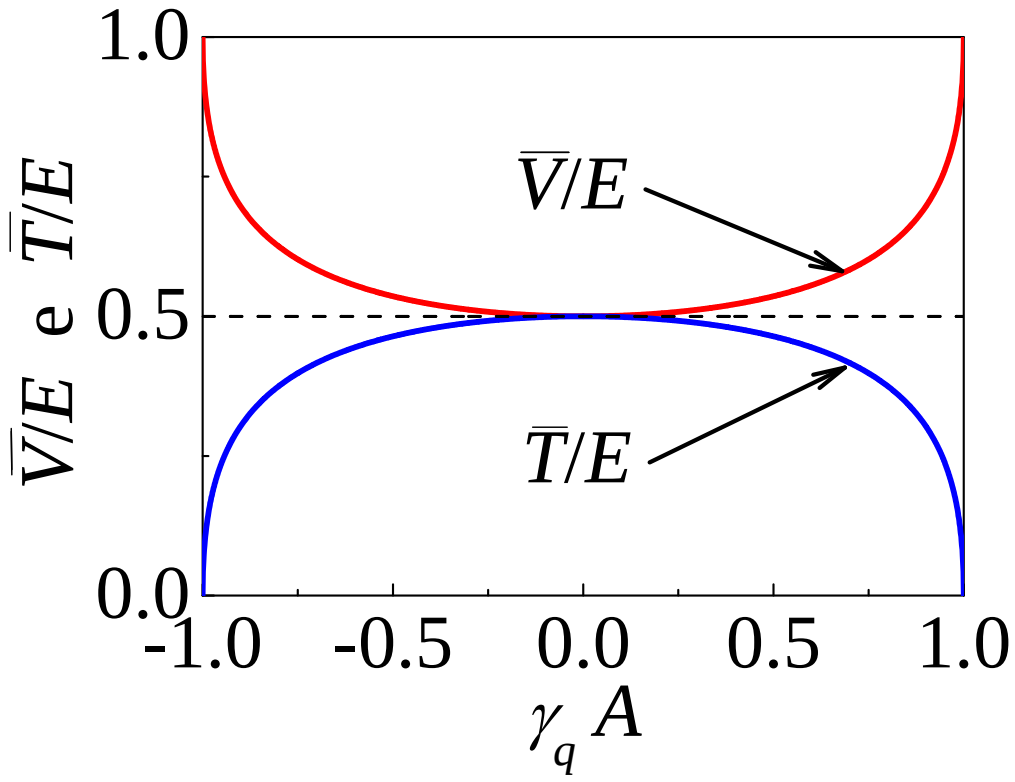


Figura 6.8: Valores médios da energia potencial ($\overline{V}$) e energia cinética ($\overline{T}$) do oscilador deformado em função parâmetro $\gamma_q A$. Temos que $\overline{T} = \overline{V} = E/2$ para $\gamma_q A = 0$.

A Figura 6.9 mostra a composição de dois osciladores com massa dependente da posição — figuras de Lissajous deformadas — para diferentes valores de $\gamma_q A$. Sejam ω_{0x} e ω_{0y} as frequências de oscilação para o caso $\gamma_q A = 0$, as figuras de Lissajous deformadas foram obtidas para a razão $\omega_{0y}/\omega_{0x} = 4/3$, e com diferença das constantes de fase $\delta_y - \delta_x = \pi/2$. Notamos que quanto maior o valor de $\gamma_q A$ no intervalo $(0, 1)$, maior é a deformação da figura em relação ao caso usual $\gamma_q A = 0$. Para $\gamma_q A \to 1$, vemos que o laço fica mais próximo das linhas $x = -1$ e $y = -1$, em virtude da massa nas proximidades dessas regiões ser maior.

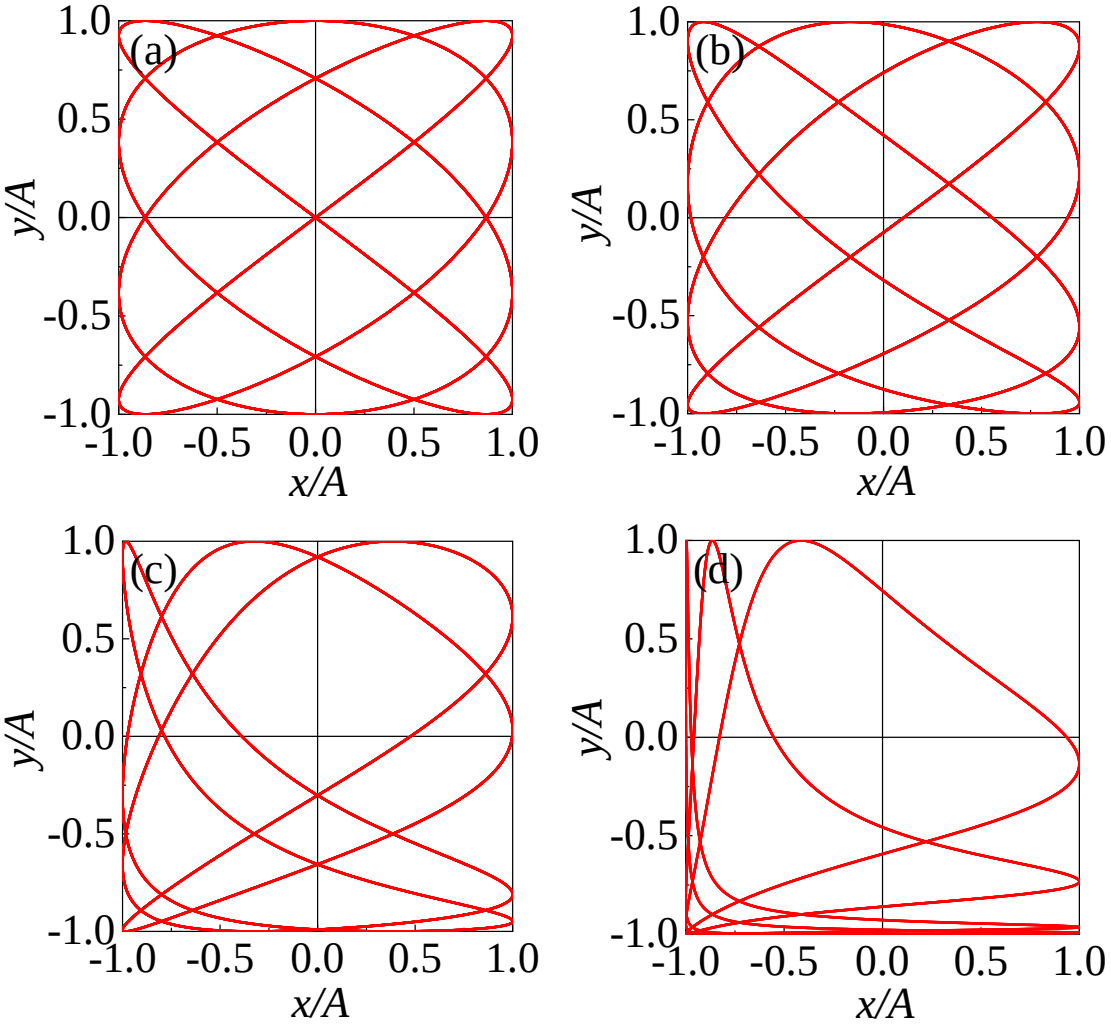


Figura 6.9: Figuras de Lissajous da composição de dois osciladores deformados com diferença de fase $\delta_y - \delta_x = \pi/2$ e razão entre as frequências $\omega_{0y}/\omega_{0x} = 4/3$ com valores de $\gamma_q A$ iguais (a) 0 (caso usual), (b) 0.3 , (c) 0.5 e (d) 0.9.

A transformação canônica (4.153) pode ser aplicada para outros osciladores. Por exemplo, consideremos que a partícula com massa dependente da posição dada por (4.80) está submetida a um potencial anarmônico

$$V(x) = \frac{m_0\omega_0^2}{2\gamma_q^2}\ln^2(1+\gamma_q x). \tag{6.26}$$

Este é um potencial confinante para $E > 0$. A Figura 6.10 ilustra o potencial acima para diferentes valores do parâmetro $\gamma_q A$, onde A é a amplitude de oscilação para o caso usual $\gamma_q = 0$ (potencial quadrático). Observa-se que quanto maior o valor de $\gamma_q A$, maior é a anamorticidade do potencial.

Neste caso, a hamiltoniana

$$H(x,p) = \frac{(1+\gamma_q x)^2 p^2}{2m_0} + \frac{m_0\omega_0^2}{2\gamma_q^2}\ln^2(1+\gamma_q x) \tag{6.27}$$

é mapeada na hamiltoniana de um oscilador harmônico simples em um espaço deformado:

$$K(x_q, p_q) = \frac{p_q^2}{2m_0} + \frac{m_0\omega_0^2 x_q^2}{2}. \tag{6.28}$$

Para o oscilador que discutimos anteriormente, vimos que a partícula no espaço de fase usual (x, p) submetida a um potencial quadrático, por sua vez simétrico, e com massa dependente da posição dada por (4.80), que é espacialmente assimétrica, é mapeada através da transformação canônica (4.153) em uma partícula de massa constante no espaço de fase (x_q, p_q) submetida a um potencial de Morse, e portanto assimétrico. Desta forma, a assimetria da massa em relação à posição no espaço usual leva à assimetria (ou anamorticidade) do potencial no espaço deformado.

Por outro lado, considerando a partícula de massa (4.80) submetida ao potencial assimétrico (6.26) no espaço de fase usual (x, p), esta é mapeada em um oscilador harmônico simples no espaço de fase deformado (x_q, p_q) através da transformação canônica (4.153). A solução do sistema (6.27) foi analisada em ambos formalismos clássico e quântico em [242]. No formalismo quântico, o espectro deste oscilador é evidentemente idêntico ao do oscilador harmônico simples, $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_0$, ou seja, a anamorticidade do potencial (6.26) é compensada pelo efeito da massa dependente da posição.

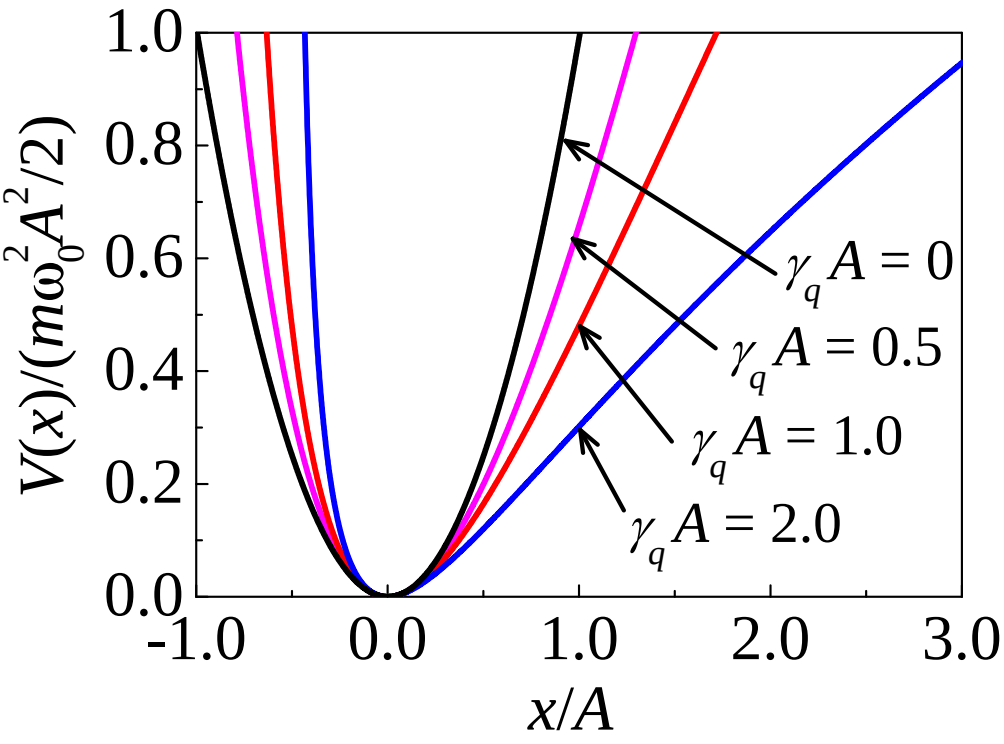


Figura 6.10: Potencial anarmônico dado pela Eq. (6.26) em função de x/A para valores de $\gamma_q A = 0$ (preto), 0.5 (magenta), 1.0 (vermelho) e 2.0 (azul).

Por fim, ressaltamos que a transformação canônica (4.153) poderia ser utilizada para estudar partículas com massa efetiva submetidas a outros potenciais anarmônicos. Consideremos o potencial exótico

$$V(x) = 4U_0 \left(\frac{\gamma_q \sigma}{\ln(1+\gamma_q x)} \right)^6 \left[\left(\frac{\gamma_q \sigma}{\ln(1+\gamma_q x)} \right)^6 - 1 \right], \tag{6.29}$$

onde U_0 e σ são constantes positivas com unidades de energia e comprimento, respectivamente (a Figura 6.11 ilustra o potencial acima para valores de $\gamma_q \sigma = 0$, -0.5, 1.0 e 2.0). Temos que a hamiltoniana

$$H(x,p) = \frac{(1+\gamma_q x)^2 p^2}{2m_0} + 4U_0 \left(\frac{\gamma_q \sigma}{\ln(1+\gamma_q x)} \right)^6 \left[\left(\frac{\gamma_q \sigma}{\ln(1+\gamma_q x)} \right)^6 - 1 \right] \tag{6.30}$$

é mapeada em

$$K(x_q, p_q) = \frac{p_q^2}{2m_0} + 4U_0 \left[\left(\frac{\sigma}{x_q} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{x_q} \right)^6 \right], \tag{6.31}$$

cujo potencial corresponde ao de Lennard-Jones [254]

$$V(x_q) = 4U_0 \left[\left(\frac{\sigma}{x_q} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{x_q} \right)^6 \right]. \tag{6.32}$$

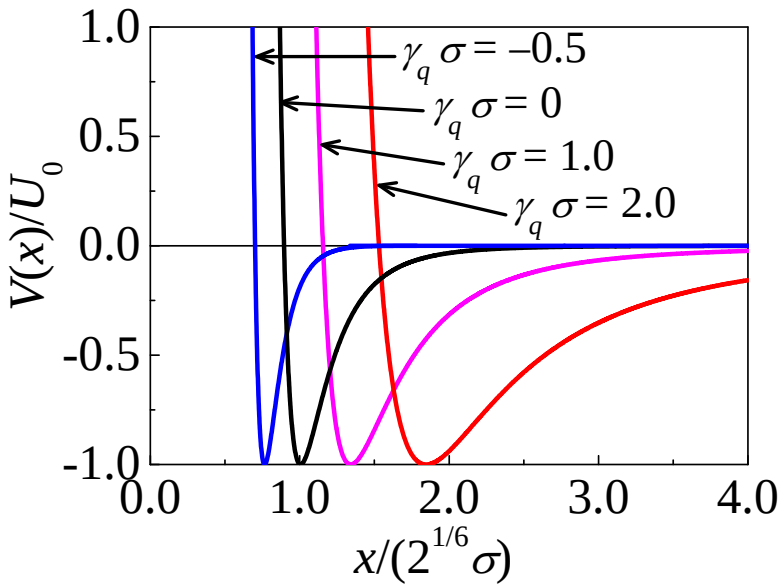


Figura 6.11: Gráficos do potencial de Lennard-Jones modificado dado pela Eq. (6.29) em função de x/σ para valores de $\gamma_q \sigma = 0$ (preto), 1.0 (magenta), 2.0 (vermelho) e -0.5 (azul). Para $\gamma_q \sigma > 0$ ($\gamma_q \sigma < 0$), a posição de equilíbrio torna-se maior (menor) do que aquela do caso usual ($x_0 = 2^{1/6}\sigma$), assim como um alargamento (uma contração) da curva em torno do ponto de energia potencial mínima.

Demonstração das equações (6.24):

A seguir façamos a demonstração dos valores médios de $\overline{x}$, $\overline{x^2}$, $\overline{p}$ e $\overline{p^2}$ para o oscilador deformado clássico discutido nesta Seção.

• Eq. (6.24a):

O valor médio da posição da partícula é dado por:

$$\begin{aligned}\overline{x} &= \int_{-A}^{A} x P_{\text{clássica}}(x)dx \\ &= \int_{-A}^{A} \frac{x\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{\pi(1+\gamma_q x)\sqrt{A^2-x^2}}dx. \end{aligned} \tag{6.33}$$

Divindo ambos os lados da equação acima por A, e fazendo a mudança de variável $x = A\cos\theta_q$, segue que:

$$\begin{aligned}\frac{\overline{x}}{A} &= \frac{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{A}\int_{\pi}^{0}\frac{A\cos\theta_q}{\pi(1+\gamma_q A\cos\theta_q)(A\text{ sen }\theta_q)}(-A\text{ sen }\theta_q)d\theta_q \\ &= \frac{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{\cos\theta_q}{1+\gamma_q A\cos\theta_q}d\theta_q \\ &= \frac{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{2\pi\gamma_q A}\int_0^{2\pi}\frac{-1+1+\gamma_q A\cos\theta_q}{1+\gamma_q A\cos\theta_q}d\theta_q \\ &= \frac{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{2\pi\gamma_q A}\left(\int_0^{2\pi}d\theta_q - \int_0^{2\pi}\frac{d\theta_q}{1+\gamma_q A\cos\theta_q}\right) \\ &= \frac{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{2\pi\gamma_q A}\left(2\pi - \frac{2\pi}{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}\right) \\ &= -\frac{1-\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{\gamma_q A}, \end{aligned} \tag{6.34}$$

onde obtemos a (6.24a).

• Eq. (6.24b):

O valor médio do quadrado da posição $\overline{x^2}$ é

$$\begin{aligned}\overline{x^2} &= \int_{-A}^{A} x^2 P_{\text{clássica}}(x)dx \\ &= \int_{-A}^{A} \frac{x^2\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{\pi(1+\gamma_q x)\sqrt{A^2-x^2}}dx. \end{aligned} \tag{6.35}$$

Dividindo ambos os lados da equação acima por A^2, e fazendo $x = A\cos\theta_q$, temos:

$$\begin{aligned}
\frac{\overline{x^2}}{A^2} &= \frac{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{A^2}\int_{\pi}^{0}\frac{A^2\cos^2\theta_q}{\pi(1+\gamma_qA\cos\theta_q)(A\ \text{sen}\ \theta_q)}(-A\ \text{sen}\ \theta_q)d\theta_q \\
&= \frac{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{\cos^2\theta_q}{1+\gamma_qA\cos\theta_q}d\theta_q \\
&= \frac{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{2\pi\gamma_qA}\int_0^{2\pi}\frac{1-\text{sen}^2\ \theta_q}{1+\gamma_qA\cos\theta_q}d\theta_q \\
&= \frac{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{2\pi}\left(\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_q}{1+\gamma_qA\cos\theta_q}-\int_0^{2\pi}\frac{\text{sen}^2\ \theta_q d\theta_q}{1+\gamma_qA\cos\theta_q}\right). \qquad (6.36)
\end{aligned}$$

A primeira integral acima pode ser obtida pela equação (6.21), e a segunda é obtida a partir da integral [253]

$$\int_0^{2\pi}\frac{\text{sen}^2\ \theta}{1+\varepsilon\cos\theta}d\theta = \frac{2\pi(1-\sqrt{1-\varepsilon^2})}{\varepsilon^2} \qquad (|\varepsilon|<1), \qquad (6.37)$$

logo, temos:

$$\begin{aligned}
\frac{\overline{x^2}}{A^2} &= \frac{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{2\pi}\left[\frac{2\pi}{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}-\frac{2\pi(1-\sqrt{1-\gamma_q^2A^2})}{\gamma_q^2A^2}\right] \\
&= \frac{1-\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{\gamma_q^2A^2}. \qquad (6.38)
\end{aligned}$$

• Eq. (6.24c):

Para calcular o valor médio do momento linear, $\overline{p}$, observemos que a partícula em uma posição x pode ter momento linear igual a $p_+ = \frac{m_0\omega_0}{1+\gamma_qx}\sqrt{A^2-x^2} > 0$ ou $p_- = -\frac{m_0\omega_0}{1+\gamma_qx}\sqrt{A^2-x^2} < 0$ com probabilidades iguais $\frac{1}{2}P_{\text{clássica}}(x)dx$. Segue que o valor médio do momento linear é

$$\begin{aligned}
\overline{p} &= \int_{-A}^{A}p(x)P_{\text{clássica}}(x)dx \\
&= \frac{1}{2}\int_{-A}^{A}p_+P_{\text{clássica}}(x)dx+\frac{1}{2}\int_{-A}^{A}p_-P_{\text{clássica}}(x)dx \\
&= \frac{1}{2}\int_{-A}^{A}\frac{m\omega_0\sqrt{A^2-x^2}}{1+\gamma_qx}P_{\text{clássica}}(x)dx-\frac{1}{2}\int_{-A}^{A}\frac{m\omega_0\sqrt{A^2-x^2}}{1+\gamma_qx}P_{\text{clássica}}(x)dx \\
&= 0. \qquad (6.39)
\end{aligned}$$

• Eq. (6.24d):

Por fim, a partir da Eq. (5.2), calculemos o valor médio do quadrado do momento linear $\overline{p^2}$. Sendo

$$p^2 = \frac{m_0^2\omega_0^2(A^2-x^2)}{(1+\gamma_q x)^2},$$

temos que

$$\begin{aligned}
\overline{p^2} &= \int_{-A}^{A}[p(x)]^2 P_{\text{clássica}}(x)dx \\
&= \int_{-A}^{A}\frac{m_0^2\omega_0^2(A^2-x^2)}{(1+\gamma_q x)^2}\frac{\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{\pi(1+\gamma_q x)\sqrt{A^2-x^2}}dx \\
&= \frac{m_0^2\omega_0^2\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{\pi}\int_{-A}^{A}\frac{\sqrt{A^2-x^2}}{(1+\gamma_q x)^3}dx. \qquad (6.40)
\end{aligned}$$

Fazendo mais uma vez a mudança de variável $x = A\cos\theta_q$, tem-se que

$$\begin{aligned}
\overline{p^2} &= \frac{m_0^2\omega_0^2\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{\pi}\int_{\pi}^{0}\frac{\text{sen }\theta_q}{(1+\gamma_q A\cos\theta_q)^3}(-A\text{ sen }\theta_q)d\theta_q \\
&= \frac{m_0^2\omega_0^2A^2\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{2\pi}\int_{0}^{2\pi}\frac{\text{sen}^2\,\theta_q}{(1+\gamma_q A\cos\theta_q)^3}d\theta_q. \qquad (6.41)
\end{aligned}$$

Derivando ambos os lados da Eq. (6.21) em relação à ε, obtém-se

$$\int_0^{2\pi}\frac{\text{sen}^2\,\theta}{(1+\varepsilon\cos\theta)^3}d\theta = \frac{\pi}{(1-\varepsilon^2)^{3/2}} \qquad (|\varepsilon|<1). \qquad (6.42)$$

A partir disso, obtemos que a Eq. (6.41) torna-se:

$$\begin{aligned}
\overline{p^2} &= \frac{m_0^2\omega_0^2A^2\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}}{2\pi}\frac{\pi}{(1-\gamma_q^2A^2)^{3/2}} \\
&= \frac{m_0^2\omega_0^2A^2}{2(1-\gamma_q^2A^2)}, \qquad (6.43)
\end{aligned}$$

como queríamos demonstrar.

6.2 Oscilador harmônico amortecido q-deformado

O modelo mais simples de um oscilador harmônico amortecido no formalismo clássico apresenta, além da força restauradora linear, uma força de viscosidade proporcional à velocidade da partícula: $f_r = -m_0\lambda v$, onde $\lambda > 0$ é a constante de amortecimento. Consequentemente, fazendo $\lambda = 2\beta$ e considerando a força de viscosidade, obtém-se a equação de movimento para o oscilador harmônico amortecido

$$\ddot{x} + 2\beta\dot{x} + \omega_0^2 x = 0. \tag{6.44}$$

Extensões deste modelo aparecem em vários outros problemas da física, desde mecânica quântica [255, 256] a modelos cosmológicos inflacionários [257].

Sistemas submetidos a forças de viscosidade podem ser discutidos através do formalismo lagrangiano a partir de diferentes considerações, de modo que uma discussão pertinente é determinar a expressão da lagrangiana que leva à equação de movimento de um oscilador harmônico amortecido. No livro *The Theory Sound*, o físico inglês John William Strutt (Lord Rayleigh) introduziu *ad hoc* na equação de Euler-Lagrange um termo relacionado a forças dissipativas [258]:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{x}} = 0, \tag{6.45}$$

onde $\mathcal{F}$ é chamada de função de dissipação de Rayleigh [141]. Por exemplo, seja a lagrangiana de um oscilador harmônico simples $L = \frac{1}{2}m_0\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2$, e $\mathcal{F} = \frac{1}{2}m_0\lambda\dot{x}^2$, com $\lambda = 2\beta$, a equação acima nos leva à equação de movimento de um oscilador harmônico amortecido unidimensional (6.44).

Outros métodos podem ser encontrados na litetatura para se obter a equação de movimento (6.44) a partir do princípio variacional: aplicação de uma lagrangiana em função de coordenadas e velocidades complexas [259], ou lagragiana com alguma dependência temporal específica [260].

Mais especificamente, para este segundo exemplo, os efeitos de amortecimento são incorporados ao oscilador harmônico simples através de um fator exponencial na lagrangiana do caso usual, e é chamada comumente de lagrangiana de Bateman. Em [255, 256], o respectivo problema no formalismo quântico foi analisado, e no qual o operador hamiltoniano é chamado de hamiltoniano CK, em referência a Caldirola e Kanai. De acordo com Bassalo *et al.* em [235], não existem dúvidas que estas formulações lagrangiana ou hamiltoniana representam um modelo relevante do ponto de vista metodológico, apesar de alguns conceitos ambíguos na sua aplicação a sistemas físicos nos formalismos clássico e quântico.

Ademais, devido ao caráter complicado das forças de atrito, um grande número de mo-

dificações no termo de amortecimento podem ser propostas. Algumas destas modificações são feitas através da troca da derivada usual na Eq. (6.44) por derivadas fracionárias [261, 262] e q-derivada de Jackson [263].

No contexto da q-álgebra associada a mecânica estatística não extensiva, alguns osciladores deformados tem sido investigados. Por exemplo, em [264], os autores propuseram uma lagrangiana que leva a sistemas clássicos com coeficiente de viscosidade dependentes do tempo. Neste caso, uma lagrangiana de Bateman q-deformada, com o fator exponencial substituído por um fator q-exponencial, recupera o caso usual no limite $q \to 1$. Em [265, 266], a dinâmica não extensiva para um sistema quântico dissipativo é descrito por um hamiltoniano CK deformada.

Propomos aqui um oscilador harmônico amortecido clássico deformado utilizando a q-derivada dual (2.116), que está associado a sistemas com massa dependente da posição e um coeficiente de viscosidade dependente da posição. Apesar de nos restringirmos ao formalismo clássico, desenvolvimentos da quantização para este problema podem vir a ser implementados.

Portanto consideremos a lagrangiana de um oscilador harmônico com massa dependente da posição $m(x)$ dada por

$$L = \frac{1}{2}m(x)\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2, \tag{6.46}$$

e uma função de dissipação de Rayleigh deformada

$$\mathcal{F}_q = \frac{1}{2}m_0\lambda_q(x)\dot{x}^2. \tag{6.47}$$

A partir da Eq. (6.45), obtemos a equação de movimento

$$m(x)\ddot{x} + \frac{1}{2}m'(x)\dot{x} + m_0\lambda_q(x)\dot{x} + kx = 0. \tag{6.48}$$

Para a função $m(x) = m_0/(1+\gamma_q x)^2$ e com $\lambda_q(x) = 2\beta/(1+\gamma_q x)$, a equação acima pode ser escrita em termos da q-derivada dual (2.116):

$$\widetilde{D}^2_{\gamma_q}x + 2\beta\widetilde{D}_{\gamma_q}x + \omega_0^2 x = 0. \tag{6.49}$$

Esta equação de movimento corresponde a de uma partícula de massa dependente da posição submetida a uma força restauradora $-kx$ e uma força de viscosidade $f_{r(q)} = -m_0\lambda_q(x)\dot{x} = -2m_0\beta\dot{x}/(1+\gamma_q x)$, e que recupera o caso do oscilador harmônico amortecido usual (6.44) para $\gamma_q = 0$.

A solução da equação acima foi obtida numericamente através da aplicação do método

de Runge-Kutta de quarta ordem [267] ao sistema de equações equivalente

$$\begin{cases} \dot{x} &= v, \\ \dot{v} &= \dfrac{\gamma_q v^2}{1+\gamma_q x} - 2\beta(1+\gamma_q x)v - (1+\gamma_q x)^2\omega_0^2 x. \end{cases} \tag{6.50}$$

A Figura 6.12 mostra a evolução temporal da posição e da velocidade do oscilador amortecido deformado para $\gamma_q A = 0.90$, e razão $\beta/\omega_0 = 0.2$, 1.0 e 2.0. Os casos usuais $\gamma_q A = 0$ para cada uma das diferentes razões β/ω_0 também são mostrados. Observamos que as curvas $x(t)$ e $v(t)$ têm um comportamento similar aos casos usuais de subamortecimento ($\beta < \omega_0$), amortecimento crítico ($\beta = \omega_0$) e superamortecimento ($\beta > \omega_0$), no entanto o efeito da massa dependente da posição leva a um decaimento mais lento para o equilíbrio do sistema.

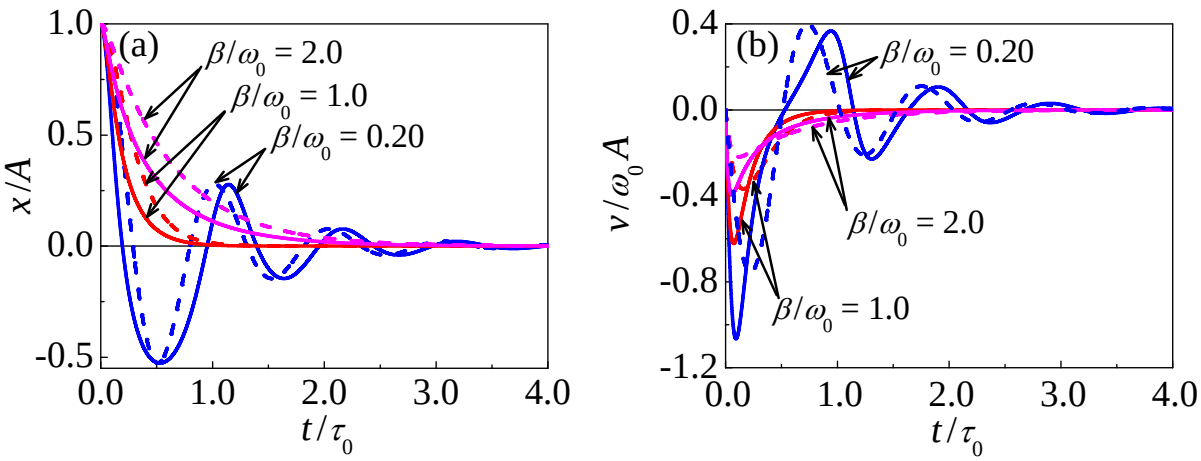


Figura 6.12: Funções da (a) posição $x(t)$ e (b) velocidade $v(t)$ do oscilador amortecido deformado com $\gamma_q A = 0.90$, e $\beta/\omega_0 = 0.20$, 1.0 e 2.0. As curvas apresentam comportamentos similares aos casos de subamortecimento ($\beta/\omega_0 < 1$), amortecimento crítico ($\beta/\omega_0 = 1$) e superamortecimento ($\beta/\omega_0 > 1$). Também são mostradas as respectivas curvas para o oscilador com massa constante ($\gamma_q A = 0$) para comparação (curvas tracejadas).

A Figura 6.13 mostra o diagrama de fase (x, v) e o espaço de fase (x, p) do oscilador harmônico amortecido deformado para $\gamma_q A = 0.90$, e razão $\beta/\omega_0 = 0.1$, e cuja condição inicial é $x_0 = A$ e $v_0 = 0$. O caso sem amortecimento, mas com mesmo valor de $\gamma_q A$, também é mostrado para comparação. Devido ao efeito da massa dependente da posição vemos que o diagrama de fase e o espaço de fase tem formas geométricas diferentes. Notemos que no caso de amortecimento, as curvas espiram até a posição de equilíbrio, de modo que $(0, 0)$ em ambos espaço e diagrama de fase é o atrator para a dinâmica do sistema.

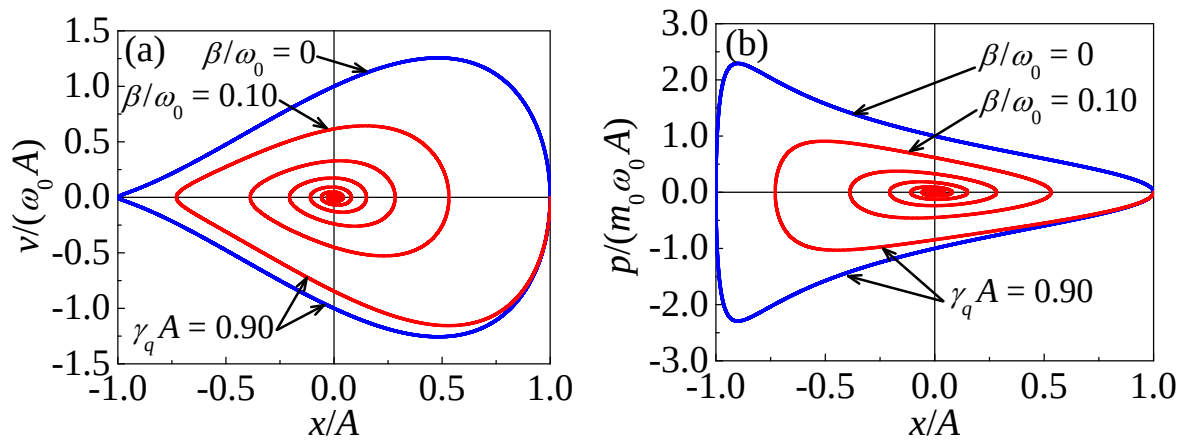


Figura 6.13: Diagrama de fase (a) e espaço de fase (b) do oscilador amortecido deformado para valores de $\gamma_q A = 0.90$ e $\beta/\omega_0 = 0.10$. O caso do oscilador deformado sem amortecimento é mostrado para comparação. As formas do diagrama de fase e do espaço de fase são diferentes devido ao efeito da massa dependente da posição. No caso de amortecimento, as curvas evoluem até o atrator $(0, 0)$ em ambos espaço e diagrama de fase.

A taxa de dissipação de energia do sistema é dada por:

$$\begin{aligned}
\frac{dE}{dt} &= \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}m(x)\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2\right) \\
&= \frac{1}{2}m'(x)\dot{x}^3 + m(x)\dot{x}\ddot{x} + kx\dot{x} \\
&= \left(\frac{1}{2}m'(x)\dot{x}^2 + m(x)\ddot{x} + kx\dot{x}\right)\dot{x} \\
&= \left(\frac{1}{2}m'(x)\dot{x}^3 - \frac{1}{2}m'(x)\dot{x}^2 - m_0\lambda_q(x)\dot{x}\right)\dot{x} \\
&= -m_0\lambda_q(x)\dot{x}^2. \qquad (6.51)
\end{aligned}$$

Uma vez que a Eq. (6.49) está associada a $\lambda_q(x) = 2\beta/(1 + \gamma_q x)$, temos que:

$$\frac{dE}{dt} = -\left(\frac{2\beta m_0}{1 + \gamma_q x}\right)\dot{x}^2. \qquad (6.52)$$

A Figura 6.14 mostra a evolução temporal da energia E e da taxa de dissipação de energia dE/dt para $\gamma_q A = 0.90$ e $\beta/\omega_0 = 0.10$. O caso usual ($\gamma_q A = 0$) para o mesmo valor de β/ω_0 é mostrado para comparação. Observamos que similarmente ao caso usual, a taxa de dissipação de energia dE/dt torna-se nula quando a partícula atinge máxima amplitude e tem velocidade nula; no entanto, dE/dt não é um máximo quando a velocidade é máxima.

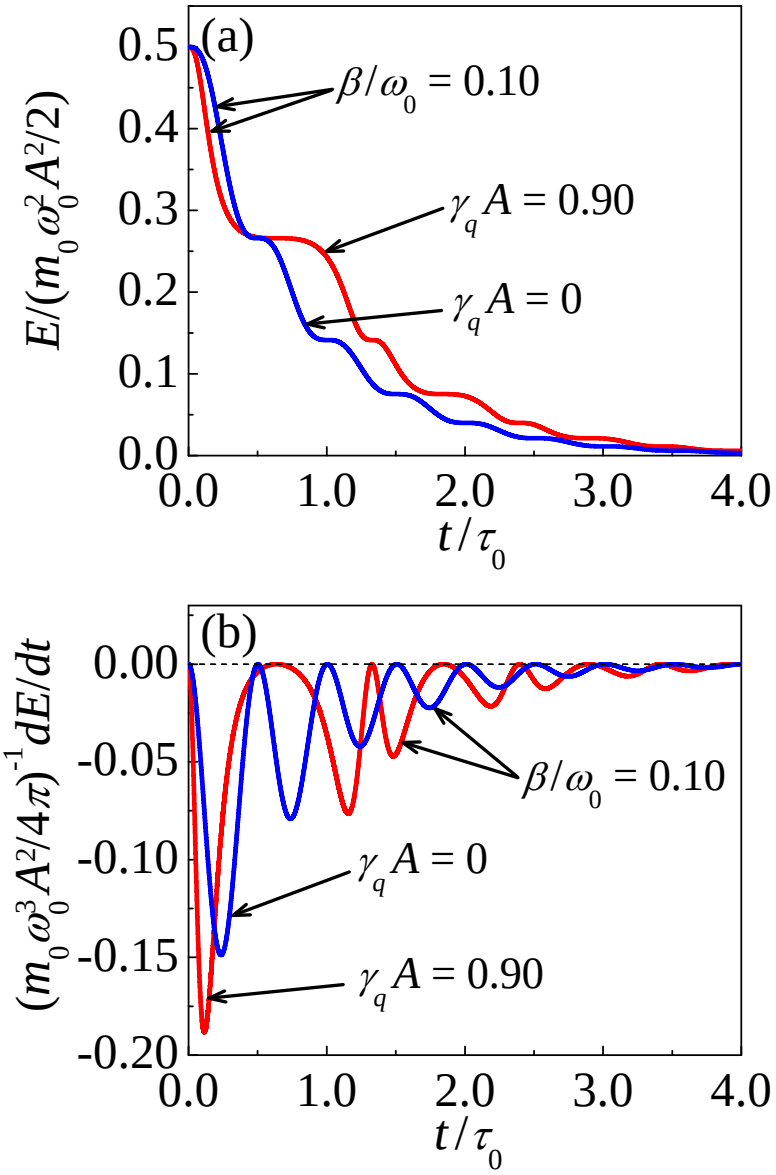


Figura 6.14: (a) Energia total ($E = T + V$) e (b) taxa de dissipação de energia dE/dt do oscilador amortecido deformado para $\gamma_q A = 0.90$ e $\beta/\omega_0 = 0.10$. O caso $\gamma_q A = 0$ é mostrado para comparação.

6.3 Variáveis ação e ângulo para o oscilador q-deformado

O estudo de sistemas periódicos são de grande importância em diversos ramos da física. As frequências destes sistemas podem ser obtidas através da teoria de Hamilton-Jacobi através das variáveis ação e ângulo [141], não sendo necessário obter as soluções analíticas do movimento.

Durante a fase de transição da "velha teoria quântica" marcada pela hipótese de Planck (1900) para a quantização da energia até formulação da teoria quântica com as

contribuições de Heisenberg, Born, Dirac e Schrödinger, um método bastente comum para se obter os níveis de energia de sistemas microscópicos consitia na condição de Bohr-Sommerfeld, onde a variável ação deveria ser proporcional a múltiplos inteiros da constante de Planck h divida por 2π, isto é,

$$\mathcal{I} = \frac{1}{2\pi}\oint \vec{p}\cdot d\vec{r} = \nu\hbar, \tag{6.53}$$

na qual ν é em geral um número inteiro não nulo. No entanto, para potenciais com duplo ponto de retorno, por exemplo, o potencial quadrático que estamos interessados, o número ν deve ser um semi-inteiro. Estas propriedades podem ser obtidas como consequência das condições de contorno da aproximação semiclássica da função de onda (aproximação WKB). Na Seção 4.7, soluções deste tipo para sistemas com massa dependente da posição foram apresentadas. A característica desta condição está no fato de se poder obter os níveis de energia sem necessidade do conhecimento da função de onda. A seguir aplicamos estas ideias ao problema do oscilador harmônico deformado.

No caso de sistemas com um grau de liberdade e a massa dependente da posição que temos tratado nesta Tese, a variável ação pode ser definida pela grandeza

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_q &= \frac{1}{2\pi}\oint_{\text{ciclo}} p(x)dx \\ &= \frac{1}{2\pi}\oint_{\text{ciclo}} [p(x)]_{\gamma_q=0} d_q x,\end{aligned} \tag{6.54}$$

onde utilizamos nesta última equação as relações

$$\begin{aligned}p(x)dx &= \pm\sqrt{2m(x)[E-V(x)]}dx \\ &= \pm\frac{\sqrt{2m_0[E-V(x)]}dx}{1+\gamma_q x} \\ &= \pm\sqrt{2m_0[E-V(x)]}d_q x.\end{aligned} \tag{6.55}$$

Desta forma, a definição da variável ação para o sistema com a massa dependente da posição é escrita através de uma q-integral em um ciclo da trajetória da partícula no espaço de fase, que chamamos de uma ação deformada. Notemos também que a variável ação deformada é uma função dependente da energia E, *i.e.*, $\mathcal{I}_q = \mathcal{I}_q(E)$, e que corresponde geometricamente à área no espaço de fase (x,p) para sistemas com a massa dependente da posição.

A teoria de Hamilton-Jacobi baseia-se em uma transformação canônica que conecta as coordenadas generalizadas e momentos canônicos, antigos (x,p) e novos (X,P), por meio da função geratriz $S(x,P,t) = W(x,P) - Et$. A transformação é tal que as novas variáveis X e P são constantes. Tipicamente, a energia E é escolhida como um momento canônico constante. Desta forma, escrevendo $E = E(I_q)$, a função geratriz $S(x,E,t)$ pode

ser substituida por $\mathcal{S}(x,\mathcal{I}_q,t)=\mathcal{W}(x,\mathcal{I}_q)-E(I_q)t$. Neste caso $\mathcal{S}(x,\mathcal{I}_q,t)$, conecta as novas e antigas variáveis através das equações:

$$p=\frac{\partial\mathcal{S}(x,\mathcal{I}_q,t)}{\partial x}=\frac{\partial\mathcal{W}(x,\mathcal{I}_q,t)}{\partial x}, \tag{6.56a}$$

e

$$X=\frac{\partial\mathcal{S}(x,\mathcal{I}_q,t)}{\partial\mathcal{I}_q}=\frac{\partial\mathcal{W}(x,\mathcal{I}_q,t)}{\partial\mathcal{I}_q}-\frac{dE}{dI_q}t=\delta=\text{constante}. \tag{6.56b}$$

A variável ângulo deformada é definida por

$$\varphi_q=\frac{\partial\mathcal{W}(x,\mathcal{I}_q)}{\partial\mathcal{I}_q}. \tag{6.57}$$

Para φ_q, verifica-se que

$$\omega_q=\dot{\varphi}_q=\frac{dE(\mathcal{I}_q)}{d\mathcal{I}_q}. \tag{6.58}$$

Logo, $\varphi_q(t)=\omega_q t+\delta$. Assim como em sistemas de massa constante, φ_q varia em 2π a cada ciclo. De fato,

$$\begin{aligned}
\Delta\varphi_q &= \oint_{\text{ciclo}} d\varphi_q=\oint_{\text{ciclo}}\frac{\partial\varphi_q}{\partial x}dx\\
&= \oint_{\text{ciclo}}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\mathcal{W}}{\partial\mathcal{I}_q}\right)dx=\frac{\partial}{\partial\mathcal{I}_q}\oint_{\text{ciclo}}\frac{\partial\mathcal{W}}{\partial x}dx\\
&= \frac{\partial}{\partial\mathcal{I}_q}\oint_{\text{ciclo}}p(x)dx=\frac{\partial}{\partial\mathcal{I}_q}(2\pi\mathcal{I}_q)\\
&= 2\pi.
\end{aligned} \tag{6.59}$$

Através da variável ângulo deformada, temos que o período de oscilação de um sistema períodico é $\tau_q=2\pi/\omega_q$. Vemos, então, que para calcular o período de oscilação de um sistema periódico com massa dependente da posição, basta calcular a variável ação deformada (6.54) e utilizar a Eq. (6.58) para obter a frequência de oscilação do sistema.

Como aplicação, consideremos o problema do oscilador harmônico com massa dependente da posição discutido neste Capítulo. Calculemos inicialmente a variável ação para este oscilador, onde substituindo a Eq. (6.7) na Eq. (6.54), temos

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_q &= \frac{1}{2\pi}\oint_{\text{ciclo}}\frac{m_0\omega_0\sqrt{A^2-x^2}}{1+\gamma_q x}dx\\
&= \frac{m_0\omega_0}{\pi}\int_{-A}^{A}\frac{\sqrt{A^2-x^2}}{1+\gamma_q x}dx.
\end{aligned} \tag{6.60}$$

Pela mudança de variável $x=A\cos\theta_q$, vem que

$$\mathcal{I}_q = \frac{m_0\omega_0A^2}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{\text{sen}^2\,\theta_q}{1+\gamma_qA\cos\theta_q}d\theta_q, \tag{6.61}$$

e pela relação (6.37), obtemos

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_q &= \frac{m_0\omega_0}{\gamma_q^2}\left(1-\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}\right)\\ &= \frac{m_0\omega_0}{\gamma_q^2}\left(1-\sqrt{1-\frac{2\gamma_q^2E}{m\omega_0^2}}\right),\end{aligned} \tag{6.62}$$

onde utilizamos $A^2 = 2E/m_0\omega_0^2$ na equação acima. Podemos observar que quando $\gamma_q A = 0$, a variável ação torna-se igual a E/ω_0, como esperado para um oscilador harmônico simples. A frequência de oscilação do oscilador harmônico deformado é

$$\begin{aligned}\omega_q &= \frac{dE}{d\mathcal{I}_q} = \left(\frac{d\mathcal{I}_q}{dE}\right)^{-1} = \omega_0\sqrt{1-\frac{2\gamma_q^2E}{m_0\omega_0^2}}\\ &= \omega_0\sqrt{1-\gamma_q^2A^2}\end{aligned} \tag{6.63}$$

que está em acordo com o período de oscilação dado pela Eq. (6.14), obtido a partir da própria equação de movimento.

Para o caso do oscilador deformado, a condição de Bohr-Sommerfeld é

$$\mathcal{I}_q = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar, \tag{6.64}$$

sendo n um número inteiro. Igualando a equação acima com (6.62), obtemos:

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{2m_0}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \tag{6.65}$$

conforme obtido em [32] a partir da solução da equação de Schrödinger independente do tempo para o correspondente problema, e utilizando o operador momento linear generalizado não hermitiano (4.2).

No estudo do oscilador harmônico quântico, uma grandeza de interesse é $x_0^2 = \hbar/m_0\omega_0$, e a energia do estado fundamental $\varepsilon_0 = \hbar\omega_0/2$. A partir da condição $E_n < W_q$, obtemos que o número de estados ligados é restrito pela condição $0 \leq n + 1/2 \leq m_0\omega_0/\gamma_q^2\hbar$, ou ainda,

$$0 \leq n+\frac{1}{2} \leq \frac{W_q}{\varepsilon_0}. \tag{6.66}$$

Temos também que os níveis de energia do oscilador deformado satisfazem

$$E_n \geq \frac{\hbar\omega_0}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right). \tag{6.67}$$

Diferentemente do oscilador harmônico quântico simples com massa constante, a quantidade de estados ligados, e consequentemente o número de níveis possíveis, é limitado e

devem satisfazer a condição (6.67). A diferença entre dois níveis de energia consecutivos do espectro é dada por

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_0 - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{2m_0}(n+1), \tag{6.68}$$

de forma que os níveis de energia não estão igualmente espaçados como no oscilador harmônico simples, e tendem a ficar mais próximos quando n cresce.

Os níveis de eneriga do oscilador harmônico quântico com massa dependente da posição dados pela Eq. (4.80) são idênticos àqueles de uma partícula de massa constante sujeita ao potencial de Morse (6.17) como esperado, uma vez que estes sistemas podem ser mapeados de um para o outro pela transformação canônica (4.153). Na Eq. (6.65), o parâmetro γ_q que controla a dependência da massa com a posição está elevado ao quadrado, portanto, temos que os níveis de energia E_n são simétricos em relação à mudança $\gamma_q \to -\gamma_q$. Desta forma, uma vez que γ_q define se o espaço deformado é contraído ($\gamma_q > 0$) ou dilatado ($\gamma_q < 0$), a energia é simétrica sob contração ou dilatação. Para $\gamma_q = 0$ ($W_q \to \infty$), reobtemos os níveis de energia de um oscilador harmônico simples no formalismo quântico. A Figura 6.15 mostra o potencial de Morse (6.17), assim como os níveis de energia de estados ligados para uma partícula com massa constante submetida a este potencial, e equivalentemente do oscilador harmônico com massa dependente da posição, para $\gamma_q x_0 = 0.30$.

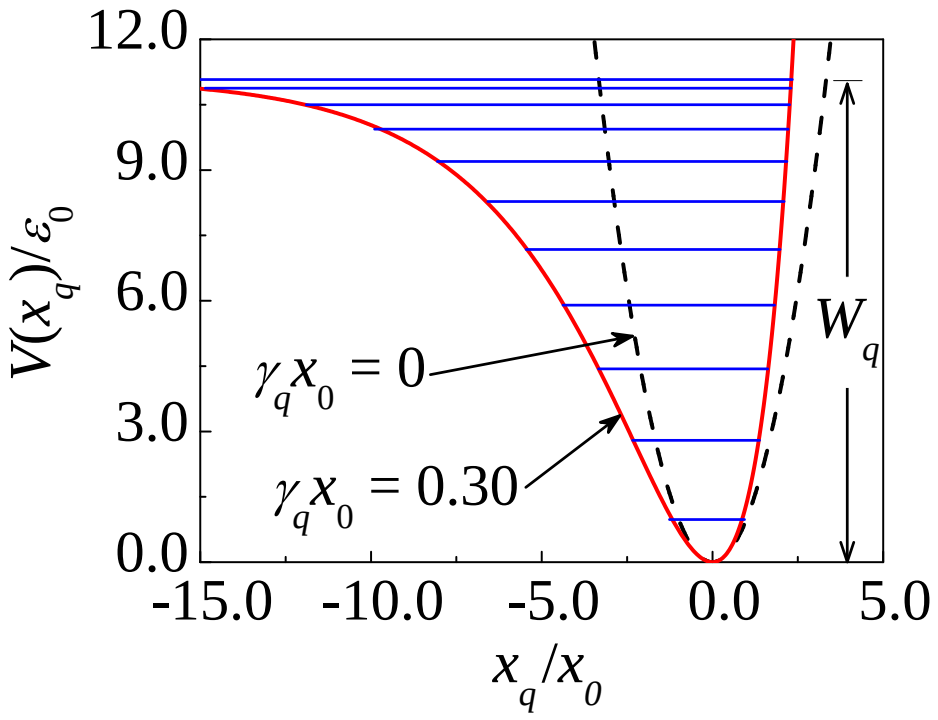


Figura 6.15: Níveis de energia dos estados ligados do potencial de Morse, e equivalentemente do oscilador harmônico com massa dependente da posição, para $\gamma_q x_0 = 0.3$, onde $x_0 = \hbar/m_0\omega_0$ e $\varepsilon_0 = \hbar\omega_0/2$.

6.4 Oscilador harmônico quântico q-deformado

Na Seção 6.1 analisamos o problema do oscilador harmônico simples com massa dependente da posição no formalismo clássico. Nesta Seção resolvemos a equação de Schrödinger para este tipo de sistema no formalismo quântico. Obtemos suas autofunções e o espectro de energia correspondente. Calculamos os valores esperados dos operadores posição e momento, e de seus respectivos quadrados, cujos resultados são comparados pelo princípio da correspondência com aqueles obtidos no formalismo clássico anteriormente. A partir disso, analisaremos o princípio da incerteza para este sistema.

Considerando o problema do oscilador harmônico quântico com massa dependente da posição dada pela Eq. (4.80), o operador hamiltoniano deste sistema é

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0}\left[(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^{1/2}\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^{1/2}\right] + \frac{1}{2}m_0\omega_0^2\hat{x}^2, \tag{6.69}$$

associado ao operador momento linear hermitiano $\hat{p}_q$ dado pela Eq. (4.55). A correspondente equação de Schrödinger independente do tempo (4.86) associada ao operador hamiltoniano (6.69) na base $\{|\hat{x}\rangle\}$ é

$$-\frac{\hbar^2(1+\gamma_q x)^2}{2m_0}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{\hbar^2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{m_0}\frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\psi(x) + \frac{1}{2}m_0\omega_0^2x^2\psi(x) = E\psi(x), \tag{6.70}$$

onde $\langle x|\alpha\rangle = \psi(x)$. Mais uma vez temos uma equação linear com coeficientes variáveis. Para determinar as soluções da equação diferencial acima, façamos a mudança de variável

$$z = 2d[\exp_q(x/\xi)]^{1-q} = [2d(1+\gamma_q x)]_+, \tag{6.71}$$

onde $d = 1/x_0^2\gamma_q^2$, e $z = 0$ para $x < -1/\gamma_q$ em consequência da definição da q-exponencial. Notando que para $x \geq -1/\gamma_q$, obtemos a partir da regra da cadeia

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = 2\gamma_q d\frac{d\psi(z)}{dz}, \tag{6.72a}$$

e

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx} = 4\gamma_q^2d^2\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}. \tag{6.72b}$$

Segue que:

$$z^2\frac{d^2\psi}{dz^2} + 2z\frac{d\psi}{dz} + \frac{1}{4}\psi(z) - \frac{1}{4}(z^2 - 4dz + 4d^2)\psi(z) + \frac{2m_0E}{\hbar^2\gamma_q^2}\psi(z) = 0. \tag{6.73}$$

Uma vez que

$$d^2 = \frac{1}{x_0^4\gamma_q^4} = \frac{m_0^2\omega^2}{\hbar^2\gamma_q^4} = \frac{2m_0W_q}{\hbar^2\gamma_q^2}, \tag{6.74}$$

e fazendo

$$\left(\frac{b}{2}\right)^2 = \frac{2m_0(W_q - E)}{\hbar^2\gamma_q^2}, \tag{6.75}$$

temos

$$\frac{b}{2d} = \sqrt{1 - \frac{E}{W_q}} = \sqrt{1 - \gamma_q^2 A^2}. \tag{6.76}$$

Com isso, a Eq. (6.73) pode ser escrita como

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{2}{z}\frac{d\psi}{dz} + \left(\frac{d}{z} - \frac{1}{4} - \frac{b^2-1}{4z^2}\right)\psi(z) = 0. \tag{6.77}$$

Seja agora

$$\psi(z) = Ae^{-z/2}z^{(b-1)/2}F(z), \tag{6.78}$$

onde $F(z)$ é uma função contínua de z, e A uma constante de normalização. Temos que

$$\begin{aligned}\frac{d\psi(z)}{dz} &= Ae^{-z/2}z^{(b-1)/2}F(z)\left[-\frac{1}{2} + \frac{b-1}{2z} + \frac{1}{F(z)}\frac{dF(z)}{dz}\right] \\ &= \psi(z)\left[-\frac{1}{2} + \frac{b-1}{2z} + \frac{1}{F(z)}\frac{dF(z)}{dz}\right],\end{aligned} \tag{6.79}$$

e

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} &= Ae^{-z/2}z^{(b-1)/2}F(z)\left[-\frac{1}{2} + \frac{b-1}{2z} + \frac{1}{F(z)}\frac{dF(z)}{dz}\right]^2 \\ &\quad + Ae^{-z/2}z^{(b-1)/2}F(z)\left[-\frac{b-1}{2z^2} + \frac{1}{F(z)}\frac{d^2F(z)}{dz^2} - \left(\frac{1}{F(z)}\frac{dF(z)}{dz}\right)^2\right] \\ &= \psi(z)\left[\frac{1}{4} + \frac{(b-1)^2}{4z^2} - \frac{b-1}{2z} - \frac{b-1}{2z^2} + \frac{b-1-z}{zF(z)}\frac{dF(z)}{dz} + \frac{1}{F(z)}\frac{d^2F(z)}{dz^2}\right].\end{aligned} \tag{6.80}$$

Substituindo (6.79) e (6.80) em (6.77), obtemos que $F(z)$ satisfaz a equação diferencial

$$z\frac{d^2F(z)}{dz^2} + (b+1-z)\frac{dF(z)}{dz} + \left(d - \frac{b}{2} - \frac{1}{2}\right)F(z) = 0, \tag{6.81}$$

cuja solução são os polinômios associados de Laguerre (veja Apêndice C), ou seja, $F(z) = L_n^{(b)}(z)$, onde $n = d - \frac{b}{2} - \frac{1}{2}$, ou ainda,

$$\begin{aligned}b &= 2d - 1 - 2n \\ &= \frac{2}{x_0^2\gamma_q^2} - 1 - 2n > 0.\end{aligned} \tag{6.82}$$

A Eq. (6.82) é equivalente à condição (6.66). Para obter os níveis de energia E_n,

substitui-se (6.82) em (6.75), e mostra-se que

$$\begin{aligned} E_n &= \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)\left[1-\frac{\gamma_q^2 x_0^2}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right] \\ &= \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{2m_0}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2, \end{aligned} \tag{6.83}$$

cujos os níveis de energia são iguais àqueles dados pela Eq. (6.65), obtida anteriormente pela condição de Bohr-Sommerfeld de forma independentemente da solução da equação de Schrödinger. Uma "amplitude quântica" $a_{n,q}$ para o oscilador deformado pode ser definida de modo que

$$E_n \equiv \frac{1}{2}m\omega_0^2 a_{n,q}^2. \tag{6.84}$$

Portanto, temos que

$$a_{n,q}^2 = x_0^2(2n+1)\left[1-\frac{\gamma_q^2 x_0^2}{4}(2n+1)\right], \tag{6.85}$$

e $E_n/W_q = \gamma_q^2 a_n^2$.

Similarmente como acontece na solução da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio, cuja expressão da função de estado envolve os polinômios associados de Laguerre, a função de estado para o oscilador harmônico com massa dependente da posição que temos tratado aqui também está relacionada a estes tipos de polinômios. Do ponto de vista matemático, em ambos os sistemas, são os parâmetros dos polinômios de Laguerre que definem o número de estados ligados. No caso do problema do átomo de hidrogênio, temos um número infinito de estados ligados, enquanto que para o oscilador harmônico quântico q-deformado, o número de estados ligados é finito. Do ponto de vista físico, a explicação está no fato de que para o átomo de hidrogênio cujo potencial coulombiano é $V(r) = -K/r$, onde $K > 0$, os autoestados podem ter energia E no intervalo $-\infty < E < 0$, e consequentemente obtém-se um número infinito de estados ligados possíveis. Já para o problema do oscilador harmônico q-deformado, vimos que os níveis de eneriga são idênticos ao de uma partícula submetida a um potencial de Morse, cujos estados ligados devem obedecer à condição $0 < E < W_q$ (ou Eq. (6.82)), o que leva a um número limitado de estados ligados possíveis. É exatamente o segundo termo da Eq. (6.83) que leva à limitação do número de estados ligados uma vez que estes estados devem satisfazer a condição $E > 0$.

As soluções para a equação (6.70) são dadas por

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \dfrac{A_n}{\sqrt{1+\gamma_q x}} e^{-d(1+\gamma_q x)}[2d(1+\gamma_q x)]^{b/2} L_n^{(b)}(2d(1+\gamma_q x)), & x \geq -1/\gamma_q \\ 0, & x < -1/\gamma_q \end{cases} \tag{6.86}$$

onde A_n é a constante de normalização. Para derminá-la, consideremos a condição de

normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = 1, \tag{6.87}$$

ou seja,

$$A_n^2 \int_{-1/\gamma_q}^{\infty} \frac{1}{1+\gamma_q x} e^{-2d(1+\gamma_q x)} [2d(1+\gamma_q x)]^b [L_n^{(b)}(2d(1+\gamma_q x))]^2 dx = 1. \tag{6.88}$$

Pela mudança de variável dada pela Eq. (6.71), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{A_n^2} &= \int_0^{\infty} \frac{2d}{z} e^{-z} z^b [L_n^{(b)}(z)]^2 \frac{dz}{2\gamma_q d} \\ &= \frac{1}{\gamma_q} \int_0^{\infty} e^{-z} z^{b-1} [L_n^{(b)}(z)]^2 dz. \end{aligned} \tag{6.89}$$

Conforme mostramos no Apêndice C, a integral no lado direito da equação acima é dada por:

$$\int_0^{\infty} e^{-z} z^{b-1} [L_n^{(b)}(z)]^2 dz = \frac{1}{b} \frac{(n+b)!}{n!}. \tag{6.90}$$

Desta forma, obtemos que a constante de normalização é

$$A_n^2 = b\gamma_q \frac{n!}{(n+b)!}. \tag{6.91}$$

Através do uso do operador momento linear hermitiano $\hat{p}_q$ dado pela Eq. (4.55), podemos obter as soluções normalizadas $\psi_n(x)$, que diferem daquelas obtidas por Costa Filho *et al.* [32] utilizando o operador momento linear não hermitiano $\hat{p}'_q$ dado pela Eq. (4.2), mas que coincidem com a solução obtida por Vubangsi *et al.* [166] que utilizaram o operador momento linear hermitiano.

Uma outra forma de obter as funções de onda para o oscilador harmônico quântico com massa dependente da posição é utilizar a transformação canônica (4.71), conforme discutido na Seção 4.3. Neste caso, a equação de Schrödinger independente do tempo na base $\{|\hat{x}_q\rangle\}$, torna-se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\varphi(x_q)}{dx_q^2} + W_q(e^{-\alpha_q x_q} - 1)^2 \varphi(x_q) = E\varphi(x_q), \tag{6.92}$$

que como no caso clássico, a transformação canônica $(\hat{x}, \hat{p}) \longrightarrow (\hat{x}_q, \hat{p}_q)$ mapeia uma partícula de massa dependente da posição $m(\hat{x})$ dada pela Eq. (4.80) submetida a um potencial quadrático em uma partícula de massa constante m_0 submetida ao potencial de Morse (6.17).

A solução analítica da Eq. (6.92), resolvida pelo físico norte-americano Philip M. Morse em 1929 para determinar os níveis de energia de moléculas diatômicas, pode ser

encontrada no seu artigo original [251], e é dada por:

$$\varphi(x_q) = A'_n e^{-z(x_q)/2}[z(x_q)]^{b/2} L_n^{(b)}(z(x_q)), \tag{6.93}$$

com $z(x_q) = 2de^{\gamma_q x_q}$. A partir da condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x_q)\varphi_n(x_q)dx_q = 1 \tag{6.94}$$

e da relação (6.90), mostra-se facilmente que $A'_n = A_n$.

Este método foi utilizado por Costa Filho *et al.* [32] para obter as soluções da equação de Schrödinger deformada (4.103) baseada no operador momento linear deformado não hermitiano (4.2) em um potencial quadrático. Os resultados sugerem que, apesar dos operadores utilizados em [11, 32] não serem hermitianos, eles levam ao mesmo espectro real daqueles obtidos através da definição de operadores hermitianos.

Para o caso da aplicação de sistemas hermitianos que temos tratado nesta Tese, as soluções dos sistemas representados pelas Eq.'s (6.70) e (6.92) estão conectadas pela Eq. (4.93), ou ainda,

$$\varphi_q(x) = \varphi(x_q(x)) = \psi(x)\sqrt{1+\gamma_q x}. \tag{6.95}$$

As funções de onda $\varphi_q(x)$ satisfazem a equação de Schrödinger deformada independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} D^2_{\gamma_q}\varphi_q(x) + \frac{1}{2}m_0\omega_0^2 x^2 \varphi_q(x) = E\varphi_q(x). \tag{6.96}$$

Alternativamente, a solução da equação acima poderia ser obtida de forma similar a que utilizamos para obter a solução $\psi(x)$ de (6.70), tal que

$$\varphi_{q,n}(z) = A'_n e^{-z/2} z^{b/2} L_n^{(b)}(z). \tag{6.97}$$

No caso do oscilador harmônico simples para uma partícula de massa constante, a solução da função de onda no estado fundamental ($n = 0$) é a gaussiana

$$[\psi_0(x)]\,|_{\gamma_q=0} = \frac{1}{\pi^{1/4} x_0^{1/2}} e^{-x^2/2x_0^2}. \tag{6.98}$$

Para o oscilador harmônico deformado no estado fundamental ($n = 0$), temos que a constante de normalização é $A_0^2 = b\gamma_q/b! = \gamma_q/(b-1)!$, com $b - 1 = 2[1/(x_0^2\gamma_q^2) - 1]$, e portanto, a função de onda é dada por:

$$\psi_0(x) = \left\{ \frac{2}{\gamma_q x_0^2 \left[2\left(\frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - 1\right)\right]!} \right\}^{1/2} e^{-(1+\gamma_q x)/\gamma_q^2 x_0^2} \left[\frac{2}{\gamma_q^2 x_0^2}(1+\gamma_q x)\right]^{\frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2}-1}. \tag{6.99}$$

Obviamente, a função de onda do estado fundamental não é mais uma função gaussiana. Podemos mostrar que esta função de onda recupera o caso usual para $\gamma_q = 0$. De fato, tomando o logaritmo natural de $\psi_0(x)$, observando que o binomial $[2(1/\gamma_q^2 x_0^2 - 1)]!$ torna-se muito grande no limite $\gamma_q \to 0$, e utilizando a fórmula de Stirling

$$\ln(N!) \approx N \ln N - N + \ln(\sqrt{2\pi N}) \tag{6.100}$$

válida para $N \gg 1$, temos que

$$\begin{aligned}
\ln \psi_0(x) &= \frac{1}{2}\ln\left(\frac{2}{\gamma_q x_0^2}\right) - \left(\frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - 1\right)\ln\left[2\left(\frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - 1\right)\right] + \frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - 1 \\
&\quad -\frac{1}{4}\ln\left[4\pi\left(\frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - 1\right)\right] - \frac{1+\gamma_q x}{\gamma_q^2 x_0^2} + \left(\frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - 1\right)\ln\left(\frac{2}{\gamma_q^2 x_0^2}\right) \\
&\quad + \left(\frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - 1\right)\ln(1+\gamma_q x) \\
&= -\frac{1}{2}\ln(\gamma_q x_0) - \frac{1}{2}\ln(x_0) - \left(\frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - 1\right)\ln(1-\gamma_q^2 x_0^2) + \frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - \frac{1}{4}\ln(\pi) \\
&\quad -\frac{1}{4}\ln(1-\gamma_q^2 x_0^2) + \frac{1}{4}\ln(\gamma_q^2 x_0^2) - \frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - \frac{x}{\gamma_q x_0^2} \\
&\quad + \left(\frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - 1\right)\ln(1+\gamma_q x),
\end{aligned} \tag{6.101}$$

ou ainda,

$$\ln \psi_0(x) = -\frac{1}{4}\ln(\pi x_0^2) - \left(1 + \frac{x}{\gamma_q x_0^2}\right) + \left(\frac{3}{4} - \frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2}\right)\ln(1-\gamma_q^2 x_0^2) + \left(\frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - 1\right)\ln(1+\gamma_q x). \tag{6.102}$$

A partir da expansão em série de Taylor $\ln(1+y) = y - \frac{y^2}{2} + \frac{y^3}{3} + ...$, válida para $|y| < 1$, segue que:

$$\begin{aligned}
\ln \psi_0(x) &= -\frac{1}{4}\ln(\pi x_0^2) - \left(1 + \frac{x}{\gamma_q x_0^2}\right) + \left(\frac{3}{4} - \frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2}\right)\left(-\gamma_q^2 x_0^2 - \frac{\gamma_q^4 x_0^4}{2} + ...\right) \\
&\quad + \left(\frac{1}{\gamma_q^2 x_0^2} - 1\right)\left(\gamma_q x - \frac{\gamma_q^2 x^2}{2} + ...\right) \\
&= -\frac{1}{4}\ln(\pi x_0^2) - \left(1 + \frac{x}{\gamma_q x_0^2}\right) + \left(1 + \frac{\gamma_q^2 x_0^2}{2} - \frac{3\gamma_q^2 x_0^2}{4} + ...\right) \\
&\quad + \left(\frac{x}{\gamma_q x_0^2} - \frac{x^2}{2x_0^2} - \gamma_q x ...\right) \\
&= -\frac{1}{4}\ln(\pi x_0^2) - \frac{x^2}{2x_0^2} - \gamma_q x - \frac{\gamma_q^2 x_0^2}{4} + ... \ .
\end{aligned} \tag{6.103}$$

Desta forma, para o estado fundamental $n = 0$, com $|\gamma_q x_0| \ll 1$, a função de onda torna-se

$$\psi_0(x) = \frac{C_q e^{-\gamma_q x}}{\pi^{1/4} x_0^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \tag{6.104}$$

onde C_q é constante de normalização da função de onda. Uma vez que $\int |\psi_0(x)|^2 dx = 1$, obtemos $C_q = e^{-\gamma_q^2 x_0^2/2}$, e assim

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} x_0^{1/2}} \exp\left[-\frac{(x + \gamma_q x_0^2)^2}{2x_0^2}\right], \tag{6.105}$$

que corresponde a uma gaussiana centrada em $x/x_0 = -\gamma_q x_0^2$. Fazendo $\gamma_q \to 0$ para a expressão acima, reobtemos a função de onda (6.98).

A Figura 6.16 mostra a função de onda $(-1)^n \psi_n(x)$, e a densidade de probabilidade $\rho(x,t) = |\psi_n(x)|^2$ do oscilador quântico deformado para diferentes parâmetros $\gamma_q x_0$. O caso do oscilador harmônico simples com massa constante ($\gamma_q x_0 = 0$) é mostrado para comparação. Para $\gamma_q x_0 > 0$, os picos de $\psi_n(x)$ e $|\psi_n(x)|^2$ tendem a ser deslocados para esquerda, similar ao que acontece com a densidade de probabilidade $P_{\text{clássica}}(x)$ no caso clássico. O efeito da massa dependente da posição que temos tratado neste trabalho quebra a propriedade de pariedade que existe na função de onda do oscilador com massa constante, ou seja, temos que $\psi_n(-x) \neq (-1)^n \psi_n(x)$ para $\gamma_q x_0 \neq 0$.

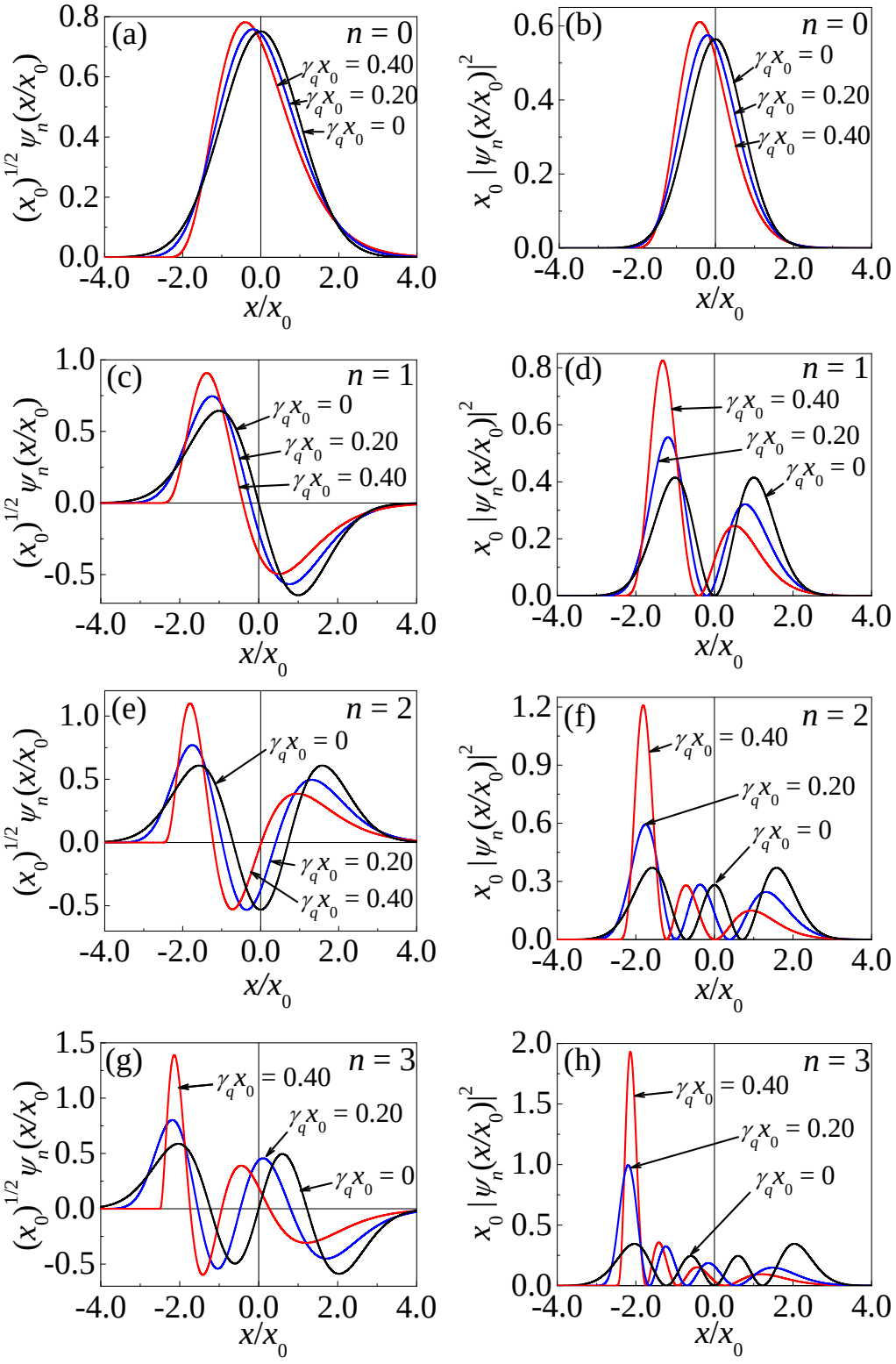


Figura 6.16: Autofunções $\psi_n(x)$ (coluna da esquerda) e as respectivas densidades de probabilidade $|\psi_n(x)|^2$ (coluna da direita) de uma partícula com massa dependente da posição dada pela Eq. (4.80) em um potencial quadrático para diferentes valores de $\gamma_q x_0$ (o caso usual $\gamma_q x_0 = 0$ é mostrado para comparação). (a) e (b): $n = 0$ (estado fundamental), (c) e (d): $n = 1$ (primeiro estado excitado), (e) e (f): $n = 2$ (segundo estado excitado). (g) e (h): $n = 3$ (terceiro estado excitado).

A Figura 6.17 mostra que para números quânticos grandes, exemplificados aqui com $n = 10$, a média da densidade de probabilidade quântica $|\psi_n(x)|^2$ tende a se aproximar da densidade de probabilidade clássica $P_{\text{clássica}}(x)$ dada pela Eq. (6.23) com $a_{q,n}$ no lugar de A.

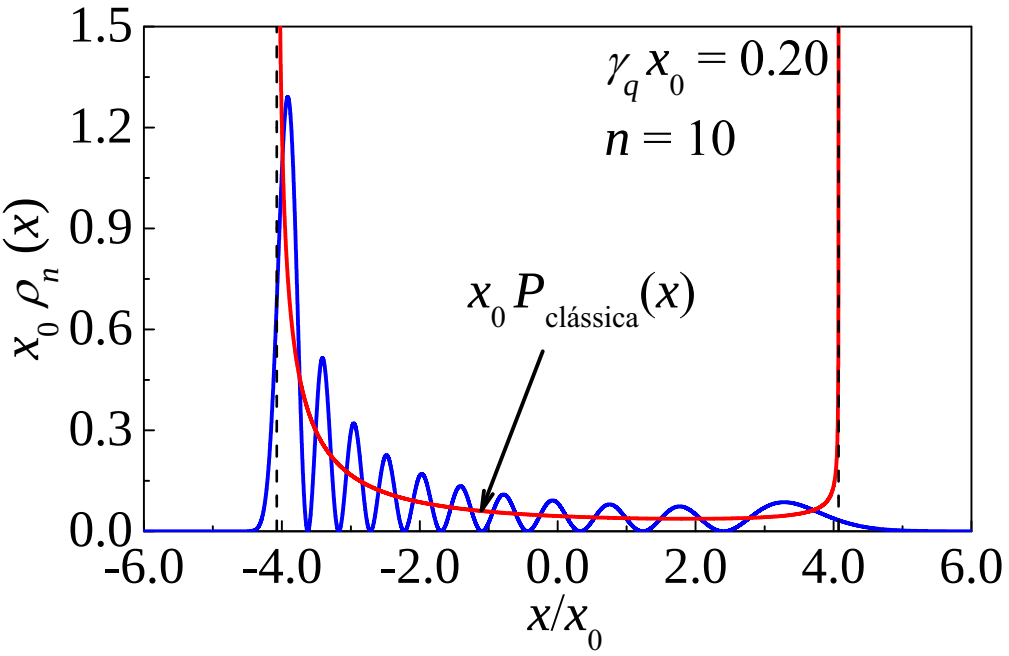


Figura 6.17: Densidade de probabilidade para uma partícula com massa dependente da posição dada pela Eq. (4.80) em um potencial quadrático com $x_0\gamma_q = 0.20$ no estado $n = 10$. Também é mostrada a densidade probabilidade clássica para uma mesma energia, tal que $A = a_{q,n}$, onde $a_{q,n}$ é a amplitude quântica dada pela Eq. (6.85). As linhas verticais pontilhadas correspondem a $x = \pm a_{n,q}$.

Similar ao que foi feito para uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito bidimensional, podemos estender os resultados discutidos aqui para um oscilador bidimensional deformado, cuja densidade de probabilidade é dada por $\rho_{n_1,n_2}(x,y) = |\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)|^2$. As Figuras 6.18 e 6.19 mostram respectivamente as densidades de probabilidade em diferentes estados (n_1, n_2) para valores de $\gamma_q a_0 = 0$ (caso usual) e 0.2, onde $a_0 = \hbar/m_0\omega_0$. Como no caso unidimensional, a densidade de probabilidade $\rho_{n_1,n_2}(x,y)$ para $\gamma_q a_0 \neq 0$ torna-se assimétrica devido ao efeito da massa dependente da posição. O análogo óptico deste oscilador bidimensional poderia ser aplicado ao estudo da propagação de feixes gaussianos em meios não homogêneos [150].

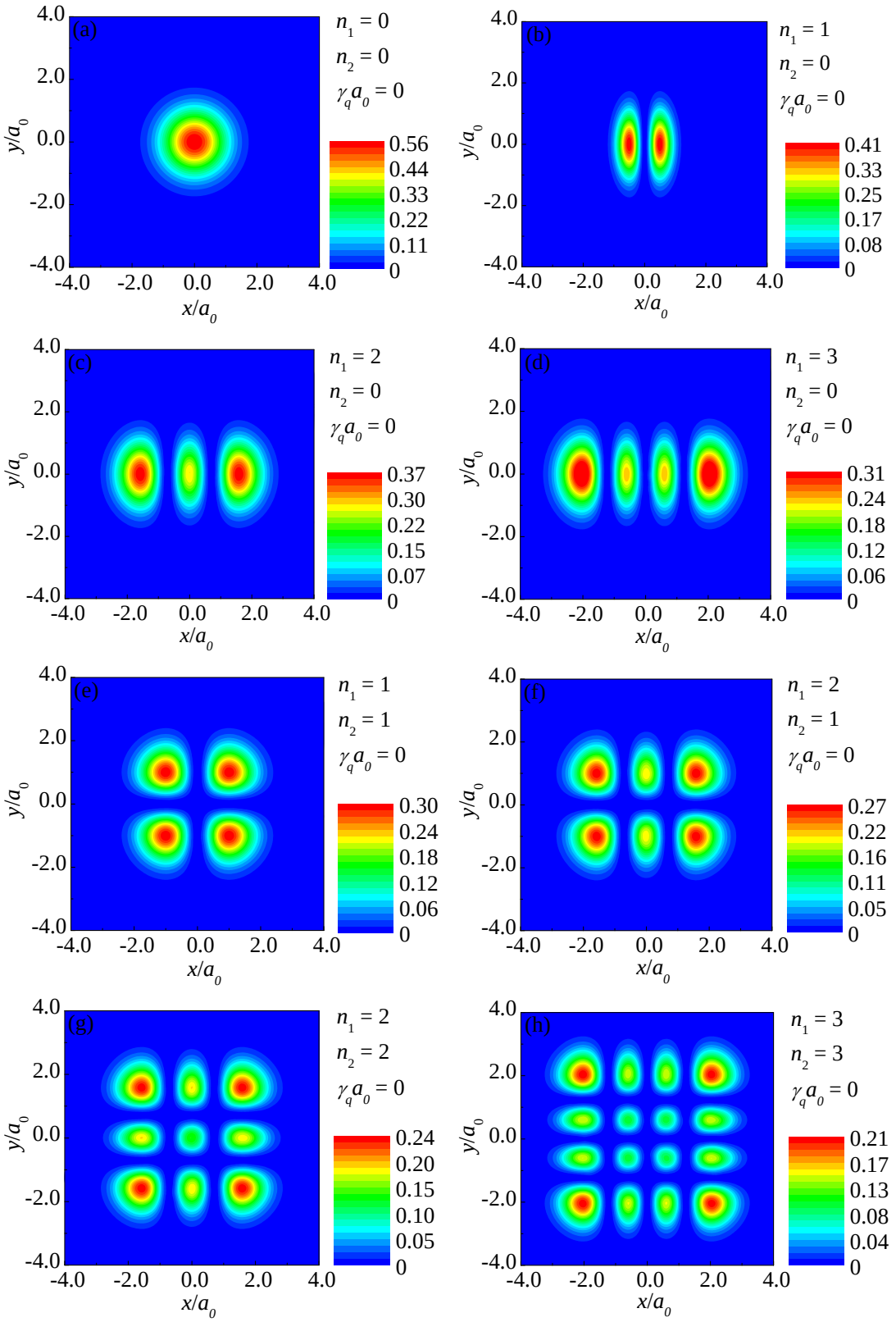


Figura 6.18: Densidade probabilidade $\rho_{n_1,n_2}(x,y) = |\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)|^2$ (em unidades de a_0^{-2}) de um oscilador harmônico usual bidimensional ($\gamma_q a_0 = 0$) nos estados (a) $(n_1, n_2) = (0,0)$, (b) $(1,0)$, (c) $(2,0)$, (d) $(3,0)$, (e) $(1,1)$, (f) $(2,1)$, (g) $(2,2)$, e (h) $(3,3)$. A escala de cores varia de azul (baixa densidade de probabilidade) para vermelho (alta densidade de probabilidade).

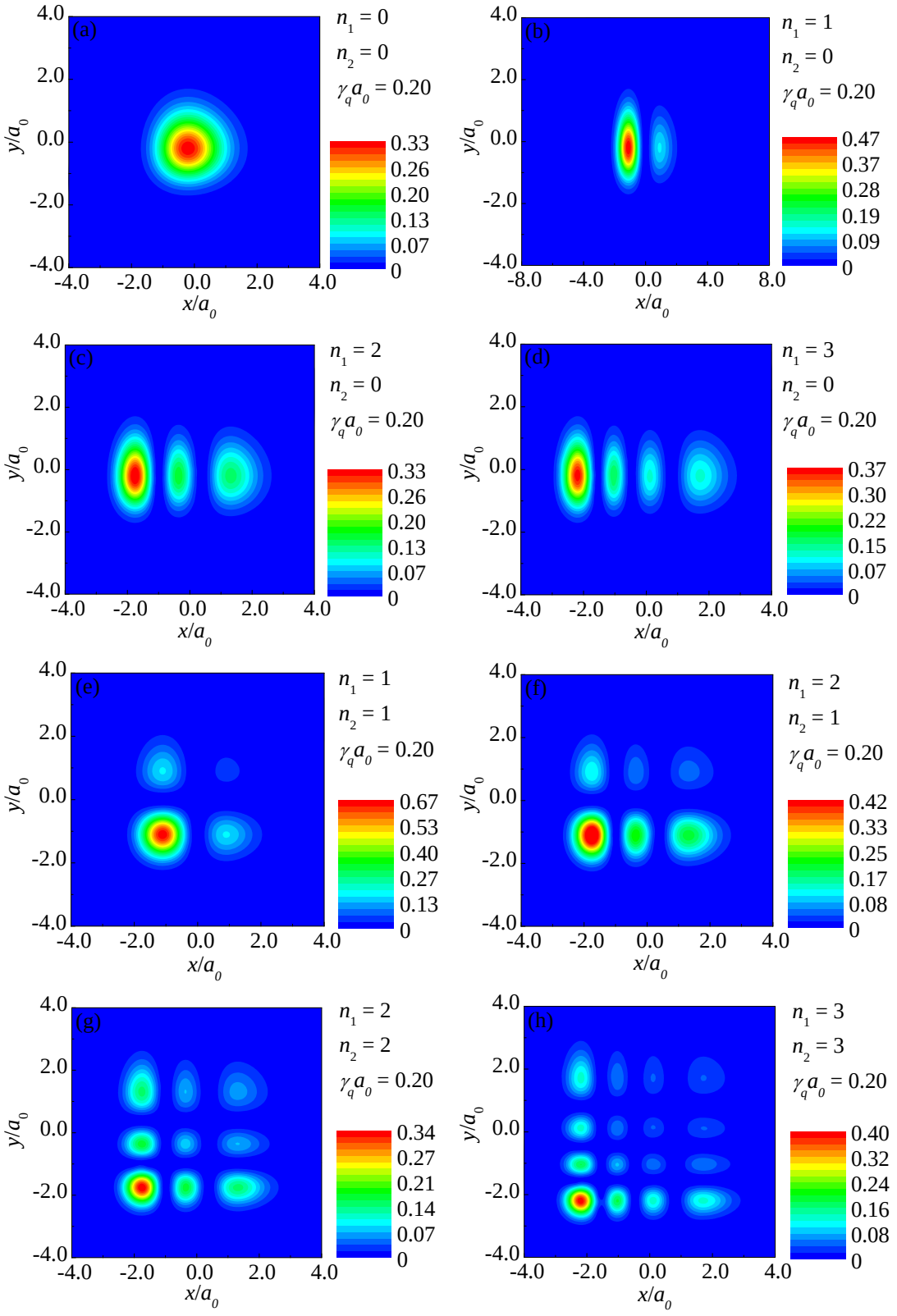


Figura 6.19: Densidade probabilidade $\rho_{n_1,n_2}(x,y) = |\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)|^2$ (em unidades de a_0^{-2}) de um oscilador harmônico deformado bidimensional para $\gamma_q a_0 = 0.2$ nos estados (a) $(n_1, n_2) = (0,0)$, (b) $(1,0)$, (c) $(2,0)$, (d) $(3,0)$, (e) $(1,1)$, (f) $(2,1)$, (g) $(2,2)$, e (h) $(3,3)$. A escala de cores varia de azul (baixa densidade de probabilidade) para vermelho (alta densidade de probabilidade).

Os valores esperados de $\langle\hat{x}\rangle$, $\langle\hat{x}^2\rangle$, $\langle\hat{p}\rangle$ e $\langle\hat{p}^2\rangle$ para o oscilador harmônico deformado são dados, respectivamente, por

$$\langle\hat{x}\rangle = -\frac{\gamma_q\hbar}{m_0\omega_0}\left(n+\frac{1}{2}\right), \tag{6.106a}$$

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{\hbar}{m_0\omega_0}\left(n+\frac{1}{2}\right), \tag{6.106b}$$

$$\langle\hat{p}\rangle = 0, \tag{6.106c}$$

e

$$\langle\hat{p}^2\rangle = m_0\omega_0\hbar\left\{\frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)\left[1-\gamma_q^2x_0^2\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]+\frac{\gamma_q^2x_0^2}{2}(n^2+n+1)}{\left[1-\gamma_q^2x_0^2\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^2-(\gamma_qx_0)^4}\right\}. \tag{6.106d}$$

A demonstração é feita no final desta Seção. Notemos que $\langle\hat{x}^2\rangle$ e $\langle\hat{p}\rangle$ tem a mesma expressão do caso usual ($\gamma_qx_0=0$). Podemos também ver claramente que no limite $\gamma_qx_0\to 0$, temos que os casos usuais $\langle\hat{x}\rangle=0$ e $\langle\hat{p}^2\rangle = m_0\omega_0\hbar(n+\frac{1}{2})$ são recuperados.

Pode-se mostrar que de acordo com o princípio da correspondência, no limite $\hbar\to 0$, as Eq.'s. (6.106) coincidem com Eq.'s. (6.24), obtidas pelo correspondente problema no formalismo clássico. De fato, a partir das Eq. (6.75) obtém-se uma relação entre $a_{n,q}$, b e d:

$$\frac{b}{2d} = \sqrt{1-\frac{E_n}{W_q}} = \sqrt{1-\gamma_q^2a_n^2}. \tag{6.107}$$

Da Eq. (6.82), e utilizando a relação (6.107), temos que:

$$\begin{aligned} n+\frac{1}{2} &= d\left(1-\frac{b}{2d}\right) = \frac{1}{\gamma_q^2x_0^2}\left(1-\frac{b}{2d}\right) \\ &= \frac{m_0\omega_0}{\gamma_q^2\hbar}\left(1-\sqrt{1-\gamma_q^2a_{n,q}^2}\right). \end{aligned} \tag{6.108}$$

Dividindo a Eq. (6.106a) por $a_{n,q}$, e utilizando a equação acima, obtemos:

$$\frac{\langle\hat{x}\rangle}{a_{n,q}} = -\frac{1-\sqrt{1-\gamma_q^2a_{n,q}^2}}{\gamma_qa_{n,q}}. \tag{6.109}$$

Similarmente, dividindo a Eq. (6.106a) por $a_{n,q}^2$, e substituindo a Eq. (6.108), temos:

$$\frac{\langle\hat{x}^2\rangle}{a_{n,q}^2} = \frac{1-\sqrt{1-\gamma_q^2a_{n,q}^2}}{\gamma_q^2a_{n,q}^2}. \tag{6.110}$$

No limite de números quânticos grandes ($n\to\infty$) que corresponde a níveis de energia elevados ($E_n/\varepsilon_0\to\infty$ ou $\hbar\to 0$), temos $E_n\to E$ e $a_{n,q}\to A$, e consequentemente as

Eq.'s (6.109) e (6.110) se reduzem às Eq.'s (6.106a) e (6.106b), respectivamente.

O valor esperado do operador momento $\langle\hat{p}\rangle$, assim como o valor médio do momento da partícula $\overline{p}$, são ambos nulos. Basta agora mostrarmos que $\langle\hat{p}^2\rangle$ reduz-se a $\overline{p^2}$ no limite $\hbar \to 0$. Sendo $n^2+n+1 = (n+\frac{1}{2})^2 + \frac{3}{4}$, e substituindo (6.108) em (6.106d), temos:

$$\begin{aligned}
\langle\hat{p}^2\rangle &= m_0\omega_0\hbar \left\{ \frac{d\left(1-\frac{b}{2d}\right)\left[1-\left(\frac{1}{d}\right)d\left(1-\frac{b}{2d}\right)\right] + \frac{1}{2d}\left[d^2\left(1-\frac{b}{2d}\right)^2 + \frac{3}{4}\right]}{\left[1-\left(\frac{1}{d}\right)d\left(1-\frac{b}{2d}\right)\right]^2 - \frac{1}{d^2}} \right\} \\
&= m_0\omega_0\hbar \left[\frac{d\left(1-\frac{b}{2d}\right) - d\left(1-\frac{b}{2d}\right)^2 + \frac{d}{2}\left(1-\frac{b}{2d}\right)^2 + \frac{3}{8d}}{\left(\frac{b}{2d}\right)^2 - \frac{1}{d^2}} \right] \\
&= m_0\omega_0\hbar d \left[\frac{1-\frac{b}{2d}-\frac{1}{2}+\frac{b}{2d}-\frac{1}{2}\left(\frac{b}{2d}\right)^2 + \frac{3}{8d^2}}{\left(\frac{b}{2d}\right)^2 - \frac{1}{d^2}} \right] \\
&= \frac{1}{2}m_0\omega_0\hbar\left(\frac{m_0\omega_0}{\hbar\gamma_q^2}\right) \left[\frac{1-\left(\frac{b}{2d}\right)^2 + \frac{3}{4d^2}}{\left(\frac{b}{2d}\right)^2 - \frac{1}{d^2}} \right] \\
&= \frac{m_0^2\omega_0^2}{2\gamma_q^2} \left[\frac{\gamma_q^2 a_{n,q}^2 + \frac{3}{4}\left(\frac{\hbar\gamma_q^2}{m\omega_0}\right)^2}{1-\gamma_q^2 a_{n,q}^2 - \left(\frac{\hbar\gamma_q^2}{m\omega_0}\right)^2} \right].
\end{aligned} \tag{6.111}$$

No limite $\hbar \to 0$, obtemos

$$\langle\hat{p}^2\rangle = \frac{m_0^2\omega_0^2 a_{n,q}^2}{2(1-\gamma_q^2 a_{n,q}^2)}, \tag{6.112}$$

que recupera a Eq. (6.24d) fazendo $a_{n,q} \to A$ para o limite clássico.

A mesma comparação também pode ser feita entre os valores esperados das energias cinética e potencial com os respectivos valores médios dessas grandezas no formalismo clássico. Da Eq. (6.106b) temos que o valor esperado da energia potencial para o oscilador com massa dependente da posição é

$$\begin{aligned}
\langle\hat{V}\rangle &= \frac{1}{2}m_0\omega_0^2\langle\hat{x}^2\rangle \\
&= \frac{\hbar\omega_0}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right).
\end{aligned} \tag{6.113}$$

Desta forma, o valor esperado da energia cinética é

$$\begin{aligned}\langle\hat{T}\rangle &= \langle\hat{H}\rangle - \langle\hat{V}\rangle \\ &= E_n - \langle\hat{V}\rangle \\ &= \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{2m_0}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{\hbar\omega_0}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right) \\ &= \frac{\hbar\omega_0}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\left[1 - x_0^2\gamma_q^2\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]. \end{aligned} \tag{6.114}$$

Evidentemente, os valores esperados $\langle\hat{V}\rangle$ são positivos. Da condição dada pela Eq. (6.82), temos que os valores esperados $\langle\hat{T}\rangle$ também são positivos. Notemos que $\langle\hat{V}\rangle = \langle\hat{T}\rangle$ apenas para o caso usual $\gamma_q = 0$. Utilizando a relação (6.108), temos que os valores esperados das energias potencial e cinética em termos da amplitude quântica $a_{n,q}$ são, respectivamente,

$$\langle\hat{V}\rangle = \frac{1}{2}m_0\omega_0^2 a_{n,q}^2\left(\frac{1-\sqrt{1-\gamma_q^2 a_{n,q}^2}}{\gamma_q^2 a_{n,q}^2}\right). \tag{6.115a}$$

e

$$\begin{aligned}\langle\hat{T}\rangle &= \frac{1}{2}m_0\omega_0^2 a_{n,q}^2\sqrt{1-\gamma_q^2 a_{n,q}^2}\left(\frac{1-\sqrt{1-\gamma_q^2 a_{n,q}^2}}{\gamma_q^2 a_{n,q}^2}\right) \\ &= \sqrt{1-\gamma_q^2 a_{n,q}^2}\langle\hat{V}\rangle. \end{aligned} \tag{6.115b}$$

As equações acima tem uma forma similar aos valores médios dados, respectivamente, pelas Eq.'s (6.25a) e (6.25b) para o oscilador no formalismo clássico.

A dispersão da posição da partícula é dada por

$$\Delta x = x_0\sqrt{\left(n+\frac{1}{2}\right)\left[1-\gamma_q^2 x_0^2\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]}, \tag{6.116}$$

e a dispersão do momento linear Δp é simplesmente a raiz quadrada da expressão (6.106d) uma vez que $\langle\hat{p}\rangle = 0$. A Figura 6.20 mostra, em função de $\gamma_q x_0$, (a) a incerteza da posição Δx, (b) do momento linear Δp, e (c) a relação de incerteza $\Delta x\Delta p$ para o oscilador harmônico com massa dependente da posição discutido. Note que $\Delta x\Delta p \geq \hbar/2$, uma vez que os operadores $\hat{x}$ e $\hat{p}$ são canonicamente conjugados e hermitianos, diferentemente do que acontece em [32], na qual se obtém

$$\begin{aligned}\Delta x\Delta p_q' &= \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)(1+\gamma_q\langle\hat{x}\rangle) \\ &= \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)\left[1-\frac{\gamma_q^2\hbar}{m_0\omega_0}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right], \end{aligned} \tag{6.117}$$

onde $\hat{x}$ e $\hat{p}'_q$ não são canonicamente conjugados, e neste caso $\Delta x \Delta p'_q$ pode ser menor do que $\hbar/2$. Observemos que assim como a energia (6.65), Δx, Δp e a relação de incerteza $\Delta x \Delta p$ são simétricos por contração ($\gamma_q > 0$) ou dilatação do espaço ($\gamma_q < 0$), uma vez que γ_q está ao quadrado nas expressões de Δx e Δp. Para $\gamma_q x_0 = 0$, temos uma relação de incerteza mínima.

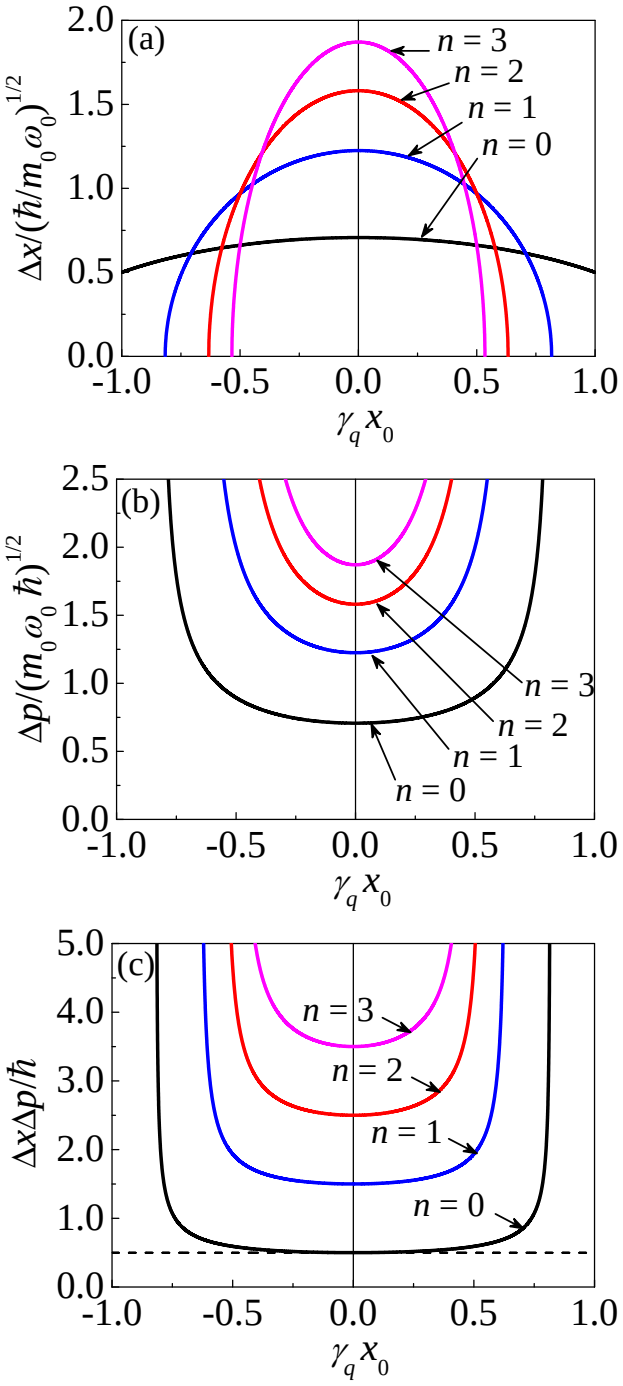


Figura 6.20: Para os estados $n = 0$, 1, 2 e 3 do oscilador deformado, temos em função de $\gamma_q x_0$: (a) a incerteza da posição Δx, (b) a incerteza do momento linear Δp, e (c) a relação de incerteza $\Delta x \Delta p$. Para $\gamma_q x_0 = 0$, temos que $\Delta x \Delta p$ é mínimo para cada estado e recupera o caso usual tal que $(\Delta x \Delta p)_{\gamma_q x_0 = 0} = (2n + 1)\hbar/2$.

Demonstração das equações (6.106):

A seguir façamos a demonstração dos valores esperados de $\langle\hat{x}\rangle$, $\langle\hat{x}^2\rangle$, $\langle\hat{p}\rangle$ e $\langle\hat{p}^2\rangle$ para o oscilador quântico deformado discutido nesta Seção.

• Eq. (6.106a):

O valor esperado do operador posição $\hat{x}$ para o oscilador harmônico deformado é obtido a partir da integral:

$$\langle\hat{x}\rangle = \langle n|\hat{x}|n\rangle = \int_{-\gamma_q^{-1}}^{\infty} \psi_n^*(x) x \psi_n(x) dx, \tag{6.118}$$

dado que $\psi_n(x) = 0$ para $x < -1/\gamma_q$.

Fazendo a mudança de variável (6.71), temos $x = (z - 2d)/(2\gamma_q d)$, e $dx = dz/2\gamma_q d$, segue que:

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}\rangle &= \int_0^{\infty} \psi_n^*(z) \left(\frac{z-2d}{2\gamma_q d}\right) \psi_n(z) \frac{dz}{2\gamma_q d} \\ &= \frac{1}{(2\gamma_q d)^2} \int_0^{\infty} \psi_n^*(z) z \psi_n(z) dz - \frac{2d}{(2\gamma_q d)^2} \int_0^{\infty} \psi_n^*(z) \psi_n(z) dz. \end{aligned} \tag{6.119}$$

A partir das função de onda escrita em termos de z

$$\psi_n(z) = A_n (2d)^{1/2} e^{-z/2} z^{(b-1)/2} L_n^{(b)}(z), \tag{6.120}$$

temos

$$\langle\hat{x}\rangle = \frac{A_n^2 (2d)}{(2\gamma_q d)^2} \int_0^{\infty} e^{-z} z^b [L_n^{(b)}(z)]^2 dz - \frac{A_n^2 (2d)^2}{(2\gamma_q d)^2} \int_0^{\infty} e^{-z} z^{b-1} [L_n^{(b)}(z)]^2 dz. \tag{6.121}$$

Uma propriedade importante dos polinômios associados de Laguerre é dada pela integral (C.8)

$$\int_0^{\infty} e^{-z} z^b L_n^{(b)}(z) L_m^{(b)}(z) dz = \frac{(n+b)!}{n!} \delta_{n,m}. \tag{6.122}$$

Utilizando a relação (6.90), e a expressão (6.91) para a constante de normalização, segue que:

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}\rangle &= \frac{b\gamma_q n!}{(n+b)!} \frac{2d}{(2\gamma_q d)^2} \frac{(n+b)!}{n!} - \frac{b\gamma_q n!}{(n+b)!} \frac{(2d)^2}{(2\gamma_q d)^2} \frac{1}{b} \frac{(n+b)!}{n!} \\ &= \frac{1}{\gamma_q} \left(\frac{b}{2d} - 1\right) = -\frac{2d-b}{2d\gamma_q}. \end{aligned} \tag{6.123}$$

Lembrando que $b = 2d - 2n - 1$ e $d = 1/x_0^2\gamma_q^2$, obtemos:

$$\langle\hat{x}\rangle = -\frac{\gamma_q \hbar}{m_0 \omega_0} \left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{6.124}$$

• Eq. (6.106b):

O valor esperado para o quadrado do operador posição é

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \langle n|\hat{x}^2|n\rangle = \int_{-\gamma_q^{-1}}^{\infty} \psi_n^*(x)x^2\psi_n(x)dx. \tag{6.125}$$

Fazendo a mudança de variável (6.71), segue que:

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}^2\rangle &= \int_0^{\infty} \psi_n^*(z)\left(\frac{z-2d}{2\gamma_q d}\right)^2 \psi_n(z)\frac{dz}{2\gamma_q d} \\ &= \frac{1}{(2\gamma_q d)^2}\int_0^{\infty}\psi_n^*(z)z^2\psi_n(z)dz - \frac{4d}{(2\gamma_q d)^2}\int_0^{\infty}\psi_n^*(z)z\psi_n(z)dz \\ &\quad + \frac{4d^2}{(2\gamma_q d)^2}\int_0^{\infty}\psi_n^*(z)\psi_n(z)dz.\end{aligned} \tag{6.126}$$

Substituindo (6.103) na expressão acima, temos

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}^2\rangle &= \frac{2A_n^2 d}{(2\gamma_q d)^3}\int_0^{\infty} e^{-z}z^{b+1}[L_n^{(b)}(z)]^2dz - \frac{8A_n^2d^2}{(2\gamma_q d)^3}\int_0^{\infty}e^{-z}z^b[L_n^{(b)}(z)]^2dz \\ &\quad + \frac{8A_n^2d^3}{(2\gamma_q d)^3}\int_0^{\infty}e^{-z}z^{b-1}[L_n^{(b)}(z)]^2dz.\end{aligned} \tag{6.127}$$

Outra integral útil envolvendo os polinômios associados de Laguerre é a Eq. (C.9) (ver Apêndice C):

$$\int_0^{\infty} e^{-x}x^{k+1}\left[L_n^{(k)}(x)\right]^2 dx = \frac{(n+b)!}{n!}(2n+b+1) = \frac{(n+b)!}{n!}(2d), \tag{6.128}$$

onde utilizamos nesta última a Eq. (6.82). A partir das Eq.'s (6.122), (6.90) e (6.128), temos

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}^2\rangle &= \frac{2A_n^2 d}{(2\gamma_q d)^3}\left[\frac{(n+b)!}{n!}(2d) - \frac{(n+b)!}{n!}(4d) + \frac{(n+b)!}{n!}\frac{4d^2}{b}\right] \\ &= \frac{2d}{(2\gamma_q d)^3}\frac{b\gamma_q n!}{(n+b)!}\frac{(n+b)!}{n!}\left(2d - 4d + \frac{4d^2}{b}\right) = \frac{b}{(2\gamma_q d)^2}\left(-2d + \frac{4d^2}{b}\right) \\ &= \frac{1}{\gamma_q^2}\left(1 - \frac{b}{2d}\right) = \frac{2d-b}{2d\gamma_q^2},\end{aligned} \tag{6.129}$$

ou seja,

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{\hbar}{m_0\omega_0}\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{6.130}$$

• Eq. (6.106c):

O valor esperado do operador momento linear é:

$$\langle\hat{p}\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle = \int_{-\gamma_q^{-1}}^{\infty} \psi_n^*(x)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\psi_n(x)dx. \tag{6.131}$$

Fazendo a mudança de variável (6.71) e utilizando a Eq. (6.72a)

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}\rangle &= -i\hbar\int_0^{\infty}\psi_n^*(z)(2\gamma_q d)\frac{d\psi_n(z)}{dz}\frac{dz}{2\gamma_q d}\\ &= -i\hbar\int_0^{\infty}\psi_n^*(z)\frac{d\psi_n(z)}{dz}dz.\end{aligned} \tag{6.132}$$

Substituindo (6.120) na expressão anterior, e lembrando da Eq. (6.79), onde $F(z) = L_n^{(b)}(z)$, temos:

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}\rangle &= -i\hbar(2d)A_n^2\int_0^{\infty}e^{-z}z^{b-1}[L_n^{(b)}(z)]^2\left[-\frac{1}{2}+\frac{b-1}{2z}+\frac{1}{L_n^{(b)}(z)}\frac{dL_n^{(b)}(z)}{dz}\right]dz\\ &= -i\hbar(2d)A_n^2\Bigg\{-\frac{1}{2}\int_0^{\infty}e^{-z}z^{b-1}[L_n^{(b)}(z)]^2dz+\frac{b-1}{2}\int_0^{\infty}e^{-z}z^{b-2}[L_n^{(b)}(z)]^2dz\\ &\quad+\int_0^{\infty}e^{-z}z^{b-1}L_n^{(k)}(z)\frac{dL_n^{(b)}(z)}{dz}dz\Bigg\}.\end{aligned} \tag{6.133}$$

No Apêndice C, apresentamos um conjunto de integrais envolvendo os polinômios associados de Laguerre. Pode-se observar que a primeira, segunda e terceira integral acima correspondem respectivamente às integrais (C.10), (C.12) e (C.11). Portanto, segue que:

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}\rangle &= -i\hbar(2d)A_n^2\left[-\frac{1}{2b}\frac{(n+b)!}{n!}+\frac{b-1}{2}\frac{2n+b+1}{(b-1)b(b+1)}\frac{(n+b)!}{n!}-\frac{n}{b(b+1)}\frac{(n+b)!}{n!}\right]\\ &= -i\hbar(2d)A_n^2\frac{(n+b)!}{n!}\left[\frac{-(b+1)+(2n+b+1)-2n}{2b(b+1)}\right]=0,\end{aligned} \tag{6.134}$$

conforme a Eq. (6.106c).

• Eq. (6.106d):

O valor esperado para o quadrado do operador momento linear é:

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}^2\rangle = \langle n|\hat{p}^2|n\rangle &= \int_{-\gamma_q^{-1}}^{\infty}\psi_n^*(x)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2\psi_n(x)dx\\ &= -\hbar^2\int_{-\gamma_q^{-1}}^{\infty}\psi_n^*(x)\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2}dx\end{aligned} \tag{6.135}$$

Da mudança de variável (6.71), e utilizando a Eq. (6.72b), temos:

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}^2\rangle &= -\hbar^2\int_0^\infty \psi_n^*(z)4\gamma_q^2 d^2\frac{d^2\psi_n(z)}{dz^2}\frac{dz}{2\gamma_q d}\\ &= -\hbar^2(2\gamma_q d)\int_0^\infty \psi_n^*(z)\frac{d^2\psi_n(z)}{dz^2}dz. \end{aligned} \tag{6.136}$$

A derivada segunda de $\psi_n(z)$ na equação acima pode ser escrita conforme a Eq. (6.80) com $F(z) = L_n^{(b)}(z)$. Naquela equação, $d^2\psi_n(z)/dz^2$ possui uma dependência em $d^2L_n^{(b)}/dz^2$. Por outro lado, da Eq. (6.81), temos que

$$\frac{d^2L_n^{(b)}}{dz^2} = -\frac{n}{z}L_n^{(b)}(z) - \frac{b+1-z}{z}\frac{dL_n^{(b)}}{dz}, \tag{6.137}$$

e assim, $d^2\psi_n(z)/dz^2$ pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} &= \psi(z)\left[\frac{1}{4}+\frac{(b-1)^2}{4z^2}-\frac{b-1}{2z}-\frac{b-1}{2z^2}\right.\\ &\quad\left.+\frac{b-1-z}{zL_n^{(b)}(z)}\frac{dL_n^{(b)}(z)}{dz}-\frac{n}{z}-\frac{b+1-z}{zL_n^{(b)}(z)}\frac{dL_n^{(b)}(z)}{dz}\right]\\ &= \psi(z)\left[\frac{1}{4}+\frac{(b-1)^2-2(b-1)}{4z^2}-\frac{b-1+2n}{2z}-\frac{2}{zL_n^{(b)}(z)}\frac{dL_n^{(b)}(z)}{dz}\right]. \end{aligned} \tag{6.138}$$

Notando que $b-1+2n = 2(d-1)$, e utilizando a expressão (6.120) podemos escrever que:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} &= A_n(2d)^{1/2}e^{-z/2}z^{(b-1)/2}L_n^{(b)}(z)\\ &\quad\times\left[\frac{1}{4}+\frac{(b-1)(b-3)}{4z^2}+\frac{1-d}{2z}-\frac{2}{zL_n^{(b)}(z)}\frac{dL_n^{(b)}(z)}{dz}\right]. \end{aligned} \tag{6.139}$$

Desta forma, substituindo (6.120) e (6.139) em (6.136), o valor esperado do quadrado do operador momento linear torna-se:

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}^2\rangle = &-\hbar^2(2\gamma_q d)\int_0^\infty A_n^2(2d)e^{-z}z^{(b-1)}[L_n^{(b)}(z)]^2\left[\frac{1}{4}+\frac{(b-1)(b-3)}{4z^2}+\frac{1-d}{2z}\right.\\ &\left.-\frac{2}{zL_n^{(b)}(z)}\frac{dL_n^{(b)}(z)}{dz}\right]dz\\ =&-\frac{\hbar^2(2\gamma_q d)^2 bn!}{(n+b)!}\left\{\frac{1}{4}\int_0^\infty e^{-z}z^{b-1}[L_n^{(b)}(z)]^2dz+(1-d)\int_0^\infty e^{-z}z^{b-2}[L_n^{(b)}(z)]^2dz\right.\\ &\left.+\frac{(b-1)(b-3)}{4}\int_0^\infty e^{-z}z^{b-3}[L_n^{(b)}(z)]^2dz-2\int_0^\infty e^{-z}z^{b-2}L_n^{(b)}(z)\frac{dL_n^{(b)}}{dz}dz\right\}. \end{aligned} \tag{6.140}$$

As quatro intregrais que aparecem na expressão acima são as integrais (C.10), (C.12), (C.14) e (C.13), respectivamente. Segue que:

$$\begin{aligned}
\langle\hat{p}^2\rangle &= -\frac{\hbar^2(2\gamma_q d)^2 bn!}{(n+b)!}\left[\frac{1}{4b}\frac{(n+b)!}{n!}+(1-d)\frac{2n+b+1}{(b-1)b(b+1)}\frac{(n+b)!}{n!}\right.\\
&\quad +\frac{2n(3n+2b+1)}{(b+2)(b+1)b(b-1)}\frac{(n+b)!}{n!}\\
&\quad \left.\frac{(b-1)(b-3)}{4}\frac{(2n+b+1)^2+(2n+1)(2n+b+1)-n(n+1)}{(b+2)(b+1)b(b-1)(b-2)}\frac{(n+b)!}{n!}\right]\\
&= -\frac{\hbar^2(2\gamma_q d)^2 b}{4(b^2-4)b(b^2-1)}\left\{(b^2-4)(b^2-1)\right.\\
&\quad +4(b^2-4)(1-d)(2n+b+1)+4(b-2)(2n)(3n+2b+1)\\
&\quad \left.+(b-1)(b-3)[(2n+b+1)^2+(2n+1)(2n+b+1)-n(n+1)]\right\}. \quad (6.141)
\end{aligned}$$

Após algum algebrismo, e utilizando que $d=(b+2n+1)/2$ e $d\gamma_q^2 = 1/x_0^2 = m_0\omega_0/\hbar$, podemos simplificar a equação anterior, tal que:

$$\begin{aligned}
\langle\hat{p}^2\rangle &= \frac{\hbar^2\gamma_q^2 d^2}{(b^2-4)(b^2-1)}[(2n+1)b^3+2(n^2+n+1)b^2-(2n+1)b-2(n^2+n+1)]\\
&= \frac{\hbar^2\gamma_q^2 d^2}{(b^2-4)(b^2-1)}\left\{(2n+1)(b^2-1)\left[b+\frac{2(n^2+n+1)}{2n+1}\right]\right\}\\
&= \frac{m_0\omega_0\hbar(2n+1)}{2}\frac{b+2n+1}{b^2-4}\left[b+\frac{2(n^2+n+1)}{2n+1}\right]\\
&= \frac{m_0\omega_0\hbar}{2}\left[\frac{(b+2n+1)[(2n+1)b+2(n^2+n+1)]}{b^2-4}\right]\\
&= \frac{m_0\omega_0\hbar}{2}\frac{(2n+1)b^2+[(2n+1)^2+2(n^2+n+1)]b+2(n^2+n+1)(2n+1)}{b^2-4}. \quad (6.142)
\end{aligned}$$

A partir da relação $b=2d-(2n+1)$, equação acima torna-se:

$$\begin{aligned}
\langle\hat{p}^2\rangle &= \frac{m_0\omega_0\hbar}{2}\frac{4d^2(2n+1)-2d(2n+1)^2+4d(n^2+n+1)}{[2d-(2n+1)]^2-4}\\
&= \frac{m_0\omega_0\hbar}{2}\frac{(2d)(2n+1)[2d-(2n+1)]+4d(n^2+n+1)}{[2d-(2n+1)]^2-4}\\
&= m_0\omega_0\hbar\frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)d\left[d-\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]+\frac{d}{2}(n^2+n+1)}{\left[d-\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^2-1}\\
&= m_0\omega_0\hbar\frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)\left[1-\frac{1}{d}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]+\frac{1}{2d}(n^2+n+1)}{\left[1-\frac{1}{d}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^2-\frac{1}{d^2}}\\
&= m_0\omega_0\hbar\left\{\frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)\left[1-\gamma_q^2x_0^2\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]+\frac{\gamma_q^2x_0^2}{2}(n^2+n+1)}{\left[1-\gamma_q^2x_0^2\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^2-(\gamma_q x_0)^4}\right\}. \quad (6.143)
\end{aligned}$$

6.5 Teoria de perturbação independente do tempo para oscilador q-deformado

O estudo de sistemas físicos conservativos em mecânica quântica, ou seja, aqueles dos quais o operador hamiltoniano $\hat{H}$ não depende explicitamente do tempo, é baseado na equação de autoenergias e autoestados de $\hat{H}$. O oscilador harmônico quântico com massa dependente da posição que temos tratado é um destes exemplos que se pode obter analiticamente as soluções através deste método. Por outro lado, a teoria de perturbação independente do tempo de Rayleigh-Schrödinger [152] é uma ferramenta muito importante para determinar os níveis de energia E_n e os autoestados $|n\rangle$ de um sistema físico de forma aproximativa, quando por exemplo a equação de autovalores e autoestados de $\hat{H}$ não pode ser obtida exatamente.

No entanto, afim de ilustrar do ponto de vista didático mais um método para se obter os níveis de energia e os autoestados do oscilador deformado, discutiremos a seguir a aplicação da teoria de perturbação independente do tempo para este tipo de oscilador. Além disso, este método nos permite obter os autoestados do oscilador deformado em termos dos autoestados do oscilador usual de forma aproximativa em primeira ordem de γ_q. Evidentemente, a aplicação deste método pode ser feita para outros sistemas quânticos com massa dependente da posição. Por exemplo, Amir *et al.* utilizaram a teoria de perturbação independente do tempo para obter os níveis de energia, autofunções e os estados coerentes de um oscilador com massa dependente da posição [268].

Como vimos no Capítulo 4, a Eq. (4.78) representa o operador hamiltoniano $\hat{H}$ de uma partícula com massa dependente da posição. Seja o operador energia potencial $V(\hat{x}) = \frac{1}{2}m_0\omega_0^2\hat{x}^2$, temos

$$\begin{aligned}
\hat{H}(\hat{x},\hat{p}) &= \frac{1}{2m_0}\left[\frac{(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}}{2}+\frac{\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})}{2}\right]^2+\frac{1}{2}m_0\omega_0^2\hat{x}^2 \\
&= \frac{1}{2m_0}\left[\hat{p}+\frac{\gamma_q}{2}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})\right]^2+\frac{1}{2}m_0\omega_0^2\hat{x}^2 \\
&= \frac{1}{2m_0}\hat{p}^2++\frac{1}{2}m_0\omega_0^2\hat{x}^2 \\
&\quad +\frac{\gamma_q}{4m_0}\hat{p}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})+\frac{\gamma_q}{4m_0}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})\hat{p}+\frac{\gamma_q^2}{8m_0}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})^2, \qquad (6.144)
\end{aligned}$$

e a equação de autoestados pode ser reescrita como

$$(\hat{H}_0+\hat{V}_q')|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \qquad (6.145)$$

onde $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m_0 + m_0\omega_0^2\hat{x}^2/2$ corresponde ao operador hamiltoniano do oscilador harmônico quântico usual, e $\hat{V}_q'$ é uma perturbação com respeito a $\hat{H}_0$, da qual deno-

minamos de q-perturbação, dada por

$$\hat{V}'_q = \frac{\gamma_q}{4m_0}\hat{p}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p}) + \frac{\gamma_q}{4m_0}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})\hat{p} + \frac{\gamma_q^2}{8m_0}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})^2. \tag{6.146}$$

Da teoria de perturbação independente do tempo, pode-se mostrar que as autoenergias e autoestados são dados por:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda {V'}_{q,nn} + \lambda^2 \sum_{k\neq n} \frac{|{V'}_{q,kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + ..., \tag{6.147}$$

$$\begin{aligned} |n\rangle = {} & |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{{V'}_{q,kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \lambda^2 \left(\sum_{k\neq n}\sum_{l\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{{V'}_{q,kl}{V'}_{q,ln}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} \right. \\ & \left. - \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{{V'}_{q,nn}{V'}_{q,kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \right) + ..., \end{aligned} \tag{6.148}$$

onde λ é um parâmetro que controla a perturbação, $\langle k|\hat{V'}_q|n\rangle = {V'}_{q,kn}$, e $E_n^{(0)}$ e $|n^{(0)}\rangle$ são os níveis de energia e autoestados do hamiltoniano não perturbado $\hat{H}_0$.

Por outro lado, para o oscilador harmônico simples quântico, faz-se útil o uso dos operadores criação $\hat{a}^\dagger$ e aniquilação $\hat{a}$, definidos por:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m_0\omega_0}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m_0\omega_0}\hat{p} \right) \tag{6.149a}$$

e

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m_0\omega_0}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m_0\omega_0}\hat{p} \right), \tag{6.149b}$$

onde $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. O operador hamiltoniano pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{\hbar\omega_0}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger) \\ &= \hbar\omega_0 \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) \\ &= \hbar\omega_0 \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \tag{6.150}$$

onde $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ é chamado operador número. Seja $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$, temos que os autoestados $|n\rangle$ (chamados de estados de Fock) são também autoestados de $\hat{H}_0$. Mostra-se que $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ e $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, com $n = 0, 1, 2, 3...$, e onde $\hat{a}|0\rangle = 0$ ($|0\rangle$ é o estado

fundamental ou estado de vácuo). Das equações (6.149), obtemos

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_0\omega_0}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger), \tag{6.151a}$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m_0\hbar\omega_0}{2}}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger). \tag{6.151b}$$

Os elementos de matriz do potencial de pertubação $V'_{q,kn} = \langle k|\hat{V}'|n\rangle$ que estamos tratando são:

$$V'_{q,kn} = \frac{\gamma_q}{4m_0}\langle k|\hat{p}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})|n\rangle + \frac{\gamma_q}{4m_0}\langle k|(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})\hat{p}|n\rangle + \frac{\gamma_q^2}{8m_0}\langle k|(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})^2|n\rangle. \tag{6.152}$$

Notando que

$$\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x} = i\hbar[(\hat{a}^\dagger)^2-\hat{a}^2], \tag{6.153}$$

e que o efeito deste operador sobre um ket $|n\rangle$ é

$$(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x})|n\rangle = i\hbar\left(-\sqrt{(n-1)n}|n-2\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle\right). \tag{6.154}$$

Calculemos a seguir $\langle k|\hat{p}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})|n\rangle$, $\langle k|(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})\hat{p}|n\rangle$ e $\langle k|(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})^2|n\rangle$. Segue que:

$$\begin{aligned}
\langle k|\hat{p}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})|n\rangle &= \langle k|\hat{p}(i\hbar)\left(-\sqrt{(n-1)n}|n-2\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle\right) \\
&= -\hbar\sqrt{\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}} \\
&\quad \times\langle k|(\hat{a}^\dagger-\hat{a})\left(-\sqrt{(n-1)n}|n-2\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle\right) \\
&= -\hbar\sqrt{\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}} \\
&\quad \times\langle k|\Big(-\sqrt{(n-1)^2n}|n-1\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}|n+3\rangle \\
&\quad +\sqrt{(n-2)(n-1)n}|n-3\rangle - \sqrt{(n+1)(n+2)^2}|n+1\rangle\Big) \\
&= \hbar\sqrt{\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}}\Big[-\sqrt{(n-2)(n-1)n}\delta_{k,n-3} + \sqrt{(n-1)^2n}\delta_{k,n-1} \\
&\quad +\sqrt{(n+1)(n+2)^2}\delta_{k,n+1} - \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\delta_{k,n+3}\Big],
\end{aligned} \tag{6.155a}$$

$$\begin{aligned}
\langle k|(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})\hat{p}|n\rangle &= \langle k|(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})i\sqrt{\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}}(\hat{a}^\dagger-\hat{a})|n\rangle \\
&= i\sqrt{\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}}\langle k|(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})\Big(\sqrt{n+1}|n+1\rangle-\sqrt{n}|n-1\rangle\Big) \\
&= -\hbar\sqrt{\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}} \\
&\quad\times\langle k|\Big[-\sqrt{(n+1)^2n}|n-1\rangle+\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}|n+3\rangle \\
&\quad+\sqrt{(n-2)(n-1)n}|n-3\rangle-\sqrt{n^2(n+1)}|n+1\rangle\Big] \\
&= \hbar\sqrt{\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}}\Big[-\sqrt{(n-2)(n-1)n}\delta_{k,n-3}+\sqrt{(n+1)^2n}\delta_{k,n-1} \\
&\quad+\sqrt{n^2(n+1)}\delta_{k,n+1}-\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\delta_{k,n+3}\Big], \quad (6.155b)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle k|(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})^2|n\rangle &= \langle k|(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})i\hbar\Big(-\sqrt{(n-1)n}|n-2\rangle+\sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle\Big) \\
&= \hbar^2\langle k|\Big[\sqrt{(n-3)(n-2)(n-1)n}|n-4\rangle-(n+1)(n+2)|n\rangle \\
&\quad+n(n-1)|n\rangle-\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}|n+4\rangle\Big] \\
&= \hbar^2\Big[-\sqrt{(n-3)(n-2)(n-1)n}\delta_{k,n-4}+[(n-1)n+(n+1)(n+2)]\delta_{k,n} \\
&\quad-\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}\delta_{k,n+4}\Big]. \quad (6.155c)
\end{aligned}$$

Portanto, os elementos de matriz do operador para o problema são portanto

$$\begin{aligned}
V'_{q,kn} &= \frac{\hbar\gamma_q}{2m_0}\sqrt{\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}}\Big[-\sqrt{(n-2)(n-1)n}\delta_{k,n-3}+\sqrt{n^3}\delta_{k,n-1}+\sqrt{(n+1)^3}\delta_{k,n+1} \\
&\quad-\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\delta_{k,n+3}\Big] \\
&\quad+\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\Big[-\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}\delta_{k,n-4}+2(n^2+n+1)\delta_{k,n} \\
&\quad-\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}\delta_{k,n+4}\Big]. \quad (6.156)
\end{aligned}$$

Da Eq. (6.147), temos que os níveis de energia perturbados são dados por

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + ..., \quad (6.157)$$

onde $E_n^{(0)}$ são os níveis de energia do oscilador hamônico simples não perturbado, $E_n^{(1)}$ e $E_n^{(2)}$ são as correções em primeira e segunda ordem em λ, respectivamente. Fazendo $\lambda = 1$,

e considerando os termos até a segunda ordem em γ_q, temos:

$$E_n^{(1)} = \hat{V}'_{q,nn} = \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{4m_0}(n^2+n+1), \tag{6.158}$$

e

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \sum_{k\neq n}\frac{|V'_{q,kn}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}} \\
&= \frac{|V'_{q(n-3,n)}|^2}{E_n^{(0)}-E_{n-3}^{(0)}} + \frac{|V'_{q(n-1,n)}|^2}{E_n^{(0)}-E_{n-1}^{(0)}} + \frac{|V'_{q(n+1,n)}|^2}{E_n^{(0)}-E_{n+1}^{(0)}} + \frac{|V'_{q(n+3,n)}|^2}{E_n^{(0)}-E_{n+3}^{(0)}} \\
&= \frac{1}{3\hbar\omega_0}\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{4m_0^2}\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}(n-2)(n-1)n + \frac{1}{\hbar\omega_0}\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{4m_0^2}\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}n^3 \\
&\quad -\frac{1}{\hbar\omega_0}\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{4m_0^2}\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}(n+1)^3 - \frac{1}{3\hbar\omega_0}\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{4m_0^2}\frac{m_0\omega_0\hbar}{2}(n+1)(n+2)(n+3) \\
&= \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{24m_0}[(n^3-3n^2+2n)+3(n^3)-3(n^3+3n^2+3n+1)-(n^3+6n^2+11n+6)] \\
&= \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{24m_0}(-18n^2-18n-9).
\end{aligned} \tag{6.159}$$

Desta forma, temos que:

$$\begin{aligned}
E_n &= \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{4m_0}(n^2+n+1) + \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{24m_0}(-18n^2-18n-9) \\
&= \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{24m_0}(-12n^2-12n-3) \\
&= \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{2m_0}\left(n^2+n+\frac{1}{4}\right) \\
&= \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2\gamma_q^2}{2m_0}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2,
\end{aligned} \tag{6.160}$$

conforme obtido anteriormente para o oscilador com massa dependente da posição, seja através da condição de Bohr-Sommerfeld ou da solução da equação de Schrödinger. Similarmente, a partir da Eq. (6.148), temos que na primeira ordem em γ_q:

$$\begin{aligned}
|n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \frac{\gamma_q x_0}{2\sqrt{2}}\left[-\frac{\sqrt{(n-2)(n-1)n}}{3}|(n-3)^{(0)}\rangle + \sqrt{n^3}|(n-1)^{(0)}\rangle\right. \\
&\quad \left. -\sqrt{(n+1)^3}|(n+1)^{(0)}\rangle + \frac{\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}}{3}|(n+3)^{(0)}\rangle\right],
\end{aligned} \tag{6.161}$$

onde $\langle x|n^{(0)}\rangle = \psi_n^{(0)}(x)$ são as funções de onda do oscilador harmônico quântico simples.

Capítulo 7

Conclusões e perspectivas

Generalizações da formulação da mecânica quântica têm sido objetivo de diversos trabalhos [13, 14, 15, 16, 17, 18, 129, 52, 53, 54, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100]. Algumas destas estão relacionadas a equações diferenciais não lineares. Outras estão associadas a equações diferenciais com coeficientes dependentes da posição, que podem por exemplo ser aplicadas para descrever sistemas com uma massa efetiva, ou ainda, uma massa dependente da posição. Nos Capítulos anteriores desta Tese discutimos recentes formulações de equações da mecânica quântica não relativística associadas a uma álgebra deformada não aditiva que emerge da mecânica estatística não extensiva, e da qual denominamos de q-álgebra. Neste último Capítulo sintetizamos alguns resultados que apresentamos neste trabalho.

No Capítulo 2 introduzimos os fundamentos básicos da q-álgebra e propomos alguns novos desenvolvimentos desta ferramenta matemática. Analisamos alguns aspectos da q-álgebra através de operadores aritméticos q-deformados presentes na literatura [7, 8, 86]. Definimos alguns novos possíveis números deformados (número q-deformado x_q, antinúmero q-deformado ${}_qx$, número q-deformado dual $\bar{x}_q$, antinúmero q-deformado ${}_q\bar{x}$) na Seção 2.4. Estes números deformados satisfazem interessantes propriedades em relação aos operadores aritméticos q-deformados definidos previamente por [7, 8]. A partir da função q-exponencial (2.13) é possível definir funções trigonométricas deformadas conforme foi feito em [31, 62, 63]. Utilizando os operadores derivada e derivada dual associados à q-álgebra [8], apresentamos na Seção 2.6 definições de novas funções trigonométricas e hiperbólicas deformadas ($\mathrm{Sn}(x)$, $\mathrm{Cs}(x)$, $\mathrm{Snh}(x)$, $\mathrm{Csh}(x)$, $\mathrm{Sen}(x)$, $\mathrm{Cos}(x)$, $\mathrm{Senh}(x)$ e $\mathrm{Cosh}(x)$) e investigamos algumas de suas propriedades.

No Capítulo 3 apresentamos uma revisão de literatura da equação de Schrödinger generalizada não linear NRT [10]. Os termos não lineares desta equação são caracterizados por um índice q, e suas soluções para uma partícula livre podem ser escritas em termos da função q-exponencial. Desta forma, apresentamos o conceito de ondas q-planas e algumas de suas propriedades conforme desenvolvido em [71]. Também apresentamos a teoria clássica de campos associada a esta mecânica quântica deformada formulada em [108].

Nesta formulação, ao invés da descrição de um sistema físico em termos de um único campo $\Phi(x,t)$ e seu complexo conjugado $\Phi^*(x,t)$ conforme acontece no caso usual, utiliza-se outro campo auxiliar $\Psi(x,t)$ e seu respectivo complexo conjugado $\Psi^*(x,t)$. Como aplicação, discutimos o clássico problema de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito conforme resolvido em [113]. Uma contribuição nossa a este tema foi realizada nas Seções 3.7 e 3.8. Desenvolvemos um possível operador evolução temporal deformado $\hat{\mathcal{U}}_q(t,t_0)$. Para $q \neq 1$, vimos que este operador é não unitário. Propomos uma possível versão da equação de Schrödinger não linear NRT na formulação de vetores ket de estado e apresentamos uma possível conexão desta dinâmica q-deformada com a mecânica estatística não extensiva. Como aplicação revisitamos o problema de precessão de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$, *i.e.*, um sistema que obedece o grupo especial unitário (*special unitary group* – $SU(2)$). Observamos que nesta formulação deformada, o spin do sistema precessiona até atingir um estado estacionário. Esta característica da evolução temporal do sistema está associada ao fenômeno de decoerência quântica devido à não unitariedade do operador $\hat{\mathcal{U}}_q(t,t_0)$.

A partir do Capítulo 4 iniciamos uma discussão a respeito de uma outra versão generalizada da dinâmica quântica, inicialmente introduzida por Costa Filho *et al.* [11], e que está associada a uma equação de Schrödinger linear q-deformada. Esta formulação decorre da definição de um operador translação generalizado que produz deslocamentos infinitesimais relacionados à q-álgebra conforme proposto em [11]. Como consequência, este operador translação deformado tem como gerador de translações um operador momento linear não hermitiano dependente da posição $\hat{p}'_q$, e que consequentemente, é usado para descrever sistemas com uma massa dependente da posição. Através da inclusão de um fator q-exponencial, propomos uma modificação deste operador translação deformado da qual nos levou a uma dedução alternativa de um novo operador momento linear deformado hermitiano $\hat{p}_q$ [33, 169]. Propomos um operador posição $\hat{x}_q$ canonicamente conjugado a $\hat{p}_q$, de forma que este tem a mesma estrututra do q-número definido na Seção 2.4. Estes operadores deformados constituem uma transformação canônica que mapeia uma partícula com massa constante em um espaço deformado para uma partícula com massa dependente da posição em um espaço usual. O efeito da massa dependente da posição pode ser representado por uma equação de Schrödinger linear cujo operador derivada é substituído por um operador q-derivada linear. Investigamos também o efeito das deformações em condições de normalização, equações de continuidade e pacotes de onda para uma partícula livre.

Apesar das formulações generalizadas não linear e linear, discutidas nos Capítulos 3 e 4, respectivamente, apresentarem o parâmetro q como variável de controle de deformação, estas duas formulação são diferentes. Na primeira, a evolução temporal é descrita através de um operador evolução temporal não unitário, de modo que a conservação da probabilidade do sistema é satisfeita apenas para determinadas condições conforme vimos na Seção 3.5. Por outro lado, a segunda formulação surge através do desenvolvimento da

deformação do operador translação (Seção 4.2). Nesta formulação a evolução temporal do sistema não sofre nenhuma modificação em relação ao caso usual, e a deformação espacial está associada a massa efetiva $m(x)$.

Desde o início da formulação da mecânica quântica, as comparações entre as predições quânticas e clássicas foram um assunto muito importante. Neste trabalho, investigamos estas comparações para sistemas com masssa dependente da posição onde analisamos: análogos clássicos para os operadores deformados, teorema de Ehrenfest e aproximação semiclássica. Uma consequência interessante foi que a dinâmica clássica do sistema com massa dependente da posição é dada através de uma lei de Newton deformada para o movimento, cujas taxas de variações temporais do espaço são não lineares e escritas em termos de um operador q-derivada dual em relação àquele presente na equação de Schrödinger linear q-deformada. Vimos ainda que no limite $\hbar \to 0$ (princípio da correspondência), a equação de Schrödinger linear q-deformada recupera a equação de Hamilton-Jacobi para o respectivo problema com massa dependente da posição.

Desenvolvemos ainda uma teoria clássica de campos associada à equação de Schrödinger linear q-deformada, que diferentemente conforme foi proposto em [163] onde são necessários dois campos acoplados e seus respectivos complexos conjugados para descrever um sistema físico, aprensentamos uma formulação que utiliza apenas um único campo.

No Capítulo 5, considerando o efeito da massa dependente da posição, revisitamos problemas típicos da mecânica quântica como poço de potencial quadrado infinito e finito, potencial degrau e tunelamento quântico. Em particular para este primeiro, vimos que os resultados são consistentes com os princípios da incerteza e da correspondência, uma vez que temos tratado com uso de operadores posição e momento canonicamente conjugados e hermitianos.

Por fim, no Capítulo 6 revisitamos o problema do oscilador harmônico q-deformado, inicialmente proposto em [32], mas agora utilizando o operador momento linear generalizado hermitiano $\hat{p}_q$. Particularmente, a transformação canônica $(\hat{x}_q, \hat{p}_q) \to (\hat{x}, \hat{p})$ mapeia uma partícula com massa constante submetida a um potencial de Morse para uma partícula com massa dependente da posição submetida a um potencial quadrático. O problema foi investigado em ambos formalismos clássico e quântico. Especificamente no formalismo clássico, as equações de movimento no espaço de fase (x, p), expressas em termos da q-derivada dual, tem como soluções uma classe de funções trigonométricas deformadas que definimos no Seção 2.4. As trajetórias em ambos espaços de fase (x, p) e (x_q, p_q) foram analisadas para alguns valores do parâmetro de deformação q. No formalismo quântico, revisitamos a solução da equação de Schrödinger para o oscilador harmônico com massa dependente da posição. Vimos que diferentemente como foi feito em [11], o princípio da incerteza é obedecido. Similar ao problema de uma partícula confinada em poço de potencial quadrado infinito, os resultados nos formalismos clássico e quântico foram comparados por meio dos princípios da correspondência. Analisamos ainda o problema com o uso da apro-

ximação WKB e teoria de perturbação independente do tempo como métodos alternativos para se obter os níveis de energia do oscilador harmônico quântico q-deformado.

Como perspectivas de continuidade deste trabalho, enumeramos a seguir algumas possibilidades para as duas recentes formulações deformadas da mecânica quântica que discutimos neste trabalho. Em relação à formulação não linear NRT, podemos citar:

(i) Analisar a possibilidade de construir uma teoria clássica de campos alternativa para a equação de Schrödinger não linear NRT em termos de um único campo, mas com uso de operadores deformados, similar ao que foi feito para a formulação de Nobre-RegoMonteiro para sistemas com massa dependente da posição que apresentamos na Seção 4.8.

(ii) Resolução de um oscilador harmônico quântico através de métodos numéricos, visto que a equação de Schrödinger não linear NRT não pode ser separada segundo afirmam os autores de [113].

(iii) Analisar a aplicação da equação de Schrödinger não linear NRT no estudo de rotações outros grupos especiais unitários, como por exemplo $SU(3)$.

Por outro lado, com relação à formulação q-deformada linear da dinâmica quântica, podemos citar alguns possíveis futuros trabalhos associados aos resultados que apresentamos nesta Tese:

(i) Aplicação do operador hamiltoniano (4.81) para sistemas com massa dependente da posição, associado à equação de Schrödinger linear q-deformada, para outros potenciais interesse, como por exemplo, potenciais periódicos que são importantes no estudo de heteroestruturas, e consequemente, obter possíveis bandas de energia para estes sistemas.

(ii) Conforme vimos, a dinâmica clássica de um sistema com massa dependente da posição está associada a uma de lei de Newton deformada pela aplicação da derivada q-deformada dual $\widetilde{D}_{\gamma_q}$ (Eq. (2.116)), e da qual corresponde ao limite clássico da equação de Schrödinger linear q-deformada que tem o operador derivada usual substituído pelo operador q-derivada. Portanto, poderíamos analisar a possibilidade de desenvolver uma equação de Langevin escrita em termos do operador q-derivada dual, e que leve a uma equação de Fokker-Planck q-deformada em termos do operador q-derivada conforme é feito para o caso usual [131] de uma partícula com massa constante.

(iii) Construir uma formulação de integrais de caminho de Feymann [269] para a equação de Schrödinger linear q-deformada e a dinâmica quântica de sistemas com massa

dependente da posição. Utilizar este formalismo para estudar os sistemas que tratamos nesta Tese, assim como estudar à evolução temporal do oscilador harmônico q-deformado através de um possível propagador q-deformado.

(iv) A aplicação de operadores criação $\hat{a}$ e aniquilação $\hat{a}^\dagger$, formando uma álgebra com o operador número $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$, conhecida como álgebra de Heisenberg, é uma importante técnica para resolução de problemas em mecânica quântica, como por exemplo o oscilador harmônico simples [4].

Uma versão deformada deste método, conhecida como álgebra q-deformada de Heisenberg [19, 20], está associada à formulação q-deformada da mecânica quântica discutida na Seção 2.2. Este formalismo por sua vez tem sido aplicado recentemente para estudar capacidade térmica de sólidos [50] e diamagnetismo [51].

Por outro lado, uma família de álgebras generalizadas de Heisenberg foi construída [270, 271] e pode ser aplicada a qualquer sistema de operadores hamiltonianos hermitianos. A álgebra generalizada de Heisenberg, estabelecida a partir dos operadores criação $\hat{A}$, aniquilação $\hat{A}^\dagger$ e do operador hamiltoniano $\hat{H}$, pode ser utilizada para obter funções de estado e estados coerentes de Glauber de diversos sistemas físicos. Ademais a álgebra generalizada de Heisenberg contém casos particulares como o oscilador harmônico simples e o oscilador q-deformado de Heisenberg.

Ressaltamo que recentes trabalhos têm sido realizados para obter operadores criação e aniquilação para sistemas com massa dependente da posição [268, 272, 273, 274, 275, 276, 277]. Neste sentido, torna-se importante estudos futuros da aplicação da álgebra geneneralizada de Heisenberg para obtenção dos operadores criação e aniquilação do oscilador q-deformado desenvolvido no Capítulo 6, assim como a construção de versões q-deformadas de operador número, estados de Fock e estados coerentes de Glauber.

(v) Além das diversas comparações entre os resultados obtidos nos formalismos clássico e quântico para o sistema com massa dependente da posição que tratamos, poderíamos calcular as correspondentes funções de distribuições de Wigner [144, 145, 146, 148], que são uma importante ferramenta para análise da conexão entre esses dois formalismos. Isto foi feito por exemplo em [278, 279], onde foram calculadas as funções de distribuição de Wigner para um oscilador específico com massa dependente da posição diferente do que tratamos nesta Tese. Em particular, o conceito de espaços não comutativos tem origem a partir da formulação de Wigner para a mecânica quântica em 1932. Uma vez que a equação de Schrödinger linear q-deformada tem uma associação com espaços não comutativos segundo Costa Filho *et al.* afirmam em [11], uma análise de possíveis funções Wigner deformadas associadas a Eq. (4.103) torna-se interessante.

(vi) Estender os resultados da equação de Schrödinger linear q-deformada (ou a equação de Schrödinger para o correspondente sistema com massa dependente da posição) para o caso relativístico, *i.e.*, construir uma equação de Dirac q-deformada para o sistema com massa dependente da posição que temos tratado. Consequemente, analisar as possíveis soluções desta equação para problemas típicos.

Apêndice A

Lista de definições matemáticas

Apresentamos um resumo de algumas definições matemáticas de funções, operações algébricas e operadores q-deformados presentes nesta Tese.

1. Função q-logaritmo (Eq. (2.10)):

$$\ln_q x = \frac{x^{1-q} - 1}{1-q}, \qquad (x > 0). \tag{A.1}$$

2. Função q-exponencial (Eq. (2.13)):

$$\exp_q x = [1 + (1-q)x]_+^{1/(1-q)}, \qquad \text{com} \quad [A]_+ = \max\{A, 0\}. \tag{A.2}$$

3. Operações q-deformadas (Eq.'s (2.42)):

(i) q-soma $\oplus_q$:

$$x \oplus_q y = x + y + (1-q)xy, \tag{A.3a}$$

(ii) q-diferença $\ominus_q$:

$$x \ominus_q y = \frac{x-y}{1+(1-q)y}, \qquad \left(y \neq -\frac{1}{1-q}\right), \tag{A.3b}$$

(iii) q-produto $\otimes_q$:

$$x \otimes_q y = [x^{1-q} + y^{1-q} - 1]_+^{1/(1-q)}, \qquad (x \geq 0, y \geq 0), \tag{A.3c}$$

(iv) q-razão $\oslash_q$:

$$x \oslash_q y = [x^{1-q} - y^{1-q} + 1]_+^{1/(1-q)}, \qquad (x \geq 0, y \geq 0). \tag{A.3d}$$

4. Operações q-deformadas adjuntas (Eq.'s (2.57)):

(i) q-soma adjunta $\oplus^q$:

$$\begin{aligned} x \oplus^q y &= \left[(1-q)\ln\left(e^{\frac{x^{1-q}}{1-q}} + e^{\frac{y^{1-q}}{1-q}}\right)\right]_+^{1/(1-q)} \\ &= \left[1+(1-q)\ln\left(e^{\frac{x^{1-q}-1}{1-q}} + e^{\frac{y^{1-q}-1}{1-q}}\right)\right]_+^{1/(1-q)}, \end{aligned} \tag{A.4a}$$

(ii) q-diferença adjunta $\ominus^q$:

$$\begin{aligned} x \ominus^q y &= \left[(1-q)\ln\left(e^{\frac{x^{1-q}}{1-q}} - e^{\frac{y^{1-q}}{1-q}}\right)\right]_+^{1/(1-q)} \\ &= \left[1+(1-q)\ln\left(e^{\frac{x^{1-q}-1}{1-q}} - e^{\frac{y^{1-q}-1}{1-q}}\right)\right]_+^{1/(1-q)}, \end{aligned} \tag{A.4b}$$

(iii) q-produto adjunto $\otimes^q$:

$$x \otimes^q y = \frac{e^{\ln[1+(1-q)x]_+ \ln[1+(1-q)y]_+/(1-q)} - 1}{1-q}, \tag{A.4c}$$

(iv) q-razão adjunta $\oslash^q$:

$$x \oslash^q y = \frac{e^{(1-q)\ln[1+(1-q)x]_+/\ln[1+(1-q)y]_+} - 1}{1-q}. \tag{A.4d}$$

5. q-soma de n termos idênticos (Eq.'s (2.76) e (2.77)):

$$n \odot_q x = \underbrace{x \oplus_q x \oplus_q \cdots \oplus_q x}_{n \text{ termos}} = \frac{1}{1-q}\Big\{\big[1+(1-q)x\big]^n - 1\Big\} = \ln_q[\exp_q^n(x)]. \tag{A.5}$$

6. q-potência $x^{\wedge_q n}$ (Eq.'s (2.81) e (2.82)):

$$x^{\wedge_q n} = \underbrace{x \otimes_q x \otimes_q \cdots \otimes_q x}_{n \text{ vezes}} = \big[nx^{1-q} - (n-1)\big]_+^{1-q} = \exp_q[n \ln_q x]. \tag{A.6}$$

7. q-soma adjunta de n termos idênticos (Eq. (2.83)):

$$n \odot^q x = \underbrace{x \oplus^q x \oplus^q \cdots \oplus^q x}_{n \text{ termos}} = \left[(1-q)\ln\left(ne^{\frac{x^{1-q}}{1-q}}\right)\right]_+^{1/(1-q)} = x \otimes_q \exp_q[\ln(n)]. \tag{A.7}$$

8. q-potência adjunta $x^{\wedge_q n}$ (Eq. (2.84)):

$$x^{\wedge_q n} = \underbrace{x \otimes^q x \otimes^q \cdots \otimes^q x}_{n \text{ vezes}} = \frac{1}{1-q}\left(\exp\left[(1-q)\left\{\frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q}\right\}^n\right]-1\right) = \ln_q[n \odot^q \exp_q(x)]. \tag{A.8}$$

9. Número q-deformado (Eq. (2.85)):

$$x_q = \frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q} = \ln[\exp_q(x)]. \tag{A.9}$$

10. Propriedades de x_q (Eq.'s (2.86), (2.87), (2.88) e (2.89)):

$$x_q + y_q = (x \oplus_q y)_q, \tag{A.10}$$
$$x_q - y_q = (x \ominus_q y)_q, \tag{A.11}$$
$$x_q y_q = (x \otimes^q y)_q, \tag{A.12}$$
$$x_q / y_q = (x \oslash^q y)_q. \tag{A.13}$$

11. Antinúmero q-deformado (Eq. (2.90)):

$${}_q x = \frac{[\exp(x)]^{1-q}-1}{1-q} = \ln_q[\exp(x)]. \tag{A.14}$$

12. Propriedades de ${}_q x$ (Eq.'s (2.91), (2.92), (2.93) e (2.94)):

$$({}_q x) \oplus_q ({}_q y) = {}_q(x+y), \tag{A.15}$$
$$({}_q x) \ominus_q ({}_q y) = {}_q(x-y), \tag{A.16}$$
$$({}_q x) \otimes^q ({}_q y) = {}_q(xy), \tag{A.17}$$
$$({}_q x) \oslash^q ({}_q y) = {}_q(x/y). \tag{A.18}$$

13. Número q-deformado adjunto (Eq. (2.96)):

$$\bar{x}_q = \exp\left(\frac{x^{1-q}-1}{1-q}\right) = \exp[\ln_q(x)]. \tag{A.19}$$

14. Propriedades de $\bar{x}_q$ (Eq.'s (2.97), (2.98), (2.99) e (2.100)):

$$\bar{x}_q + \bar{y}_q = \overline{(x \oplus_q y)}_q, \tag{A.20}$$
$$\bar{x}_q - \bar{y}_q = \overline{(x \ominus_q y)}_q, \tag{A.21}$$
$$\bar{x}_q \bar{y}_q = \overline{(x \otimes^q y)}_q, \tag{A.22}$$
$$\bar{x}_q / \bar{y}_q = \overline{(x \oslash^q y)}_q. \tag{A.23}$$

15. Antinúmero q-deformado adjunto (2.101):

$$ {}_q\bar{x} = [1 + (1-q)\ln(x)]_+^{1/(1-q)} = \exp_q[\ln(x)]. \tag{A.24} $$

16. Propriedades de ${}_q\bar{x}$ (Eq.'s (2.102), (2.103), (2.104) e (2.105)):

$$ \begin{aligned} ({}_q\bar{x}) \oplus^q ({}_q\bar{y}) &= {}_q\overline{(x+y)}, && \text{(A.25)} \\ ({}_q\bar{x}) \ominus^q ({}_q\bar{y}) &= {}_q\overline{(x-y)}, && \text{(A.26)} \\ ({}_q\bar{x}) \otimes^q ({}_q\bar{y}) &= {}_q\overline{(xy)}, && \text{(A.27)} \\ ({}_q\bar{x}) \oslash^q ({}_q\bar{y}) &= {}_q\overline{(x/y)}. && \text{(A.28)} \end{aligned} $$

17. Relação entre os números deformados (Eq.'s (2.95) e (2.106)):

$$ ({}_qx)_q = {}_q(x_q) = \overline{({}_q\bar{x})}_q = {}_q\overline{(\bar{x}_q)} = x. \tag{A.29} $$

18. q-derivada (Eq.'s (2.113) e (2.123)):

$$ \begin{aligned} D_q f(x) &= \lim_{x' \to x} \frac{f(x') - f(x)}{x' \ominus_q x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x \oplus_q \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \\ &= [1 + (1-q)x] \frac{df(u)}{dx} \\ &= \frac{df(x)}{d_q x}. \end{aligned} \tag{A.30} $$

19. q-derivada dual (Eq.'s (2.116) e (2.124)):

$$ \begin{aligned} \widetilde{D}_q f(x) &= \lim_{x' \to x} \frac{f(x') \ominus_q f(x)}{x' - x} \\ &= \frac{1}{1 + (1-q)f(x)} \frac{df(x)}{dx} \\ &= \frac{d_q f(x)}{dx}. \end{aligned} \tag{A.31} $$

20. Derivadas q-deformadas de segunda ordem (Eq.'s (2.125) e (2.126)):

$$ D_q^2 f(x) = [1 + (1-q)x] \frac{d}{dx} \left\{ [1 + (1-q)x] \frac{df(x)}{dx} \right\}, \tag{A.32} $$

$$ \widetilde{D}_q^2 f(x) = \frac{1}{1 + (1-q)f(x)} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{1 + (1-q)f(x)} \frac{df(x)}{dx} \right]. \tag{A.33} $$

21. q-integral (Eq. (2.127)):

$$\int_{(q)} f(x)dx = \int \frac{f(x)}{1+(1-q)x}dx = \int f(x)d_q x. \tag{A.34}$$

22. q-integral dual (Eq. (2.128)):

$$\widetilde{\int_{(q)}} f(x)dx \equiv \int [1+(1-q)f(x)]f(x)dx. \tag{A.35}$$

23. Outras derivadas deformadas (Eq.'s (2.131) e (2.133)):

$$\hat{D}_q f(x) = [f(x)]^{1-q}\frac{df(x)}{dx}, \tag{A.36}$$

$$\check{D}_q f(x) = \frac{1}{x^{1-q}}\frac{df(x)}{dx}. \tag{A.37}$$

24. Regras da cadeia deformadas para os operadores $\hat{D}_q$ e $\check{D}_q$ (Eq.'s (2.137) e (2.138)):

$$\hat{D}_q z(y(x)) = z^{1-q}\frac{dz}{dy}\frac{dy}{dx}, \tag{A.38}$$

$$\check{D}_q z(y(x)) = \frac{1}{y^{1-q}}\frac{dz}{dy}\frac{dy}{dx}, \tag{A.39}$$

25. Funções trigonométricas q-espirais (Eq.'s (2.145), (2.146), (2.147), (2.148) e (2.157)):

$$\cos_q(x) = \frac{\exp_q(ix)+\exp_q(-ix)}{2} = \rho_q(x)\cos[\theta_q(x)], \tag{A.40}$$

$$\mathrm{sen}_q(x) = \frac{\exp_q(ix)-\exp_q(-ix)}{2i} = \rho_q(x)\mathrm{sen}[\theta_q(x)], \tag{A.41}$$

e

$$\tan_q(x) = \frac{\mathrm{sen}_q(x)}{\cos_q(x)} = \frac{\exp_q(ix)-\exp_q(-ix)}{\exp_q(ix)+\exp_q(-ix)} = \tan[\theta_q(x)], \tag{A.42}$$

com

$$\rho_q^2(x) = \exp_q(ix)\exp_q(-ix) = [1+(1-q)^2x^2]^{1/(1-q)} = \exp_q[(1-q)x^2], \tag{A.43}$$

e

$$\theta_q(x) = \frac{\mathrm{atan}((1-q)x)}{1-q}. \tag{A.44}$$

26. Funções hiperbólicas q-espirais (Eq. (2.159) e (2.165)):

$$\cosh_q(x) = \frac{\exp_q(x)+\exp_q(-x)}{2}, \tag{A.45}$$

$$\mathrm{senh}_q(x) = \frac{\exp_q(x) - \exp_q(-x)}{2}, \tag{A.46}$$

e

$$\tanh_q(x) = \frac{\mathrm{senh}_q(x)}{\cosh_q(x)} = \frac{\exp_q(x) - \exp_q(-x)}{\exp_q(x) + \exp_q(-x)}, \tag{A.47}$$

27. Funções trigonométricas associadas à q-derivada (Eq.'s (2.170), (2.171), (2.173) e (2.176)):

$$\begin{aligned} \mathrm{Cs}_q(x) &= \cos[x_q(x)] \\ &= \cos\left\{\frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q}\right\} \\ &= \frac{[\exp_q(x)]^i + [\exp_q(x)]^{-i}}{2} \\ &= \frac{\exp_q(i \odot_q x) + \exp_q(-i \odot_q x)}{2}, \end{aligned} \tag{A.48}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{Sn}_q(x) &= \mathrm{sen}\,[x_q(x)] \\ &= \mathrm{sen}\left\{\frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q}\right\} \\ &= \frac{[\exp_q(x)]^i - [\exp_q(x)]^{-i}}{2i} \\ &= \frac{\exp_q(i \odot_q x) - \exp_q(-i \odot_q x)}{2i}, \end{aligned} \tag{A.49}$$

$$\mathrm{Tn}_q(x) = \frac{\mathrm{Sn}_q(x)}{\mathrm{Cs}_q(x)} = \tan(x_q(x)), \tag{A.50}$$

28. Funções hiperbólicas associadas à q-derivada (Eq.'s (2.180), (2.181), (2.182) e (2.185)):

$$\begin{aligned} \mathrm{Csh}_q(x) &= \cosh[x_q(x)] \\ &= \cosh\left\{\frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q}\right\} \\ &= \frac{1}{2}\left(\exp_q(x) + \frac{1}{\exp_q(x)}\right), \end{aligned} \tag{A.51}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{Snh}_q(x) &= \mathrm{senh}\,[x_q(x)] \\ &= \mathrm{senh}\left\{\frac{\ln[1+(1-q)x]}{1-q}\right\} \\ &= \frac{1}{2}\left(\exp_q(x) - \frac{1}{\exp_q(x)}\right). \end{aligned} \tag{A.52}$$

$$\mathrm{Tnh}_q(x) = \frac{\mathrm{Snh}_q(x)}{\mathrm{Csh}_q(x)} = \tanh(x_q(x)). \tag{A.53}$$

29. Funções trigonométricas associadas à q-derivada dual (Eq.'s (2.191) e (2.192)):

$$\mathrm{Cos}_q(x) = \cos\left[\Theta_q(x)\right] = \frac{\exp[i\Theta_q(x)] + \exp[-i\Theta_q(x)]}{2}, \tag{A.54}$$

$$\mathrm{Sen}_q(x) = \mathrm{sen}\left[\Theta_q(x)\right] = \frac{\exp[i\Theta_q(x)] - \exp[-i\Theta_q(x)]}{2i}, \tag{A.55}$$

com

$$\Theta_q(x) = \begin{cases} 2\arctan\left[\sqrt{\dfrac{1+a_q}{1-a_q}}\tan\left(\sqrt{1-a_q^2}\dfrac{x}{2}\right)\right], & |a_q| < 1 \\ 2\arctan\left[\sqrt{\left|\dfrac{a_q+1}{a_q-1}\right|}\tanh\left(\sqrt{a_q^2-1}\dfrac{x}{2}\right)\right], & |a_q| > 1. \end{cases} \tag{A.56}$$

30. Funções hiperbólicas associadas à q-derivada dual (Eq.'s (2.203) e (2.204)):

$$\mathrm{Cosh}_q(x) = \cosh\left[\vartheta_q(x)\right] = \frac{\exp[i\vartheta_q(x)] + \exp[-i\vartheta_q(x)]}{2}, \tag{A.57}$$

$$\mathrm{Senh}_q(x) = \mathrm{senh}\left[\vartheta_q(x)\right] = \frac{\exp[i\vartheta_q(x)] - \exp[-i\vartheta_q(x)]}{2i}, \tag{A.58}$$

com

$$\vartheta_q(x) = \begin{cases} 2\mathrm{arctanh}\left[\sqrt{\dfrac{1+a_q}{1-a_q}}\tanh\left(\sqrt{1-a_q^2}\dfrac{x}{2}\right)\right], & |a_q| < 1 \\ 2\mathrm{arctanh}\left[\sqrt{\left|\dfrac{a_q+1}{a_q-1}\right|}\tan\left(\sqrt{a_q^2-1}\dfrac{x}{2}\right)\right], & |a_q| > 1, \end{cases} \tag{A.59}$$

onde $a_q = 1 - q$.

Apêndice B

Equações de Ehrenfest para sistemas com massa efetiva

Neste Apêndice demonstramos as equações de Ehrenfest a partir da formulação ondulatória. Calculemos a seguir a taxa de variação temporal do valor esperado de $\langle\hat{x}\rangle$ para o sistema com massa dependente da posição que temos tratado. Neste caso, uma vez que

$$\langle\hat{x}\rangle = \langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx, \tag{B.1}$$

temos:

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} &= \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial t}x\Psi(x,t)dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}dx. \end{aligned}\tag{B.2}$$

Substituindo as Eq.'s (4.90a) e (4.90b) na equação acima, temos

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} &= \frac{\hbar}{2im_0}\int_{-\infty}^{+\infty} x(1+\gamma_q x)^2\Psi(x,t)\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2}dx \\ &+\frac{\hbar\gamma_q}{im_0}\int_{-\infty}^{+\infty} x(1+\gamma_q x)^2\Psi(x,t)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}dx \\ &+\frac{\hbar}{8im_0}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx - \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)xV(x)\Psi(x,t) \\ &-\frac{\hbar}{2im_0}\int_{-\infty}^{+\infty} x(1+\gamma_q x)^2\Psi^*(x,t)\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx \\ &-\frac{\hbar\gamma_q}{im_0}\int_{-\infty}^{+\infty} x(1+\gamma_q x)^2\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\ &-\frac{\hbar}{8im_0}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)xV(x)\Psi(x,t), \end{aligned}\tag{B.3}$$

ou ainda,

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} =$$
$$\frac{\hbar}{2im_0}\int_{-\infty}^{+\infty} x(1+\gamma_q x)^2\Psi(x,t)\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2}dx + \frac{\hbar\gamma_q}{im_0}\int_{-\infty}^{+\infty} x(1+\gamma_q x)^2\Psi(x,t)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}dx$$
$$-\frac{\hbar}{2im_0}\int_{-\infty}^{+\infty} x(1+\gamma_q x)^2\Psi^*(x,t)\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx - \frac{\hbar\gamma_q}{im_0}\int x(1+\gamma_q x)^2\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx. \quad \text{(B.4)}$$

Integrando por partes a primeira e a terceira integrais acima, temos

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} &= \left[x(1+\gamma_q x)^2\Psi(x,t)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\right]\Bigg|_{-\infty}^{+\infty} \\
&-\frac{\hbar}{2im_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}[x(1+\gamma_q x)^2\Psi(x,t)]dx \\
&+\frac{\hbar\gamma_q}{im_0}\int_{-\infty}^{+\infty} x(1+\gamma_q x)\Psi(x,t)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}dx \\
&-\left[x(1+\gamma_q x)^2\Psi(x,t)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\right]\Bigg|_{-\infty}^{+\infty} \\
&+\frac{\hbar}{2im_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}[x(1+\gamma_q x)^2\Psi^*(x,t)]dx \\
&-\frac{\hbar\gamma_q}{im_0}\int_{-\infty}^{+\infty} x(1+\gamma_q x)\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx. \qquad \text{(B.5)}
\end{aligned}$$

Como os termos dentro dos colchetes são nulos, da equação acima segue que:

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} &= -\frac{\hbar}{2im_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}(1+\gamma_q x)^2\Psi(x,t)dx \\
&-\frac{\hbar\gamma_q}{im_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}x(1+\gamma_q x)\Psi(x,t)dx \\
&-\frac{\hbar}{2im_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}x(1+\gamma_q x)^2\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&+\frac{\hbar\gamma_q}{im_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}x(1+\gamma_q x)\Psi(x,t)dx \\
&+\frac{\hbar}{2im_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)(1+\gamma_q x)^2\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&+\frac{\hbar\gamma_q}{im_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)x(1+\gamma_q x)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&+\frac{\hbar}{2im_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}x(1+\gamma_q x)^2\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&-\frac{\hbar\gamma_q}{im_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)x(1+\gamma_q x)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \qquad \text{(B.6)}
\end{aligned}$$

ou simplesmente,

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} &= \frac{1}{2m_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}(1+\gamma_q x)^2\Psi(x,t)dx \\ &+\frac{1}{2m_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)(1+\gamma_q x)^2\left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx. \end{aligned} \tag{B.7}$$

Uma vez que $\langle x|\hat{p}|\alpha\rangle = (\hbar/i)\partial\Psi(x,t)/\partial x$ e $\langle\alpha|\hat{p}|x\rangle = -(\hbar/i)\partial\Psi^*(x,t)/\partial x$, esta última expressão pode ser reescrita como

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{1}{2m_0}\langle\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\rangle + \frac{1}{2m_0}\langle(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})^2\hat{p}\rangle, \tag{B.8}$$

ou seja,

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{1}{2}\left(\left\langle\hat{p}\frac{1}{m(\hat{x})}\right\rangle + \left\langle\frac{1}{m(\hat{x})}\hat{p}\right\rangle\right), \tag{B.9}$$

onde utilizamos a Eq. (4.80) nesta última, demonstrando assim a Eq. (4.176a).

Para determinarmos $d\langle\hat{p}\rangle/dt$, façamos um cálculo similar ao anterior para obter $d\langle\hat{x}\rangle/dt$. Neste caso, temos que

$$\langle\hat{p}\rangle = \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t)dx, \tag{B.10}$$

e assim

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t)dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial t}\left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx + \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}\right]dx. \end{aligned} \tag{B.11}$$

Substituindo as Eq.'s (4.90a) e (4.90b), e observando que para $m(x) = m_0/(1+\gamma_q x)^2$, temos

$$\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right] = \frac{2\gamma_q(1+\gamma_q x)}{m_0}, \tag{B.12}$$

segue que:

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar}{2i}\frac{1}{m(x)}\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\hbar}{2i}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x} + \frac{\hbar\gamma_q^2}{8im_0}\Psi^*(x,t)\right. \\ &\left.-\frac{1}{i\hbar}V(x)\Psi^*(x,t)\right\}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\ &+\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left\{-\frac{\hbar}{2i}\frac{1}{m(x)}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\hbar}{2i}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}\right. \\ &\left.-\frac{\hbar\gamma_q^2}{8im_0}\Psi(x,t) + \frac{1}{i\hbar}V(x)\Psi(x,t)\right\}dx, \end{aligned} \tag{B.13}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= -\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2}\frac{1}{m(x)}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&-\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&-\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx+\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)V(x)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&+\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx \\
&+\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{1}{m(x)}\frac{\partial^3\Psi(x,t)}{\partial x^3}dx \\
&+\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&+\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx \\
&+\frac{\hbar^2\gamma_q^2}{8m_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx-\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{dV}{dx}\Psi(x,t)dx \\
&-\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)V(x)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx. \qquad \text{(B.14)}
\end{aligned}$$

Simplificando a expressão acima, temos

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= -\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2}\frac{1}{m(x)}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&-\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&+\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx \\
&+\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{1}{m(x)}\frac{\partial^3\Psi(x,t)}{\partial x^3}dx \\
&+\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&-\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{dV}{dx}\Psi(x,t)dx. \qquad \text{(B.15)}
\end{aligned}$$

Seja

$$I'=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{1}{m(x)}\frac{\partial^3\Psi(x,t)}{\partial x^3}dx$$

e

$$I''=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx.$$

Da integração por partes dos temos:

$$\begin{aligned}
I' &= \left[\Psi^*(x,t)\frac{1}{m(x)}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right]\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left[\Psi^*(x,t)\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{1}{m(x)}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx - \left[\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{1}{m(x)}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}\right]\Big|_{-\infty}^{\infty} \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx + \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2}\frac{1}{m(x)}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \qquad \text{(B.16)}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
I'' &= \left\{\frac{\partial}{\partial x}\left[\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}\right]\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\right\}\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left[\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}\right]\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]dx \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx - \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx. \qquad \text{(B.17)}
\end{aligned}$$

Substituindo I' e I'' em (B.15), temos

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= -\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2}\frac{1}{m(x)}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&\quad -\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&\quad +\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx \\
&\quad -\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx \\
&\quad +\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^2\Psi^*(x,t)}{\partial x^2}\frac{1}{m(x)}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&\quad +\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&\quad -\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx \\
&\quad -\frac{\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx \\
&\quad -\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{dV}{dx}\Psi(x,t)dx, \qquad \text{(B.18)}
\end{aligned}$$

e simplificando os termos acima, podemos escrever:

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= -\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left[-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\right]\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(x)}\right]\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}\right] \\ &\quad -\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{dV}{dx}\Psi(x,t)dx. \end{aligned} \tag{B.19}$$

A equação acima pode ser reescrita em termos dos operadores $\hat{x}$ e $\hat{p}$ como:

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= -\frac{1}{2}\left\langle\hat{p}\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{m(\hat{x})}\right]\hat{p}\right\rangle-\left\langle\frac{dV}{d\hat{x}}\right\rangle \\ &= -\frac{\gamma_q}{m_0}\langle\hat{p}(\hat{1}+\gamma_q\hat{x})\hat{p}\rangle-\left\langle\frac{dV}{d\hat{x}}\right\rangle, \end{aligned} \tag{B.20}$$

demonstrando assim a Eq. (4.176b).

Apêndice C

Algumas propriedades dos polinômios associados de Laguerre

Em diversas aplicações, em particular na mecânica quântica, se faz necessário o uso dos polinômios associados de Laguerre definidos por [280, 281]

$$L_n^{(k)}(x) \equiv (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{n+k}(x) \tag{C.1}$$

onde $L_n(x)$ são os polinômios de Laguerre, e estes últimos podem ser obtidos a partir da fórmula de Rodrigues

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}) \tag{C.2}$$

onde n é um inteiro.

Por diferenciação da equação (C.1), tem-se que os polinômios associados de Laguerre satisfazem a equação diferencial ordinária[1]

$$x\frac{d^2 L_n^{(k)}(x)}{dx^2} + (k+1-x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx} + nL_n^{(k)}(x) = 0. \tag{C.3}$$

Equações como esta acima aparecem em soluções da equação de Schrödinger para alguns potenciais, por exemplo, o potencial coulombiano no problema do átomo de hidrogênio, ou o potencial de Morse utilizado para descrever interações entre átomos em moléculas diatômicas.

Substituindo (C.2) em (C.1) pode-se também obter a seguinte representação de Rodrigues para os polinômios associados de Laguerre:

$$L_n^{(k)}(x) = \frac{e^x x^{-k}}{n!} \frac{d^n}{dx^n}(x^{n+k} e^{-x}). \tag{C.4}$$

Notemos que nesta forma, k não precisa ser um inteiro, e a equação (C.4) é utilizada para

[1] Alguns autores definem $L_n^{(k)}(x)$ como $(d^k/dx^k)L_n(x)$, e na qual, neste caso, satisfazem a equação diferencial: $xd^2L_n^{(k)}(x)/dx^2 + (k+1-x)dL_n^{(k)}(x)/dx + (n-k)L_n^{(k)}(x) = 0$.

definir $L_n^{(k)}$ para qualquer $k > -1$.

A partir da Eq. (C.4), os polinômios associados de Laguerre podem ser escritos como

$$L_n^{(k)}(x) = \sum_{m=0}^{n} (-1)^m \binom{n+k}{n-m} \frac{x^m}{m!}. \tag{C.5}$$

A tabela C.1 mostra alguns polinômios associados de Laguerre de interesse nesta Tese.

Tabela C.1: Polinômios associados de Laguerre $L_n^{(k)}(x)$ para $n = 0$, 1, 2 e 3.

Alguns polinômios associados de Laguerre $L_n^{(k)}(x)$			
$n=0$	$L_0^{(k)}(x)$	$=$	1
$n=1$	$L_1^{(k)}(x)$	$=$	$-x+k+1$
$n=2$	$L_2^{(k)}(x)$	$=$	$\frac{1}{2}[x^2 - 2(k+2)x + (k+2)(k+1)]$
$n=3$	$L_3^{(k)}(x)$	$=$	$-\frac{1}{6}[x^3 - 4(k+4)x^3 + 6(k+4)(k+3)x^2$ $-4(k+4)(k+3)(k+2)x + (k+4)(k+3)(k+2)(k+1)]$

Algumas relações de recorrência para os polinômios associados de Laguerre tornam-se relevantes para nossos objetivos neste trabalho:

$$L_n^{(k+1)}(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i^{(k)}(x), \tag{C.6}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx} &= -L_{n-1}^{(k+1)}(x) \\ &= \frac{1}{x}\left[nL_n^{(k)}(x) - (n+k)L_{n-1}^{(k)}(x)\right] \\ &= \frac{dL_{n-1}^{(k)}(x)}{dx} - L_{n-1}^{(k)}(x). \end{aligned} \tag{C.7}$$

Usando a equação diferencial (C.3), pode-se mostrar que os polinômios associados de Laguerre são ortogonais no intervalo $(0, \infty)$ com respeito a função peso $x^k e^{-x}$, ou seja,

$$I_1 = \int_0^\infty x^k e^{-x} L_n^{(k)}(x) L_m^{(k)}(x) dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ \frac{(n+k)!}{n!}, & m = n. \end{cases} \tag{C.8}$$

Pode-se também obter a seguinte integral envolvendo as funções $L_n^{(k)}(x)$:

$$I_2 = \int_0^\infty e^{-x} x^{k+1} \left[L_n^{(k)}(x)\right]^2 dx = \frac{(n+k)!}{n!}(2n+k+1). \tag{C.9}$$

Estas duas integrais acima são bem conhecidas e geralmente encontradas em livros de Física Matemática.

Nesta Tese, utiliza-se também outras integrais envolvendo os polinômios associados de Laguerre, e que podem ser obtidas a partir das propriedades apresentadas anteriormente neste apêndice. Em particular,

$$I_3 = \int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}[L_n^{(k)}(x)]^2dx = \frac{1}{k}\frac{(n+k)!}{n!}, \tag{C.10}$$

$$I_4 = \int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx = -\frac{n}{(k+1)k}\frac{(n+k)!}{n!}, \tag{C.11}$$

$$I_5 = \int_0^\infty e^{-x}x^{k-2}[L_n^{(k)}(x)]^2dx = \frac{2n+k+1}{(k+1)k(k-1)}\frac{(n+k)!}{n!}, \tag{C.12}$$

$$I_6 = \int_0^\infty e^{-x}x^{k-2}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx = -\frac{n(3n+2k+1)}{(k+2)(k+1)k(k-1)}\frac{(n+k)!}{n!}, \tag{C.13}$$

$$\begin{aligned} I_7 &= \int_0^\infty e^{-x}x^{k-3}[L_n^{(k)}(x)]^2dx \\ &= \frac{(2n+k+1)^2+(2n+1)(2n+k+1)-n(n+1)}{(k+2)(k+1)k(k-1)(k-2)}\frac{(n+k)!}{n!}. \end{aligned} \tag{C.14}$$

Estas integrais tornam-se importantes no cálculo de valores esperados no problema do oscilador harmônico quântico q-deformado. A seguir, faremos a demonstração de cada uma dessas integrais acima, a partir das integrais I_1 e I_2, e de algumas das demais propriedades citadas anteriormente neste Apêndice.

Demonstração da Eq. (C.10):

Seja

$$I_3 = \int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}[L_n^{(k)}(x)]^2dx, \tag{C.15}$$

obtemos a partir de uma integração por partes:

$$\begin{aligned} I_3 &= \left[\frac{1}{k}e^{-x}x^k[L_n^{(k)}(x)]^2\right]\Big|_0^\infty - \frac{1}{k}\int_0^\infty x^k\frac{d}{dx}\left\{e^{-x}[L_n^{(k)}(x)]^2\right\}dx \\ &= \frac{1}{k}\int_0^\infty e^{-x}x^k[L_n^{(k)}(x)]^2dx - \frac{2}{k}\int_0^\infty e^{-x}x^kL_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx. \end{aligned} \tag{C.16}$$

Utlizando a Eq. (C.9), podemos escrever

$$I_3 = \frac{1}{k}\frac{(n+k)!}{n!} - \frac{2}{k}I_3', \tag{C.17}$$

onde

$$I_3' = \int_0^\infty e^{-x}x^kL_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx. \tag{C.18}$$

A partir das propriedades (C.6) e (C.7), temos:

$$\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx} = -\sum_{i=0}^{n-1} L_i^{(k)}(x). \tag{C.19}$$

Segue que:

$$\begin{aligned} I_3' &= \int_0^\infty e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)\left[-\sum_{i=0}^{n-1} L_i^{(k)}(x)\right]dx = -\sum_{i=0}^{n-1}\int_0^\infty e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)L_i^{(k)}(x)dx \\ &= -\sum_{i=0}^{n-1}\frac{(n+i)!}{n!}\delta_{n,i} = 0. \end{aligned} \tag{C.20}$$

E assim:

$$I_3 = \frac{1}{k}\frac{(n+k)!}{n!}. \tag{C.21}$$

Demonstração da Eq. (C.11):

Através de integração por partes, temos que:

$$\begin{aligned} I_4 &= \int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx \\ &= \left[\frac{1}{k}e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}\right]\Bigg|_0^\infty - \frac{1}{k}\int_0^\infty x^k\frac{d}{dx}\left[e^{-x}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}\right]dx \\ &= \frac{1}{k}\int_0^\infty e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx - \frac{1}{k}\int_0^\infty e^{-x}x^k\left(\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}\right)^2 dx \\ &\quad -\frac{1}{k}\int_0^\infty e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)\frac{d^2L_n^{(k)}}{dx^2}dx. \end{aligned} \tag{C.22}$$

Denominando cada uma das integrais nos três termos do lado direito da integral acima respectivamente por I_4', I_4'' e I_4''', temos que $I_4 = (I_4' - I_4'' - I_4''')/k$. Segue que:

$$\begin{aligned} I_4' &= \int_0^\infty e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx = -\int_0^\infty e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)L_{n-1}^{(k+1)}(x)dx \\ &= -\int_0^\infty e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)\sum_{i=0}^{n-1}L_i^{(k)}(x)dx = -\sum_{i=0}^{n-1}\int_0^\infty e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)L_i^{(k)}(x)dx \\ &= 0, \end{aligned} \tag{C.23}$$

onde utilizamos as propriedades (C.7) e (C.8).

Para I_4'', temos

$$I_4'' = \int_0^\infty e^{-x}x^k\left[\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}\right]^2 dx = \int_0^\infty e^{-x}x^k[L_{n-1}^{(k+1)}(x)]^2 dx, \tag{C.24}$$

e comparando com a Eq. (C.10), segue que:

$$I_4'' = \frac{1}{k+1}\frac{(k+1+n-1)!}{(n-1)!} = \frac{n}{k+1}\frac{(n+k)!}{n!}. \tag{C.25}$$

E para I_4''', dada por

$$I_4''' = \int_0^\infty e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)\frac{d^2L_n^{(k)}}{dx^2}dx, \tag{C.26}$$

utilizando a equação diferencial (C.3), temos que:

$$\begin{aligned} I_4''' &= \int_0^\infty e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)\frac{1}{x}\left[-nL_n^{(k)}(x) - (k+1-x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}\right]dx, \\ &= -n\int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}[L_n^{(k)}(x)]^2dx - (k+1)\int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}}{dx}dx \\ &\quad + \int_0^\infty e^{-x}x^k L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx \end{aligned} \tag{C.27}$$

A primeira, segunda integrais acima são respectivamente dadas pelas Eq.'s (C.10) e (C.11). A terceita integral é a própria definição de I_4. Portanto,

$$I_4''' = -\frac{n}{k}\frac{(n+k)!}{n!} - (k+1)I_4. \tag{C.28}$$

Diante disso,

$$\begin{aligned} I_4 &= \frac{1}{k}(I_4' - I_4'' - I_4''') \\ &= \frac{1}{k}\left[0 - \frac{n}{k+1}\frac{(n+k)!}{n!} + \frac{n}{k}\frac{(n+k)!}{n!} + (k+1)I_4\right], \end{aligned} \tag{C.29}$$

e resolvendo a equação acima, obtemos

$$I_4 = -\frac{n}{(k+1)k}\frac{(n+k)!}{n!}, \tag{C.30}$$

como queríamos demonstrar.

Demonstração da Eq. (C.12):

Aplicando a integração por partes:

$$\begin{aligned} I_5 &= \int_0^\infty e^{-x}x^{k-2}[L_n^{(k)}(x)]^2dx \\ &= \left\{\frac{1}{k-1}e^{-x}x^{k-1}[L_n^{(k)}(x)]^2\right\}\Big|_0^\infty - \frac{1}{k-1}\int_0^\infty x^{k-1}\frac{d}{dx}\left\{e^{-x}[L_n^{(k)}(x)]^2\right\}dx \\ &= \frac{1}{k-1}\int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}[L_n^{(k)}(x)]^2dx - \frac{2}{k-1}\int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx \\ &= \frac{1}{k-1}I_3 - \frac{2}{k-1}I_4 \end{aligned} \tag{C.31}$$

e que leva a relação

$$-\frac{1}{2}I_3 + I_4 + \frac{k-1}{2}I_5 = 0. \tag{C.32}$$

A integral I_5 em termos de n e k pode ser obtida utilizando as Eq.'s (C.10) e (C.11):

$$\begin{aligned} I_5 &= \frac{1}{k-1}\left[\frac{1}{k}\frac{(n+k)!}{n!}\right] - \frac{2}{k-1}\left[\frac{n}{(k+1)k}\frac{(n+k)!}{n!}\right] \\ &= \frac{2n+k+1}{(k+1)k(k-1)}\frac{(n+k)!}{n!}, \end{aligned} \tag{C.33}$$

conforme queríamos demonstrar.

Demonstração da Eq. (C.13):

Mais uma vez, aplicando a integração por partes:

$$\begin{aligned} I_6 &= \int_0^\infty e^{-x}x^{k-2}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx \\ &= \left\{\frac{1}{k-1}e^{-x}x^{k-1}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}\right\}\Big|_0^\infty - \frac{1}{k-1}\int_0^\infty x^{k-1}\frac{d}{dx}\left\{e^{-x}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}\right\}dx \\ &= \frac{1}{k-1}\int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx - \frac{1}{k-1}\int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}\left(\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}\right)^2dx \\ &\quad -\frac{1}{k-1}\int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}L_n^{(k)}(x)\frac{d^2L_n^{(k)}(x)}{dx^2}dx. \end{aligned} \tag{C.34}$$

A integral acima pode ser escrita em termos de três integrais denominadas I_6', I_6'' e I_6''', respectivamente, de forma que:

$$I_6 = \frac{1}{k-1}(I_6' - I_6'' - I_6'''). \tag{C.35}$$

A primeira integral acima é a Eq. (C.11): $I_6' = I_4$. A segunda integral, I_6'', pode ser calculada utilizando a propriedade dada por (C.7) e a relação (C.12). De fato,

$$\begin{aligned} I_6'' &= \int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}\left(\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}\right)^2 dx \\ &= \int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}\left[L_{n-1}^{(k+1)}(x)\right]^2 dx \\ &= \frac{[(n-1)+(k+1)]!}{(n-1)!}\frac{2(n-1)+(k+1)+1}{[(k+1)-1](k+1)[(k+1)+1]} \\ &= \frac{n(2n+k)}{(k+2)(k+1)k}\frac{(n+k)!}{n!}, \end{aligned} \tag{C.36}$$

ou ainda,

$$I_6'' = -\frac{(2n+k)}{k+2}I_4. \tag{C.37}$$

Já a terceira integral da Eq. (C.34) é obtida utilizando a equação diferencial (C.3).

$$\begin{aligned} I_6''' &= \int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}L_n^{(k)}(x)\frac{d^2L_n^{(k)}(x)}{dx^2}dx \\ &= \int_0^\infty e^{-x}x^{k}L_n^{(k)}(x)\frac{1}{x}\left[-nL_n^{(k)}(x)-(k+1-x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}\right]dx, \\ &= -n\int_0^\infty e^{-x}x^{k-2}[L_n^{(k)}(x)]^2dx-(k+1)\int_0^\infty e^{-x}x^{k-2}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}}{dx}dx \\ &\quad +\int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx, \end{aligned} \tag{C.38}$$

ou ainda,

$$I_6''' = -(k+1)I_6 + I_4 - nI_5. \tag{C.39}$$

Substiuindo na Eq. (C.35) as expressões de I_6', I_6'' e I_6''' que calculamos acima, temos que

$$I_6 = \frac{1}{k-1}\left(I_6' - I_6'' - I_6'''\right) = \frac{1}{k-1}\left\{I_4 + \frac{(2n+k)}{k+2}I_4 - [-(k+1)I_6 + I_4 - nI_5]\right\},$$

que nos dá

$$I_6 = -\frac{1}{2}\left(\frac{2n+k}{k+2}\right)I_4 - \frac{n}{2}I_5. \tag{C.40}$$

Substituindo as Eq.'s (C.11) e (C.12), vem que:

$$\begin{aligned} I_6 &= \frac{1}{2}\left(\frac{2n+k}{k+2}\right)\frac{n}{(k+1)k}\frac{(n+k)!}{n!} - \frac{n}{2}\frac{2n+k+1}{(k+1)k(k-1)}\frac{(n+k)!}{n!} \\ &= \frac{1}{2}\frac{n(n+k)!}{(k+2)(k+1)k(k-1)}\left[(2n+k)(k-1)-(2n+k+1)(k+2)\right] \\ &= \frac{1}{2}\frac{n(n+k)!}{(k+2)(k+1)k(k-1)}(2nk-2n+k^2-k-2nk-k^2-k-4n-2k-2) \\ &= -\frac{1}{2}\frac{n(n+k)!}{(k+2)(k+1)k(k-1)}(6n+4k+2) \\ &= -\frac{n(3n+2k+1)}{(k+2)(k+1)k(k-1)}\frac{(n+k)!}{n!}, \end{aligned} \tag{C.41}$$

demonstrando assim a equação (C.13).

Demonstração da Eq. (C.14):

Utilizando a integração por partes, temos que:

$$\begin{aligned} I_7 &= \int_0^\infty e^{-x}x^{k-3}[L_n^{(k)}(x)]^2dx \\ &= \left\{\frac{1}{k-2}e^{-x}x^{k-2}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}\right\}\Bigg|_0^\infty - \frac{1}{k-2}\int_0^\infty x^{k-2}\frac{d}{dx}\left\{e^{-x}[L_n^{(k)}(x)]^2\right\}dx \\ &= \frac{1}{k-2}\int_0^\infty e^{-x}x^{k-2}[L_n^{(k)}(x)]^2dx - \frac{2}{k-2}\int_0^\infty e^{-x}x^{k-2}L_n^{(k)}(x)\frac{dL_n^{(k)}(x)}{dx}dx \\ &= \frac{1}{k-2}I_5 - \frac{2}{k-2}I_6 \end{aligned} \tag{C.42}$$

Substituindo as Eq's. (C.12), e (C.13):

$$\begin{aligned} I_7 &= \frac{1}{k-2}\frac{2n+k+1}{(k+1)k(k-1)}\frac{(n+k)!}{n!} - \frac{2}{k-2}\frac{n(3n+2k+1)}{(k+2)(k+1)k(k-1)}\frac{(n+k)!}{n!} \\ &= \frac{(2n+k+1)(k+2)+2n(3n+2k+1)}{(k+2)(k+1)k(k-1)(k-2)}\frac{(n+k)!}{n!} \\ &= \frac{(2n+k+1)(k+2)+2n[(2n+k+1)+(n+k)]}{(k+2)(k+1)k(k-1)(k-2)}\frac{(n+k)!}{n!} \\ &= \frac{(2n+k+1)(2n+k+2)+2n(n+k)}{(k+2)(k+1)k(k-1)(k-2)}\frac{(n+k)!}{n!} \\ &= \frac{(2n+k+1)[(2n+k+1)+1]+2n[(2n+k+1)-(n+1)]}{(k+2)(k+1)k(k-1)(k-2)}\frac{(n+k)!}{n!} \\ &= \frac{(2n+k+1)^2+(2n+1)(2n+k+1)-n(n+1)}{(k+2)(k+1)k(k-1)(k-2)}\frac{(n+k)!}{n!}, \end{aligned} \tag{C.43}$$

como queríamos demonstrar.

Referências Bibliográficas

[1] J. F. Rocha (organizador); *Origens e evolução das ideias da física* (Edufba, Salvador, 2011). 1

[2] E. Schrödinger; Phys. Rev. **28** (6), 1049 (1926). 1

[3] M. Born, W. Heisenberg e P. Jordan; Z. Phys. **35**, 557 (1926). [Tradução para o inglês em B. L. van der Waerden (Editor); *Sources of Quantum Mechanics* (Dover, New York, 1968)]. 1

[4] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu e Franck Laloë; *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons, New York, 1977). 1, 158, 231

[5] C. Kittel; *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons, $6^{\underline{\text{th}}}$ ed., New York, 1986). 2, 4

[6] D. J. Griffiths; *Mecânica Quântica* (Person, $2^{\underline{nd}}$ ed., São Paulo, 2011). 3, 111, 148

[7] L. Nivanen, A. Le Méhauté e Q. A. Wang; Rep. Math. Phys **52**, 437 (2003). 6, 17, 19, 20, 85, 227

[8] E. P. Borges; Physica A **340**, 95 (2004). 6, 17, 19, 21, 22, 27, 28, 29, 30, 85, 227

[9] C. Tsallis; *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics* (Springer, New York, 2009). 6, 10, 11, 51, 92

[10] F. D. Nobre, M. A. Rego-Monteiro e C. Tsallis; Phys. Rev. Lett. **106**, 140601 (2011). 6, 31, 47, 56, 76, 227

[11] R. N. Costa Filho, M. P. Almeida, G. A. Farias e J. S. Andrade Jr.; Phys. Rev. A **84**, 050102(R) (2011). 6, 85, 92, 104, 133, 140, 149, 167, 205, 228, 229, 231

[12] R. A. Meyers (Editor); *Encyclopedia of Complexity and Systems Science* (Springer, 2009). 7

[13] J.-Zu Zhang; Phys. Lett. B **440**, 66 (1998). 7, 13, 227

[14] J.-Zu Zhang; Phys. Lett. B **477**, 361 (2000). 7, 13, 227

[15] M. Micu; J. Phys. A **32**, 7765 (1999). 7, 13, 227

[16] A. Lavagno; J. Phys. A: Math. Theor. **41**, 244014 (2008). 7, 13, 227

[17] A. Lavagno; Rep. Math. Phys. **64**, 79 (2009). 7, 13, 227

[18] A. Lavagno e G. Gervino; J. Phys.: Conf. Ser. **174**, 012071 (2009). 7, 13, 227

[19] L. Bierdman; J. Phys. A: Math. Gen. **22**, L873 (1989). 7, 13, 231

[20] A. Macfarlane , J. Phys. A: Math. Gen. **22**, 4581 (1989). 7, 13, 231

[21] H. B. Callen; *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* (John Wiley & Sons, 2nd ed., New York, 1985). 7

[22] K. Huang; *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, New York, 1963). 8

[23] J. W. Gibbs; *Elementary Principles in Statistical Mechanics – Developed with Especial Reference to the Rational Foundation of Thermodynamics* (C. Scribner's Sons, New York, 1902; Yale University Press, New Haven, 1981). 9

[24] C. Tsallis; Braz. J. Phys. **29** (1), 1 (1999). 10

[25] C. Tsallis; J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988). 10, 12

[26] C. Tsallis; Quimica Nova **17**, 468 (1994). 10, 11

[27] A. Rényi; Fourth Berkeley symposium on mathematical statistics and probability **1**, 547 (1960). 11

[28] P. Jizba e T. Arimitsu; Annals of Physics **312** (1), 17 (2004). 12

[29] M. R. Schroeder; *Fractals, chaos, power laws: Minutes from an infinite paradise* (Dover, New York, 1991). 12

[30] P. Ván, G. G. Barnaföldi, T S Biró e K. Ürmössy; J. Phys.: Conf. Ser. **394**, 012002 (2012). 12

[31] E. P. Borges; J. Phys. A: Math. Gen. **31**, 5281 (1998). 12, 17, 33, 34, 35, 36, 80, 92, 227

[32] R. N. Costa Filho, G. Alencar, B.-S. Skagerstam e J. S. Andrade Jr, Europhys. Lett. **101**, 10009 (2013). 12, 85, 98, 105, 113, 149, 175, 176, 199, 204, 205, 214, 229

[33] B. G. da Costa e E. P. Borges; J. Math. Phys. **55**, 062105 (2014). 12, 92, 134, 228

[34] T. Ernst; *The history of q-calculus and a new method* (UUDM Report 2000:16, Dept. Math. Uppsala Univ., 2000). 13

[35] B. A. Kupershmidt; J. Nonlin. Math. Phys. **7**, 244 (2000). 13

[36] F. H. Jackson; Proc. Edin. Math. Soc. **22**, 28 (1904). 13, 15, 33

[37] F. H. Jackson; Am. J. Math. **32**, 305 (1910). 13

[38] R. Floreanini e L. Vinet; Lett. Math. **22**, 45(1991). 13

[39] R. Floreanini e L. Vinet; Ann. Phys. **211**, 53 (1993). 13

[40] R. Floreanini e L. Vinet; Phys. Lett. A **180**, 393 (1993). 13

[41] R. Floreanini, J. LeTourneux e L. Vinet; J. Phys. A: Math. Gen. **28**, L287 (1995). 13

[42] D. S. McAnally; J. Math. Phys. **36**, 546 (1995). 13

[43] R. Koekoek e R. F. Swarttouw; *The Askey-Scheme of Hypergeometric Orthogonal Polynomials and its q-Analogue, e-print* [`http://arxiv.org/abs/math/9602214`] (1996). 13, 33

[44] W. S. Chung; *Study on the mechanical system related to Hahn's discrete time derivative, e-print* [`http://arxiv.org/abs/1212.2329`] (2012). 13, 33

[45] N. M. Atakishiyev; J. Phys. A: Math. Gen. **29**, L223 (1996). 13

[46] N. M. Atakishiyev; J. Phys. A: Math. Gen. **29** (22), 7177 (1996). 13

[47] N. M. Atakishiyev e P. Feinsilver; J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 1659 (1996). 13

[48] N. M. Atakishiyev, A. U. Klimyk e K. B. Wolf; J. Phys. A: Math. Theor. **41**, 085201 (2008). 13

[49] J. L. Cieśliński; Applied Mathematics Letters **423** (2), 1219 (2015). 13, 33

[50] C. Chesman, A. A. Marinho e F. A. Brito; Physica A **391**, 3424 (2012). 13, 231

[51] A. A. Marinho, F. A. Brito e C. Chesman; Physica A **411**, 74 (2014). 13, 231

[52] V. Ginsburg e L. Pitayevski; Sov. Phys. – JETP **7**, 858 (1958). 15, 49, 227

[53] E. P. Gross; J. Math. Phys. **4**, 195 (1963). 15, 49, 227

[54] H. D. Doebner e G. Goldin; Phys. Lett. A **162**, 397 (1992). 15, 49, 227

[55] T. Yamano; Physica A **305**, 486 (2002). 17

[56] J. Naudts; Physica A **316**, 323 (2002). 17

[57] T. J. Arruda, R. S. Gonzalez, C. A. S. Tercariol e A. S. Martinez, Phys. Lett. A **307**, 2578 (2008). 17, 21, 22

[58] P. G. S. Cardoso, E. P. Borges, T. C. P. Lobao e S. T. R. Pinho; J. Math. Phys. **49**, 093509 (2008). 17

[59] T. C. P. Lobao, P. G. S. Cardoso, S. T. R. Pinho e E. P. Borges; Braz. J. Phys. **39**, 402 (2009). 17, 21

[60] N. Kalogeropoulos; Physica A **356**, 408 (2005). 17

[61] W. S. Chung; Int. J. Theor. Phys. **52**, 3762-3770 (2013). 17

[62] S. M. Stanković, S. D. Marinković e P. M. Rajković; Appl. Math. and Computation **218**, 2439 (2011). 17, 33, 227

[63] S. Marinković, M. Stanković e E. Mulalić; Mathematica Balkanica **26**, 147 (2012). 17, 33, 227

[64] W. S. Chung; *On the q-Laplace transform in the non-extensive statistical physics, e-print* [`http://arxiv.org/abs/1301.5480`] (2013). 17, 33, 38

[65] E. K. Lenzi, E. P. Borges e R. S. Mendes; J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 8551 (1999) 17

[66] A. Plastino e M. C. Rocca; Physica A **392**, 5581 (2013). 17

[67] M. Jauregui e C. Tsallis; Phys. Lett. A **375**, 2085 (2011). 17

[68] A. Plastino e M. C. Rocca; Physica A **391**, 4740 (2012). 17

[69] S. Umarov, C. Tsallis e S. Steinberg; Milan J. Math. **76**, 307 (2008). 17, 93

[70] S. Umarov e C. Tsallis; Phys. Lett. A **372**, 4874 (2008). 17

[71] M. Jauregui e C. Tsallis; J. Math. Phys. **51**, 063304 (2010). 17, 33, 47, 52, 227

[72] A. Chevreuil, A. Plastino e C. Vignat, J. Math. Phys. **51**, 093502 (2010). 17

[73] M. Mamode; J. Math. Phys. **51**, 123509 (2010). 17

[74] H. Suyari; Physica A **368** (1), 63 (2006). 17

[75] H. Bergeron, E. M. F. Curado, J. P. Gazeau e L. M. C. S. Rodrigues; J. Math. Phys. **54**, 123301 (2013). 17

[76] G. Ruiz e C. Tsallis; J. Math. Phys. **56**, 053301 (2015). 17

[77] T. Wada e H. Suyari; Phys. Lett. A **348**, 89 (2006). 17

[78] H. Suyari; Entropy **15** (11), 4634 (2013). 17

[79] J. Naudts e H. Suyari; Physica A **436**, 716 (2015). 17

[80] C. Tsallis, S. V. F Levy, A. M. C. de Souza e R. Maynard; Phys. Rev. Lett. **75**, 3589 (1995); Erratum: Phys. Rev. Lett. **77**, 5442 (1996). 17

[81] G. Kaniadakis e A. M. Scarfone; Physica A **305**, 69 (2002). 17

[82] G. Kaniadakis, M. Lissia e A. M. Scarfone; Physica A **340**, 41 (2004). 17

[83] V. Schwämmle e C. Tsallis; J. Math. Phys. **48**, 113301 (2007). 17

[84] N. Kalogeropoulos; Physica A **391**, 1120 (2012). 17

[85] W. S. Chung; *New exponential, logarithm and q-probability in the non-extensive statistical physics, e-print* [`http://arxiv.org/abs/1302.1865`] (2013). 17

[86] W. S. T. da Silva; *Estruturas algébricas deformadas inspiradas na entropia não extensiva*, Dissertação de Mestrado (Março de 2009, Universidade Federal da Bahia). 19, 227

[87] C. Tsallis; Phys. Lett. A **195**, 329 (1994). 21

[88] S. Abe; Phys. Lett. A **224**, 326 (1997). 27

[89] J. Weberszpil, M. J. Lazo e J.A. Helayël-Neto; Physica A **436**, 399 (2015). 28, 31

[90] K. B. Oldham e J. Spanier; *The Fractional Calculus* (Academic Press, New York, 1974). 28

[91] R. Herrmann; *Fractional calculus: An introduction for physicists* (World Scientific, Singapore, 2011). 29

[92] N. Laskin; Chaos **10**, 780 (2000). 29, 227

[93] N. Laskin; Phys. Lett. A **268**, 298 (2000). 29, 227

[94] N. Laskin; Phys. Rev. E **66**, 056108 (2002). 29, 227

[95] M. Naber; J. Math. Phys. **45**, 3339 (2004). 29, 227

[96] S. Wang e M. Xu; J. Math. Phys. **48**, 043502 (2007). 29, 227

[97] J. Dong e M. Xu; J. Math. Anal. Appl. **344**, 1005 (2008). 29, 227

[98] M. Jeng, S.-L.-Y. Xu, E. Hawkins e J.M. Schwarz; J. Math. Phys. **51**, 062102 (2010). 29, 227

[99] S. S. Bayin, J. Math. Phys. **53**, 042105 (2012). 29, 227

[100] Yuri Luchko; J. Math. Phys. **54**, 012111 (2013). 29, 227

[101] J. L. Cieśliński; J. Math. Anal. Appl. **388** (1), 8 (2012). 33

[102] G. A. Monteiro e A. Slavík; J. Math. Anal. Appl. **411** (2), 838 (2014). 33

[103] J. L. Cieśliński, T. Nikiciuk e K. Waskiewicz; J. Math. Anal. Appl. **423** (2), 1219 (2015). 33

[104] M. S. Reis, V. S. Amaral, J. P. Araujo e I. S. Oliveira; Phys. Rev. B **68**, 014404 (2003). 33

[105] E. P. Borges; *Manifestações dinâmicas e termodinâmicas de sistemas não-extensivos* Tese de Doutorado (Janeiro de 2004, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas). 35, 37

[106] A. Lavagno; Braz. J. Phys. **35** (2B), 516 (2005). 35, 37, 75

[107] I. S. Gradshteyn e I. M. Ryzhik; *Table of integrals, series, and products* (Academic Press, New York, 1994). 42, 43, 45

[108] F. D. Nobre, M. A. Rego-Monteiro e C. Tsallis; Europhys. Lett. **97**, 41001 (2012). 47, 61, 227

[109] A. R. Plastino e C. Tsallis; J. Math. Phys. **54** (4), 041505 (2013). 47, 57

[110] S. Curilef, A. R. Plastino e A. Plastino; Physica A **392**, 2631 (2013). 47

[111] I. V. Toranzo, A. R. Plastino, J. S. Dehesa e A. Plastino; Physica A **392**, 3945 (2013). 47

[112] M. A. Rego-Monteiro e F. D. Nobre; J. Math. Phys. **54**, 103302 (2013). 47, 61

[113] A.R. Plastino, A. M. C. Souza, F. D. Nobre, e C. Tsallis; Phys. Rev. A **90**, 062134 (2014). 47, 61, 66, 68, 71, 228, 230

[114] F. Pennini, A. R. Plastino e A. Plastino; Physica A **403**, 195 (2014). 47, 125

[115] L. G. A. Alves, H. V. Ribeiro, M. A. F. Santos, R. S. Mendes, E. K. Lenzi; Physica A **429**, 35 (2015). 47

[116] A. R. Plastino e A. Plastino; Physica A **222**, 347 (1995). 47, 50

[117] C. Tsallis e D. J. Bukman; Phys. Rev. E **54**, R2197 (1996). 47, 49, 50, 75

[118] M. Bologna, C. Tsallis e P. Grigolini; Phys. Rev. E **62**, 2213 (2000). 47

[119] E. M. F. Curado e F. D. Nobre; Phys. Rev. E **67**, 021107 (2003). 47

[120] I. T. Pedron e R. S. Mendes; Rev. Bras. Ens. Fis. **27** (2), 251 (2005). 47

[121] T. D. Frank; *Nonlinear Fokker-Planck Equations: Fundamentals and Applications* (Springer, Berlin, 2005). 47, 50

[122] V. Schwämmle, F. D. Nobre e E. M. F. Curado; Phys. Rev. E **76**, 041123 (2007). 47, 50

[123] V. Schwaämmle, E. M. F. Curado e F. D. Nobre; Eur. Phys. J. B **58**, 159 (2007). 47, 50

[124] J. S. Andrade Jr., G. F. T. da Silva, A. A. Moreira, F. D. Nobre e E. M. F. Curado; Phys. Rev. Lett. **105**, 260601 (2010). 47

[125] M. S. Ribeiro, F. D. Nobre e E. M. F. Curado; Entropy **13**, 1928 (2011). 47

[126] G. A. Casas, F. D. Nobre e E. M. F. Curado; Phys. Rev. E **86**, 061136 (2012). 47

[127] M. A. Moret, L. Q. Antonio e H. B. B. Pereira; Physica A **391**, 1657 (2012). 47

[128] M. S. Ribeiro, G. A. Casas e F. D. Nobre; Phys. Rev. E **91**, 012140 (2015). 47

[129] C. Sulem e P.-L. Sulem; *The Nonlinear Schrödinger Equation: Self-Focusing and Wave-Collapse* (Springer, New York, 1999). 47, 49, 227

[130] A. Vidiella-Barranco e H. Moya-Cessa; Phys. Lett. A **279**, 56 (2001). 48, 77

[131] T. Tomé e M. J. de Olveira; *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (EDUSP, São Paulo, 2001). 48, 230

[132] A. C. Scott; *Encyclopedia of Nonlinear Science* (Taylor and Francis, New York, 2005). 49

[133] A. C. Scott; *The Nonlinear Universe* (Springer, Berlin, 2007). 49

[134] L. D. Landau; Phys. Z. Sovjet. **3**, 664 (1933). 50

[135] J. T. Devreese; *Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors* (North-Holland, Amsterdam, 1972). 50

[136] N. Mannella, Ch. Renner, G. Aeppli, T. Kimura, e Y. Tokura; Nature **438**, 474 (2005). 50

[137] P. A. Lee, N. Nagaosa e X.-G. Wen; Rev. Mod. Phys. **78**, 17 (2006). 50

[138] M. L. Boas; *Mathematical Methods in the Physical Sciences* (John Wiley & Sons, New York, 2005). 53

[139] A. Peres; *Quantum Theory: Concepts and Methods* (Kluwer, Dordrecht, 1993). 58

[140] J. W. Leech; *Classical mechanics* (Methuen, London, 1958). 61

[141] N. A. Lemos; *Mecânica Analítica* (Livraria da Física, São Paulo, 2007). 54, 61, 192, 196

[142] H. Goldstein; *Classical Mechanics* (Addison-Wesley, 2nd ed., 1980). 61, 115, 125, 185

[143] K. Huang; *Quantum Field Theory: From Operators to Path Integrals* (John Wiley & Sons, New York, 1998). 61

[144] E. Wigner; Phy. Rev. **40**, 749 (1932). 71, 231

[145] M. A. Marchiolli; Rev. Bras. Ens. Fís. **24** (4), 421 (2002). 71, 231

[146] M. Novaes; Rev. Bras. Ens. Fís. **24** (4), 437 (2002). 71, 231

[147] W. B. Case; Am. J. Phys. **76**, 937 (2008). 71

[148] R. G. G. Amorim, M. C. B. Fernandes, A. R. Queiroz, A. E. Santana e J. D. M. Viana; Rev. Bras. Ens. Fís. **35** (3), 3604 (2013). 71, 231

[149] D. A. Lidar K. B. Whaley; *Decoherence-Free Subspaces and Subsystems* em Irreversible Quantum Dynamics, F. Benatti e R. Floreanin (editores), pp. 83-120, (Springer Lecture Notes in Physics,Berlin, 2003). 74

[150] A. Yariv; *Quantum eletronics* (John Wiley & Sons, New York, 1988). 75, 160, 209

[151] U. Tırnaklı, S. F. Özeren, F. Büÿukkılıç e D. Demirhan; Z. Phys. B **104**, 341 (1997). 75

[152] J. J. Sakurai e J. Napolitano; *Mecânica Quântica Moderna* (Bookman, Porto Alegre, 2013). 77, 78, 221

[153] I. A. Merkulov, Al. L. Efros e M. Rosen; Phys. Rev. B **65**, 205309 (2002). 84

[154] O. von Roos; Phys. Rev. B **27**, 7547 (1983). 85, 87, 100

[155] F. Arias de Saavedra, J. Boronat, A. Polls e A. Fabrocini; Phys. Rev. B **50**, 4248 (1994). 85

[156] M. Barranco, M. Pi, S. M. Gatica, E. S. Hernández e J. Navarro; Phys. Rev. B **56**, 8997 (1997). 85

[157] R. Khordad; Indian J. Phys. **86**, 513 (2012). 85, 158

[158] A. R. Jafari e Y. Naimi; Journal of Computational Electronics **12** (1), 36 (2013). 85, 158

[159] A. R. Jafari, Y. Naimi e S. Davatolhagh; Optical and Quantum Electronics **45** (6) 517 (2013). 85, 158

[160] N. Aquino, G. Campoy e H. Yee-Madeira; Chem. Phys. Lett. **296**, 111 (1998). 85

[161] H. A. Bethe; Phys. Rev. Lett. **56**, 1305 (1986). 85

[162] D. O. Richstone e M. D. Potter; Astrophys. J. **254**, 451 (1982). 85

[163] M. A. Rego-Monteiro e F. D. Nobre; Phys. Rev. A **88**, 032105 (2013). 85, 127, 129, 132, 133, 229

[164] F. D. Nobre e M. A. Rego-Monteiro; Braz. J. Phys. **45** 79 (2015). 85, 127

[165] M. Vubangsi, M. Tchoffo e L. C. Fai; Physica Scripta **89**, 025101 (2014). 85

[166] M. Vubangsi, M. Tchoffo e L. C. Fai; Eur. Phys. J. Plus; **129**, 105 (2014). 85, 204

[167] E. G. Barbagiovanni e R. N. Costa Filho; Phys. E **63**, 14 (2014). 85

[168] E. G. Barbagiovanni, D. J. Lockwood, N. L. Rowell, R. N. Costa Filho, I. Berbezier, G. Amiard, L. Favre, A. Ronda, M. Faustini e D. Grosso; J. Appl. Phys **115**, 044311 (2014). 85

[169] S. H. Mazharimousavi; Phys. Rev. A **85**, 034102 (2012). S. H. Mazharimousavi; Phys. Rev. A **89**, 049904(E) (2014) (erratum). 86, 133, 228

[170] V. Bargmann; Ann. Math. **59**, 1 (1954). 86

[171] K. Kawamura e R. A. Brown; Phys. Rev. B **37**, 3932 (1988). 86

[172] K. Young; Phys. Rev. B **39** (18), 13434 (1989). 86

[173] J.-M. Lévy-Leblond; Phys. Rev. A **52** (3), 1845 (1995). 86

[174] W. Pauli; *Pauli Lectures on Physics, Vol. 5* (Dover, New York, 2000). 87

[175] D. J. BenDaniel e C. B. Duke; Phys. Rev. **152**, 683 (1966). 87

[176] T. Gora e F. Williams; Phys. Rev. **177**, 1179 (1969). 87

[177] Q.-G. Zhu e H. Kroemer; Phys. Rev. B **27** (6), 3518 (1983). 87

[178] T. L. Li e K. J. Kuhn; Phys. Rev. B **47**, 12760 (1993). 87

[179] R. A. Morrow e K. R. Brownstein; Phys. Rev. B **30**, 678 (1984). 87

[180] A. Trabelsi, F. Madouri, A. Merdaci e A. Almatar; *Classication scheme for kinetic energy operators with position-dependent mass, e-print* [`http://arxiv.org/abs/1302.3963v1`] (2013). 88

[181] C. Quesne e V. M. Tkachuk; J. Phys. A **37**, 4267 (2004). 88

[182] B. Bagchi, P. Gorain, C. Quesne e R. Roychoudhury; Mod. Phys. Lett. A **19**, 2765 (2004). 88

[183] C.Y. Cai, Z.Z. Ren e G.X. Ju; Commun. Theor. Phys. **43**, 1019 (2005). 88

[184] A. Schulze-Halberg;todas a densidades Cent. Europ. Journ. of Phys. **3**, 591 (2005). 88

[185] P. K. Jha, H. Eleuch, Y. V. Rostovtsev J. Mod. Opt. **58**, 652 (2011). 88

[186] H. Eleuch, P. K. Jha e Y. V. Rostovtsev; Math. Sci. Lett. **1**, 1 (2012). 88

[187] A. G. M. Schmidt; Physica A **391**, 3792 (2012). 88

[188] A. D. Alhaidari; Phys. Rev. A **66**, 042116 (2002). 88

[189] O. Mustafa; Cent. Eur. J. Phys. **11**, 480 (2013). 88

[190] M. S. Cunha e H. R. Christiansen; Commum. Theor. Phys. **60**, 642 (2013). 88

[191] A. de Souza Dutra e C. A. S. Almeida; Phys. Lett. A **275** 25 (2000). 88

[192] O. Mustafa e S. H. Mazharimousavi; J. Phys. A: Math. Gen. **39**, 10537 (2006). 88

[193] O. Mustafa e S. H. Mazharimousavi; Phys. Lett. A **373**, 325 (2009). 88

[194] R. A. Kraenkel e M. Senthilvelan; J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 415303 (2009). 88

[195] G.X. Ju; Commun. Theor. Phys. **56**, 235 (2011). 88

[196] B. Gönül, O. Özer, B. Gönül e F. Üzgun; Mod. Phys. Lett. A **17**, 2453 (2002). 88

[197] A. de Souza Dutra, M. Hott e C. A. S. Almeida; Europhys. Lett. **62**, 8 (2003). 88

[198] C. Quesne, B. Bagchi, A. Banerjee e V. M. Tkachuk; Bulg. J. Phys. **33**, 308 (2006). 88

[199] J. P. Killingbeck; J. Phys. A: Math. Theor. **44**, 285208 (2011). 88

[200] J. Förster, A. Saenz e U. Wolff; Phys. Rev. E **86**, 16701 (2012). 88

[201] A. Fernández-Ramos, Z. Smedarchina e W. Siebrand; Phys. Rev. E **90**, 033306 (2014). 88, 167

[202] S. Cruz y Cruz e O. Rosas-Ortiz; J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 185205 (2009). 88, 175

[203] M. L. Lyra e C. Tsallis; Phys. Rev. Lett. **80**, 53 (1998). 92

[204] E. Lutz Phys. Rev. A **67**, 051402(R) (2003). 92

[205] L. F. Burlaga e A. F.-Vinas, Physica A **356**, 375 (2005). 92

[206] C. M. Bender; Rep. Prog. Phys. **70**, 947 (2007). 104

[207] J. da Providência, N. Bebiano e J. P. da Providência; Braz. J. Phys. **41**, 78 (2011). 104

[208] L. H. A. Monteiro; *Sistemas dinâmicos* (Editora Livraria da Fisica, $2^{a.}$ ed., São Paulo, 2006). 108

[209] K. Krane; Amer. J. Phys. **49**, 113 (1981). 114

[210] S. Cruz y Cruz e O. Rosas-Ortiz, SIGMA **9**, 4 (2013). 114

[211] P. Ehrenfest; Zeitschrift für Physik **45** 455 (1927). 118

[212] A. O. Bolivar; Rev. Bras. Ens. Fís. **23** (2), 543 (2001). 118

[213] L. de Broglie; Journal de Physique et le Radium **8**, 225 (1927). 125

[214] D. Bohm; Phys. Rev. **85**, 166 (1952). 125

[215] M. E. M. Betz; Rev. Bras. Ens. Fis. **36** (4) 4310 (2014). 125

[216] A. R. Plastino, C. Vignat e A. Plastino; Commun. Theor. Phys. **63** 275 (2015). 130, 132

[217] A. G. M. Schmidt; Phys. Lett. A **353**, 459 (2006). 133, 140

[218] A. Dimakis e F. Müller-Hoissen; Phys. Lett. B **295**, 242 (1992). 149

[219] J. D. Jackson; *Classical Electrodynamics* (John Wiley & Sons, New York, 1975). 157

[220] M. A. Reed, J. N. Randall, R. J. Aggarwal, T. M. Moore e E. Wetsel; Phys. Rev. Lett. **60** (6) 535 (1988). 158

[221] S. H. Mazharimousavi A. Roozbeh, M. Halilsoy; J. Electromagn. Waves Appl. **27** (16), 2065 (2013). 158

[222] A. Sharma e I. Kourakis; Laser and Particle Beams **28** (3), 479 (2010). 161

[223] A. Singh e N. Gupta; Phy. Plasmas **22**, 013102 (2015). 161

[224] G. Gamow; Z. Physik **51**, 204 (1928). 167

[225] G. Gamow; Z. Physik **52**, 510 (1928). 167

[226] R. Tsu e L. Esaki; App. Phys. Lett. **22**, 562 (1973). 167

[227] A. B. Balantekin e N. Takigawa; Rev. Mod. Phys. **70**, 77 (1998). 167

[228] A. V. Andrade-Neto e Ariel Almeida Abreu Silva; Caderno de Física da UEFS **7**, 115 (2009). 167

[229] R. J. Shannon, M. A. Blitz, A. Goddard e D. E. Heard; Nature Chemistry **5**, 745 (2013). 167

[230] T. Miyazaki; *Atom Tunneling Phenomena in Physics, Chemistry and Biology* (Springer, Berlin, 2004). 167

[231] L. Chetouani, L. Dekar e T. F. Hammann; Phys. Rev. A, **52 (1)**, 82 (1995). 167

[232] A. Ganguly, S. Kuru, J. Negro e L. M. Nieto; Phys. Lett. A **360**, 228 (2006). 167

[233] G. T. Einevoll, P. C. Hemmer e J. Thomsen; Phys. Rev. B **42**, 3485 (1990). 167

[234] J. R. F. Lima, M. Vieira, C. Furtado, F. Moraes e C. Filgueiras; J. Math. Phys. **53**, 072101 (2012). 167

[235] J. M. F. Bassalo e M. S. D. Cattani; *Osciladores: harmônicos clássicos e quânticos* (Livraria da Física, São Paulo, 2009). 175, 192

[236] M. Moshinsky e Y.F. Smirnov; *The Harmonic Oscillator in Modern Physics* (Harwood Academic Publishers, Amsterdam, 1996). 175

[237] H. Exton; *q-Hypergeometric functions and applications* (John Wiley & Sons, New York, 1983). 175

[238] V. V. Eremin e A. A. Meldianov; Theor. and Math. Phys. **147** (2), 709 (2006). 175

[239] P. M. Mathews e M. Lakshmanan; Quart. Appl. Math. **32**, 215 (1974). 175

[240] C. Leubnert e P. Krumm; Eur. J. Phys. 11, 31 (1990). 175

[241] J. Flores, G. Solovey e S. Gil; Am. J. Phys. **71**, 7 (2003). 175

[242] S. Cruz y Cruz, J. Negro e L. M. Nieto; Phys. Lett. A **369** (5), 400 (2007). 175, 187

[243] S. Cruz y Cruz, J. Negro e L. M. Nieto; J. Phys.: Conf. Ser. **128**, 012053 (2008). 175

[244] G.X. Ju, C.Y. Cai e Z.Z. Ren; Commun. Theor. Phys. **51**, 797 (2009). 175

[245] V. Chithiika Ruby e M. Senthilvelan; J. Math. Phys. **51**, 052106 (2010). 175

[246] N. Amir e S. Iqbal; Commun. Theor. Phys. **62**, 790 (2014). 175

[247] J. P. G. Nascimento e I. Guedes; Rev. Bras. Ens. Fís. **36** (4), 4308 (2014). 175

[248] D. Ghosh e B. Roy; Ann. of Phys. **353**, 222 (2015). 175

[249] V. Chithiika Ruby, V. K. Chandrasekar, M. Senthilvelan e M. Lakshmanan; J. Math. Phys. **56**, 012103 (2015). 175

[250] M. Tchoffo M. Vubangsi e L. C. Fai; Physica Scripta **89**, 105201 (2014). 175

[251] Morse P. M., Phys. Rev., **34**, 57 (1929). 175, 181, 205

[252] F. L. Moraes Barboza, A. J. Costa, N. F. Ribeiro e E. Drigo Filho; Rev. Bras. Ens. Fís. **29** (4), 543 (2007). 181

[253] R. V. Churchill; *Variáveis complexas e suas aplicações* (McGraw-Hill do Brasil, São Paulo, 1975). 183, 190

[254] J. E. Lennard-Jones; Proc. R. Soc. Lond. A **106** (738), 463 (1924). 188

[255] P. Caldirola; Nuovo Cimento **18**, 393 (1941). 192

[256] E. Kanai; Prog. Theor. Phys. **3**, 440 (1950). 192

[257] E. W. Kolb e M. S. Turner; *The Early Universe* (Addison-Wesley, 1990). 192

[258] J. W. Strutt; *The Theory of Sound* (Dover, New York, 1979). 192

[259] P. M. Morse e H. Feshbach; *Methods of Theoretical Physics – vol. 1* (McGraw-Hill, New York, 1953). 192

[260] H. Bateman; Phys. Rev. **38**, 815 (1931). 192

[261] J. F. Gómez-Aguilar, J. J. Rosales-García e J. J. Bernal-Alvarado; Rev. Mex. de Fís. **58**, 348 (2012). 193

[262] W. S. Chung e M. Jung; J. Korean Phys. Soc. **64**, 186 (2014). 193

[263] S. Nalci e O. K. Pashaev; *q-Damped oscillator and degenerate roots of constant coefficients q-difference ODE, e-print* [`http://arxiv.org/abs/1107.2518`] (2011). 193

[264] J. Santos e J. A. S. de Lima; Phys. Lett. A **267**, 213 (2000). 193

[265] J. R. Choi; Scientific Reports **4**: 3911, 1 (2014). 193

[266] J. R. Choi, S. Lakeha, M. Maamache e Salah Menouar; Progress in Electromagnetics Research Letters **44**, 71 (2014). 193

[267] F. F. Campos, filho; *Algoritmos numéricos* (LTC, Rio de Janeiro, 2013). 194

[268] N. Amir e S. Iqbal; J. Math. Phys. **56**, 062108 (2015); 221, 231

[269] R. P. Feymann e A. R. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965). 230

[270] E. M. F. Curado, M. A. Rego-Monteiro e H. N. Nazareno; Phys. Rev. A **64**, 012105 (2001). 231

[271] E. M. F. Curado, Y. Hassouni, M. A. Rego-Monteiro e L. M. C. S. Rodrigues; Phys. Lett. A **372**, 3350 (2008). 231

[272] B. Roy e P. Roy; Phys. Lett. A **340**, 70 (2005). 231

[273] B. Roy; Europhys. Lett. **72**, 1 (2005). 231

[274] A. Biswas e B. Roy; Mod. Phys. Lett. A **24**, 1343 (2009). 231

[275] S. Cruz y Cruz e O. Rosas-Ortiz; Int. J. Theor. Phys. **50**, 2201 (2011). 231

[276] S. Dey; Phys. Rev. D **91**, 044024 (2015). 231

[277] N. Amir e S. Iqbal; Europhys. Lett. **111**, 20005 (2015). 231

[278] Z.d. Chen e G. Chen; Physica Scripta **73**, 354 (2006). 231

[279] A. de Souza Dutra e J. A. de Oliveira; Physica Scripta **78**, 035009 (2008). 231

[280] G. B. Arfken e H. J. Weber; *Mathematical methods for physicists* (Academic press, 2005). 247

[281] G. A. Korn e T. M. Korn; *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers* (McGraw-Hill, New York, 1961). 247