



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA

WILLIAN WALLACE RIBEIRO ALVES DA SILVA

**MÉTODO WKB COMO ALTERNATIVA PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS NO
FORMALISMO DO PDTO**

FORTALEZA

2022

WILLIAN WALLACE RIBEIRO ALVES DA SILVA

MÉTODO WKB COMO ALTERNATIVA PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS NO
FORMALISMO DO PDTO

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho

FORTALEZA

2022

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- S584m Silva, Willian Wallace Ribeiro Alves da.
Método WKB como alternativa para solução de problemas no formalismo do PDTO / Willian Wallace Ribeiro Alves da Silva. – 2022.
41 f. : il.
- Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Curso de Física, Fortaleza, 2022.
Orientação: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.
1. Método WKB. 2. Formalismo PDTO. 3. Poço Quadrado Infinito. 4. Potencial Harmônico. I. Título.
CDD 530
-

WILLIAN WALLACE RIBEIRO ALVES DA SILVA

MÉTODO WKB COMO ALTERNATIVA PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS NO
FORMALISMO DO PDTO

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de bacharel em Física.

Aprovada em: 04/02/2022

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa
Filho (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Dr. Vanderley Aguiar de Lima Júnior
Universidade Federal do Ceará (UFC)

A todos que sempre me apoiaram em todas as minhas decisões, em especial à minha mãe, ao meu pai, às minhas irmãs, à minha namorada e aos meus familiares. Mãe e Pai, a presença de vocês significou segurança e certeza de que não estou sozinho nessa caminhada.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Deus, pois acredito que muitas das minhas conquistas na vida passaram pelas mãos dele.

Agradeço à minha família, em especial ao meu pai Edmar, à minha mãe Roberta, às minhas irmãs Rebeca e Débora e aos meus avós Roberto, Francisca, Eguimar e Geralda por todo o apoio, confiança e carinho que me ofereceram nos momentos mais dolorosos da minha vida e por ajudarem na formação do homem que sou hoje.

Agradeço de forma especial à minha namorada Letícia e toda a sua família por todo o carinho e apoio que sempre me proporcionaram, sem dúvidas são todos muito importantes nessa minha conquista.

Agradeço aos amigos que fiz durante o curso de Física e espero levar para a vida: Bruno, Genivaldo, Isaac, Jackson, João Pedro, Nadson, Sabrina, Thiago, Vinícius e Wagner, cujas conversas, brincadeiras, saídas, reuniões, amizade, companheirismo e apoio foram de fundamental importância para tornar mais leve o fardo pesado que é se formar no curso de Física.

Agradeço aos amigos que fiz durante a vida: Vinícius Barbosa, Maria Yolanda, Vitor Andrey, Matheus Gregório e Leandro Freire por todas as conversas que tivemos, por acreditarem em mim sempre e por me apoiarem sempre.

Agradeço ao grupo de rap 7 minutos pelas letras de música incríveis que me ajudam todos os dias a seguir em frente no meu caminho.

Agradeço aos responsáveis pela elaboração do *template* utilizado neste trabalho e pela adequação para que o mesmo ficasse de acordo com as normas da biblioteca da Universidade Federal do Ceará (UFC).

Agradeço ao Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho por me receber e me orientar no Trabalho de Conclusão de Curso e ao Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa e ao Dr. Vanderley Aguiar de Lima Júnior por acompanharem o desenvolvimento e participarem da banca dessa monografia bem como a todos os funcionários e professores do departamento de Física que contribuíram de alguma forma na minha formação acadêmica.

Agradeço ao CNPq pelo financiamento da minha bolsa de Iniciação Científica que foi muito importante para o meu desenvolvimento estudantil e para o desenvolvimento deste trabalho.

“Eu não sei o que é desistir, com mil motivos pra chorar eu ainda vou escolher sorrir. Provei pra mim e pra todos que eu consigo.”

(7 minutoz)

RESUMO

O presente trabalho tem como principal objetivo mostrar que o método *Wentzel, Kramers, Brillouin* (WKB) pode ser utilizado em conjunto com o formalismo do *Position dependent translation operator* (PDTO) para obter as energias corretas para os casos do potencial de um poço quadrado infinito e do potencial harmônico. Para isso, foi necessário introduzir de forma breve o formalismo usual da mecânica quântica e o método WKB neste mesmo formalismo. Em seguida, fizemos uma introdução ao formalismo do PDT0 e o método WKB modificado para este formalismo. Por fim, aplicamos tudo o que foi discutido para os casos do potencial de um poço quadrado infinito e do potencial harmônico, ambos em um espaço deformado, obtendo, assim, as energias esperadas, mostrando que o método WKB é uma alternativa viável para obter as soluções de uma equação tipo Schrödinger no formalismo do PDT0, podendo ser aplicado para outros problemas em trabalhos futuros.

Palavras-chave: método WKB; formalismo do PDT0; poço quadrado infinito; potencial harmônico.

ABSTRACT

The main objective of the present work is to show that the *Wentzel, Kramers, Brillouin*(WKB) method can be used together with the *Position dependent translation operator* (PDTO) formalism to obtain the correct energies for the cases of the potential of an infinite square well and the harmonic potential. For this, it was necessary to briefly introduce the usual formalism of quantum mechanics and the WKB method in this same formalism. Then, we made an introduction to the PDTO formalism and the WKB method modified for this formalism. Finally, we apply everything discussed for the cases of the potential of an infinite square well and the harmonic potential, both in a deformed space, thus obtaining the expected energies, showing that the WKB method is a viable alternative to obtain the solutions of a Schrödinger-like equation in the PDTO formalism, which can be applied to other problems in future works.

Keywords: WKB method; PDTO formalism; infinite square well; harmonic potential.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Problema do espalhamento de uma barreira retangular com uma ondulação em cima. Neste gráfico, A representa a amplitude da onda incidente, B é a amplitude da onda refletida e F é a amplitude da onda transmitida. O potencial $V(x)$ é igual a zero para $x < 0$ e $x > a$ e possui uma forma ondulada para $0 < x < a$. Fonte: (GRIFFITHS, 1960) 24
- Figura 2 – Ilustração do problema do estado ligado. Neste gráfico estão representadas as regiões clássica e não clássica. A região clássica é a região em que $E > V(x)$. A região não clássica é a região em que $E < V(x)$. Os pontos de retorno são os pontos em que $E = V(x)$ e nestes pontos a amplitude da função de onda vai para infinito. Fonte: (GRIFFITHS, 1960) 25
- Figura 3 – Aqui temos uma visão ampliada do ponto de retorno da direita onde o potencial é ascendente. O gráfico foi deslocado, em comparação com da Figura 2, de modo que o ponto de retorno fosse para $x = 0$. A região em que vale a aproximação do potencial linearizado é chamada de região de ajuste. Dentro do intervalo da região de ajuste, a região clássica ocorre em $x < 0$ e a região não clássica ocorre em $x > 0$. Fonte: (GRIFFITHS, 1960) 25
- Figura 4 – Representação gráfica da região de ajuste e as zonas de sobreposição 1 e 2. A sobreposição 1 representa a sobreposição da função ψ_p e da função ψ_{WKB} clássica. A sobreposição 2 representa a sobreposição da função ψ_p e da função ψ_{WKB} não clássica. Fonte: (GRIFFITHS, 1960) 27
- Figura 5 – Ilustração do potencial de um poço quadrado infinito de largura L . O potencial $V(x)$ é igual a zero para x entre zero e L , e é igual a infinito para x menor que zero e x maior que L . Fonte: Elaborado pelo autor. 34
- Figura 6 – Ilustração do potencial de um poço quadrado infinito. Aqui adotamos unidades atômicas onde $\hbar = m = 1$. Os níveis de energia(linhas tracejadas) foram obtidos considerando $\gamma = 0.5$ e valores inteiros de n indo de 1 até 3. Fonte: Elaborado pelo autor. 35
- Figura 7 – Ilustração do potencial de um poço quadrado infinito. Aqui adotamos unidades atômicas onde $\hbar = m = 1$. Os níveis de energia(linhas tracejadas) foram obtidos considerando $\gamma = 0$ e valores inteiros de n indo de 1 até 3. Fonte: Elaborado pelo autor. 36

Figura 8 – Ilustração do potencial harmônico. Os pontos de retorno para são os pontos x_1 e x_2 . A partícula possui uma energia E , uma massa m e está sujeita a uma frequência de oscilação ω . Fonte: Elaborado pelo autor.	36
Figura 9 – Ilustração do potencial harmônico (linha sólida). Aqui consideramos $\omega = 1$ e adotamos unidades atômicas onde $\hbar = m = 1$. Os níveis de energia (linhas tracejadas) foram obtidos considerando $\gamma = 0.4$ e valores inteiros de n indo de 0 até 4. Fonte: Elaborado pelo autor.	38
Figura 10 – Ilustração do potencial harmônico (linha sólida). Aqui consideramos $\omega = 1$ e adotamos unidades atômicas onde $\hbar = m = 1$. Os níveis de energia (linhas tracejadas) foram obtidos considerando $\gamma = 0$ e valores inteiros de n indo de 0 até 4. Fonte: Elaborado pelo autor.	39

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

WKB *Wentzel, Kramers, Brillouin*

PDTO *Position dependent translation operator*

LISTA DE SÍMBOLOS

i	Unidade imaginária
h	Constante de Planck
\hbar	Constante reduzida de Planck
γ	Constante com dimensão de inverso de comprimento
ν	Frequência
I	Radiância espectral
E	Energia
ψ	Função de onda
δ_{mn}	Delta de Kronecker
m	Massa
ω	Frequência angular

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	FORMALISMO DA MECÂNICA QUÂNTICA	15
2.1	Introdução histórica	15
2.1.1	<i>Problema da radiação do corpo negro</i>	15
2.1.2	<i>Efeito fotoelétrico</i>	16
2.2	Formalismo matemático	17
2.2.1	<i>Espaço de Hilbert</i>	18
2.2.2	<i>Observáveis e Medições</i>	19
2.3	Postulados da Mecânica Quântica	19
3	MÉTODO WKB	21
3.1	A região clássica	22
3.2	A região não clássica	23
3.3	Fórmulas de conexão	24
4	FORMALISMO DO OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO	30
4.1	Formalismo unidimensional	30
4.2	Método WKB no formalismo do operador de translação dependente da posição	33
5	APLICAÇÕES	34
5.1	Poço quadrado infinito	34
5.2	Potencial harmônico	36
6	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	40
	REFERÊNCIAS	41

1 INTRODUÇÃO

No fim do século XIX e início do século XX, Planck apresentou a comunidade científica resultados que iriam mudar os rumos da física, pois, a partir daquele ponto, nasceu a Física quântica. Até aquele momento a ideia geral, de acordo com a teoria clássica, dizia que a energia era transmitida de um sistema para outro de forma contínua. A teoria de Planck era revolucionária, pois a hipótese de Planck dizia que, na natureza, a energia era emitida ou absorvida em quantidades mínimas e discretizadas denominadas *quanta*. Com esta teoria, Planck conseguiu desenvolver um modelo matemático que concordava com os resultados experimentais obtidos para a radiação de corpo negro e como consequência, resolveu um dos problemas que estavam em aberto na sua época.

Em 1905, Einstein buscava explicar o efeito fotoelétrico que havia sido descoberto pelo físico Heinrich Hertz em 1886. Para isto, ele estendeu as hipóteses propostas por Planck e propôs que a radiação era quantizada, assim a radiação passaria a ser tratada como um conjunto de pacotes de energia e esses pacotes teriam uma energia discretizada dependente da frequência da radiação. Com essa proposta, Einstein conseguiu explicar o efeito fotoelétrico de forma satisfatória e colaborou para difundir a teoria dos *quanta*.

A Mecânica Quântica é uma das teorias mais bem sucedidas da física de modo que os avanços nessa área continuam a existir até hoje. Um dos avanços mais recentes é o desenvolvimento da teoria da mecânica quântica não-aditiva a partir do formalismo do operador de translação dependente da posição, em inglês *position dependent translation operator* (PDTO), para sistemas quânticos. Essa teoria foi idealizada com o objetivo de entender os efeitos da métrica do espaço na teoria quântica.

O formalismo do PDTTO tem sido muito utilizado no meio científico para estudar problemas envolvendo uma massa efetiva dependente da posição, como pode ser visto nos artigos (BARBAGIOVANNI; FILHO, 2014) e (BARBAGIOVANNI *et al.*, 2015), e materiais bidimensionais, como pode ser visto nos artigos (AGUIAR *et al.*, 2020) e (FILHO *et al.*, 2021). Portanto, devido a visibilidade deste formalismo, foi pensado em estudar o método *Wentzel, Kramers, Brillouin* (WKB) para ser utilizado em conjunto com o formalismo do PDTTO em busca de alternativas para solução de problemas envolvendo mecânica quântica.

Nesse sentido, o presente trabalho visa desenvolver de forma breve a base teórica necessária para o entendimento do mesmo, bem como aplicar o método WKB em conjunto com o formalismo do PDTTO para os problemas do poço quadrado infinito e do potencial harmônico.

2 FORMALISMO DA MECÂNICA QUÂNTICA

A mecânica quântica surgiu durante o fim do século XIX e início do século XX. Neste período, os físicos acreditavam que a Física estava muito próxima de ser uma área do conhecimento completa, restando poucos problemas para serem solucionados. Um desses problemas dizia a suposta existência do éter, que seria o meio no qual as ondas eletromagnéticas se propagariam. A teoria do éter foi aos poucos sendo deixada de lado após o experimento de Michelson-Morley obter a primeira grande evidência contra a esta teoria, dando espaço para o surgimento da teoria da relatividade de Einstein. O outro problema estava relacionado com as discrepâncias entre os dados experimentais e as teorias clássicas, na tentativa de explicar a emissão de radiação pela matéria, fato que ficou conhecido como catástrofe do ultravioleta (NUSSENZVEIG, 2014). Este problema proporcionou o desenvolvimento do que hoje é conhecido como mecânica quântica.

2.1 Introdução histórica

2.1.1 Problema da radiação do corpo negro

De acordo com a visão clássica, a radiação térmica é emitida por cargas elétricas de um corpo oscilando em diversas frequências. Considerando que os constituintes do corpo eram osciladores harmônicos clássicos, se este corpo fosse aquecido, os seus constituintes emitiriam energia de forma contínua e, portanto, a intensidade de radiação $I(\nu)$ seria sempre crescente em relação a frequência e tenderia ao infinito para frequências muito altas. Contudo, os resultados obtidos experimentalmente não concordavam com essa conclusão.

Em 1900, o físico Max Planck apresentou um modelo matemático, que foi idealizado por ele, que se ajustava perfeitamente aos dados experimentais obtidos na época. Este modelo tinha como base duas hipóteses:

1. As partículas oscilantes deveriam ter apenas determinadas quantidades de energias, em valores discretos, dadas por

$$E_n = nh\nu, \quad (2.1)$$

onde n é um número inteiro positivo, h é a constante de Planck e ν é a frequência da radiação emitida.

2. As partículas emitem ou absorvem radiação em quantidades discretas, denominadas *quanta*.

Assim, esta nova teoria se contrapõe a teoria clássica, já que as energias dos osciladores são restritas a múltiplos inteiros de $h\nu$. Com este modelo Planck conseguiu resolver o problema do corpo negro. Contudo, Planck e outros cientistas não acreditavam que o *quantum* fosse real, apenas achavam que era um artifício matemático para resolver o problema. Planck também considerava que essa solução era, na verdade, um ato de desespero, pois ele era extremamente conservador no que diz respeito as teorias clássicas da física. A partir do problema do corpo negro, iniciou-se uma série de discussões a respeito da validade da teoria clássica na escala atômica e para muitos este problema é considerado como o marco inicial da teoria quântica na Física.

2.1.2 Efeito fotoelétrico

Um outro problema que não era bem explicado somente com a Física clássica e teoria ondulatória da luz era o do efeito fotoelétrico. O efeito fotoelétrico é a emissão de elétrons por um material, geralmente metálico, quando exposto a uma radiação eletromagnética (como a luz). Com a teoria clássica, acreditava-se que esse efeito poderia ser atribuído à transferência de energia da luz para um elétron. Assim, era esperava-se que uma mudança na intensidade da luz induziria mudanças na energia cinética dos elétrons emitidos. No entanto, o que os resultados experimentais mostravam era que os elétrons são emitidos apenas quando a luz excede uma certa frequência, chamada de frequência de corte. Para explicar o fato de que a luz pode ejetar elétrons mesmo com sua intensidade baixa, Albert Einstein estendeu a teoria de Planck e considerou que a radiação era quantizada. Assim, a radiação eletromagnética passou a ser tratada como um feixe de pacotes de energia. Alguns anos depois seria confirmado que esses pacotes de energia, ou *quanta*, eram na verdade um conjunto de uma determinada partícula elementar que, em 1926, foi chamada de fóton pelo cientista Gilbert Lewis.

Assim, quando a radiação incide no metal, ocorre a interação entre fótons e elétrons. Caso o elétron absorva a radiação, ele sai do material com a energia que recebeu. Caso contrário, ele permanecerá no material. Uma consequência imediata disso foi a expressão matemática para a energia de um fóton, que ficou conhecida como relação de Planck-Einstein e é dada por:

$$E = h\nu , \quad (2.2)$$

onde h é conhecida como a constante de Planck. Esta expressão significa que cada fóton pode atingir apenas um elétron e fornecer energia $h\nu$. O trabalho de Einstein sobre o efeito fotoelétrico lhe rendeu o prêmio nobel em 1921.

Com tudo isso, o pensamento de que uma teoria quântica da matéria era necessária foi ganhando força no meio científico e vários cientistas passaram a desenvolver o formalismo matemático da mecânica quântica.

2.2 Formalismo matemático

Na mecânica clássica, o principal objetivo é determinar a posição de uma partícula em qualquer instante de tempo dado, ou seja, determinar a posição em função do tempo, $x(t)$. Com essa informação, podemos obter a velocidade ($v = dx/dt$), o momento ($p = mv$), a energia cinética ($E_c = p^2/2m$) ou qualquer outra grandeza dinâmica de interesse. Para determinarmos $x(t)$ utilizamos as leis de Newton e, considerando sistemas conservativos, o fato de que a força pode ser expressa como a derivada de um potencial ($F = -dV/dx$) (NUSSENZVEIG, 2013) (FEYNMAN *et al.*, 2011).

Na mecânica quântica, por sua vez, o que buscamos são as chamadas funções de onda da partícula ($\psi(x, t)$) e também os observáveis físicos (\hat{H} , \hat{X} , \hat{P} e etc). Para obter a *função de onda*, é necessário resolver a chamada equação de Schrödinger unidimensional dependente do tempo (GRIFFITHS, 1960):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi, \quad (2.3)$$

onde i é a unidade imaginária, \hbar é a constante reduzida de Planck e m a massa da partícula.

A equação de Schrödinger desempenha um papel na mecânica quântica muito semelhante ao da segunda lei de Newton na mecânica clássica. A função de onda necessita de uma interpretação estatística em que $|\psi|^2$ é densidade de probabilidade e a probabilidade de encontrar a partícula na posição x , no instante t , é dada pela seguinte integral:

$$\int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx = \text{probabilidade de encontrar a partícula entre } a \text{ e } b \text{ no instante } t. \quad (2.4)$$

Com a interpretação estatística surge uma indeterminação dentro da mecânica quântica, ou seja, não é possível prever com exatidão onde a partícula estava antes da medida. A mecânica quântica nos fornece apenas a informação estatística sobre os resultados possíveis.

2.2.1 Espaço de Hilbert

A teoria quântica se baseia em duas construções principais: funções de onda e operadores. A função de onda representa o estado do sistema de interesse e os operadores representam os observáveis físicos. As funções de onda são elementos de um espaço vetorial e os operadores agem sobre elas como transformações lineares. Portanto, a linguagem utilizada na mecânica quântica é a álgebra linear. É importante lembrar que, para a interpretação estatística fazer sentido fisicamente, a função de onda deve estar normalizada, ou seja,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1, \quad (2.5)$$

já que a partícula necessariamente tem que estar em algum lugar do espaço (GRIFFITHS, 1960). O conjunto de todas as funções quadrado-integráveis ($\int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty$), em um intervalo específico, constitui um espaço vetorial conhecido na física como *espaço de Hilbert*. Assim, as funções de onda existem no espaço de Hilbert. Definimos o produto interno de duas funções de onda, $\psi(x)$ e $\theta(x)$, da seguinte forma (COHEN-TANNOUDI *et al.*, 2019):

$$\langle \psi | \theta \rangle \equiv \int_a^b \psi(x)^* \theta(x) dx. \quad (2.6)$$

Se ψ e θ estão no espaço de Hilbert, então o produto interno de ambas certamente existe. É importante notar que

$$\langle \theta | \psi \rangle = \langle \psi | \theta \rangle^*, \quad (2.7)$$

isso é esperado já que o espaço de Hilbert é construído sobre o corpo dos complexos. Duas funções serão consideradas **ortogonais** se o produto interno de ambas for igual a 0. Um conjunto de funções, $\{\psi_n\}$, será **ortonormal** se as funções forem normalizadas e mutuamente ortogonais, ou seja, se obedecem a seguinte relação:

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}, \quad (2.8)$$

onde δ_{mn} é a delta de Kronecker.

Por último, um conjunto de funções será chamado **completo** se qualquer outra função no espaço de Hilbert puder ser escrita como uma combinação linear delas, de modo que:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x). \quad (2.9)$$

Considerando que as funções $\{\psi_n\}$ sejam ortonormais, os coeficientes c_n são dados pela seguinte equação:

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle. \quad (2.10)$$

2.2.2 Observáveis e Medições

Como foi dito anteriormente, na mecânica quântica, além das funções de onda, também são necessários os operadores. Uma classe específica de operadores, chamados hermitianos, é particularmente útil na teoria quântica, pois os observáveis físicos são representados por operadores hermitianos. Uma medição de uma quantidade física em mecânica quântica é representada pela aplicação de um observável \hat{A} em um autovetor $|\psi_n\rangle$ deste operador (COHEN-TANNOUDJI *et al.*, 2019). Assim obteremos uma equação de autovalor dada por:

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle, \quad (2.11)$$

onde a_n são os autovalores de \hat{A} .

Consideremos, por simplicidade, que os autovalores a_n são não degenerados, ou seja, cada autovalor a_n está associado com um único autovetor $|\psi_n\rangle$. Cada autovalor representa, então, um resultado possível de uma medição dessa quantidade física representada por \hat{A} . O valor médio ou esperado de um observável \hat{A} pode ser expresso por:

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\hat{A}\rangle, \quad (2.12)$$

considerando que $|\psi\rangle$ seja um estado normalizado.

2.3 Postulados da Mecânica Quântica

A mecânica quântica é tradicionalmente abordada em termos de postulados e nesta seção serão apresentados estes postulados. Os postulados são (COHEN-TANNOUDJI *et al.*, 2019):

- 1º Postulado: *Em um tempo t_0 , o estado de um sistema físico é definido especificando o ket $|\psi(t_0)\rangle$ pertencente ao espaço de Hilbert.*
- 2º Postulado: *Toda quantidade física “A” mensurável é descrita por um operador hermitiano \hat{A} que atua no espaço de Hilbert. Esse operador é um observável. Exemplos: \hat{P} (momento linear), \hat{X} (posição), \hat{H} (energia) e \hat{L} (momento angular).*
- 3º Postulado: *A única possibilidade de medição de uma grandeza física “A” é um dos autovalores do observável \hat{A} correspondente.*
- 4º Postulado:
 - Caso discreto não degenerado: *Quando uma grandeza física “A” é medida em um sistema cujo o estado $|\psi\rangle$ é normalizado, a probabilidade $P(a_n)$ de se obter o*

autovalor não degenerado “ a_n ” correspondente ao operador \hat{A} é:

$$P(a_n) = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2, \quad (2.13)$$

onde $|\psi_n\rangle$ é o autovetor associado a a_n .

- Caso discreto degenerado: Quando uma grandeza física “ A ” é medida em um sistema cujo o estado $|\psi\rangle$ é normalizado a probabilidade $P(a_n)$ de se obter o autovalor degenerado “ a_n ” correspondente ao operador \hat{A} é:

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \psi_n^i | \psi \rangle|^2, \quad (2.14)$$

onde g_n é o grau de degenerescência de a_n e $\{|\psi_n^i\rangle\}$ é o conjunto de autovetores ortonormais associados a a_n .

- Caso contínuo não degenerado: Quando uma grandeza física “ A ” é medida em um sistema cujo o estado $|\psi\rangle$ é normalizado a probabilidade $dP(\alpha)$ de se obter um resultado entre os valores “ α ” e “ $\alpha + d\alpha$ ” é:

$$dP(\alpha) = |\langle \psi_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha, \quad (2.15)$$

onde $|\psi_\alpha\rangle$ é o autovetor associado a α .

- 5º Postulado: Se a medição de uma grandeza física “ A ” em um sistema $|\psi\rangle$ resultar em “ a_n ”, o estado do sistema logo após a medição é a normalização da projeção de $|\psi\rangle$ no subespaço dos estados com autovalor “ a_n ”:

$$|\psi'\rangle = \frac{\hat{P}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle}}, \quad (2.16)$$

onde \hat{P}_n é o operador projetor.

- 6º Postulado: A evolução temporal de um estado $|\psi\rangle$ é governada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (2.17)$$

onde $\hat{H}(t)$ é o observável associado com a energia total do sistema.

Com estes postulados e a álgebra linear, é possível descrever os sistemas físicos de forma satisfatória. Exemplos de sistemas físicos: Oscilador harmônico quântico, sistemas de dois níveis, spin 1/2 e o átomo de hidrogênio.

3 MÉTODO WKB

O método WKB (GRIFFITHS, 1960) é uma técnica para encontrar as soluções aproximadas da equação de Schrödinger independente do tempo em uma dimensão (podemos utilizar a mesma ideia básica para resolver outros tipos de equações diferenciais e para a parte radial da equação de Schrödinger em três dimensões). Esse método é especialmente útil no cálculo de energias de estados ligados e nas taxas de tunelamento por meio de barreiras de potenciais.

A ideia do método é a seguinte: considere uma partícula de energia E que se move por uma região em que o potencial $V(x)$ é *constante*. Se $E > V$, a função de onda tem a forma

$$\psi(x) = Ae^{\pm ikx}, \text{ com } k \equiv \sqrt{2m(E - V)}/\hbar. \quad (3.1)$$

O sinal positivo indica que a partícula está se movendo para a direita, e o negativo significa que ela está indo para a esquerda (a solução geral é uma combinação linear dessas duas soluções). Nesse caso, a função de onda é sinusoidal com um comprimento de onda ($\lambda = 2\pi/k$) fixo e amplitude imutável (A). Agora, supondo que $V(x)$ *não seja constante*, mas que varie lentamente em comparação com λ , fazendo com que o potencial seja *praticamente* constante sobre uma região contendo muitos comprimentos de onda. Então, é lógico supor que ψ permaneça *praticamente* sinusoidal, mas com o comprimento de onda e amplitude variando lentamente com x . Essa é a inspiração por trás da aproximação WKB.

Pelo mesmo motivo, se $E < V$ (e V é constante), então ψ tem uma forma exponencial

$$\psi(x) = Ae^{\pm \kappa x}, \text{ com } \kappa \equiv \sqrt{2m(V - E)}/\hbar. \quad (3.2)$$

E se $V(x)$ *não é constante*, mas varia lentamente em comparação com $1/\kappa$, a solução permanece *praticamente* exponencial, mas com A e κ sendo funções que variam lentamente com x .

Porém, existe um lugar onde o método está fadado ao fracasso, e esse lugar fica nas proximidades de um **ponto de retorno** clássico, em que $E \approx V$. Nesses pontos de retorno, λ tende ao infinito, de modo que $V(x)$ passa a não variar lentamente em comparação a ele. A manipulação adequada dos pontos de retorno é o aspecto mais difícil da aproximação WKB, embora os resultados finais sejam simples de afirmar e fáceis de serem implementados.

3.1 A região clássica

A equação de Schrödinger independente do tempo,

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (3.3)$$

pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x), \quad (3.4)$$

em que

$$p(x) \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]} \quad (3.5)$$

é a fórmula clássica para o momento de uma partícula com energia total E e com uma energia potencial $V(x)$. A região clássica é justamente a região em que $E > V(x)$, de modo que $p(x)$ é *real*. Na região clássica, ψ é uma função complexa e podemos expressá-la em termos de sua amplitude, $A(x)$, e de sua fase, $\phi(x)$. $A(x)$ e $\phi(x)$ são ambas reais. Assim, temos que:

$$\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)}. \quad (3.6)$$

Tomando a primeira e a segunda derivada em relação a x , encontramos que

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = (A' + iA\phi')e^{i\phi(x)}, \quad (3.7)$$

e

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = [A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2]e^{i\phi(x)}, \quad (3.8)$$

onde o apóstrofe foi utilizado para indicar a derivada em relação a x .

Substituindo as equações (3.8) e (3.6) na equação (3.4), temos:

$$A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2 = -A\frac{p^2}{\hbar^2}. \quad (3.9)$$

Isso equivale a duas equações *reais*, uma para a parte real e a outra para a parte imaginária. Para a parte real:

$$A'' - A(\phi')^2 = -A\frac{p^2}{\hbar^2} \implies A'' = A \left[(\phi')^2 - \frac{p^2}{\hbar^2} \right]. \quad (3.10)$$

Para a parte imaginária:

$$2A'\phi' + A\phi'' = 0 \implies (A^2\phi')' = 0. \quad (3.11)$$

As equações (3.10) e (3.11) são inteiramente equivalentes à equação de Schrödinger original. Resolvendo a segunda equação, temos que:

$$A^2 \phi' = C^2 \implies A = \frac{C}{\sqrt{\phi'}}, \quad (3.12)$$

onde C é uma constante real. A primeira equação (3.10) não pode ser resolvida, então, utilizaremos uma aproximação: *pressupomos que a amplitude A varie lentamente*, assim, o termo de A'' é desprezível, em outras palavras, A''/A é muito menor que $(\phi')^2$ e que p^2/\hbar^2 . Com essa aproximação, podemos descartar o lado esquerdo de (3.10) ficando somente com

$$(\phi')^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \implies \frac{d\phi}{dx} = \pm \frac{p}{\hbar}, \quad (3.13)$$

e, portanto,

$$\phi(x) = \pm \frac{1}{\hbar} \int p(x) dx. \quad (3.14)$$

Qualquer constante pode ser absorvida em C , de modo que a função de onda ψ se torna

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx}, \quad (3.15)$$

e a solução geral (aproximada) será uma combinação linear de dois termos, um com cada sinal.

É importante observar que agora C pode ser complexa e que, portanto, a probabilidade de encontrar uma partícula no ponto x é dada por

$$|\psi(x)|^2 \cong \frac{|C|^2}{p(x)}, \quad (3.16)$$

e essa probabilidade é inversamente proporcional ao momento da mesma.

3.2 A região não clássica

Até aqui foi considerado o caso onde $E > V$, portanto p é real. Mas podemos utilizar o mesmo raciocínio para escrever o resultado correspondente a região não clássica ($E < V$). O resultado é semelhante ao da equação (3.15) só que agora p é imaginário:

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx}. \quad (3.17)$$

Consideremos, por exemplo, o problema do espalhamento de uma barreira retangular com uma ondulação em cima, conforme a Figura 1.

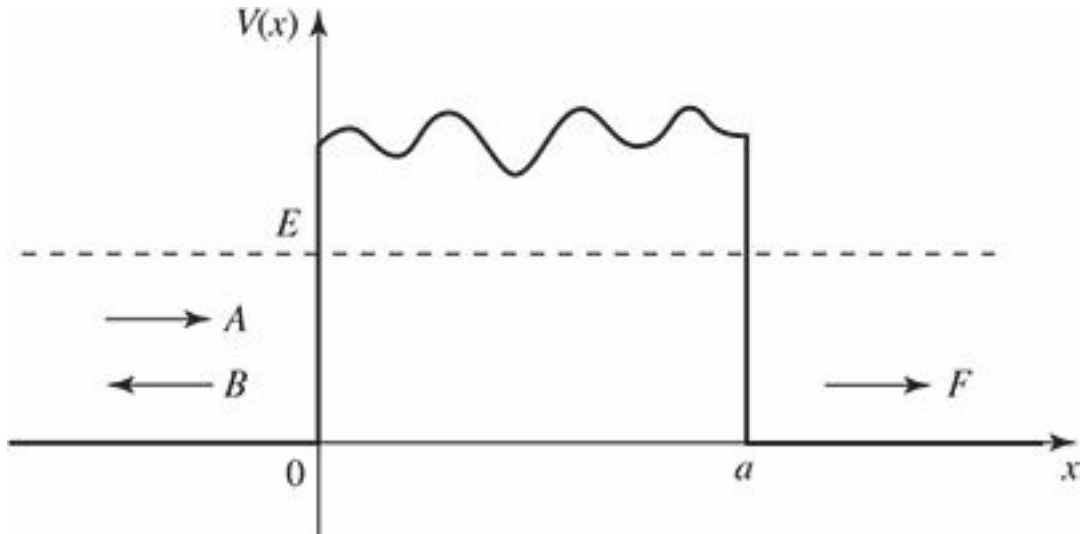


Figura 1 – Problema do espalhamento de uma barreira retangular com uma ondulação em cima. Neste gráfico, A representa a amplitude da onda incidente, B é a amplitude da onda refletida e F é a amplitude da onda transmitida. O potencial $V(x)$ é igual a zero para $x < 0$ e $x > a$ e possui uma forma ondulada para $0 < x < a$. Fonte: (GRIFFITHS, 1960)

Considerando a região em que $x < 0$, temos que:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (3.18)$$

em que A é a amplitude da onda incidente, B é a amplitude da onda refletida e $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$.

Considerando a região em que $x > a$, temos que:

$$\psi(x) = Fe^{ikx}, \quad (3.19)$$

em que F é a amplitude da onda que foi transmitida, com a probabilidade de transmissão sendo dada por

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2}. \quad (3.20)$$

Já na região de tunelamento, em que $0 \leq x \leq a$, a aproximação WKB fornece

$$\psi \cong \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left\{\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'\right\} + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'\right\}. \quad (3.21)$$

3.3 Fórmulas de conexão

Até então, os resultados obtidos são razoavelmente precisos. Contudo é interessante estudar o que acontece nos pontos de retorno ($E = V$), em que a aproximação WKB falha. Para tal consideraremos o problema do estado ligado, ilustrado na Figura 2.

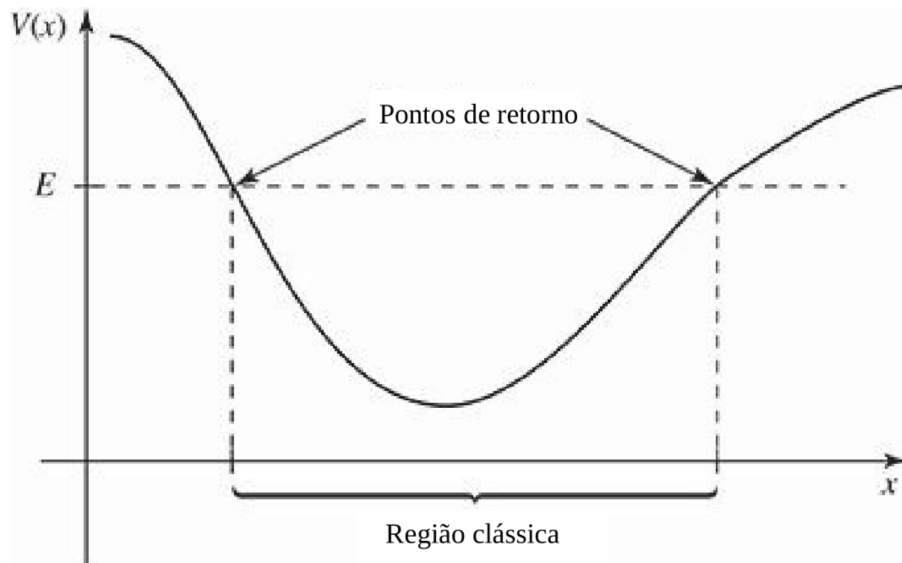


Figura 2 – Ilustração do problema do estado ligado. Neste gráfico estão representadas as regiões clássica e não clássica. A região clássica é a região em que $E > V(x)$. A região não clássica é a região em que $E < V(x)$. Os pontos de retorno são os pontos em que $E = V(x)$ e nestes pontos a amplitude da função de onda vai para infinito. Fonte: (GRIFFITHS, 1960)

Para simplificar, mudaremos os eixos de forma que o ponto de retorno onde o potencial é crescente ocorra em $x = 0$, conforme a Figura 3.

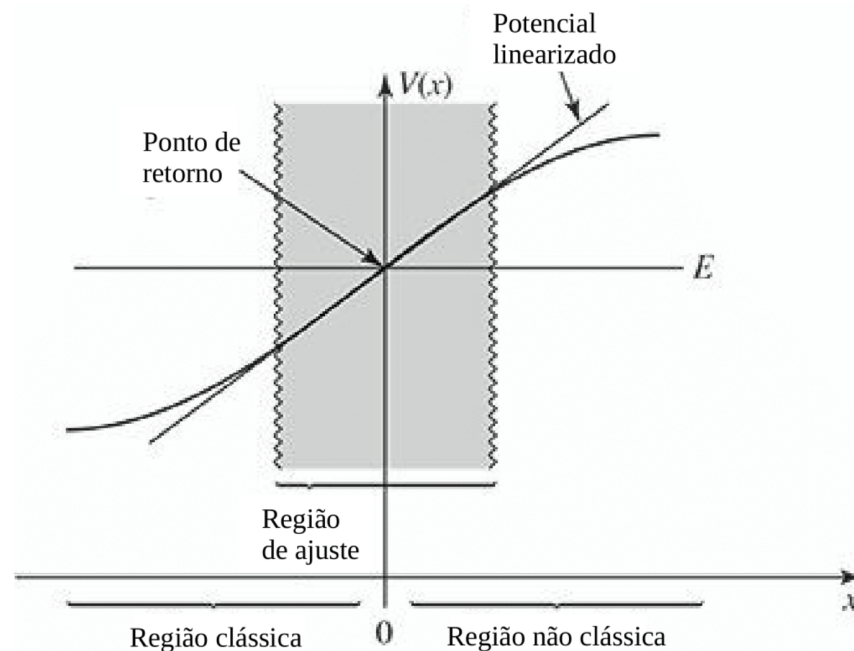


Figura 3 – Aqui temos uma visão ampliada do ponto de retorno da direita onde o potencial é ascendente. O gráfico foi deslocado, em comparação com da Figura 2, de modo que o ponto de retorno fosse para $x = 0$. A região em que vale a aproximação do potencial linearizado é chamada de região de ajuste. Dentro do intervalo da região de ajuste, a região clássica ocorre em $x < 0$ e a região não clássica ocorre em $x > 0$. Fonte: (GRIFFITHS, 1960)

Considerando a aproximação WKB na região de ajuste, temos

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left\{ B \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_x^0 p(x') dx' \right] + C \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_x^0 p(x') dx' \right] \right\}, \text{ se } x < 0, \quad (3.22)$$

ou

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} D \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx' \right], \text{ se } x > 0. \quad (3.23)$$

O potencial $V(x)$ permanece maior do que E para todos $x > 0$, portanto podemos excluir a parte com sinal positivo para o caso não clássico, já que a exponencial diverge nessa região. O problema é que, na aproximação WKB, a função de onda vai para infinito na vizinhança do ponto de retorno. Para resolver esse problema iremos definir uma função de onda de ajuste (ψ_p) que atravesse o ponto de retorno e, portanto, junte a função de onda na região clássica com a função de onda na região não clássica.

Como só precisamos da função de onda de ajuste na vizinhança da origem (ponto de retorno), podemos expandir o potencial até primeira ordem, obtendo então:

$$V(x) \cong E + V'(0)x. \quad (3.24)$$

Agora podemos resolver a equação de Schrödinger para esse $V(x)$. Assim, temos que:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_p}{dx^2} + [E + V'(0)x] \psi_p = E \psi_p \implies \frac{d^2 \psi_p}{dx^2} = \alpha^3 x \psi_p, \quad (3.25)$$

em que $\alpha \equiv \left[\frac{2m}{\hbar^2} V'(0) \right]^{1/3}$. Definindo $z \equiv \alpha x$, podemos reescrever a equação (3.25) como:

$$\frac{d^2 \psi_p}{dz^2} = z \psi_p. \quad (3.26)$$

A equação (3.26) é chamada de equação de Airy, e as soluções são chamadas de funções de Airy. Como a equação de Airy é uma equação diferencial de segunda ordem, então existem duas funções de Airy linearmente independentes, $Ai(z)$ e $Bi(z)$. A solução geral de ψ_p é uma combinação linear dessas funções, logo:

$$\psi_p(x) = a Ai(\alpha x) + b Bi(\alpha x), \quad (3.27)$$

onde a e b são constantes.

As propriedades das funções de Airy que serão úteis para o problema são as formas assintóticas das funções. São elas:

$$Ai(z) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi z^{1/4}}} e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} \text{ e } Bi(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi z^{1/4}}} e^{\frac{2}{3}z^{3/2}}, \text{ para } z \gg 0. \quad (3.28)$$

e

$$Ai(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \sin \left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \text{ e } Bi(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \cos \left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right], \text{ para } z \ll 0. \quad (3.29)$$

Com as expressões de ψ_p , de ψ na região clássica e de ψ na região não clássica em mãos, é possível fazer a sobreposição das funções (Figura 4) para obter a expressão final das fórmulas de conexão. Nas regiões de sobreposição, a equação (3.24) se mantém, e, portanto, $p(x)$ é dado por

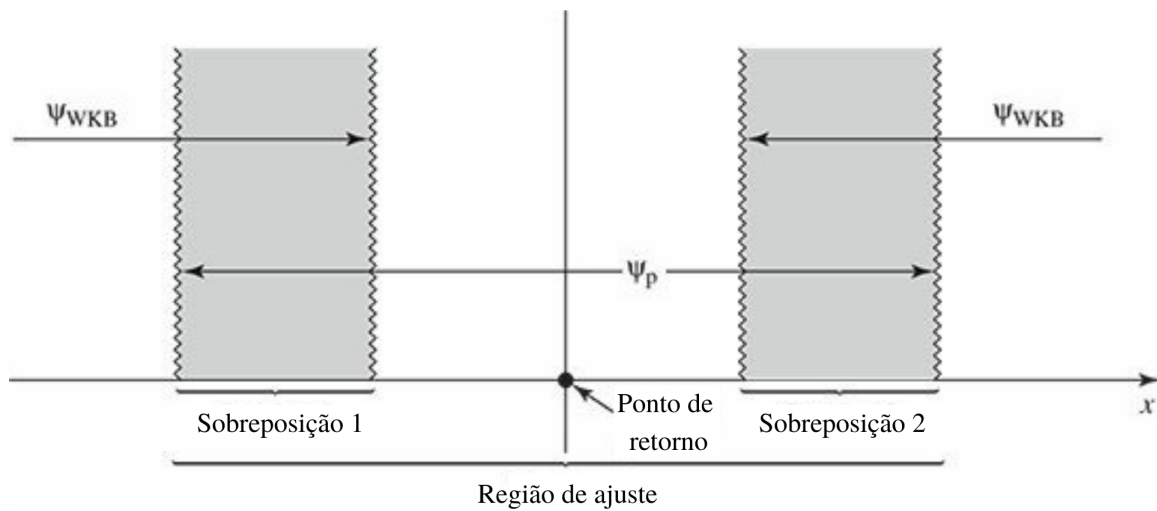


Figura 4 – Representação gráfica da região de ajuste e as zonas de sobreposição 1 e 2. A sobreposição 1 representa a sobreposição da função ψ_p e da função ψ_{WKB} clássica. A sobreposição 2 representa a sobreposição da função ψ_p e da função ψ_{WKB} não clássica. Fonte: (GRIFFITHS, 1960)

$$p(x) \cong \sqrt{2m[E - E - V'(0)x]} = \hbar\alpha^{3/2}\sqrt{-x}. \quad (3.30)$$

Para a região de sobreposição não clássica:

$$\int_0^x |p(x')| dx' \cong \hbar\alpha^{3/2} \int_0^x \sqrt{x'} dx' = \frac{2}{3} \hbar(\alpha x)^{3/2}. \quad (3.31)$$

Logo, a função de onda na região não clássica pode ser escrita como

$$\psi(x) \cong \frac{D}{\sqrt{\hbar}\alpha^{3/4}x^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}}. \quad (3.32)$$

Utilizando a forma assintótica das funções de Airy para $z \gg 0$, temos

$$\psi_p(x) \cong \frac{a}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}}. \quad (3.33)$$

Fazendo uma comparação das equações (3.32) e (3.33), vemos que

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha\hbar}} D \text{ e } b = 0. \quad (3.34)$$

Agora podemos utilizar o mesmo procedimento para a região de sobreposição clássica. Nessa região $p(x)$ é dado por:

$$\int_x^0 p(x') dx' \cong \frac{2}{3} \hbar (-\alpha x)^{3/2}, \quad (3.35)$$

e a função de onda WKB é

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{\hbar\alpha^{3/4}(-x)^{1/4}}} \left[B e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} + C e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right]. \quad (3.36)$$

Utilizando a forma assintótica das funções de Airy para $z \ll 0$ e lembrando que $b = 0$, temos

$$\psi_p(x) \cong \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \sin \left[\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right]. \quad (3.37)$$

Podemos reescrever o ψ_p da seguinte forma

$$\psi_p(x) = \frac{a}{2i\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \left[e^{i\pi/4} e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} - e^{-i\pi/4} e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right]. \quad (3.38)$$

Agora, comparando a equação (3.38) com a equação (3.36) encontramos

$$\frac{a}{2i\sqrt{\pi}} e^{i\pi/4} = \frac{B}{\sqrt{\hbar\alpha}} \implies B = -ie^{i\pi/4} D, \quad (3.39)$$

onde a segunda relação é pela equação (3.34), e também

$$\frac{-a}{2i\sqrt{\pi}} e^{-i\pi/4} = \frac{C}{\sqrt{\hbar\alpha}} \implies C = ie^{-i\pi/4} D, \quad (3.40)$$

onde a segunda relação é pela equação (3.34).

Com todas essas informações apresentadas até aqui podemos construir as chamadas fórmulas de conexão, que unem as soluções WKB em ambos os lados do ponto de retorno. A função de onda de ajuste não precisa mais ser utilizada pois já cumpriu seu propósito. Assim, podemos expressar tudo em termos da constante de normalização D e para deixar a solução mais

geral deslocaremos o ponto de retorno, que inicialmente estava na origem, para um ponto x_2 qualquer onde o potencial seja ascendente. A função de onda WKB então será

$$\psi(x) \cong \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], \text{ se } x < x_2 \text{ (Região clássica)}, \quad (3.41)$$

ou então

$$\psi(x) \cong \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx' \right] \right\}, \text{ se } x > x_2 \text{ (Região não clássica)}. \quad (3.42)$$

É importante lembrar que toda essa construção foi possível considerando um ponto de retorno onde o potencial é ascendente. Portanto, para o caso de um ponto de retorno onde o potencial é descendente a lógica é a mesma. Considerando o ponto de retorno com inclinação descendente, temos que

$$\psi(x) \cong \frac{D'}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx' \right] \right\}, \text{ se } x < x_1 \text{ (Região não clássica)}, \quad (3.43)$$

ou então

$$\psi(x) \cong \frac{2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], \text{ se } x > x_1 \text{ (Região clássica)}. \quad (3.44)$$

Esse conjunto de equações (3.41), (3.42), (3.43) e (3.44) são as chamadas fórmulas de conexão. Para completar a discussão sobre o método WKB é importante comentar o quanto esse resultado é útil, pois nos permite calcular (aproximadamente) as energias permitidas sem precisar resolver diretamente a equação de Schrödinger.

4 FORMALISMO DO OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO

O formalismo do PDTTO é a base da chamada Mecânica Quântica não aditiva e tem sido amplamente utilizado no meio científico para estudar problemas envolvendo uma massa efetiva dependente da posição e materiais bidimensionais. Esse formalismo tem como base um operador de translação diferente do usual, já que o referido operador depende explicitamente da posição. Esse é o operador de translação dependente da posição é o ponto de partida para o desenvolvimento do formalismo que será apresentado ao longo desta seção.

4.1 Formalismo unidimensional

Considere um estado bem localizado em torno de x que pode ser alterado para um outro estado bem localizado em torno de $x + a + \gamma ax$ mantendo todas as propriedades físicas inalteradas, onde γ tem dimensão de inverso de comprimento e a representa o tamanho de uma translação. Para $\gamma = 0$, voltamos para uma translação padrão (SAKURAI; COMMINS, 1995). Para $\gamma \neq 0$, vemos que a translação depende explicitamente da posição do sistema. Esse processo é matematicamente expresso por um operador de translação $\hat{T}_\gamma(a)$ da seguinte forma:

$$\hat{T}_\gamma(a) |x\rangle = |x + a + \gamma ax\rangle . \quad (4.1)$$

A composição dos deslocamentos através de \hat{T}_γ em termos de duas sucessivas translações infinitesimais resulta em:

$$\hat{T}_\gamma(dx')\hat{T}_\gamma(dx'') = \hat{T}_\gamma(dx' + dx'' + \gamma dx' dx'') . \quad (4.2)$$

Isso nos mostra a característica não-aditiva desse operador. É importante notar que o operador inverso de \hat{T}_γ é dado por:

$$\hat{T}_\gamma^{-1}(dx) |x\rangle = \left| \frac{x - dx}{1 + \gamma dx} \right\rangle . \quad (4.3)$$

Outra propriedade importante de \hat{T}_γ é que no limite em que a translação infinitesimal vai a zero, o operador \hat{T}_γ retorna para o operador identidade. Matematicamente, temos que:

$$\lim_{dx \rightarrow 0} \hat{T}_\gamma(dx) = \mathbb{1} . \quad (4.4)$$

Agora, supondo que o *momentum* generalizado \hat{p}_γ é o gerador de translação (SAKURAI; COMMINS, 1995), temos então que:

$$\hat{T}_\gamma(dx) = \mathbb{1} - \frac{i\hat{p}_\gamma dx}{\hbar} . \quad (4.5)$$

Agora, gostaríamos de obter a relação de comutação entre $\hat{T}_\gamma(dx)$ e \hat{x} , para isso vamos considerar as seguintes equações:

$$\hat{x}\hat{T}_\gamma(dx)|x\rangle = (x + dx + \gamma x dx)|x + dx + \gamma x dx\rangle, \quad (4.6)$$

e

$$\hat{T}_\gamma(dx)\hat{x}|x\rangle = x|x + dx + \gamma x dx\rangle. \quad (4.7)$$

Subtraindo a equação (4.7) da equação (4.6), obtemos a relação de comutação entre $\hat{T}_\gamma(dx)$ e \hat{x} , que é dada por:

$$[\hat{x}, \hat{T}_\gamma(dx)]|x\rangle \simeq (1 + \gamma x)dx|x\rangle, \quad (4.8)$$

onde o erro é de segunda ordem em dx . Utilizando as equações (4.5) e (4.8), podemos obter a relação de comutação entre \hat{x} e \hat{p}_γ . Temos então que:

$$[\hat{x}, \hat{p}_\gamma]|x\rangle = i\hbar(1 + \gamma x)|x\rangle. \quad (4.9)$$

Com a relação de comutação dada pela equação (4.9), podemos determinar também a relação de incerteza entre \hat{x} e \hat{p}_γ . Utilizando o fato de que $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}_\gamma \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{x}, \hat{p}_\gamma]\rangle|$, a relação de incerteza é dada por (FILHO *et al.*, 2016):

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}_\gamma \geq \frac{\hbar}{2}(1 + \gamma\langle x \rangle). \quad (4.10)$$

Neste ponto, é importante afirmar que o operador \hat{p}_γ é Hermitiano em relação ao seguinte produto escalar:

$$\langle\psi|\theta\rangle = \int \frac{dx}{1 + \gamma x} \psi^*(x)\theta(x). \quad (4.11)$$

Onde o intervalo de integração depende das condições de contorno do sistema que está sendo investigado. A partir da equação (4.11) é possível determinar a forma do operador identidade, que é dada por:

$$\mathbb{1} = \int \frac{dx}{1 + \gamma x} |x\rangle\langle x|. \quad (4.12)$$

É possível determinar a expressão do operador \hat{p}_γ no espaço de posição a partir da equação (4.5) e da equação (4.12) (BRAGA, 2015). Essa expressão é dada por:

$$\langle x|\hat{p}_\gamma|\psi\rangle = -i\hbar(1 + \gamma x)\frac{d}{dx}\langle x|\psi\rangle. \quad (4.13)$$

Definindo $D_\gamma \equiv (1 + \gamma x) \frac{d}{dx}$, onde D_γ é uma derivada no espaço deformado, podemos reescrever \hat{p}_γ da seguinte forma:

$$\hat{p}_\gamma = -i\hbar D_\gamma . \quad (4.14)$$

A equação de movimento para um partícula na representação de posição desse espaço deformado corresponde a uma equação do tipo equação de Schrödinger, dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H}_\gamma \psi(x, t) , \quad (4.15)$$

onde $\hat{H}_\gamma = \frac{\hat{p}_\gamma^2}{2m} + V(x)$. Portanto, utilizando a equação (4.14), podemos reescrever a equação (4.15) da seguinte forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} D_\gamma^2 \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) . \quad (4.16)$$

É mais conveniente expressar a equação (4.16) em termos de uma mudança de variáveis. O operador identidade sugere como deve ser essa mudança. Assim, podemos definir uma variável η a partir da equação diferencial $\frac{d\eta}{dx} = \frac{1}{1+\gamma x}$, com a condição de contorno $\eta(0) = 0$. Assim, a expressão de η é dada por:

$$\eta = \frac{\ln(1 + \gamma x)}{\gamma} . \quad (4.17)$$

Podemos inverter a equação (4.17) para acharmos x em termos de η . Assim, obtemos que:

$$x = \frac{e^{\gamma\eta} - 1}{\gamma} . \quad (4.18)$$

Com a mudança de variáveis, um intervalo de $[0, L]$ em x corresponde a um intervalo $[0, \bar{L}]$ em η , com $\bar{L} = \ln(1 + \gamma L)/\gamma$. Após a mudança de variáveis, podemos reescrever D_γ da seguinte forma:

$$D_\gamma = (1 + \gamma x) \frac{d}{d\eta} \frac{d\eta}{dx} = \frac{d}{d\eta} . \quad (4.19)$$

Definindo $\theta(\eta, t) = \psi(x(\eta), t)$ e $V_{eff}(\eta) = V(x(\eta))$, podemos reescrever a equação (4.16) da seguinte forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \theta(\eta, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \theta(\eta, t) + V_{eff}(\eta) \theta(\eta, t) . \quad (4.20)$$

Assumindo que $\theta(\eta, t) = \Phi(\eta) \exp(-iEt/\hbar)$ e substituindo na equação (4.20), obtemos que:

$$E\Phi(\eta) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\eta^2} \Phi(\eta) + V_{eff}(\eta) \Phi(\eta) . \quad (4.21)$$

Note que essa é a forma mais familiar da equação de Schrödinger independente do tempo, porém, dependendo de uma variável η e com um potencial efetivo V_{eff} .

4.2 Método WKB no formalismo do operador de translação dependente da posição

No formalismo do PDTO, a equação de movimento assume a forma vista em 4.16, onde o *momentum* pode ser escrito como

$$\hat{p}_\gamma(x) = (1 + \gamma x)p(x) , \quad (4.22)$$

e a energia total por sua vez é

$$E = \frac{(1 + \gamma x)^2 p^2}{2m} + V(x) . \quad (4.23)$$

Agora podemos isolar $p(x)$ para escrever uma expressão semelhante a equação (3.5). A equação obtida é

$$p = \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{1 + \gamma x} . \quad (4.24)$$

Seguindo o mesmo raciocínio da Seção 3, obteremos os mesmos resultados que já foram discutidos, apenas trocando $p(x)$ por $(1 + \gamma x)p(x)$. Com tudo que foi discutido até aqui, podemos aplicar este formalismo para alguns problemas e assim mostrar o quanto o método WKB pode ser útil para analisar as energias de um sistema físico de modo a facilitar a análise de problemas, já que não é necessário resolver a equação diferencial com este método.

5 APLICAÇÕES

Nessa seção iremos tratar de alguns problemas para ilustrar a utilidade do método WKB quando utilizado em conjunto com o formalismo do PDT0.

5.1 Poço quadrado infinito

Para o caso do poço quadrado infinito com uma largura L , a equação de Schrödinger é dada por

$$E\psi(x) = \frac{(1 + \gamma x)^2 p^2}{2m} \psi(x), \quad (5.1)$$

onde $V(x) = 0$, para $0 < x < L$ e $V(x) = \infty$, caso contrário. Uma ilustração do potencial do poço quadrado infinito é dada na Figura 5.

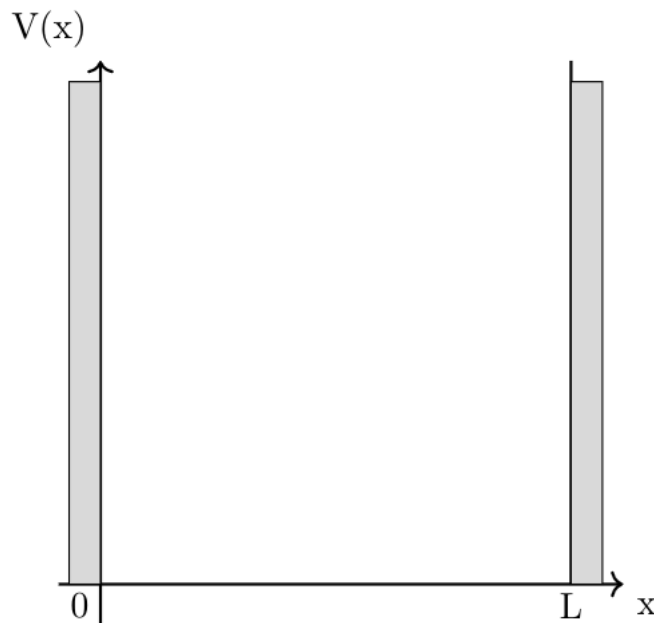


Figura 5 – Ilustração do potencial de um poço quadrado infinito de largura L . O potencial $V(x)$ é igual a zero para x entre zero e L , e é igual a infinito para x menor que zero e x maior que L . Fonte: Elaborado pelo autor.

Desse modo, podemos ver que o *momentum* é dado por

$$p(x) = \frac{\sqrt{2mE}}{1 + \gamma x}. \quad (5.2)$$

Agora, aplicando o método WKB, temos que:

$$\phi(x) = \frac{1}{\hbar} \int_0^x p(x') dx' = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{\ln(1 + \gamma x)}{\gamma}, \quad (5.3)$$

onde a equação (5.3) foi obtida a partir da equação (3.14), apenas trocando $p(x)$ obtido em (3.5) por $p(x)$ obtido em (4.23). Como $\phi(0) = 0$ e $\phi(L) = n\pi$ para a função de onda zera em 0 e em L , então

$$\phi(L) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{\ln(1 + \gamma L)}{\gamma} = n\pi \implies E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2 \gamma^2}{2m[\ln(1 + \gamma L)]^2}. \quad (5.4)$$

Um gráfico das energias obtidas na equação (5.4) é exibido na Figura 6.

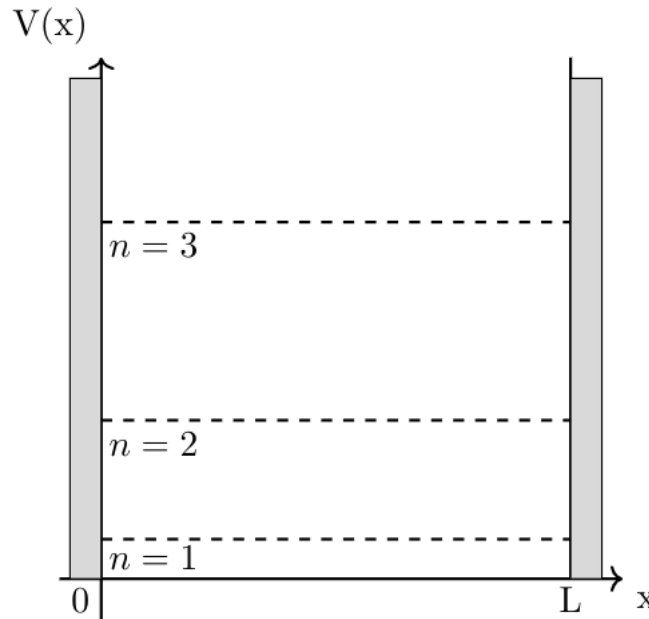


Figura 6 – Ilustração do potencial de um poço quadrado infinito. Aqui adotamos unidades atômicas onde $\hbar = m = 1$. Os níveis de energia (linhas tracejadas) foram obtidos considerando $\gamma = 0.5$ e valores inteiros de n indo de 1 até 3. Fonte: Elaborado pelo autor.

Notemos que o resultado obtido mostra que as energias são quantizadas, como era o esperado (FILHO *et al.*, 2011). Também é muito importante notar que, quando $\gamma = 0$, as energias retornam para o caso padrão das energias para um poço quadrado infinito, que são dadas por:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}. \quad (5.5)$$

Um gráfico das energias obtidas na equação (5.5) é exibido na Figura 7 para servir de comparação com a Figura 6. Podemos observar, pela Figura 6, que o espaçamento dos níveis de energia são um pouco menores em comparação com as energias da Figura 7. Isto se deve ao fator γ , que representa uma deformação no espaço.

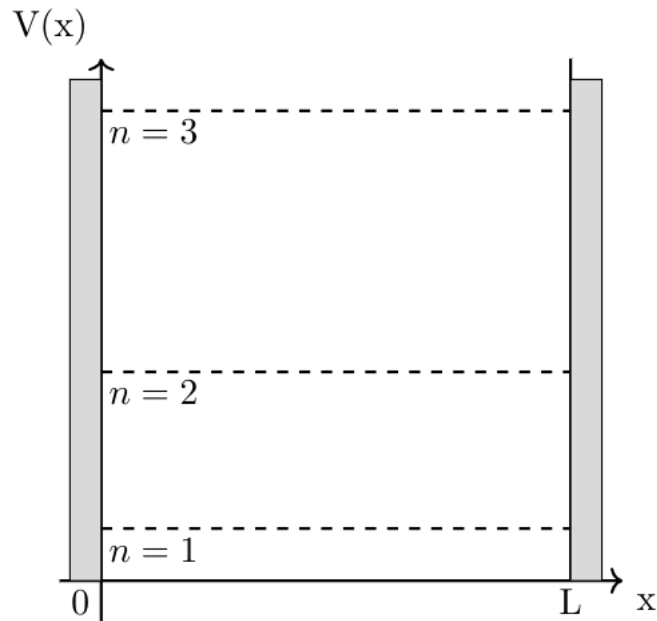


Figura 7 – Ilustração do potencial de um poço quadrado infinito. Aqui adotamos unidades atômicas onde $\hbar = m = 1$. Os níveis de energia (linhas tracejadas) foram obtidos considerando $\gamma = 0$ e valores inteiros de n indo de 1 até 3. Fonte: Elaborado pelo autor.

5.2 Potencial harmônico

Para o caso do potencial harmônico, ilustrado na Figura 8, é necessário utilizar as fórmulas de conexão, pois a aproximação falha nos pontos de retorno.

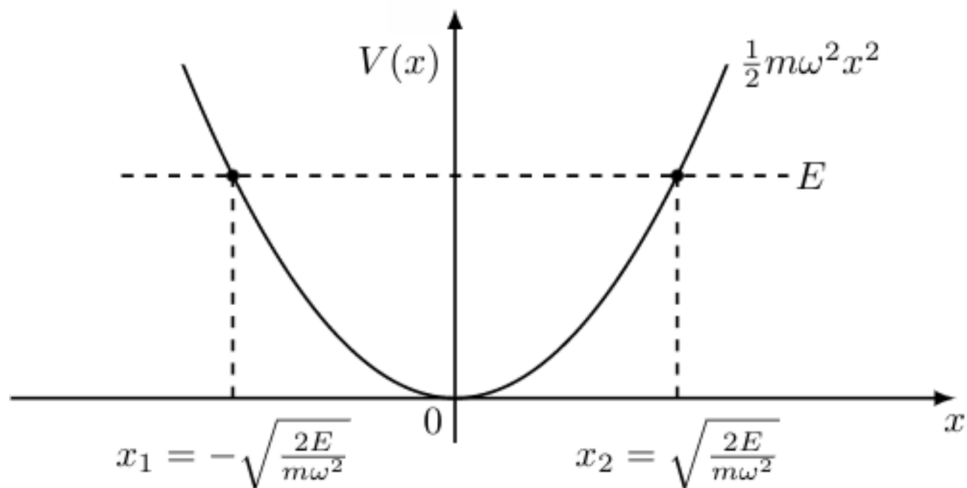


Figura 8 – Ilustração do potencial harmônico. Os pontos de retorno são os pontos x_1 e x_2 . A partícula possui uma energia E , uma massa m e está sujeita a uma frequência de oscilação ω . Fonte: Elaborado pelo autor.

As fórmulas são dadas pelas equações (3.37) à (3.40), porém com $p(x)$ escrito na forma da equação (4.24), já que estamos no formalismo do PDTTO. Estamos interessados em

explorar os pontos de conexão da região clássica com a região não clássica, de modo que as funções de onda na região clássica ($E > V$) são

$$\psi_1(x) \cong \frac{2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], \text{ para } x > x_1, \quad (5.6)$$

e

$$\psi_2(x) \cong \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], \text{ para } x < x_2. \quad (5.7)$$

Como $\cos(\theta - \frac{\pi}{2}) = \sin(\theta)$ e $\cos(\theta) = \cos(-\theta)$, então podemos reescrever as equações (5.5) e (5.6) como

$$\psi_1(x) \cong \frac{2D'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right], \text{ para } x > x_1, \quad (5.8)$$

e

$$\psi_2(x) \cong \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], \text{ para } x < x_2. \quad (5.9)$$

Na região clássica, $\psi_1(x) = \psi_2(x)$, portanto os argumentos dos cossenos devem ser iguais em módulo. Logo,

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} = -\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} + n\pi \implies \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (5.10)$$

Lembrando que $p(x)$ é dado pela equação (4.24) e, que x_1 e x_2 são obtidos quando $E = V(x)$, temos que:

$$E = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \implies x_1 = -x_2 = -\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}, \quad (5.11)$$

e

$$p(x) = \frac{m\omega\sqrt{x_2^2 - x^2}}{1 + \gamma x}. \quad (5.12)$$

O trabalho agora se resume em resolver a integral da equação (5.9). O resultado dessa integral é:

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{m\omega\sqrt{x_2^2 - x^2}}{1 + \gamma x} dx = \frac{m\omega}{\gamma^2} \cdot \left[-\sqrt{1 - x_2^2 \gamma^2} \arctan \left(\frac{x_2^2 \gamma + x}{\sqrt{1 - x_2^2 \gamma^2} \cdot \sqrt{x_2^2 - x^2}} \right) + \right. \\ \left. + \gamma \sqrt{x_2^2 - x^2} + \arctan \left(\frac{x}{\sqrt{x_2^2 - x^2}} \right) \right]_{-x_2}^{x_2}. \quad (5.13)$$

Aplicando os limites de integração, obtemos que:

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{m\omega \sqrt{x_2^2 - x^2}}{1 + \gamma x} dx = \frac{m\omega}{\gamma^2} \left[-\pi \sqrt{1 - x_2^2 \gamma} + \pi \right]. \quad (5.14)$$

Podemos juntar os resultados da equação (5.9) e da equação (5.12) para obter os valores possíveis de energia para o potencial harmônico no formalismo do PDTTO. Assim, teremos que:

$$\frac{m\omega}{\gamma^2} \left[-\sqrt{1 - x_2^2 \gamma^2} \cdot \pi + \pi \right] = \hbar \pi \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (5.15)$$

Lembrando que $x_2 = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$, podemos reorganizar a equação (5.14) para obter os valores das energias do sistema. Assim, obtemos que:

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \left[1 - \frac{\hbar \gamma^2}{2m\omega} \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (5.16)$$

Um gráfico das energias obtidas na equação (5.16) é exibido na Figura 9.

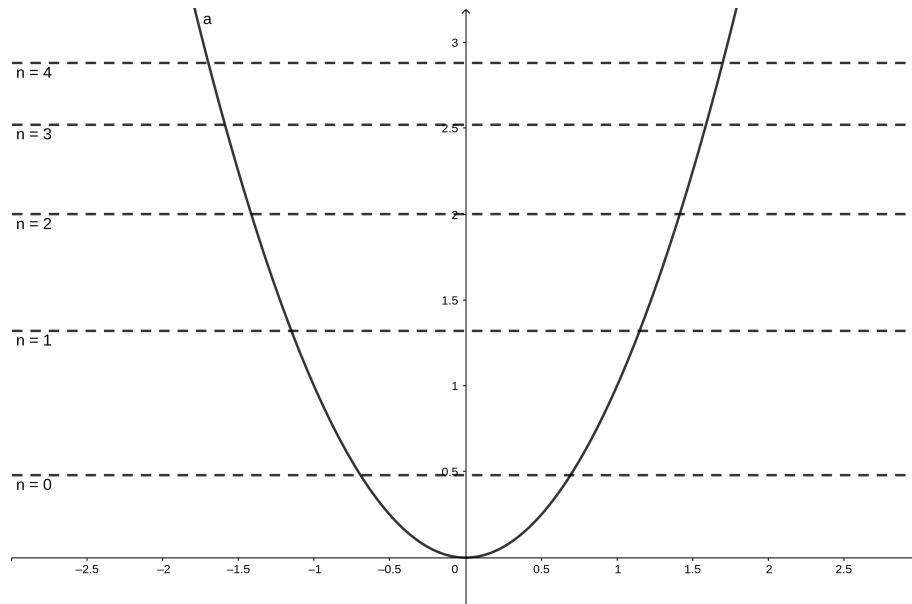


Figura 9 – Ilustração do potencial harmônico (linha sólida). Aqui consideramos $\omega = 1$ e adotamos unidades atômicas onde $\hbar = m = 1$. Os níveis de energia (linhas tracejadas) foram obtidos considerando $\gamma = 0.4$ e valores inteiros de n indo de 0 até 4. Fonte: Elaborado pelo autor.

Notemos que o resultado obtido mostra que as energias são quantizadas, como era o esperado (FILHO *et al.*, 2013). Também é muito importante notar que, quando $\gamma = 0$, as energias retornam para o caso padrão das energias de um potencial harmônico, que são dadas por:

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (5.17)$$

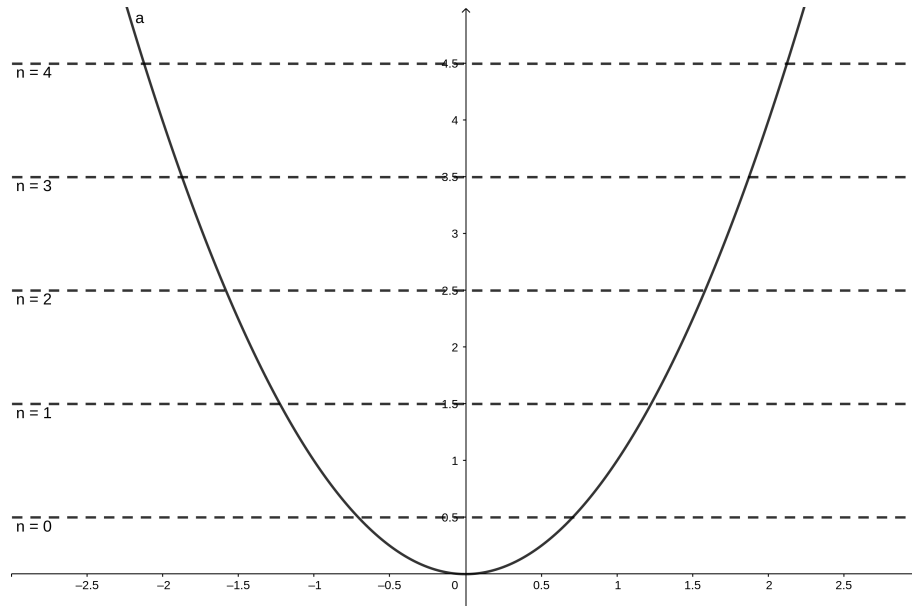


Figura 10 – Ilustração do potencial harmônico (linha sólida). Aqui consideramos $\omega = 1$ e adotamos unidades atômicas onde $\hbar = m = 1$. Os níveis de energia (linhas tracejadas) foram obtidos considerando $\gamma = 0$ e valores inteiros de n indo de 0 até 4. Fonte: Elaborado pelo autor.

Um gráfico das energias obtidas na equação (5.17) é exibido na Figura 10 para servir de comparação com a Figura 9.

Podemos observar que o espaçamento entre as energias vai diminuindo quando n vai aumentando, diferentemente do caso usual onde os níveis de energia possuem um espaçamento fixo dado por $\hbar\omega$, isto se deve ao fator γ que representa uma deformação no espaço.

6 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho apresentamos o formalismo do PDTTO em conjunto com o método WKB como uma forma alternativa de obter as energias possíveis para uma partícula, sem resolver diretamente a equação diferencial. Foi possível observar a utilidade deste método nas aplicações para dois casos distintos, pois os resultados obtidos utilizando o método WKB fornecem energias quantizadas, além de que, quando $\gamma = 0$, as energias retornam para os casos conhecidos para as energias do poço quadrado infinito e do potencial harmônico.

Apesar do método WKB ser um método utilizado para obter soluções aproximadas, ou seja, as energias obtidas podem ser aproximações ao invés da solução exata, para os casos apresentados as energias obtidas foram as energias exatas que seriam obtidas resolvendo as respectivas equações diferenciais, como podemos ver nos artigos (FILHO *et al.*, 2011) e (FILHO *et al.*, 2013). Nesse sentido, o método WKB se apresenta como uma alternativa viável na análise de problemas físicos utilizando o formalismo do PDTTO, podendo ser utilizado para confirmar algum resultado previamente obtido utilizando o método tradicional, ou até mesmo para fazer uma primeira análise das soluções do problema, auxiliando e indicando o caminho a ser seguido para explicar a física por trás de um determinado problema.

Por fim, temos como perspectivas futuras a aplicação desse método para outros problemas físicos bem como incluir nas soluções as expressões das funções de onda que podem ser obtidas com o método WKB para os respectivos problemas e, assim, fazer uma análise mais detalhada sobre qual o tipo de problema que é possível aplicar este método e obter uma solução aproximada de forma satisfatória.

REFERÊNCIAS

- AGUIAR, V.; CUNHA, S.; COSTA, D. da; FILHO, R. N. C. Dirac fermions in graphene using the position-dependent translation operator formalism. **Physical Review B**, APS, v. 102, n. 23, p. 235404, 2020.
- BARBAGIOVANNI, E.; COSENTINO, S.; LOCKWOOD, D.; FILHO, R. C.; TERRASI, A.; MIRABELLA, S. Influence of interface potential on the effective mass in ge nanostructures. **Journal of Applied Physics**, AIP Publishing LLC, v. 117, n. 15, p. 154304, 2015.
- BARBAGIOVANNI, E.; FILHO, R. C. Quantum confinement in nonadditive space with a spatially dependent effective mass for si and ge quantum wells. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, Elsevier, v. 63, p. 14–20, 2014.
- BRAGA, J. P. M. Mecânica quântica não-aditiva. 2015.
- COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum Mechanics: basic concepts, tools and applications**. [S. l.]: John Wiley & Sons, 2019. v. 1.
- FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. **The Feynman lectures on physics, The new millennium edition: mainly mechanics, radiation and heat**. [S. l.]: Basic books, 2011. v. 1.
- FILHO, R. C.; ALMEIDA, M.; FARIAS, G.; JR, J. A. Displacement operator for quantum systems with position-dependent mass. **Physical Review A**, APS, v. 84, n. 5, p. 050102, 2011.
- FILHO, R. N. C.; ALENCAR, G.; SKAGERSTAM, B.-S.; JR, J. S. A. Morse potential derived from first principles. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 101, n. 1, p. 10009, 2013.
- FILHO, R. N. C.; BRAGA, J. P.; LIRA, J. H.; JR, J. S. A. Extended uncertainty from first principles. **Physics Letters B**, Elsevier, v. 755, p. 367–370, 2016.
- FILHO, R. N. C.; OLIVEIRA, S.; AGUIAR, V.; COSTA, D. da. Two-dimensional electron gas in a non-euclidean space. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, Elsevier, v. 129, p. 114639, 2021.
- GRIFFITHS, D. J. **Introduction to quantum mechanics**. [S. l.]: Pearson International Edition 1960.
- NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de física básica: mecânica**. [S. l.]: Editora Blucher, 2013. v. 1.
- NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de física básica: ótica, relatividade, física quântica**. [S. l.]: Editora Blucher, 2014. v. 4.
- SAKURAI, J. J.; COMMINS, E. D. **Modern quantum mechanics**. Rev. ed. [S. l.]: American Association of Physics Teachers, 1995.