

Jardel de Carvalho Veloso

**Abordagem semiclássica para uma carga pontual
sob a influência de potenciais anarmônicos e do
inverso do quadrado atrativo**

João Pessoa-PB

2023

Jardel de Carvalho Veloso

**Abordagem semiclássica para uma carga pontual sob a
influência de potenciais anarmônicos e do inverso do
quadrado atrativo**

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal da Paraíba como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Universidade Federal da Paraíba – UFPB
Centro de Ciências Exatas e da Natureza – CCEN
Programa de Pós-Graduação em Física – PPGF

Orientador: Dr. Knut Bakke Filho

João Pessoa-PB

2023

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

V432a Veloso, Jardel de Carvalho.

Abordagem semiclássica para uma carga pontual sob a influência de potenciais anarmônicos e do inverso do quadrado atrativo / Jardel de Carvalho Veloso. - João Pessoa, 2023.

57 f. : il.

Orientação: Knut Bakke Filho.

Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN.

1. Física - Aproximação WKB. 2. Simetria cilíndrica.
3. Potencial anarmônico. 4. Potencial inverso quadrado.
I. Bakke Filho, Knut. II. Título.

UFPB/BC

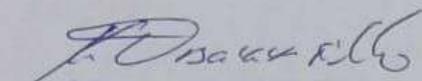
CDU 53(043)

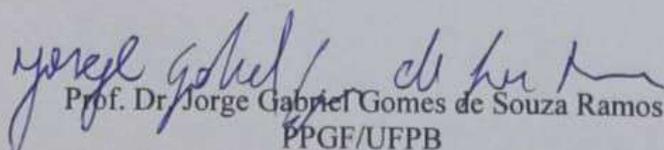


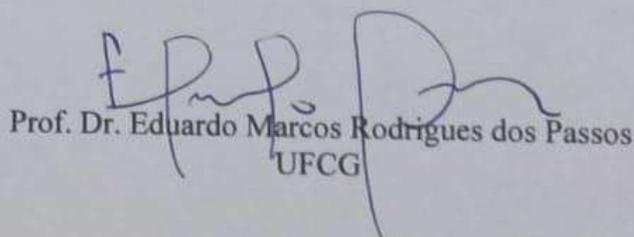
Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

Ata da Sessão Pública da Defesa de dissertação de **Mestrado** do aluno **Jardel de Carvalho Veloso**, candidato ao Título de Mestre em Física na Área de Concentração Física da Matéria Condensada.

Aos vinte e oito dias do mês de julho do ano de dois mil e vinte e três, às 09:00, nas dependências do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora constituída para avaliar a dissertação de Mestrado, na área de Física da Matéria Condensada, de **Jardel de Carvalho Veloso**. A banca foi composta pelos(as) professores(as) doutores(as): Knut Bakke Filho (UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos (UFPB) e Eduardo Marcos Rodrigues dos Passos (UFCG). Dando início aos trabalhos, o Prof. Knut Bakke Filho comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a palavra para o candidato para que o mesmo fizesse, oralmente, a exposição da pesquisa de dissertação intitulada "*Abordagem Semiclássica para uma carga pontual sob a influência de potenciais anarmônicos e do inverso do quadrado atrativo*". Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela Banca Examinadora, que emitiu o parecer "**aprovado**". Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Mestre em Física na forma da lei. E para constar, Danilo Wilson Lemos Menezes, Técnico em Assuntos Educacionais, redigiu a presente ata que vai assinada pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, Paraíba, **28 de julho de 2023**.


Prof. Dr. Knut Bakke Filho
Orientador - PPGF/UFPB


Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos
PPGF/UFPB


Prof. Dr. Eduardo Marcos Rodrigues dos Passos
UFCG

*Aos meus sobrinhos
Giovana Augusta e Bernardo.*

Agradecimentos

Especiais aos meus pais Sílvia e José Francisco por sempre incentivarem em minha formação e apoiar nos momentos necessários e à minha noiva Maura por todo suporte emocional.

Aos meus amigos e colegas do departamento de Física, dentre eles, Isaiane, Felipe, Robson, Rosa, Hugo, Antônio Lucas, Ivana, Mylle, Rafael, Juliana, por todos os auxílios, conversas sérias e principalmente as "jogadas fora", por tornar essa jornada menos pesada.

Em especial ao Professor Dr. Knut Bakke Filho, primeiramente pela paciência e aceite em me orientar, segundo, pela atenção na montagem do meu itinerário formativo.

A todos os professores responsáveis pela minha formação nas cadeiras, Fábio Dahia, Carlos Pires, Eugênio de Mello e Jorge Gabriel.

À UFPB, em particular ao Programa de Pós-Graduação em Física.

E, por fim, ao CNPq que, a partir do financiamento, possibilitou esta realização.

Lista de publicações

Segue uma publicação realizada a partir dos resultados obtidos durante a pesquisa dessa dissertação.

1. VELOSO, J. d. C.; BAKKE, K. Point charge subject to an attractive inverse-square-type potential and anharmonic-type potentials. *Universe*, v. 9, n. 3, 2023. ISSN 2218-1997. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2218-1997/9/3/151>>. Citado na página 48.

*"Este é o mais belo destino que uma
teoria física pode ter:
quando ela abre caminho para
o estabelecimento de uma teoria
mais ampla, na qual continua a viver
como um caso particular."
(Albert Einstein)*

Resumo

A partir de uma abordagem semiclássica, através da aproximação WKB (Wentzel, Kramers e Brillouin), neste trabalho obtemos os níveis de energia, considerando o caso particular das ondas s , para sistemas caracterizados por uma carga pontual interagindo com campos elétricos produzidos por distribuições contínuas e não uniformes de carga em simetria cilíndrica. Das interações surgem potenciais anarmônicos e do inverso do quadrado atrativo.

Palavras-chave: aproximação WKB, potencial anarmônico, potencial inverso quadrado, simetria cilíndrica.

Abstract

We apply the WKB approximation to the Schrödinger equation of a point charge under the influence of anharmonic potentials and attractive inverse-square potential in order to calculate the allowed energies for the particle. These potentials arise from the interaction of a point charge with non-uniform radial electric fields in cylindrical symmetry. For the potentials that arise from these interactions we consider the bound states for the particular case of s -waves.

Keywords: WKB approximation, anharmonic potential, inverse-square potential, cylindrical symmetry.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Poço potencial com dois pontos de retorno	20
Figura 2 – Aproximação linear do potencial no ponto x_2	24
Figura 3 – Função de Airy $Ai(z)$	26
Figura 4 – Função de Airy $Bi(z)$	27
Figura 5 – Região de análise	28
Figura 6 – Poço potencial com uma parede infinita	31
Figura 7 – Função de Neumann	35
Figura 8 – Função de Bessel	35
Figura 9 – Potencial efetivo	36
Figura 10 – Cilindro com cavidade interna	45

Lista de abreviaturas e siglas

WKB	Wentzel, Kramers, Brillouin
\mathcal{PT}	Simetria de Paridade-Reversão Temporal
GFT	Teoria de Campo de Grupo
ATMM	Método Analítico de Matriz de Transferência

Lista de símbolos

h	Constante de Planck
\hbar	Constante de Planck reduzida
i	Unidade imaginária
ϵ_0	Permissividade elétrica no vácuo

Sumário

1	INTRODUÇÃO	12
2	APROXIMAÇÃO SEMICLÁSSICA WKB	18
2.1	Aproximação WKB em uma dimensão	20
2.1.1	Fórmulas de conexão	24
2.1.2	Regras de quantização de Bohr-Sommerfeld	30
2.1.2.1	Poço potencial com um ponto de retorno e uma parede impenetrável	30
2.1.2.2	Poço potencial com dois pontos de retorno	30
2.2	Aproximação WKB para a equação radial	32
3	INTERAÇÃO DA CARGA PONTUAL COM CAMPOS ELÉTRICOS NÃO UNIFORMES	38
3.1	Análogo do potencial quártico puro	38
3.2	Análogo do potencial sêxtico puro	41
3.3	Potencial inverso do quadrado atrativo	43
4	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	49
	REFERÊNCIAS	50

1 Introdução

Muitos problemas físicos podem ser descritos por equações diferenciais. Entretanto, resolvê-las pode significar um pesadelo para quem o tenta. Isto porque, em muitas das vezes, os cálculos por traz da busca pela solução analítica exata podem se mostrar impossíveis de serem realizados. Apresenta-se, portanto, a importância das soluções aproximadas. Historicamente, por exemplo, é atribuído a Carlini (1817) ser o primeiro a obter uma solução aproximada de uma equação de Bessel (GOMES, 1975). Décadas depois, debruçado sobre as equações diferenciais, um importante matemático desenvolvia essa área. Liouville (1837) (LIOUVILLE, 1837) foi bem-sucedido em obter soluções assintóticas para equações diferenciais mais gerais. Ele desenvolveu um método de resolução a partir de aproximações sucessivas (LÜTZEN, 1982). Posteriormente, Rayleigh (1912) (RAYLEIGH, 1912) estudando propagação de ondas eletromagnéticas obteve fórmulas de conexão. Durante esse período as pesquisas para desvendar a estrutura e mecânica da matéria em nível atômico eram consideráveis. Um ano antes, Rutherford, através de experimentos, constatou que no centro de um átomo encontrava-se um núcleo duro onde se concentrava quase toda sua massa. Em 1913, Bohr desenvolve seu modelo atômico, onde surge o conceito de estado estacionário discreto. Contudo, o modelo apresentava problemas. Um desses problemas era a previsão de frequências orbitais que não constavam em observações (HEISENBERG, 1975).

Cerca de onze anos depois do trabalho de Bohr, Jeffreys (1923) (JEFFREYS, 1923), independentemente, redescobre as fórmulas de conexão descritas por Rayleigh. No mesmo ano, de Broglie intrigado com o conceito de dualidade onda-partícula atribuído para a radiação, propõe que a matéria também apresentaria tal comportamento a partir da seguinte equação:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (1.1)$$

onde h é a constante de Planck e p o momento da partícula. Ele introduz essa ideia ao longo do ano 1923 a partir dos seguintes trabalhos: *Ondas e quanta (1923a)*, *Quanta de luz, difração e interferências (1923b)* e *Os quanta, a teoria cinética dos gases e o princípio de Fermat (1923c)*, os quais foram os responsáveis, de certa forma, além de outros trabalhos da época, como o ponto de virada na teoria quântica (ROSA, 2004). Bastante influenciado pelas ideias sobre as ondas de matéria defendidas por de Broglie, Schrödinger (1926) (SCHRÖDINGER, 1926) publica seu trabalho intitulado *Quantisierung als Eigenwertproblem*¹ (onde ele sintetiza suas ideias na famosa equação de onda), o qual

¹ Esse título em alemão, que no português pode ser traduzido como "Quantização como um Problema

lançou luzes sobre o desconhecido e contraintuitivo mundo quântico. Este, juntamente com outros trabalhos (HEISENBERG, 1925; PAULI, 1926), é considerado o que divide a história da mecânica quântica em duas, a "velha" mecânica quântica, de 1900 a 1925, e a "nova", pós 1925. No mesmo ano de publicação, logo se iniciaram as investidas, exitosas, na busca de soluções aproximadas para tal equação. Wentzel (1926), Kramers (1926) e Brillouin (1926), então, publicam seus trabalhos (WENTZEL, 1926; KRAMERS, 1926; BRILLOUIN, 1926).

Em junho de 1926, Wentzel desenvolve a aproximação para a função de onda, ou seja, faz a integração em séries de potência de h considerando apenas o termo de baixa ordem e obtém a condição de quantização de Bohr-Sommerfeld. Também, faz uma generalização da aproximação para sistemas com mais graus de liberdade independentes. Posteriormente, realiza uma conexão com a mecânica matricial de Heisenberg e, finalmente, faz aplicação para o efeito Stark. Logo em seguida ao trabalho de Wentzel, no mês de julho do mesmo ano, Brillouin publica seu breve trabalho mostrando que, a partir de aproximações sucessivas, o termo de primeira ordem descreve a "velha" mecânica quântica enquanto os demais termos constituem a novidade da mecânica de Schrödinger. Já Kramers, em setembro, adiciona uma discussão importante a respeito do problema que o método enfrenta nos pontos de retorno clássicos, visto que o termo que descreve a amplitude da onda diverge nessa região. Além dessa discussão, faz uma aplicação para movimentos centrais.

Mas como visto logo acima, esse método aplicado por Wentzel, Kramers e Brillouin na teoria ondulatória da mecânica quântica desenvolvida por Schrödinger é essencialmente oriunda da teoria das equações diferenciais ordinárias, estudada pelos já referidos Liouville (1837), Rayleigh (1912) e Jeffreys (1923) (MERZBACHER, 1998; SCHIFF, 1987; DUNHAM, 1932). Por isso, o fato de a teoria ser conhecida por WKB levou a problemas, como em outras teorias, por não englobar obras anteriores importantes. Isto é, apesar de o nome atualmente conhecido ser aproximação WKB, autores também tentaram chamar de aproximação de Liouville-Green (pois Green (1937), além de Gans (1915), contribuiu para essa teoria) ou método da integral de fase. Para Fröman e Fröman (1965) (FRÖMAN; FRÖMAN, 1965), ela deveria se chamar aproximação JWKB. Mas também, para evitar esse problema de como se referir à teoria a partir de nomes de autores, propuseram denominá-la de método de aproximação assintótica. Enfim, independente das controvérsias acerca da nomenclatura a se adotar, o método seguiu sendo bastante desenvolvido e utilizado nas mais variadas áreas.

Logo em seguida aos trabalhos de Wentzel, Kramers e Brillouin, outros pesquisadores da área realizaram grandes contribuições. Por exemplo, Langer (1937) (LANGER, 1937) realizou discussões detalhadas sobre a aplicabilidade do método em problemas com simetria

de Autovalores", encabeçou um conjunto de publicações no periódico *Annalen der Physik*.

esférica. Fröman e Fröman (1965), inspirados nos trabalhos de Zwaan (1929) [Zwaan \(1929\)](#), Kemble (1935) [\(KEMBLE, 1935\)](#) e Kemble (1937) [\(KEMBLE, 1937\)](#), abordaram principalmente o problema dos pontos de retorno no plano complexo e, partindo desse ponto, produziram um material denso acerca do tema. Por sua vez, Berry e Mount (1972) [\(BERRY; MOUNT, 1972\)](#), discutiram vários aspectos da teoria, abordando, também, as implicações da teoria em simetria esférica. Posteriormente, Berry e Almeida (1973) [\(BERRY; ALMEIDA, 1973\)](#), baseados no trabalho de Langer (1937) [\(LANGER, 1937\)](#), trabalharam o problema da aplicabilidade do método WKB em simetria cilíndrica.

Como consequência de seu amplo desenvolvimento, podemos dizer que o método não se restringe apenas à mecânica quântica, mas é aplicável em diversas áreas da física teórica como, por exemplo, na teoria das ondas eletromagnéticas [\(FRÖMAN; FRÖMAN, 1965\)](#). Outro exemplo seria na teoria de campos. Nesse sentido, Cornwall e Tiktopoulos (1965) [\(CORNWALL; TIKTOPOULOS, 1993\)](#), a partir do potencial de oscilador quártico, estudaram um problema na teoria $\lambda\phi^4$ onde uma das ferramentas de abordagem para obtenção de soluções estimadas foi a teoria WKB. Já Holstein e Swift (1982) [\(HOLSTEIN; SWIFT, 1982\)](#) inovaram com uma abordagem onde associaram o método WKB padrão com as técnicas de integrais de caminho desenvolvidas por Feynman no limite em que a integral de caminho é dominada pela trajetória clássica da partícula. Observaram que, no limite $\hbar \rightarrow 0$, a integral do propagador depende somente do caminho clássico.

Em contrapartida, outros trabalhos recuperaram o de Langer. Por exemplo, Morehead (1995) [\(MOREHEAD, 1995\)](#) deriva de forma generalizada a transformação de Langer para qualquer operador radial. A transformação de Langer é uma melhoria do método WKB para a equação radial de Schrödinger, fundamental para obtenção de resultados convincentes. Observara, por exemplo, que as funções de onda WKB, a partir dessa generalização, possuem um bom comportamento para raios pequenos.

Entretanto, trabalhos tentaram alternativas para não realizar a modificação de Langer, pois consideravam um tanto estranho a alteração nos autovalores do operador momento angular. Com esse objetivo em mente, Hainz e Grabert (1999) [\(HAINZ; GRABERT, 1999\)](#) trabalharam o problema do átomo de hidrogênio do ponto de vista semiclassico WKB evitando a utilização dessa modificação. Em vez disso, o potencial centrífugo foi decomposto em um potencial centrífugo clássico e uma correção quântica. Para isso, iniciam observando que, no limite semiclassico, o problema do hidrogênio deveria se reduzir ao problema de Kepler. Outras abordagens feitas dentro do campo de estudos da teoria foram com potenciais que possuem termos complexos. Como exemplo, podemos citar Yi, Lee e Sohn (1994) [\(YI; LEE; SOHN, 1994\)](#) que, com o objetivo de estudar os níveis de energia para um potencial central bidimensional, utilizaram mapeamento conforme, o qual produziu uma modificação no potencial efetivo. Com essa modificação, a partir da aproximação WKB, os níveis de energia foram obtidos para, por exemplo, o potencial de Coulomb. Na mesma

linha, aplicando o método WKB complexo ao oscilador quártico geral com coeficientes que estão no domínio complexo, Delabaere e Pham (1997) (DELABAERE; PHAM, 1997) apresentaram resultados sobre o processo de ramificação dos níveis de energia. Por sua vez, Bender e colaboradores (2001) (BENDER et al., 2001) investigaram um hamiltoniano com um potencial anarmônico e um termo complexo a fim de observarem que, a partir de um certo limite de um dado parâmetro, pares de níveis de energia adjacentes coalescem, se tornando complexos. Para valores muito altos deste parâmetro se tem, também, valores altos para a energia, de maneira que, a razão entre esses dois, à medida que crescem, se aproxima de um certo valor crítico constante. A aproximação WKB convencional falha para níveis próximos a esse valor, mas funciona para níveis altos de energia. Por outro lado, a teoria WKB complexa prevê exatamente tal limite crítico.

Ainda, usando o método semiclássico WKB, Bender e Jones (2004) (BENDER; JONES, 2004) mostraram como calcular um certo operador C observável independente do tempo o qual é necessário para determinar o produto interno de uma teoria quântica não-hermitiana com hamiltoniano que preserva a simetria \mathcal{PT} . Neste trabalho consideraram hamiltonianos não cúbicos da forma $H = p^2 + x^2(ix)^\delta$ ($\delta \geq 0$) para determinar C . Já Dorey, Millican-Slater e Tateo (2005) (DOREY; MILLICAN-SLATER; TATEO, 2005) analisaram as funções de níveis de energia associadas à quebra de simetria \mathcal{PT} de Bender e Boettcher, bem como em sua generalização que incorpora um termo centrífugo. Apesar da WKB falhar no regime de quebra da simetria, esse problema é contornado ao usar uma conexão com a equação diferencial ordinária modelo integrável em teoria de campos. Adhikari, Dutt e Varshni (1988) (ADHIKARI; DUTT; VARSHNI, 1988) usaram o método WKB supersimétrico para calcular autovalores médios de energia onde um dos potenciais estudados foi o potencial anarmônico duplo em uma dimensão. Fizeram, também, o uso do método para o caso tridimensional. Os dados obtidos mostraram uma precisão pouco melhor em comparação ao método WKB convencional.

Além dessas, outras áreas onde se encontram trabalhos que usam o método aproximativo WKB são cosmologia e matéria condensada. Em cosmologia temos, como exemplo, Gielen, Oriti e Sindoni (2013) (GIELEN; ORITI; SINDONI, 2013) que, estudando a dinâmica de estados condensados em gravidade quântica, mais especificamente em Teoria de Campo de Grupo (GFT), mostraram que um termo cinético tipo Laplaciano em tal modelo GFT leva, a partir de uma aproximação semiclássica WKB no caso isotrópico, a uma equação modificada de Friedmann. Em contrapartida, Xu, Ma e Liu (2014) (XU; MA; LIU, 2014) estudaram o transporte de carga em eletrólitos de ambiente dielétrico não homogêneo e desenvolveram uma abordagem aproximativa WKB e uma numérica. Mostraram que, a aproximação apresenta alta precisão quando a autoenergia do íon gerado pela inomogeneidade dielétrica e pela correlação íon-íon tem força de interação fraca.

Alguns outros exemplos que podemos referenciar são: Das e colaboradores (2004) (DAS

et al., 2004) estudaram uma partícula carregada sob influência de um campo magnético unidimensional independente do tempo. Discutiram métodos perturbativos e não-perturbativos. Aplicaram o método WKB para derivar os níveis de energia quantizados da partícula carregada em uma bobina de Helmholtz. Por sua vez, Bakke e Furtado (2019) (BAKKE; FURTADO, 2019) investigaram os efeitos topológicos na interação de um elétron sem spin com campos elétricos radiais a partir da aproximação WKB. Mostraram que o termo centrífugo da equação radial deve ser alterado devido a influência do defeito topológico. Ainda, Bakke (2019) (BAKKE, 2019) obteve o espectro de energias para o caso particular das ondas s a partir de um ponto de vista semiclássico aplicando o método WKB em sistemas caracterizados pela interação de quadrupolo elétrico de uma partícula neutra com campos elétricos radiais produzidos por distribuições não uniformes de carga.

Já Silva e Andrade-Neto (2010) (SILVA; ANDRADE-NETO, 2010) usaram a aproximação WKB para o cálculo de taxa de ionização. Calcularam para o átomo de hidrogênio na presença de um campo elétrico uniforme. Para isso, analisaram dois modelos de potencial e ao final observaram que os valores da taxa de ionização do primeiro modelo estão mais próximos em ordens de grandeza dos valores obtidos usando o modelo de Landau e Lifshitz. No entanto, resultados numéricos corroboram muito mais o segundo modelo. Na mesma linha, os mesmos autores (SILVA; ANDRADE-NETO, 2012) calcularam a taxa de ionização para um átomo próximo a uma superfície metálica.

Em um meio elástico contendo um defeito topológico Bakke e Furtado (2020) (BAKKE; FURTADO, 2020), estudaram a interação do momento de dipolo elétrico de uma partícula neutra com um campo elétrico a partir de uma análise semiclássica usando o método aproximativo WKB. Mostraram que essa interação produz um potencial inverso do quadrado atrativo, o qual é influenciado pela topologia do defeito. Por sua vez, Vieira e Bakke (2020) (VIEIRA; BAKKE, 2020) buscaram soluções de estado ligado aplicando a WKB. Nesse estudo os autores abordaram a hipótese dos monopolos magnéticos e buscaram efeitos de rotação na interação de campos elétricos axiais com o momento de quadrupolo magnético de uma partícula neutra.

Já Mariz e Oliveira (1985) (MARIZ; OLIVEIRA, 1985) utilizaram a aproximação WKB para o cálculo dos níveis de energia de sistemas caracterizados por potenciais $\frac{1}{2}|x|^\nu$ ($\nu > 0$). Gaudreau, Slevinsky e Safouhi (2013) (GAUDREAU; SLEVINSKY; SAFOUHI, 2013), de forma mais específica, usando o método WKB, obtiveram expansão assintótica para potencial tipo oscilador anarmônico quártico para os autovalores de energia. A partir de um algoritmo os autores calcularam os coeficientes da expansão e compararam com resultados analíticos. Por outro lado, Wald e Lu (2003) (WALD; LU, 2003) estudaram um outro potencial específico, o de Lennard-Jones, a partir da WKB com modificação. Por seu turno, Castellani, Gonçalves e Santiago (1993) (CASTELLANI; GONÇALVES; SANTIAGO, 1993), usando a aproximação WKB, abordaram a propagação de ondas em

meios não homogêneos, mostrando que a função de onda, velocidade e outros parâmetros dependem da distribuição de densidade do meio. Finalmente, Ou, Cao e Shen (2003) (OU; CAO; SHEN, 2003) apresentaram resultados de energia para diferentes potenciais esfericamente simétricos a partir da aplicação do método analítico de matriz de transferência (ATMM) em uma dimensão que é, nesse caso, segundo os autores, uma melhoria do método WKB nos pontos de virada, na análise da mudança fase das ondas.

Visto isso, este trabalho tem como objetivo calcular o espectro de energias para sistemas caracterizados por potenciais anarmônicos, o quártico e o sêxtico puros e pelo potencial inverso do quadrado atrativo a partir da aplicação da aproximação semiclássica WKB. Para isso, vamos primeiro fazer uma breve revisão sobre o método aproximativo e depois obter potenciais análogos a estes por meio da interação de uma carga pontual com campos elétricos gerados por distribuições contínuas e não uniformes de carga em simetria cilíndrica.

O trabalho se estrutura da seguinte forma: no capítulo 2 vamos realizar uma breve revisão sobre o método WKB. Inicialmente vamos abordar o caso unidimensional, onde encontraremos a função de onda aproximada. Em seguida trabalharemos o problema nos pontos de retorno clássicos, encontrando as fórmulas de conexão e, posteriormente, obtendo duas regras de quantização de Bohr-Sommerfeld. Por último, trataremos da aproximação em três dimensões, no caso específico da simetria cilíndrica. No capítulo 3 faremos a aplicação do método aproximativo para os três sistemas especificados acima. No último capítulo apresentamos as conclusões e perspectivas.

2 Aproximação semiclássica WKB

Assim como na mecânica relativística, onde o caso limite para baixas velocidades recuperava a mecânica clássica, corroborando a validade dessa teoria, o mesmo resultado era esperado a partir da teoria da mecânica quântica desenvolvida ao longo de todo o primeiro quarto do século vinte, sintetizada na equação ondulatória de Schrödinger (2.1), como visto, uma das metodologias utilizadas na época.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}. \quad (2.1)$$

Esta equação de onda descreve o movimento de uma partícula quântica de massa m sob a influência de um certo potencial V . Então, partindo dela, vamos estudar o limite de transição da mecânica quântica para a clássica afim de observar o porquê de o método WKB ser chamado de método semiclássico. Para isso, considere a função de onda da forma:

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{\frac{iS(\vec{r},t)}{\hbar}}, \quad (2.2)$$

onde $S(\vec{r},t)$ é a fase da função de onda. Substituindo a Eq. (2.2) na Eq. (2.1), obtemos

$$\frac{(\nabla S)^2}{2m} - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S + V(\vec{r}) = -\frac{\partial S}{\partial t}, \quad (2.3)$$

que é uma equação não linear em termos da fase da função de onda a qual possui condições de contorno muito mais complicadas do que a Eq. (2.1) (MERZBACHER, 1998). Entretanto, ela desenvolve papel importante, pois, a partir dela, poderemos obter uma condição fundamental associada ao método aproximativo a ser desenvolvido. Observe da Eq. (2.3) que, se desconsideramos o segundo termo do lado esquerdo, obtemos a equação

$$\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\partial S}{\partial t}, \quad (2.4)$$

conhecida na mecânica clássica como equação de Hamilton-Jacobi, que é uma equação de primeira ordem para ação clássica $S = \int_a^t L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t') dt'$. Por sua vez, a trajetória de uma partícula na mecânica clássica ocorre, no espaço de configurações, ao longo de um raio em que o mesmo é perpendicular a superfícies caracterizadas pela função ação constante (BRACK; BHADURI, 2018; SAKURAI, 1994; DAVYDOV; HAAR, 1976). Então, conclui-se que

$$\vec{p} = \nabla S. \quad (2.5)$$

A transição da equação quântica (2.3) para a clássica (2.4) pode ser feita formalmente a partir do limite $\hbar \rightarrow 0$ (DAVYDOV; HAAR, 1976; LANDAU; LIFSHITZ, 1981). Desse modo, a noção de trajetória (e momento bem definido) ocorre para o pacote de onda, que ocupa uma determinada região do espaço, quando, nesse limite de $\hbar \rightarrow 0$, as dimensões dessa região também tendem a zero. Então, o pacote de onda, no caso semiclássico, se moverá ao longo de um caminho de uma partícula clássica (LANDAU; LIFSHITZ, 1981).

Considere, agora, que o sistema tenha energias bem definidas, isto é, de modo que possamos separar a solução (2.2) da seguinte forma:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-i\frac{Et}{\hbar}}. \quad (2.6)$$

Isso implica em

$$S(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) - Et, \quad (2.7)$$

onde, para Merzbacher (MERZBACHER, 1998), o fato da fase $\phi(\vec{r})$ se relacionar com a ação clássica é um dos motivos de o método WKB ser referido como método semiclássico. Então, substituindo a Eq. (2.7) na Eq. (2.3) obtemos

$$\frac{(\nabla\phi)^2}{2m} + V(\vec{r}) - E - \frac{i\hbar\nabla^2\phi}{2m} = 0. \quad (2.8)$$

A equação análoga na mecânica clássica, como feito na transição da Eq. (2.3) para a Eq. (2.4) é

$$\frac{(\nabla\phi)^2}{2m} + V(\vec{r}) - E = 0 \quad (2.9)$$

onde, a partir da Eq. (2.5), $\nabla\phi = \vec{p}$. Observe que podemos substituir a Eq. (2.8) pela Eq. (2.9) se a seguinte condição é satisfeita:

$$|\nabla\phi|^2 \gg \hbar |\nabla^2\phi| \quad (2.10)$$

ou

$$p^2 \gg \hbar |\nabla \cdot \vec{p}|. \quad (2.11)$$

Essa condição surge no desenvolvimento do método WKB e exerce papel fundamental pois ela sintetiza o limite de aplicabilidade desse método aproximativo. Visto isso, abordaremos esse resultado adiante, no desenvolver da aproximação WKB em uma dimensão.

2.1 Aproximação WKB em uma dimensão

Agora, introduzindo o método para o caso unidimensional, busca-se estabelecer ao final as regras de quantização de Bohr-Sommerfeld que possibilitam o cálculo das energias permitidas do sistema em estudo. Então, considere uma partícula de massa m e energia E que está em uma região com potencial $V(x)$. A equação de Schrödinger unidimensional para essa partícula é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.12)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0,$$

onde temos

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad (2.13)$$

e

$$p \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]}, \quad (2.14)$$

que são, respectivamente, o número de onda e o momento da partícula. Da Eq. (2.14) observa-se uma divisão do espaço em duas regiões como mostra a [Figura 1](#), uma região classicamente permitida para a partícula (que denominamos região II), quando $E > V(x)$ e, conseqüentemente, $p(x)$ real; e uma região classicamente não permitida (regiões I e III), $E < V(x)$, portanto, $p(x)$ imaginário. A interface entre essas duas regiões (quando $E = V(x)$) é denominada ponto de retorno, onde reside o cuidado a ser tomado.

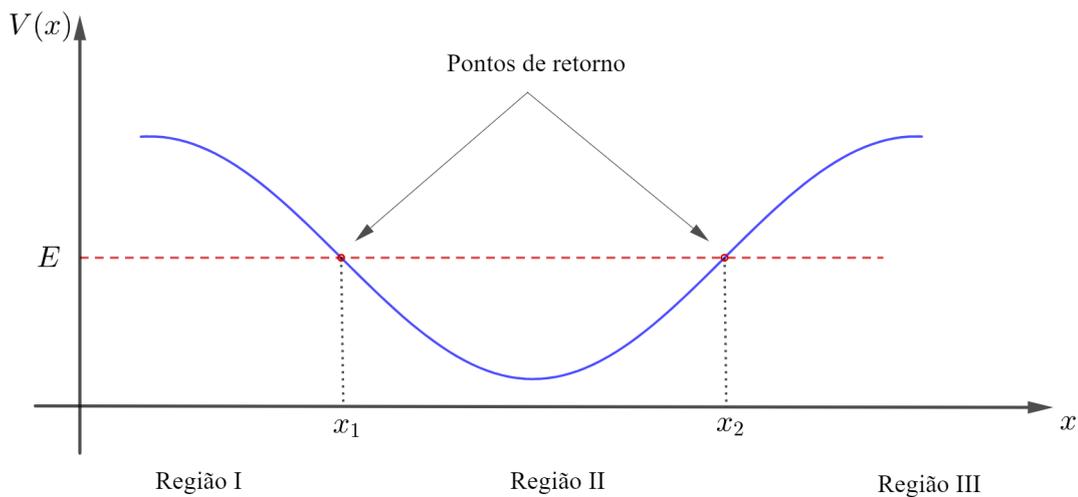


Figura 1 – Poço potencial com dois pontos de retorno

Considere um potencial que varie suavemente em relação à variável x . Então a amplitude da onda também passa a variar com x . De forma geral, podemos escrever a

solução da equação de onda da seguinte maneira:

$$\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)}, \quad (2.15)$$

onde $\phi(x)$ é a fase da onda. Calculando a derivada segunda em relação a x da Eq. (2.15), obtemos

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = [A'' - A(\phi')^2 + 2iA'\phi' + iA\phi'']e^{i\phi(x)}. \quad (2.16)$$

Substituindo essa derivada na Eq. (2.12), encontramos

$$A'' - A(\phi')^2 + i[2A'\phi' + A\phi''] = -\frac{p(x)^2}{\hbar^2}A. \quad (2.17)$$

Podemos separar a Eq. (2.17) em duas equações, uma associada à parte real e outra à parte imaginária, obtendo, respectivamente,

$$\frac{A''}{A} - (\phi')^2 = -\frac{p(x)^2}{\hbar^2} \quad (2.18)$$

e

$$[2A'\phi' + A\phi''] = 0. \quad (2.19)$$

A aproximação WKB acontece na Eq. (2.18), isto é, como $A(x)$ é um parâmetro que varia suavemente, então a derivada segunda desse parâmetro se torna irrelevante, de tal sorte que, a razão do lado esquerdo possa ser eliminada. Ou melhor, essa razão é muito pequena em comparação a ϕ'^2 e $\frac{p^2}{\hbar^2}$ (GRIFFITHS; SCHROETER, 2018). Então, ficamos com

$$(\phi')^2 = \frac{p^2}{\hbar^2}, \quad (2.20)$$

que implica em

$$\phi(x) = \pm \frac{1}{\hbar} \int p(x) dx. \quad (2.21)$$

Obtemos, assim, a fase da função de onda. Agora, substituindo a Eq. (2.20) na Eq. (2.19), achamos

$$-\frac{p'}{p} = 2\frac{A'}{A}. \quad (2.22)$$

Resolvendo, encontramos a seguinte expressão para a amplitude

$$A(x) = \frac{c}{\sqrt{|\phi'|}} = \frac{C}{\sqrt{p(x)}}. \quad (2.23)$$

Por fim, substituindo a Eq. (2.21) e a Eq. (2.23) na Eq. (2.15), encontramos a seguinte solução aproximada para a equação de onda:

$$\psi(x) \approx \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx}. \quad (2.24)$$

Por generalidade, a solução é melhor escrita da seguinte forma:

$$\psi(x) \approx \frac{B}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} + \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx}, \quad (2.25)$$

o que nos informa que teremos na região II duas ondas se propagando em direções opostas. Por sua vez, a solução no domínio classicamente proibido (regiões I e III da [Figura 1](#)), caso em que $V(x) > E$, com $p(x) = i |p(x)|$, pode ser escrita da seguinte forma:

$$\psi(x) \approx \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx} + \frac{E}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx}, \quad (2.26)$$

obtendo assim, a menos da definição dos limites de integração, as soluções nas três regiões da [Figura 1](#).

Antes de abordar o problema nos pontos de retorno, vamos analisar o comportamento da onda necessário para que o método possa ser aplicado. Para isso, considere a equação de Schrödinger com a função de onda $\psi(x) = e^{i\phi/\hbar}$:

$$i\hbar\phi'' - (\phi')^2 = -2m(E - V(x)). \quad (2.27)$$

Comparando os termos do lado esquerdo, observamos a seguinte desigualdade:

$$\hbar |\phi''| \ll (\phi')^2. \quad (2.28)$$

A partir do comprimento de onda de de Broglie (1.1), encontramos que

$$1 \gg \frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda}{dx} \quad (2.29)$$

ou

$$\lambda \gg \lambda \frac{d\lambda}{dx}, \quad (2.30)$$

que nos informa que a variação do comprimento de onda ao longo de, digamos, uma distância característica do sistema λ , acontece de forma suave, ou seja, essa variação é muito menor do que o próprio comprimento de onda. Se o que se diz por dimensões do sistema é escrito como $x_2 - x_1$, então pode-se dizer que $\frac{d\lambda}{dx} \approx \frac{\lambda}{x_2 - x_1}$ ([DAVYDOV; HAAR, 1976](#)). Logo, a partir da Eq. (2.29), temos que

$$x_2 - x_1 \gg \lambda, \quad (2.31)$$

ou seja, a aproximação se torna boa quando os pontos de retorno forem tão espaçados o quanto possível para que haja muitos comprimentos de onda entre estes, de outra forma, se os pontos estão muito próximos, a aproximação não funciona ([SCHIFF, 1987](#);

MERZBACHER, 1998). Assim, numa região contendo muitos comprimentos de onda, $V(x)$ pode ser considerado praticamente constante (LANDAU; LIFSHITZ, 1981; GRIFFITHS; SCHROETER, 2018). Também podemos ver da seguinte forma, se a região II da Figura 1 é muito estreita, o potencial varia de uma forma mais abrupta, isso reflete em um aumento da amplitude de modo que a derivada segunda desse parâmetro não é mais desprezível e, conseqüentemente, não podemos mais realizar a aproximação feita na Eq. (2.18). O Sakurai (SAKURAI, 1994) chega nas mesmas conclusões interpretando que \hbar tem que ser suficientemente pequeno para que haja muitas oscilações na distância típica sobre a qual o potencial varia, ou melhor, a ação quântica, em comparação à ação clássica, tem que obedecer a seguinte relação:

$$p(x_2 - x_1) \gg h. \quad (2.32)$$

Considere como exemplo o experimento da dupla fenda. Este experimento é caracterizado por uma fonte, nesse caso de elétrons, que são atirados um de cada vez e com mesma energia em direção a um anteparo com duas fendas. Do lado oposto às fendas se encontra uma tela, para detecção dos elétrons que chegam. O experimento é muito instrutivo pois ele evidencia o comportamento dual da matéria a depender de como o experimento é preparado. Se deixamos apenas uma fenda aberta, as partículas que chegam no anteparo apresentarão uma distribuição com um dado aspecto, ou seja, um pico na região da tela que fica logo à frente da fenda aberta. Neste caso, o fato de deixar apenas uma fenda aberta determina a trajetória possível que a partícula pode tomar e, portanto, a distribuição observada se torna semelhante à distribuição para esse mesmo experimento com partículas clássicas. Por outro lado, se deixamos as duas fendas abertas, após um dado tempo de execução do experimento, um padrão de interferência surge no anteparo, como acontece com ondas, no experimento da dupla fenda clássico. Ou seja, o comportamento ondulatório da matéria é evidenciado. Considere agora a Eq. (2.31). Neste exemplo que acabamos de descrever, $x_2 - x_1$ está relacionada à abertura das fendas. Então, considere o caso em que as duas fendas estão abertas. Neste caso, o padrão de interferência surge. Mas suponha que aumentemos o tamanho das fendas. Esse aumento acarreta, a partir da Eq. (2.31), num comportamento semiclássico para a partícula. Em outros termos, o padrão de interferência desaparece. Nesse limite, a dinâmica da partícula poderá ser descrita classicamente, ou seja, a partícula apresentará um momento bem definido. Portanto, esse exemplo mostra de um outro modo como enxergar a Eq. (2.31).

Entretanto, o problema maior, como mencionado, reside na interface entre a região classicamente permitida e a não permitida, ou melhor, quando $E \approx V(x)$. Então, nessa região bem próxima ao ponto de retorno a aproximação WKB acaba falhando, já que a densidade de probabilidade $\rho(x \rightarrow x_{1,2}) \rightarrow \infty$. Isso porque a velocidade tende a zero nessa região e a densidade de probabilidade é inversamente proporcional a tal velocidade. Veja que a noção de densidade de probabilidade, como entendida na mecânica quântica, acaba

perdendo sentido no caso semiclássico, nesse limite de velocidade tendendo a zero. Surge, então, a ideia de buscar soluções analíticas nessa região de forma que se possa interligar a solução (2.25) para a região classicamente permitida com a solução (2.26) para a região classicamente não permitida. Esse processo levará às conhecidas fórmulas de conexão.

2.1.1 Fórmulas de conexão

Alguns sistemas físicos possuem condições de contorno mais simples, como é o caso dos poços com barreiras intransponíveis, pois as soluções para a região externa são triviais. Entretanto, quando se trata de potenciais não tão abruptos, como o do caso representado pela Figura 1, uma análise mais cuidadosa é necessária no ponto de retorno. Para fazer essa análise, considere a Figura 2, que é uma imagem mais detalhada do ponto de retorno que separa as regiões II e III da Figura 1.

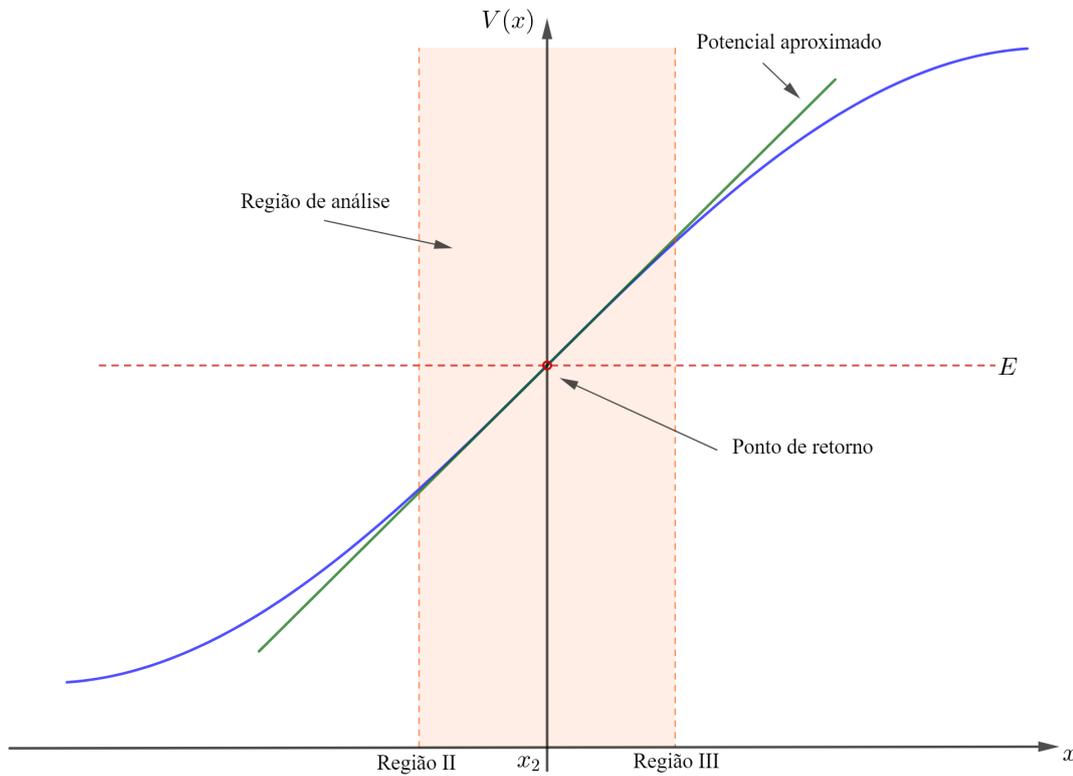


Figura 2 – Aproximação linear do potencial no ponto x_2

Recobremos, também, os resultados (2.25) e (2.26), agora com os devidos limites de integração especificados:

$$\psi(x) \approx \frac{B}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx'} + \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx'}, \quad (x < x_2) \quad (2.33)$$

$$\psi(x) \approx \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx'}, \quad (x > x_2) \quad (2.34)$$

onde, para a Eq. (2.34), o termo com expoente positivo diverge quando $x \rightarrow \infty$, de modo que o desconsideramos. Então, no ponto de retorno clássico a função de onda aproximada WKB vai a infinito (devido $p(x) \rightarrow 0$). No entanto, saber o comportamento da função de onda nessa região é crucial, pois, são justamente as características de fronteira na interface clássico-quântica que determinam as energias permitidas para a partícula (GRIFFITHS; SCHROETER, 2018). Desse modo, a ideia é encontrar uma solução analítica na região hachurada da Figura 2, denominada de região de análise.

Resumindo, o procedimento que se segue será: (i) encontrar uma solução (que denotaremos por $\psi_a(x)$) usando uma aproximação para o potencial. Para isso, a região de análise deve ser tão próxima o quanto possível do ponto de retorno para que a aproximação de primeira ordem no potencial seja razoavelmente precisa. Depois, (ii) resolver a WKB utilizando o mesmo potencial aproximado na expressão de $p(x)$ e, por fim, (iii) comparar as soluções $\psi_a(x)$ com as WKB de tal modo que, nesse processo, possa-se estabelecer a mesma constante de amplitude para as soluções WKB na região II e região III, respectivamente, equações (2.33) e (2.34).

Desse modo, na região logo próxima a $x = x_2$ o potencial tem um comportamento aproximadamente linear como visto na Figura 2. Assim, considere a seguinte expansão:

$$V(x) \approx V(x_2) + V'(x_2)(x - x_2) + \frac{1}{2}V''(x_2)(x - x_2)^2 + \dots$$

Por simplicidade, considere $x_2 = 0$. Dessa forma, temos

$$V(x) \approx E + x \frac{dV(0)}{dx} + \dots \quad (2.35)$$

Substituindo a Eq. (2.35) na equação de Schrödinger (2.12), ficamos com

$$\frac{d^2\psi_a(x)}{dx^2} - \frac{2m(E - E - xV')}{\hbar^2}\psi_a(x) = 0 \quad (2.36)$$

$$\frac{d^2\psi_a(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}xV'(0)\psi_a(x) = 0 \quad (2.37)$$

ou

$$\frac{d^2\psi_a(x)}{dx^2} = \alpha^3 x \psi_a(x), \quad (2.38)$$

onde o subíndice "a", enfatizando, identifica a solução na região de análise e $\alpha^3 = \frac{2m}{\hbar^2}V'(0)$. A quantidade α^3 pode ser contraída fazendo-se a seguinte substituição de variável, $z \equiv \alpha x$. Com isso, a equação diferencial fica da seguinte forma:

$$\frac{d^2\psi_a(x)}{dz^2} - z\psi_a = 0. \quad (2.39)$$

Essa equação é conhecida como equação de Airy, a qual possui soluções analíticas conhecidas. Isto é, a solução para a região de análise é, portanto, uma combinação linear das chamadas funções de Airy seguintes:

$$\psi_a(x) = aAi(z) + bBi(z) = aAi(\alpha x) + bBi(\alpha x), \quad (2.40)$$

onde a e b são constantes. Vejam que tais funções, como explicitam as [Figura 3](#) e [Figura 4](#), apresentam comportamento ondulatório na região II da [Figura 1](#).

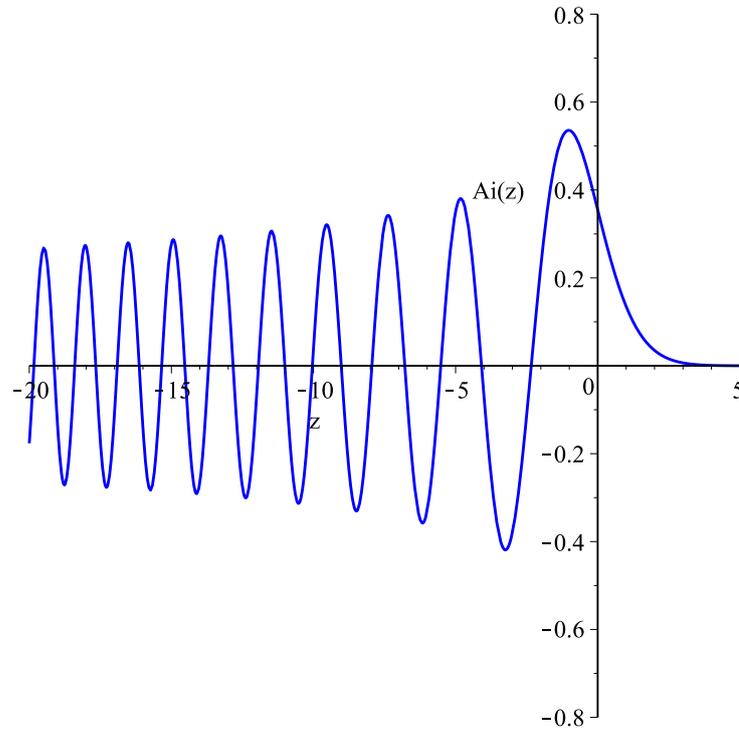


Figura 3 – Função de Airy $Ai(z)$

Essas soluções ajudarão na conexão das soluções oscilatórias da região II do poço com as soluções que decaem exponencialmente na região III ([BRACK; BHADURI, 2018](#)). Tais soluções possuem formas assintóticas para $z \gg 0$ iguais a

$$Ai(z) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{z}} e^{-\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{\frac{3}{2}}} \quad (2.41)$$

e

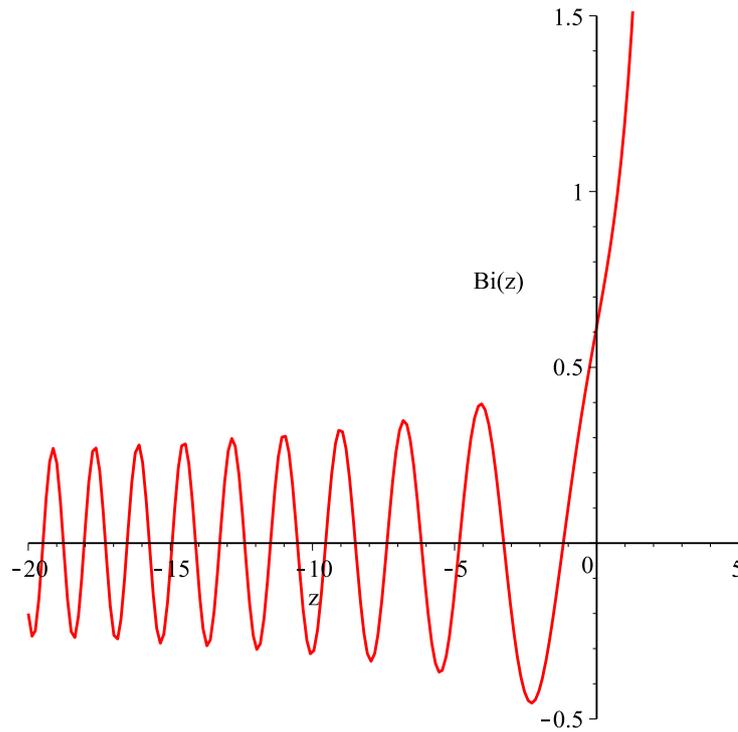
$$Bi(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{z}} e^{\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{\frac{1}{4}}} e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.42)$$

Já para $z \ll 0$, temos

$$Ai(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}} \sin \left[\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] = \frac{1}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{\frac{1}{4}}} \sin \left[\frac{2}{3}(-\alpha x)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] \quad (2.43)$$

e

$$Bi(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}} \cos \left[\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] = \frac{1}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{\frac{1}{4}}} \cos \left[\frac{2}{3}(-\alpha x)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right]. \quad (2.44)$$

Figura 4 – Função de Airy $Bi(z)$

Analisemos, agora, a região sombreada da [Figura 2](#) com maior precisão a partir do esquema apresentado na [Figura 5](#). Observem que a Eq. (2.40) é a função de onda (aproximada) nas redondezas da origem, de modo que resta agora combiná-la com as soluções WKB nas regiões de superposição em ambos os lados, isto é, a partir desse ponto realizaremos os procedimentos (ii) e (iii) para cada região. Então, inicialmente examinando a região de análise do lado direito do ponto de retorno, vemos que a expressão para o momento com o potencial aproximado fica:

$$p(x)^2 = 2m(E - E - xV')$$

$$p(x) = i\hbar\alpha^{\frac{3}{2}}\sqrt{x}, \quad (2.45)$$

onde

$$|p(x)| = \hbar\alpha^{\frac{3}{2}}\sqrt{x}. \quad (2.46)$$

Portanto, a integral do expoente da solução aproximada WKB (2.34) fica

$$\int_{x_2=0}^x |p(x')| dx' \cong \hbar\alpha^{\frac{3}{2}} \int_0^x \sqrt{x'} dx' = \frac{2}{3}\hbar(\alpha x)^{\frac{3}{2}}. \quad (2.47)$$

Logo, obtemos para a Eq. (2.34) a expressão

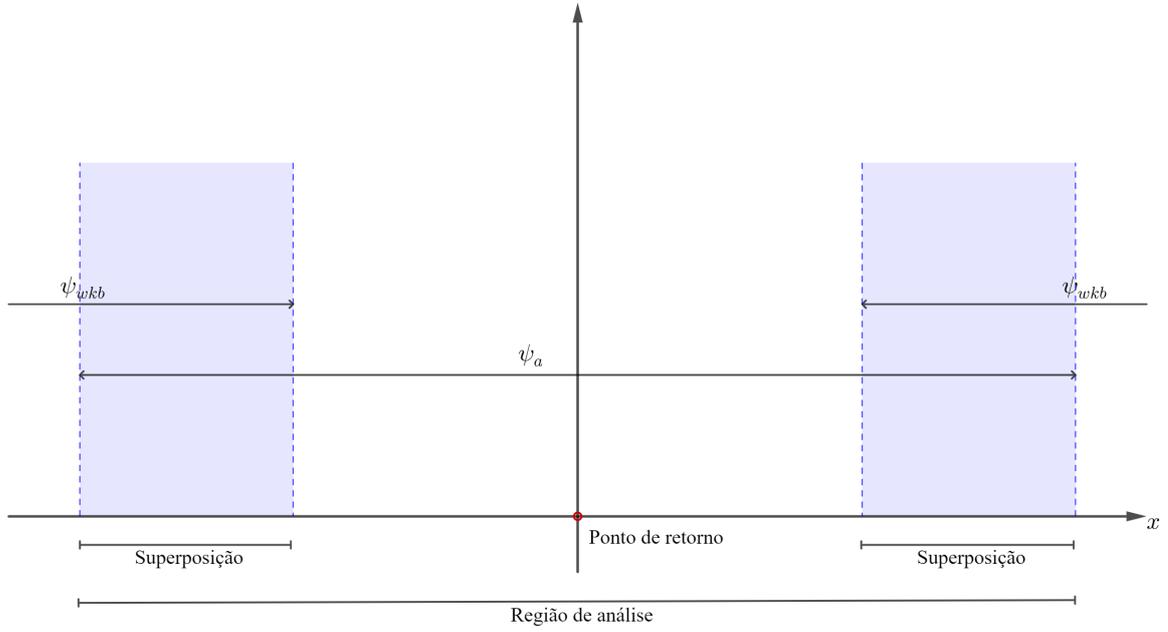


Figura 5 – Região de análise

$$\psi(x) \approx \frac{D}{\sqrt{\hbar} \alpha^{\frac{3}{4}} x^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.48)$$

Comparando a Eq. (2.48) com a Eq. (2.40) para $z \gg 0$, obtemos a seguinte relação entre os coeficientes:

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha \hbar}} D \quad (2.49)$$

$$b = 0.$$

Por sua vez, a análise das soluções na região II, onde o momento é dado pela Eq. (2.45), fornece

$$\begin{aligned} \int_x^0 p(x') dx' &= \int_x^0 i \hbar \alpha^{\frac{3}{2}} \sqrt{x'} dx' \\ &= -i \frac{2}{3} \hbar (\alpha x)^{\frac{3}{2}} \\ &= \frac{2}{3} \hbar (-\alpha x)^{\frac{3}{2}} \end{aligned} \quad (2.50)$$

Então, substituindo a Eq. (2.50) e a Eq. (2.45) na Eq. (2.33), obtemos para a solução aproximada WKB:

$$\psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{\hbar} \alpha^{\frac{3}{4}} (-x)^{\frac{1}{4}}} \left[B e^{i \frac{2}{3} (-\alpha x)^{\frac{3}{2}}} + C e^{-i \frac{2}{3} (-\alpha x)^{\frac{3}{2}}} \right]. \quad (2.51)$$

A forma assintótica das funções de Airy para $z \ll 0$ com $b = 0$ é dada por

$$\begin{aligned}\psi_a(x) &\approx \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{\frac{1}{4}}} \sin \left[\frac{2}{3}(-\alpha x)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right] \times \left(\frac{2i}{2i} \right) \\ &\approx \frac{a}{2i\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{\frac{1}{4}}} \left[e^{i\frac{\pi}{4}} e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{\frac{3}{2}}} - e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{\frac{3}{2}}} \right].\end{aligned}\quad (2.52)$$

Comparando a Eq. (2.52) com Eq. (2.51), estabelecemos as seguintes relações entre os coeficientes envolvidos:

$$\begin{aligned}a &= \frac{2i\sqrt{\pi}}{\sqrt{\hbar\alpha}} e^{-i\frac{\pi}{4}} B \\ -a &= \frac{2i\sqrt{\pi}}{\sqrt{\hbar\alpha}} e^{i\frac{\pi}{4}} C.\end{aligned}\quad (2.53)$$

Por fim, substituindo os coeficientes dados pela Eq. (2.49) na Eq. (2.53), obtemos

$$\begin{aligned}B &= -ie^{i\frac{\pi}{4}} D \\ C &= ie^{-i\frac{\pi}{4}} D.\end{aligned}\quad (2.54)$$

Portanto, podemos escrever as soluções expressas em termos de uma única constante de normalização D . As equações (2.49) e (2.54) são as conhecidas fórmulas de conexão, as quais conectam os coeficientes da solução WKB na região classicamente permitida com os coeficientes da solução da região classicamente não permitida. Portanto, substituindo as fórmulas (2.54) na Eq. (2.33) encontramos a solução para a região II, dada por

$$\psi(x) \approx \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right].\quad (2.55)$$

Já a solução para a região III continua sendo

$$\psi(x) \approx \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx'}.\quad (2.56)$$

O papel da função de onda de análise, portanto, foi "preencher" o espaço logo antes e logo após o ponto de retorno de modo a conectar as soluções WKB (como esquematizado pela Figura 5), visto que estas últimas não possuem comportamento adequado nessa região (GRIFFITHS; SCHROETER, 2018).

Note que para o ponto de virada x_1 na Figura 1, temos que $V'(x_1) < 0$, fazendo com que z seja negativo. Isso leva a uma imagem espelhada em $x = x_1$ (BRACK; BHADURI, 2018). A função de onda na região dentro do poço analisando do ponto de vista de x_1 pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\psi(x) &\approx \frac{2\tilde{D}}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] \\
&\approx \frac{2\tilde{D}}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right].
\end{aligned} \tag{2.57}$$

Já para a região I, a solução é igual a solução (2.34) com uma constante de integração \tilde{D} e os limites de integração adequados. Portanto, com as funções de onda WKB adequadas estabelecidas, podemos agora obter as regras de quantização de Bohr-Sommerfeld, que será o próximo passo.

2.1.2 Regras de quantização de Bohr-Sommerfeld

As regras de quantização possibilitam estabelecer os níveis de energia quantizados para o sistema no caso semiclássico em questão. A nomenclatura adotada, *regras de quantização de Bohr-Sommerfeld*, é devido as mesmas recobrem os resultados obtidos por estes em seus trabalhos no desenvolvimento da mecânica quântica. Claro que as condições nos pontos de retorno influenciam diretamente nas expressões de quantização. Por exemplo, para um poço com duas paredes impenetráveis em $x = 0$ e $x = a$, o caso mais simples, temos $\int_0^a p(x) dx = n\pi\hbar$. No entanto, abordaremos aqui os casos com um único ponto de retorno e com dois pontos de retorno.

2.1.2.1 Poço potencial com um ponto de retorno e uma parede impenetrável

Considere um potencial com uma parede infinita localizada em $x_1 = 0$, como mostra a Figura 6. Essa configuração possui um contorno trivial, já que $\psi(0) = 0$. Desse modo, a partir da Eq. (2.55), obtemos

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{x_2} p(x) dx + \frac{\pi}{4} = n\pi, \tag{2.58}$$

encontrando, assim, a seguinte regra de quantização de Bohr-Sommerfeld:

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{x_2} p(x) dx = \left(n - \frac{1}{4}\right)\pi. \tag{2.59}$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$. Observe a diferença em relação à quantização do poço com duas paredes infinitas. Evidentemente, espera-se que ao colocar mais um ponto de retorno a regra se modifique.

2.1.2.2 Poço potencial com dois pontos de retorno

Seja um poço potencial com dois pontos de retorno, como na Figura 1. Vimos que, para a região II, região classicamente permitida, compreendida no intervalo $x_1 \leq x \leq x_2$, as funções de onda são escritas como (2.55 e 2.57):

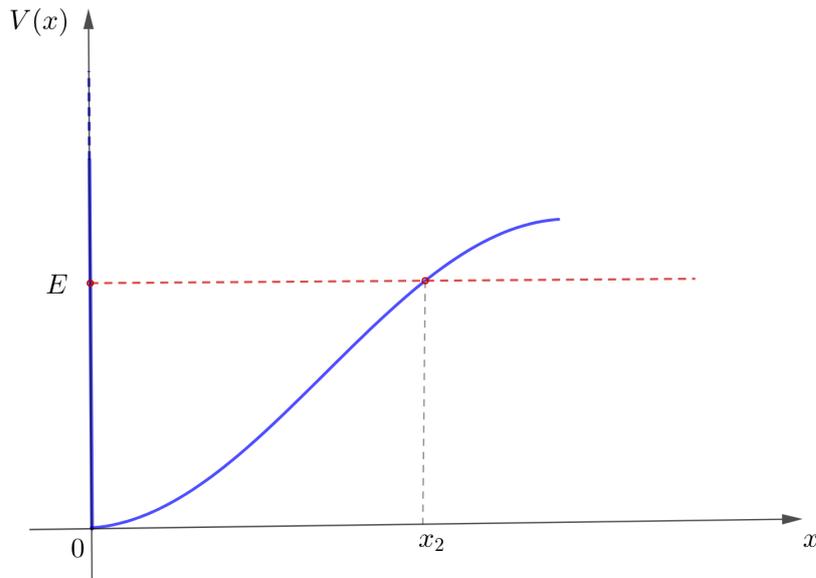


Figura 6 – Poço potencial com uma parede infinita

$$\psi_2(x) \approx \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \quad (2.60)$$

e

$$\psi_1(x) \approx \frac{2\tilde{D}}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right). \quad (2.61)$$

Em princípio, a solução nessa região deve ser contínua, ou seja, os argumentos dos senos devem estar, a menos de algum múltiplo de π , em fase (GRIFFITHS; SCHROETER, 2018), de modo que

$$\sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) = \frac{\tilde{D}}{D} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right). \quad (2.62)$$

Definido

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx$$

e

$$\theta = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4},$$

e reescrevendo a Eq. (2.62), obtemos

$$\sin\left(\alpha + \frac{\pi}{2} - \theta\right) = \frac{\tilde{D}}{D} \sin \theta, \quad (2.63)$$

de modo a ganharmos o seguinte sistema de equações:

$$\sin\left(\alpha + \frac{\pi}{2}\right) = 0 \quad (2.64)$$

$$\cos\left(\alpha + \frac{\pi}{2}\right) = -\frac{\tilde{D}}{D}. \quad (2.65)$$

Da Eq. (2.64) tira-se a seguinte expressão:

$$\alpha + \frac{\pi}{2} = n\pi. \quad (2.66)$$

Substituindo a Eq. (2.66) na Eq. (2.65), encontramos a relação para as constantes de integração das funções de onda $\tilde{D} = (-1)^{n+1}D$. Por fim, da Eq. (2.66), obtemos a seguinte regra de quantização de Bohr-Sommerfeld:

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi. \quad (2.67)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$

A integral do lado esquerdo é a integral de um ciclo completo de movimento, isto é, por exemplo, de x_1 a x_2 e voltando a x_1 novamente. O valor n , por sua vez, está relacionado ao número de nós da onda associada à partícula. Então, como esse número pode ser bem grande, reforça a necessidade de que a condição (2.31) seja cumprida. Tal regra de quantização pode ser usada até o ponto em que E se torna tão grande que ultrapassa os pontos de retorno (SCHIFF, 1987).

A título de informação, vale ressaltar que para problemas que apresentarem três ou mais pontos de retorno, envolverá o estudo do comportamento ressonante de ondas (BERRY; MOUNT, 1972). Agora vamos trazer uma discussão específica da aplicabilidade do método em simetria cilíndrica.

2.2 Aproximação WKB para a equação radial

Nesta seção vamos desenvolver o método considerando três dimensões, mais especificamente em simetria cilíndrica. Para isso, algumas condições terão que ser satisfeitas. Nesse sentido, o método é aplicável para casos em que a equação diferencial possa ser separada em uma ou mais equações diferenciais ordinárias, isto é, onde cada uma esteja associada a uma única variável independente e, como consequência, possa se estabelecer uma equação radial (SCHIFF, 1987; MERZBACHER, 1998).

Então, considere a equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula com massa m sujeita a um potencial central $V(r)$ dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (2.68)$$

onde E corresponde ao autovalor de energia. Em simetria cilíndrica, temos que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(r, \varphi, z) + V(r)\psi(r, \varphi, z) = E\psi(r, \varphi, z). \quad (2.69)$$

Se os operadores de momento linear \hat{p}_z e momento angular \hat{L}_z se conservam, isto é, comutam com o Hamiltoniano H do sistema, então pode-se escrever uma solução particular da seguinte forma:

$$\psi(r, \phi, z) = e^{il\phi + ikz} R(r), \quad (2.70)$$

onde $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ é o autovalor da componente z do operador momento angular, k corresponde ao autovalor da componente z do momento linear e $R(r)$ é a função de onda correspondente à coordenada radial. Substituindo a solução (2.70) na equação tridimensional de Schrödinger (2.69) com a seguinte escolha $R(r) = \frac{u(r)}{\sqrt{r}}$ e calculando as derivadas, obtemos

$$e^{il\phi + ikz} \left(u'' r^{-\frac{1}{2}} - u' r^{-\frac{3}{2}} + \frac{3}{4} u r^{-\frac{5}{2}} \right) + e^{il\phi + ikz} r^{-1} \left(u' r^{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} u r^{-\frac{3}{2}} \right) - e^{il\phi + ikz} u r^{-\frac{5}{2}} l^2 - e^{il\phi + ikz} u r^{-\frac{1}{2}} k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (V(r) - E) e^{il\phi + ikz} u r^{-\frac{1}{2}} = 0$$

$$e^{il\phi + ikz} \left[u'' r^{-\frac{1}{2}} + \frac{3}{4} u r^{-\frac{5}{2}} - \frac{1}{2} u r^{-\frac{5}{2}} - u r^{-\frac{5}{2}} l^2 - u r^{-\frac{1}{2}} k^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) u r^{-\frac{1}{2}} \right] = 0$$

$$u'' r^{-\frac{1}{2}} + u r^{-\frac{5}{2}} \left(\frac{3}{4} - \frac{1}{2} - l^2 \right) + u r^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - k^2 \right) = 0.$$

Multiplicando tudo por $r^{\frac{1}{2}}$, ficamos com

$$u'' - \frac{1}{r^2} \left(l^2 - \frac{1}{4} \right) u + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - k^2 \right] u = 0.$$

Por simplificação vamos considerar $k = 0$, logo

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + Q^2(r) u(r) = 0, \quad (2.71)$$

com

$$Q(r) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(l^2 - \frac{1}{4} \right) \right]}, \quad (2.72)$$

onde $Q(r)$ é o número de onda radial para a l -ésima onda parcial.

Observe que a Eq. (2.71) é idêntica à equação de Schrödinger unidimensional. Entretanto, o procedimento para obter uma função aproximada como no caso unidimensional

não retorna uma função de onda aceitável. Primeiro que, observando o termo centrífugo, terceiro termo dentro dos colchetes, o mesmo diverge na origem; segundo, da condição de aplicabilidade do método WKB que surge da aproximação feita na Eq. (2.18), dada por

$$1 \gg \left| \frac{\hbar^2}{p^3} \frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{1}{\sqrt{p}} \right) \right|, \quad (2.73)$$

com $p(r) = \hbar Q(r)$, no limite $r \rightarrow 0$, temos que

$$1 \gg \frac{1}{4l^2 - 1}, \quad (2.74)$$

isto é, o método não é aplicável para valores pequenos de l (BERRY; MOUNT, 1972; BERRY; ALMEIDA, 1973). Então, Langer (LANGER, 1937) propõe uma solução para o problema.

Desse modo, com o intuito de mostrar a proposta de Langer, analisemos um caso simples de um poço quadrado de profundidade $V(r) = V_0$. Os passos seguintes acontecem na mesma ordem como feito no capítulo anterior, na obtenção das fórmulas de conexão. Seja

$$\kappa^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} - k^2 \quad (2.75)$$

uma constante, de modo que a equação radial fique igual a

$$r^2 R''(r) + rR'(r) + (r^2 \kappa^2 - l^2)R = 0. \quad (2.76)$$

Esta equação é conhecida como equação de Bessel que possui soluções bastante conhecidas, as soluções de Bessel. Geralmente a solução mais completa é escrita em termos da combinação linear entre a função de Bessel e a de Neumann. A solução de Neumann, como mostra a Figura 7, não apresenta comportamento adequado na origem. Contudo, a solução de Bessel (Figura 8) se comporta muito bem (ARFKEN; WEBER, 2005). Logo, vamos descartar a solução de Neumann, já que, no nosso caso, a análise do comportamento ondulatório se faz necessário nas proximidades da origem.

Considere o limite assintótico $\kappa r \gg |l|$; a solução de Bessel possui a seguinte forma assintótica:

$$J_l(\kappa r) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi \kappa r}} \cos \left(\kappa r - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (2.77)$$

Agora é necessário construir a função aproximada WKB como a Eq. (2.57). Então, temos que

$$u(r) \simeq \frac{2}{\sqrt{\tilde{Q}(r)}} \cos \left[\int_{r_1}^r \tilde{Q}(r') dr' - \frac{\pi}{4} \right] \quad (2.78)$$

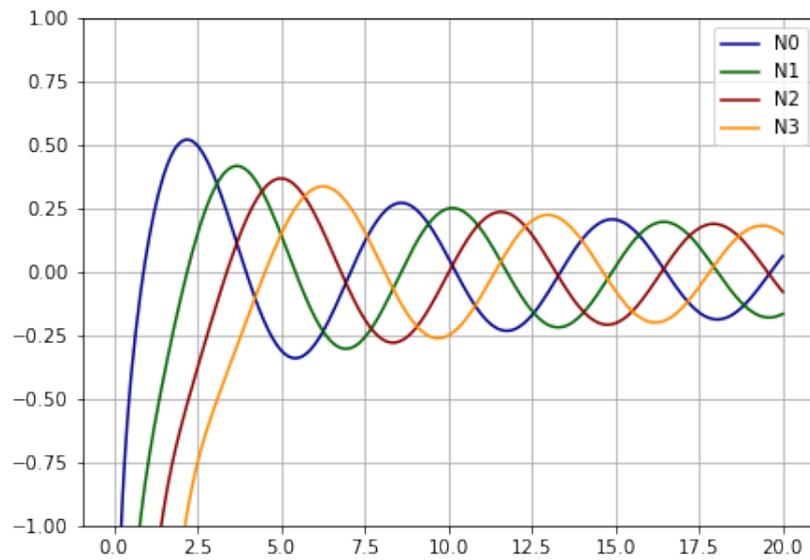


Figura 7 – Função de Neumann

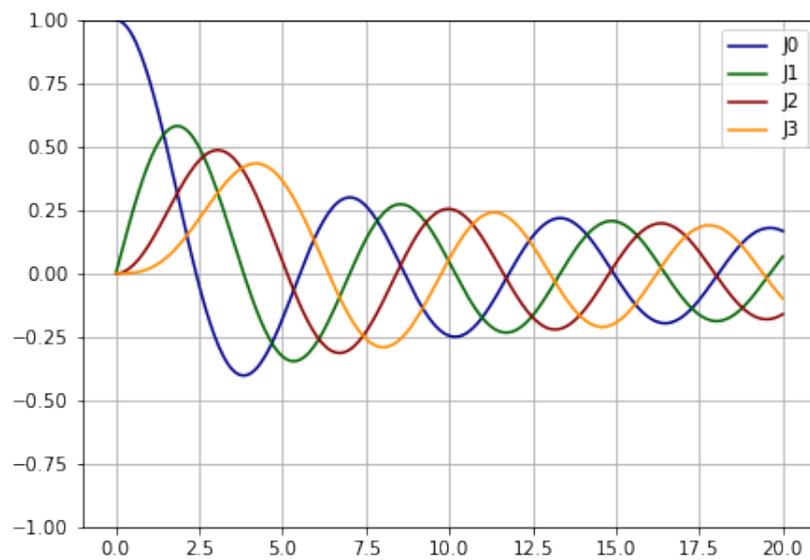


Figura 8 – Função de Bessel

é a função WKB (BRACK; BHADURI, 2018). No entanto, como artifício, será substituído $(l^2 - \frac{1}{4})$ por s^2 , como parâmetro a ser determinado, e a expressão $Q(r)$ fica:

$$\begin{aligned} \tilde{Q}(r) &= \sqrt{\kappa^2 - \frac{s^2}{r^2}} \\ &= \frac{1}{r} \sqrt{\kappa^2 r^2 - s^2}. \end{aligned} \quad (2.79)$$

Substituindo a Eq. (2.79) na Eq. (2.78), obtemos

$$u(r) \simeq \frac{2}{\sqrt{\tilde{Q}(r)}} \cos \left[\int_{r_1}^r \frac{\sqrt{\kappa^2 r'^2 - s^2}}{r'} dr' - \frac{\pi}{4} \right]. \quad (2.80)$$

Calculando a integral do argumento do cosseno, chegamos em

$$\int_{r_1}^r \frac{\sqrt{\kappa^2 r'^2 - s^2}}{r'} dr' = \int_{\sqrt{\kappa^2 r_1^2 - s^2}}^{\sqrt{\kappa^2 r^2 - s^2}} \frac{a^2}{a^2 + s^2} da.$$

Mas, como o ponto de retorno r_1 está próximo da origem, como mostra a [Figura 9](#) (esta apresenta o potencial efetivo sob o qual uma partícula, à medida que se aproxima da origem, é repelida fortemente no outro sentido), e $\kappa r_1 \gg s$, então podemos considerar $\kappa^2 r_1^2 - s^2 = 0$. Logo

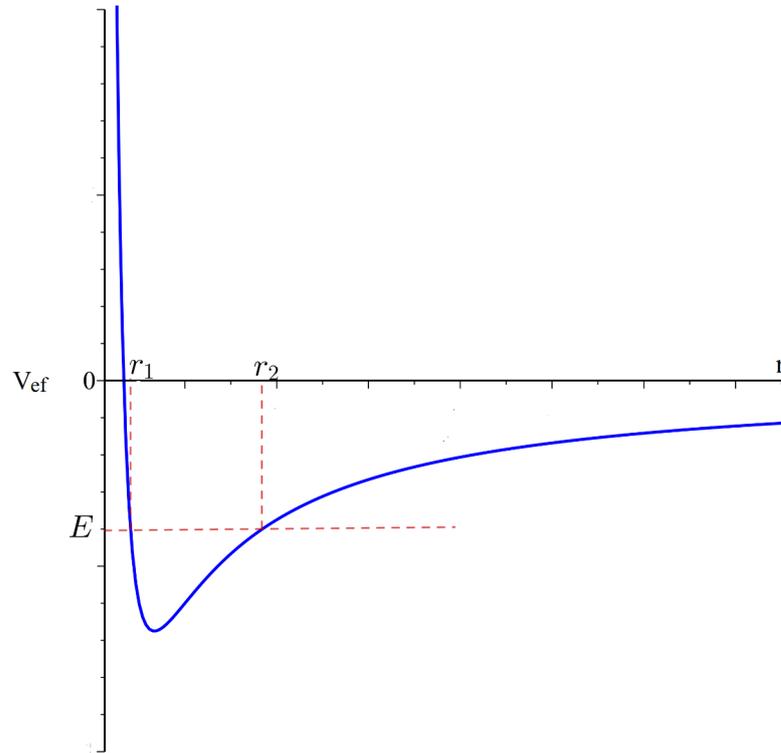


Figura 9 – Potencial efetivo

$$\begin{aligned} \int_{r_1}^r \frac{\sqrt{\kappa^2 r'^2 - s^2}}{r'} dr' &= \int_0^{\sqrt{\kappa^2 r^2 - s^2}} \frac{a^2}{a^2 + s^2} da \\ &= \sqrt{\kappa^2 r^2 - s^2} - s \cdot \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{\sqrt{\kappa^2 r^2 - s^2}}{s} \right) \\ &= \sqrt{\kappa^2 r^2 - s^2} - s \cdot \operatorname{cos}^{-1} \left(\frac{s}{\kappa r} \right). \end{aligned} \quad (2.81)$$

No limite assintótico em questão, em que $\kappa r_1 \gg s$, obtemos

$$\int_{r_1}^r \frac{\sqrt{\kappa^2 r'^2 - s^2}}{r'} dr' = \kappa r - \frac{s\pi}{2}. \quad (2.82)$$

Substituindo a Eq. (2.82) na Eq. (2.80), encontramos

$$u(r) \simeq \frac{2}{\sqrt{\tilde{Q}(r)}} \cos \left[\kappa r - \frac{s\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right]. \quad (2.83)$$

Por fim, ao se comparar este resultado com a solução de Bessel (2.77), constatamos que $s^2 = l^2$ para que as fases das soluções combinem. De maneira mais geral, esse processo também vale para o caso em que o potencial dependa da coordenada r (BERRY; MOUNT, 1972; BERRY; ALMEIDA, 1973). Esse processo de substituição

$$\left(l^2 - \frac{1}{4} \right) \rightarrow l^2 \quad (2.84)$$

é conhecido na literatura como modificação (ou transformação) de Lange (LANGER, 1937) e é sempre necessária para a obtenção da função de onda adequada para a equação radial. Isso resolve o problema enfrentado pela solução WKB sem a modificação Langer. Por exemplo, para o problema do átomo de hidrogênio em simetria esférica, a aproximação com essa modificação passa a fornecer autovalores aproximados de energia condizentes já em ordem mais baixa da aproximação. No caso dessa simetria a modificação no termo centrífugo da equação radial é de $l(l+1)$ por $(l + \frac{1}{2})^2$ (LANGER, 1937; HAINZ; GRABERT, 1999).

Finalmente, podemos agora determinar as energias dos estados ligados dos sistemas a serem abordados a partir da Eq. (2.78) com número de onda efetivo dado por

$$Q^2(r) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - k^2 - \frac{l^2}{r^2}, \quad (2.85)$$

de modo que o momento radial é dado por $p(r) = \hbar Q(r)$. Logo, com as regras de quantização (2.59) e (2.67) e o momento linear adequado, finaliza-se a revisão sobre o método.

Portanto, realizada esta breve revisão do método WKB, partindo do caso mais simples, unidimensional, e concluindo com o caso mais geral em simetria cilíndrica, serão feitas as aplicações no próximo capítulo para análogos de alguns potenciais.

3 Interação da carga pontual com campos elétricos não uniformes

3.1 Análogo do potencial quártico puro

Em nível de graduação um dos principais problemas abordados ao longo do curso é o oscilador harmônico. De maneira geral, a discussão de tal conteúdo se dá inicialmente realizando uma aproximação na forma do potencial ao qual a partícula está sujeita, ou seja, desconsidera-se termos de ordem $\mathcal{O}(x^3)$ na expansão em torno de um ponto de equilíbrio (LANDAU; LIFSHITZ, 1976; SANTIAGO; RODRIGUES, 2005). Esta aproximação realizada para o oscilador harmônico, é claro, tem como finalidade uma abordagem didática.

Entretanto, para movimentos reais, mesmo em escala macroscópica, como, por exemplo, o movimento do sistema massa mola, pelo menos o termo quártico na expansão do potencial desempenha importante papel (AGUIAR, 1994). Em sistemas quânticos, por sua vez, esses termos superiores são, evidentemente, importantes dependendo do problema em análise. Por exemplo, em sistemas moleculares anarmonicidades são observadas nas vibrações de tais estruturas (CHAN; STELMAN, 1963; CHAN; STELMAN; THOMPSON, 1964). Ainda, Chan, Stelman e Thompson (CHAN; STELMAN; THOMPSON, 1964) comentam que anarmonicidades quárticas são sempre esperadas em vibrações de baixa frequência devido a, por exemplo, grandes amplitudes de vibração dessas estruturas. Por sua vez, Laane (LAANE, 2000) e também Ocola e Laane (OCOLA; LAANE, 2020), a partir de pesquisas usando infravermelho e espectroscopia Raman, no estudo de vibrações de pequenas moléculas de formato anelar, observaram que a molécula apresentava uma energia potencial do tipo anarmônica quártica.

Além da importância em sistemas moleculares como os tratados, esses potenciais são relevantes também em teoria de campos. E, para além dos trabalhos já referidos, Bender e Wu (BENDER; WU, 1969), por exemplo, falam que o potencial anarmônico quártico é importante na teoria de campos porque está associado, acima disso, a um modelo de campo (o modelo $\lambda\phi^4$) em uma dimensão. Por sua vez, anarmonicidades sêxticas são de interesse em física nuclear (RADUTA; BUGANU, 2013; BUDACA, 2014; BUGANU; BUDACA, 2015).

Portanto, em seguida iremos apresentar análogos de potenciais dessas categorias. Ou melhor, a partir da interação de uma carga de prova com específicas distribuições contínuas e não uniformes de carga, gera-se tais potenciais. O objetivo final é calcular, a partir da aplicação do método aproximativo WKB, os níveis de energia acessíveis para os

sistemas.

Então, considere uma distribuição de cargas elétricas não uniforme em um cilindro infinito e não condutor dada por

$$\rho(r) = \rho_0 \frac{r^2}{r_0^2}, \quad (3.1)$$

onde r_0 é o raio do cilindro e ρ está compreendido no intervalo $0 \leq \rho \leq \rho_0$ com $\rho_0 > 0$. Assim, o campo elétrico gerado no interior do cilindro é dado por

$$\vec{E} = \frac{\rho_0}{4\epsilon_0} \frac{r^3}{r_0^2} \hat{r}. \quad (3.2)$$

O potencial escalar é, então,

$$\vec{E} = -\nabla\Phi \Rightarrow \Phi(r) = -\int_0^r \frac{\rho_0}{4\epsilon_0} \frac{r'^3}{r_0^2} dr' \quad (3.3)$$

$$\Phi(r) = -\frac{\rho_0}{16\epsilon_0 r_0^2} r^4. \quad (3.4)$$

Desse modo, a energia potencial de interação de um elétron de prova situado dentro do cilindro fica

$$V(r) = \frac{|q|\rho_0}{16\epsilon_0 r_0^2} r^4, \quad (3.5)$$

onde $q = -|q|$. Então, esse sistema físico dá origem a um potencial análogo de um oscilador quártico puro. O oscilador quártico é caracterizado por um potencial, por exemplo, $V(x) = \frac{ax^2}{2} + bx^4$, com a e b diferentes de zero. Logo, nesta situação específica, o termo "puro" é atribuído ao caso em que $a = 0$ (LIVERTS; MANDELZWEIG; TABAKIN, 2006).

A equação de movimento em coordenadas cilíndricas para esse elétron é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi + V(r)\psi = \mathcal{E}\psi, \quad (3.6)$$

onde m é a massa do elétron. Como \hat{p}_z e \hat{L}_z são constantes de movimento, então podemos separar a solução. Desta forma, temos que

$$\psi(r, \varphi, z) = R(r)e^{il\varphi + ikz}, \quad (3.7)$$

onde l é um número quântico inteiro associado à componente z do momento angular e $-\infty < k < \infty$ é o autovalor associado à componente z do momento linear. Então, substituindo a Eq. (3.7) na Eq. (3.6), obtemos a seguinte equação radial:

$$R'' + \frac{1}{r}R' - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{|q|\rho_0}{16\epsilon_0 r_0^2} r^4 R + \left[\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2} - k^2 \right] R - \frac{l^2}{r^2} R = 0. \quad (3.8)$$

Fazendo

$$R(r) = \frac{u(r)}{\sqrt{r}}, \quad (3.9)$$

a equação radial (3.8) fica agora da seguinte forma:

$$u'' - \frac{2m}{\hbar^2} \lambda r^4 u + \left[\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2} - k^2 \right] u - \frac{(l^2 - \frac{1}{4})}{r^2} u = 0 \quad (3.10)$$

$$u'' + \frac{1}{\hbar^2} \left[2m\mathcal{E} - 2m\lambda r^4 - \hbar^2 k^2 - \hbar^2 \frac{(l^2 - \frac{1}{4})}{r^2} \right] u = 0, \quad (3.11)$$

onde

$$\lambda = \frac{|q| \rho_0}{16\epsilon_0 r_0^2}. \quad (3.12)$$

Entretanto, a aproximação WKB em simetria cilíndrica só é válida realizando a transformação de Langer, Eq. (2.84), levando $(l^2 - \frac{1}{4})$ em l^2 (LANGER, 1937). Será abordado o problema no plano $z = 0$ fazendo $k = 0$. Essa abordagem pode ser justificada pelo fato de materiais bidimensionais serem estudados atualmente e, conseqüentemente, desempenhar importante papel no desenvolvimento de novas tecnologias (AKINWANDE et al., 2017). Logo, obtemos

$$u'' + Q^2(r)u = 0, \quad (3.13)$$

onde

$$Q(r) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\mathcal{E} - \lambda r^4) - \frac{l^2 \hbar^2}{r^2}}. \quad (3.14)$$

A solução aproximada WKB é dada por (BERRY; ALMEIDA, 1973; BRACK; BHADURI, 2018):

$$u(r) \simeq \frac{2}{\sqrt{Q(r)}} \cos \left(\int_{r_1}^r Q(r') dr' - \frac{\pi}{4} \right), \quad (3.15)$$

sendo r_1 um ponto de retorno.

Já a condição de quantização de Bohr-Sommerfeld, por sua vez, é dada por (GRIFITHS; SCHROETER, 2018):

$$\int_{r_1}^{r_2} Q(r) dr = \left(n - \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (3.16)$$

onde r_1 e r_2 são os pontos de retorno e $n = 1, 2, 3, \dots$ é o número quântico radial. Observe que, para esse problema específico, a integral do número de onda dado pela Eq. (3.14), devido sua forma, não pode ser resolvida, isso porque o problema não retorna pontos de

retorno adequados para ondas l (BAKKE, 2019). Tendo isso em vista, vamos analisar o sistema para o caso específico das ondas s , onde $l = 0$. Esse caso é conhecido como ondas s em referência ao orbital atômico s . Logo, vamos analisar o problema nesse caso específico. Entretanto, mesmo especificando, ainda traz informações relevantes sobre o sistema, visto as características importantes de tais ondas. Então, substituindo a Eq. (3.14) com $l = 0$ na Eq. (3.16) com $r_1 = 0$, obtemos

$$\int_0^{r_2} \sqrt{2m(\mathcal{E} - \lambda r^4)} dr = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi \hbar. \quad (3.17)$$

Fazendo $x = r^2$ e considerando que no ponto de retorno temos $\mathcal{E} = V(r_2) = \lambda x_2^2$, então

$$\frac{x_2 \sqrt{2m\lambda}}{2} \int_0^{x_2} \left(1 - \frac{x^2}{x_2^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{dx}{\sqrt{x}} = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi \hbar$$

$$\frac{\sqrt{2m\lambda}}{4} x_2^{3/2} \int_0^1 (1-u)^{\frac{3}{2}-1} u^{\frac{1}{4}-1} du = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi \hbar. \quad (3.18)$$

Essa integral pode ser resolvida em termos das funções gama (ARFKEN; WEBER, 2005). Assim, o espectro de energias para o elétron interagindo com o campo elétrico gerado por uma distribuição de cargas dada pela Eq. (3.1), que dá origem a um potencial análogo ao de um oscilador quártico puro (BELL, 1945; BARAKAT; ROSNER, 1981; LIVERTS; MANDELZWEIG; TABAKIN, 2006), para o caso particular das ondas s no plano $z = 0$, é dado por

$$\mathcal{E}_n = \left[\lambda^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{8\pi}{m}} \left(n - \frac{1}{2}\right) \hbar \frac{\Gamma(\frac{7}{4})}{\Gamma(\frac{1}{4})} \right]^{\frac{4}{3}} \quad (3.19)$$

onde λ , Eq. (3.12), é uma constante, m a massa da partícula e n o número quântico radial (VELOSO; BAKKE, 2023). Portanto, observamos que esses valores de energia dados pela Eq. (3.19) não puderam ser obtidos para ondas l por meio da aproximação WKB. Entretanto, a especificação do problema ainda possibilitou este resultado para esse sistema específico.

3.2 Análogo do potencial sêxtico puro

Considere um cilindro infinito não condutor com a seguinte densidade de cargas

$$\rho(r) = \rho_0 \frac{r^4}{r_0^4}, \quad (3.20)$$

onde r_0 é o raio do cilindro e ρ_0 é uma densidade de carga de modo que $0 \leq \rho(r) \leq \rho_0$. Essa distribuição não uniforme gera o seguinte campo elétrico:

$$\vec{E} = \frac{\rho_0}{6\epsilon_0} \frac{r^5}{r_0^4} \hat{r}. \quad (3.21)$$

Desse modo, o potencial escalar é dado por

$$\begin{aligned} \Phi(r) &= - \int_0^r \frac{\rho_0}{6\epsilon_0} \frac{r'^5}{r_0^4} dr' \\ \Phi(r) &= - \frac{\rho_0}{36\epsilon_0 r_0^4} r^6. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Um elétron de carga $q = -|q|$ que se encontra dentro do cilindro experimenta uma energia potencial

$$V(r) = \frac{|q|\rho_0}{36\epsilon_0 r_0^4} r^6, \quad (3.23)$$

que é um análogo de potencial sêxtico (MAIZ; ALFAIFY, 2014), no caso, um potencial sêxtico puro.

A equação de movimento para esse elétron é dada pela equação de Schrödinger seguinte:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi + \frac{|q|\rho_0}{36\epsilon_0 r_0^4} r^6 \psi = \mathcal{E} \psi, \quad (3.24)$$

onde m é a massa do elétron. Como \hat{p}_z e \hat{L}_z comutam com o Hamiltoniano do sistema, então a solução pode ser separada da seguinte forma:

$$\psi(r, \varphi, z) = \frac{u(r)}{\sqrt{r}} e^{il\varphi + ikz}, \quad (3.25)$$

onde, como já mencionado, l é o número quântico inteiro associado à componente z do momento angular e $-\infty < k < \infty$ é o autovalor associado à componente z do momento linear. Desse modo, substituindo a Eq. (3.25) na Eq. (3.24), a equação radial fica

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{\left(l^2 - \frac{1}{4}\right)}{r^2} u - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{|q|\rho_0}{36\epsilon_0 r_0^4} r^6 u + \left[\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2} - k^2 \right] u &= 0 \\ \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{1}{\hbar^2} \left[2m \left(\mathcal{E} - \frac{|q|\rho_0}{36\epsilon_0 r_0^4} r^6 \right) - k^2 \hbar^2 - \frac{\hbar^2}{r^2} \left(l^2 - \frac{1}{4} \right) \right] u &= 0. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Analisando o problema no plano ($k = 0$) e fazendo a transformação de Langer (2.84) para o termo centrífugo, obtemos

$$u'' + Q(r)^2 u = 0, \quad (3.27)$$

onde

$$Q(r) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\mathcal{E} - \eta r^6) - \frac{l^2 \hbar^2}{r^2}}, \quad (3.28)$$

com

$$\eta = \frac{|q|\rho_0}{36\epsilon_0 r_0^4}. \quad (3.29)$$

A solução aproximada WKB é dada por (BERRY; ALMEIDA, 1973; BRACK; BHADURI, 2018):

$$u(r) \simeq \frac{2}{\sqrt{Q(r)}} \cos \left(\int_{r_1}^r Q(r') dr' - \frac{\pi}{4} \right). \quad (3.30)$$

Por sua vez, a regra de quantização de Bohr-Sommerfeld é escrita como:

$$\int_{r_1}^{r_2} Q(r) dr = \left(n - \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (3.31)$$

onde n é o número quântico radial, r_1 e r_2 são os pontos que delimitam a região classicamente permitida. Substituindo a Eq. (3.28) na Eq. (3.31), ficamos com

$$\int_0^{r_2} \sqrt{2m(\mathcal{E} - \eta r^6) - \frac{l^2 \hbar^2}{r^2}} dr = \left(n - \frac{1}{2} \right) \pi \hbar. \quad (3.32)$$

Considerando o caso para ondas s e sabendo que o ponto de retorno é dado por $r_2 = \left(\frac{\mathcal{E}}{\eta} \right)^{\frac{1}{6}}$, então o integrando fica

$$\begin{aligned} \int_0^{r_2} \sqrt{2m(\eta r_2^6 - \eta r^6)} dr &= \left(n - \frac{1}{2} \right) \pi \hbar \\ \frac{r_2^4 \sqrt{2m\eta}}{6} \int_0^1 (1-x)^{\frac{3}{2}-1} x^{\frac{1}{6}-1} dx &= \left(n - \frac{1}{2} \right) \pi \hbar, \end{aligned} \quad (3.33)$$

de modo a obtermos

$$\mathcal{E}_n = \left[\eta^{\frac{1}{6}} \sqrt{\frac{8\pi}{m}} \left(n - \frac{1}{2} \right) \hbar \frac{\Gamma(\frac{2}{3})}{\Gamma(\frac{1}{6})} \right]^{\frac{3}{2}} \quad (3.34)$$

(VELOSO; BAKKE, 2023), onde η é dado pela Eq. (3.29). Como no caso anterior, não foi possível obter os estados ligados para as ondas l ($l \neq 0$) através da aproximação WKB, ou seja, os pontos de retorno também são modificados de modo que não se pode encontrar o espectro de energias do sistema. Logo, o resultado (3.34) corresponde aos autovalores de energia para ondas s onde o sistema é caracterizado pela interação de uma carga pontual de prova com o campo elétrico gerado por uma distribuição não uniforme de cargas dada pela Eq. (3.20). Tal interação gera um potencial do tipo oscilador anarmônico sêxtico puro.

3.3 Potencial inverso do quadrado atrativo

No início do desenvolvimento da teoria WKB, um dos primeiros problemas enfrentados por esta foi sua utilidade frente o problema do átomo de hidrogênio, onde o tratamento do problema gerava dificuldades, de modo que interferia nos resultados. Esse problema quase invariavelmente é atribuído à singularidade na origem (HAINZ; GRABERT, 1999).

Os potenciais singulares, historicamente, levaram a grandes dificuldades na mecânica quântica. Para Case (CASE, 1950), o primeiro problema em que apareceu tal dificuldade foi, provavelmente, no potencial fortemente atrativo $\frac{1}{r^2}$. Claro que, outros exemplos que carregam essa dificuldade seriam potenciais que possuem comportamento $\frac{1}{r^n}$ (com $n > 2$) próximo à origem. O mesmo problema, portanto, será apresentado aqui nesta seção.

Desse modo, este tópico se concentra no caso $n = 2$, mais especificamente no caso atrativo. Este potencial foi abordado, por exemplo, por Bawin e Coon (BAWIN; COON, 2001), onde estudaram o problema do espalhamento de átomos neutros frios por um fio fino carregado com o objetivo de derivar soluções de espalhamento da equação de Schrödinger.

No mesmo sentido, em busca do espectro de energias, Bakke e Furtado (BAKKE; FURTADO, 2020) trouxeram uma abordagem semiclássica para a interação do momento de dipolo elétrico de uma partícula neutra com um campo elétrico em um meio elástico contendo um defeito. Tal interação gera um potencial inverso do quadrado atrativo, o qual foi abordado de uma forma mais precisa em (BAKKE; FURTADO, 2021). Audretsch, Skarzhinsky e Voronov (AUDRETSCH; SKARZHINSKY; VORONOV, 2001) também obtiveram, além do espalhamento de átomos neutros a partir de uma combinação do potencial inverso do quadrado atrativo com o potencial de Aharonov-Bohm, estados ligados para o potencial r^{-2} atrativo.

Em um estudo experimental interessante (DENSCHLAG; UMSHAUS; SCHMIED-MAYER, 1998) com átomos neutros frios, Denschlag e colaboradores apresentaram como utilizar tais corpos de prova para estudar potenciais singulares, especificamente o $\frac{1}{r^2}$. Para tanto, foi inserido dentro de um gás confinado de átomos de lítio frios um fio carregado.

Por outro lado, Tkachuk (TKACHUK, 1999), usando um fio ferromagnético para prender e guiar átomos neutros, mostrou que um potencial do tipo r^{-2} atrativo ou repulsivo surge entre o átomo e o fio a depender do estado do spin do átomo.

Portanto, este potencial é de grande importância, pois está na interface entre os potenciais r^{-n} ($n < 2$) em que o movimento pode ser estabilizado pelo momento angular e os que não podem ser estabilizados ($n > 2$) (LANDAU; LIFSHITZ, 1981). Então, com a intenção de abordar esse problema, na sequência é apresentado um sistema constituído da interação de um elétron sem spin com uma distribuição não uniforme de cargas em simetria cilíndrica, da qual surge um potencial desse tipo.

Desta forma, seja um cilindro não condutor infinito que possui uma cavidade cilíndrica interna com raio r_1 e um raio externo r_2 com densidade volumétrica não uniforme de carga (Figura 10-a) dada por:

$$\rho(r) = -\rho_0 \frac{r_1^4}{r^4}. \quad (3.35)$$

Essa distribuição gera um campo elétrico

$$\vec{E}_1 = \left[\frac{\rho_0 r_1^4}{2\epsilon_0 r^3} - \frac{\rho_0 r_1^2}{2\epsilon_0 r} \right] \hat{r}. \quad (3.36)$$

Por outro lado, consideraremos a região $r < r_1$ proibida para o elétron, ou seja, o raio interno r_1 do cilindro exerce um papel de uma parede impenetrável (ESSIN; GRIFFITHS, 2006; BAKKE, 2022). Nessa região, localiza-se uma linha de cargas elétricas posicionada ao longo do eixo z (Figura 10-b). Essa distribuição de cargas adicional λ gera um campo elétrico na região permitida $r > r_1$ dado por:

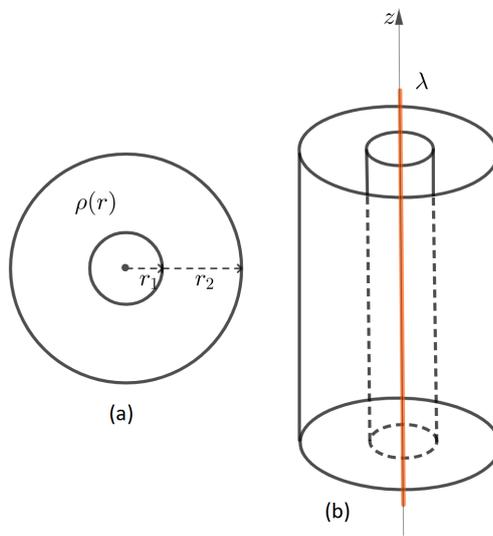


Figura 10 – Cilindro com cavidade interna

$$\vec{E}_2 = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0 r} \hat{r}. \quad (3.37)$$

Contudo, nosso particular interesse está no caso em que $\lambda = \pi r_1^2 \rho_0$, de modo que a Eq. (3.37) fica

$$\vec{E}_2 = \frac{\rho_0 r_1^2}{2\epsilon_0 r} \hat{r}. \quad (3.38)$$

Por fim, o campo elétrico resultante na região permitida para a partícula $r > r_1$ é dado pela soma da Eq. (3.36) com a Eq. (3.38), de modo que

$$\vec{E} = \frac{\rho_0 r_1^4}{2\epsilon_0 r^3} \hat{r}. \quad (3.39)$$

O potencial escalar, por sua vez, é dado por

$$\Phi(r) = \frac{\rho_0 r_1^4}{4\epsilon_0 r^2} - \frac{\rho_0 r_1^2}{4\epsilon_0}, \quad (3.40)$$

e a energia de interação fica igual a

$$V(r) = -\frac{|q|\rho_0 r_1^4}{4\epsilon_0 r^2} + \frac{|q|\rho_0 r_1^2}{4\epsilon_0} \quad (3.41)$$

ou

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r^2} + \beta, \quad (3.42)$$

onde $\alpha = \beta r_1^2$ e $\beta = \frac{|q|\rho_0 r_1^2}{4\epsilon_0}$ são constantes. Desse modo, a energia potencial eficiente é

$$\tilde{V}(r) = V(r) - \beta$$

$$\tilde{V}(r) = -\frac{\alpha}{r^2}. \quad (3.43)$$

Veja que esta expressão para o potencial é consistente uma vez que o campo elétrico dado pela Eq. (3.39) é recuperado a partir de $\vec{E} = -\nabla\tilde{V}/|q|$. Observe que a imposição da condição de contorno $\psi(r_1) = 0$ nos possibilita usar a regra de quantização (2.59). Além disso, tal contorno proporciona-nos evitar problemas com a divergência na origem (ESSIN; GRIFFITHS, 2006). Diversos trabalhos estudaram como fazer o tratamento da singularidade na origem (GUPTA; RAJEEV, 1993; CAMBLONG et al., 2000; COON; HOLSTEIN, 2002). Esta abordagem foi usada, por exemplo, em (BAKKE, 2022).

Desse modo, com a energia potencial dada pela Eq. (3.43), a equação de Schrödinger fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi + \left(-\frac{\alpha}{r^2} \right) \psi = \mathcal{E} \psi. \quad (3.44)$$

Note que $[p_z, \mathcal{H}] = 0$ e $[L_z, \mathcal{H}] = 0$, isto é, p_z e L_z são constantes de movimento. Preservando tais propriedades de simetria, a solução ψ pode ser separada particularmente da seguinte forma:

$$\psi(r, \varphi, z) = \frac{u(r)}{\sqrt{r}} e^{il\varphi + ikz}, \quad (3.45)$$

de maneira que, ao substituirmos ψ na equação de movimento (3.44) e realizando as derivadas necessárias, obtemos

$$u'' + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\alpha}{r^2} + \mathcal{E} \right) - k^2 - \frac{1}{r^2} \left(l^2 - \frac{1}{4} \right) \right] u = 0. \quad (3.46)$$

Vamos analisar o problema no plano $z = 0$ fazendo $k = 0$. Finalmente, como visto no capítulo anterior, a função de onda aproximada WKB só é válida em simetria cilíndrica quando realizada a transformação de Lange (2.84) no termo centrífugo, levando $(l^2 - \frac{1}{4})$ em l^2 . Assim, realizando essas alterações, a Eq. (3.46) fica

$$u'' + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\alpha}{r^2} + \mathcal{E} \right) - \frac{l^2}{r^2} \right] u = 0. \quad (3.47)$$

Então, vamos definir $\nu^2 = 2m\alpha$ e considerar o caso para ondas s . Como queremos obter os estados ligados, consideraremos, neste caso, $\mathcal{E} < 0$. Logo, ficamos com a seguinte equação:

$$u'' + Q^2(r)u = 0 \quad (3.48)$$

com

$$Q^2(r) = \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{\nu^2}{r^2} - (-2m\mathcal{E}) \right], \quad (3.49)$$

que possui solução WKB dada por (BRACK; BHADURI, 2018):

$$u(r) \simeq \frac{2}{\sqrt{Q(r)}} \cos \left(\int_{r_1}^r Q(r') dr' - \frac{\pi}{4} \right). \quad (3.50)$$

A condição de quantização de Bohr-Sommerfeld para este sistema é igual a

$$\int_{r_1}^{r_2} Q(r) dr = \left(n - \frac{1}{4} \right) \pi \quad (3.51)$$

$$\int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{\nu^2}{r^2} - (-2m\mathcal{E})} dr = \left(n - \frac{1}{4} \right) \pi \hbar, \quad (3.52)$$

onde $n = 1, 2, 3, \dots$ é o número quântico radial. Analisando o ponto de retorno, temos

$$\frac{\nu^2}{r_2^2} = -2m\mathcal{E} \Rightarrow r_2 = \frac{\nu}{\sqrt{-2m\mathcal{E}}} \quad (3.53)$$

que, substituindo na Eq. (3.52) e calculando-a, obtemos

$$\begin{aligned} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{\nu^2}{r^2} - (-2m\mathcal{E})} dr &= \sqrt{-2m\mathcal{E}} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{r_2^2 - r^2} \frac{dr}{r} \\ &= \sqrt{-2m\mathcal{E}} \left[-r_2 \sqrt{1 - \frac{r_1^2}{r_2^2}} + r_2 \ln \left(\frac{r_2}{r_1} \right) + r_2 \ln \left(1 + \sqrt{1 - \frac{r_1^2}{r_2^2}} \right) \right]. \end{aligned}$$

Vamos assumir que o raio exterior do cilindro seja muito maior do que o raio interno, de modo que, aplicando uma expansão de Taylor e negligenciando termos de ordem $\mathcal{O}\left(\frac{r_1^2}{r_2^2}\right)$, obtemos a seguinte equação:

$$\begin{aligned} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{\nu^2}{r^2} - (-2m\mathcal{E})} dr &\approx r_2 \sqrt{-2m\mathcal{E}} \left[\ln \left(\frac{r_2}{r_1} \right) + c \right] \\ &\approx \nu \ln \left(\frac{\nu}{r_1 \sqrt{-2m\mathcal{E}}} \right) + \nu c. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Então, voltando à Eq. (3.52), temos que

$$\nu \ln \left(\frac{\nu}{r_1 \sqrt{-2m\mathcal{E}}} \right) + \nu c \approx \left(n - \frac{1}{4} \right) \pi \hbar$$

$$\frac{\nu}{r_1 \sqrt{-2m\mathcal{E}}} \approx e^{\frac{\pi \hbar}{\nu} (n - \frac{1}{4}) - c},$$

obtendo, assim, a seguinte expressão para as energias aproximadas do sistema:

$$\mathcal{E}_n \approx -\frac{\nu^2}{2mr_1^2 e^{-2\delta/\nu}} e^{-2\pi \hbar n/\nu}, \quad (3.55)$$

onde $\delta = \left(\frac{\pi \hbar}{4} + \nu c \right)$ (VELOSO; BAKKE, 2023).

Logo, a Eq. (3.55) revela o espectro de energia de uma partícula submetida a um potencial inverso do quadrado atrativo para o caso particular das ondas s . Observe que no limite $n \rightarrow \infty$, temos $\mathcal{E}_{n \rightarrow \infty} \rightarrow 0$, já que a energia decai exponencialmente. Isso indica um grande acúmulo de níveis de energia nesse limite (AUDRETSCH; SKARZHINSKY; VORONOV, 2001).

O estado fundamental, por sua vez, é definido para $n = 1$, com energia

$$\mathcal{E}_1 = -\frac{\nu^2}{2mr_1^2 e^{-\frac{2}{\nu}\delta}} e^{-\frac{2\pi \hbar}{\nu}} \quad (3.56)$$

determinando, assim, o seguinte intervalo para os autovalores de energia:

$$-\frac{\nu^2}{2mr_1^2 e^{-\frac{2}{\nu}\delta}} e^{-\frac{2\pi \hbar}{\nu}} \leq \mathcal{E}_n \leq 0. \quad (3.57)$$

Observe também que, quando $r_1 \rightarrow 0$, $\mathcal{E}_n \rightarrow -\infty$, recobrando o problema da singularidade. Esse resultado foi discutido em Landau e Lifshitz (LANDAU; LIFSHITZ, 1981), onde denominaram esse comportamento como a queda da partícula para o centro.

Foi obtido, portanto, os níveis de energia para três sistemas diferentes considerando o caso particular das ondas s . Tais expressões possibilitam o estudo de outras propriedades do sistema como, por exemplo, o tempo de ressurgimento da onda. Esta abordagem foi realizada em (VELOSO; BAKKE, 2023).

4 Conclusões e perspectivas

Neste trabalho foi calculado o espectro de energias dos estados ligados para o caso das ondas s de sistemas físicos caracterizados pela interação de um elétron sem spin com o campo elétrico gerado por distribuições contínuas e não uniformes de carga em simetria cilíndrica a partir de uma abordagem semiclassical.

Vimos que a equação diferencial tridimensional tem que ser redutível para equações dependentes de uma única variável, no caso da simetria cilíndrica, uma equação radial. Adicionalmente, deve haver uma transformação no termo centrífugo, conhecida como modificação de Langer, para que haja uma adequação na fase da função de onda aproximada.

A partir disso, aplicamos a WKB para os sistemas físicos em questão. Foi possível encontrar análogos de potenciais anarmônicos, o quártico e o proporcional a r^6 . O quártico, como visto, de grande interesse em física molecular, mas, também, de interesse em outras áreas como teoria de campos. Já o sêxtico, estudado em física nuclear, por exemplo. Observamos que o cálculo das energias permitidas para os potenciais anarmônicos não foi possível para ondas l através do método WKB devido à dificuldade de realizar a integração necessária.

Ainda, alguns trabalhos abordaram o caso do potencial inverso do quadrado atrativo em simetria cilíndrica para átomos neutros. Neste trabalho foi obtido um análogo desse potencial. Vimos que o problema da singularidade para tal potencial atrativo leva ao que foi definido na literatura como a queda para o centro. Constatou-se, também, um acúmulo de níveis de energia no limite $\mathcal{E}_{n \rightarrow \infty} \rightarrow 0$.

Por fim, como perspectivas, pretendemos explorar soluções exatas de sistemas físicos semelhantes e obter estados ligados para as ondas l , bem como incluir outros parâmetros como rotações, com o objetivo de estudar efeitos Aharonov-Bohm e efeitos análogos a partir de defeitos topológicos em meios elásticos.

Referências

- ADHIKARI, R.; DUTT, R.; VARSHNI, Y. On the averaging of energy eigenvalues in the supersymmetric wkb method. *Physics Letters A*, v. 131, n. 4, p. 217–221, 1988. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960188900151>>. Citado na página 15.
- AGUIAR, M. A. de. Caos em sistemas clássicos conservativos. *Revista brasileira de ensino de física*, v. 16, n. 1-4, p. 3–20, 1994. Citado na página 38.
- AKINWANDE, D. et al. A review on mechanics and mechanical properties of 2d materials—graphene and beyond. *Extreme Mechanics Letters*, v. 13, p. 42–77, 2017. ISSN 2352-4316. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S235243161630236X>>. Citado na página 40.
- ARFKEN, G.; WEBER, H. J. *Mathematical Methods for Physicists*. 6. ed. San Diego: Academic Press, Inc., 2005. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 41.
- AUDRETSCH, J.; SKARZHINSKY, V. D.; VORONOV, B. L. Elastic scattering and bound states in the aharonov-bohm potential superimposed by an attractive -2 potential. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 34, n. 2, p. 235, jan 2001. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/34/2/303>>. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 48.
- BAKKE, K. A semiclassical treatment of the interaction of non-uniform electric fields with the electric quadrupole moment of a neutral particle. *The European Physical Journal Plus*, Springer Berlin Heidelberg, v. 134, n. 2, p. 76, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 41.
- BAKKE, K. Coulomb-type interaction in the electric quadrupole moment system under the influence of a cut-off point. *Europhysics Letters*, EDP Sciences, IOP Publishing and Società Italiana di Fisica, v. 137, n. 5, p. 50002, may 2022. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/ac293d>>. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 46.
- BAKKE, K.; FURTADO, C. Analysis of the interaction of an electron with radial electric fields in the presence of a disclination. *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, v. 16, n. 11, p. 1950172, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1142/S021988781950172X>>. Citado na página 16.
- BAKKE, K.; FURTADO, C. Semiclassical treatment of an attractive inverse-square potential in an elastic medium with a disclination. *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, v. 17, n. 12, p. 2050178, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 44.
- BAKKE, K.; FURTADO, C. On an attractive inverse-square potential in an elastic medium with a screw dislocation. *International Journal of Modern Physics A*, v. 36, n. 08n09, p. 2150066, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1142/S0217751X21500664>>. Citado na página 44.

- BARAKAT, R.; ROSNER, R. The bounded quartic oscillator. *Physics Letters A*, v. 83, n. 4, p. 149–150, 1981. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960181908719>>. Citado na página 41.
- BAWIN, M.; COON, S. A. Neutral atom and a charged wire: From elastic scattering to absorption. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 63, p. 034701, Feb 2001. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.63.034701>>. Citado na página 44.
- BELL, R. P. The occurrence and properties of molecular vibrations with $v(x) = ax^4$. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, v. 183, n. 994, p. 328–337, 1945. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1945.0006>>. Citado na página 41.
- BENDER, C. M. et al. Complex wkb analysis of energy-level degeneracies of non-hermitian hamiltonians. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 34, n. 6, p. L31, feb 2001. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/34/6/101>>. Citado na página 15.
- BENDER, C. M.; JONES, H. F. Semiclassical calculation of the c operator in pt-symmetric quantum mechanics. *Physics Letters A*, v. 328, n. 2, p. 102–109, 2004. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037596010400790X>>. Citado na página 15.
- BENDER, C. M.; WU, T. T. Anharmonic oscillator. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 184, p. 1231–1260, Aug 1969. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.184.1231>>. Citado na página 38.
- BERRY, M.; ALMEIDA, A. O. de. Semiclassical approximation of the radial equation with two-dimensional potentials. *Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General*, IOP Publishing, v. 6, n. 10, p. 1451, 1973. Citado 5 vezes nas páginas 14, 34, 37, 40 e 43.
- BERRY, M. V.; MOUNT, K. Semiclassical approximations in wave mechanics. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 35, n. 1, p. 315, 1972. Citado 4 vezes nas páginas 14, 32, 34 e 37.
- BRACK, M.; BHADURI, R. K. *Semiclassical physics*. [S.l.]: CRC Press, 2018. Citado 7 vezes nas páginas 18, 26, 29, 35, 40, 43 e 47.
- BRILLOUIN, L. La mécanique ondulatoire de Schrödinger; une méthode générale de resolution par approximations successives. *Compt. Rend. Hebd. Seances Acad. Sci.*, v. 183, n. 1, p. 24–26, 1926. Citado na página 13.
- BUDACA, R. Harmonic oscillator potential with a sextic anharmonicity in the prolate -rigid collective geometrical model. *Physics Letters B*, v. 739, p. 56–61, 2014. ISSN 0370-2693. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269314007540>>. Citado na página 38.
- BUGANU, P.; BUDACA, R. Sextic potential for -rigid prolate nuclei. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, IOP Publishing, v. 42, n. 10, p. 105106, sep 2015. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0954-3899/42/10/105106>>. Citado na página 38.

CAMBLONG, H. E. et al. Renormalization of the inverse square potential. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 85, n. 8, p. 1590–1593, aug 2000. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.1590>>. Citado na página 46.

CASE, K. M. Singular potentials. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 80, p. 797–806, Dec 1950. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.80.797>>. Citado na página 44.

CASTELLANI, ; GONÇALVES, M.; SANTIAGO, A. Aproximação wkb e propagação de ondas em meios não-homogêneos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 15, 1993. Disponível em: <<https://www.sbfisica.org.br/rbef/pdf/vol15a06.pdf>>. Citado na página 16.

CHAN, S. I.; STELMAN, D. Some energy levels and matrix elements of the quartic oscillator. *Journal of Molecular Spectroscopy*, v. 10, n. 1, p. 278–299, 1963. ISSN 0022-2852. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022285263901759>>. Citado na página 38.

CHAN, S. I.; STELMAN, D.; THOMPSON, L. E. Quartic oscillator as a basis for energy level calculations of some anharmonic oscillators. *The Journal of Chemical Physics*, v. 41, n. 9, p. 2828–2835, 1964. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1726359>>. Citado na página 38.

COON, S. A.; HOLSTEIN, B. R. Anomalies in quantum mechanics: The $1/r^2$ potential. *American Journal of Physics*, American Association of Physics Teachers (AAPT), v. 70, n. 5, p. 513–519, may 2002. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.1456071>>. Citado na página 46.

CORNWALL, J.; TIKTOPOULOS, G. Semiclassical matrix elements for the quartic oscillator. *Annals of Physics*, v. 228, n. 2, p. 365–410, 1993. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491683710961>>. Citado na página 14.

DAS, A. et al. Quantum behavior of a charged particle in an axial magnetic field. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 70, p. 053408, Nov 2004. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.70.053408>>. Citado na página 16.

DAVYDOV, A.; HAAR, D. *Quantum Mechanics*. Pergamon Press, 1976. (International series in natural philosophy, v. 1). ISBN 9780080204383. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=OHYpAQAAMAAJ>>. Citado 3 vezes nas páginas 18, 19 e 22.

DELABAERE, E.; PHAM, F. Unfolding the quartic oscillator. *Annals of Physics*, Elsevier, v. 261, n. 2, p. 180–218, 1997. Citado na página 15.

DENSCHLAG, J.; UMSHAUS, G.; SCHMIEDMAYER, J. Probing a singular potential with cold atoms: A neutral atom and a charged wire. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 81, p. 737–741, Jul 1998. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.737>>. Citado na página 44.

DOREY, P.; MILLICAN-SLATER, A.; TATEO, R. Beyond the wkb approximation in -symmetric quantum mechanics. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 38,

n. 6, p. 1305, jan 2005. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/38/6/010>>. Citado na página 15.

DUNHAM, J. The wentzel-brillouin-kramers method of solving the wave equation. *Physical Review*, APS, v. 41, n. 6, p. 713, 1932. Citado na página 13.

ESSIN, A. M.; GRIFFITHS, D. J. Quantum mechanics of the $\frac{1}{x^2}$ potential. *American Journal of Physics*, American Physical Society, v. 74, p. 109–117, 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1119/1.2165248>>. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 46.

FRÖMAN, N.; FRÖMAN, P. O. *JWKB approximation*. [S.l.]: North-Holland Publishing Company Amsterdam, 1965. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 14.

GAUDREAU, P.; SLEVINSKY, R. M.; SAFOUHI, H. An asymptotic expansion for energy eigenvalues of anharmonic oscillators. *Annals of Physics*, v. 337, p. 261–277, 2013. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491613001528>>. Citado na página 16.

GIELEN, S.; ORITI, D.; SINDONI, L. Cosmology from group field theory formalism for quantum gravity. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 111, p. 031301, Jul 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.031301>>. Citado na página 15.

GOMES, J. R. About the wkb method according to n. froeman and po froeman. 1975. Citado na página 12.

GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. *Introduction to Quantum Mechanics*. 3. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2018. Citado 6 vezes nas páginas 21, 23, 25, 29, 31 e 40.

GUPTA, K. S.; RAJEEV, S. G. Renormalization in quantum mechanics. *Phys. Rev. D*, American Physical Society, v. 48, p. 5940–5945, Dec 1993. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.48.5940>>. Citado na página 46.

HAINZ, J.; GRABERT, H. Centrifugal terms in the wkb approximation and semiclassical quantization of hydrogen. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 60, p. 1698–1701, Aug 1999. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.60.1698>>. Citado 3 vezes nas páginas 14, 37 e 43.

HEISENBERG, W. Development of concepts in the history of quantum theory. *American Journal of Physics*, v. 43, n. 5, p. 389–394, 05 1975. ISSN 0002-9505. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.9833>>. Citado na página 12.

HEISENBERG, W. K. Uber quantentheoretische umdeutung kinematischer und mechanischer beziehungen. *Zeitschrift für Physik*, v. 33, p. 879–893, 1925. Citado na página 13.

HOLSTEIN, B. R.; SWIFT, A. R. Path integrals and the WKB approximation. *American Journal of Physics*, v. 50, n. 9, p. 829–832, 09 1982. ISSN 0002-9505. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.12750>>. Citado na página 14.

JEFFREYS, H. *Proc. London Math. Soc.*, (2)23, 428, 1923. Citado na página 12.

KEMBLE, E. C. A contribution to the theory of the bwk method. *Physical Review*, APS, v. 48, n. 6, p. 549, 1935. Citado na página 14.

- KEMBLE, E. C. The fundamental principles of quantum mechanics: with elementary applications. McGraw-Hill, 1937. Citado na página 14.
- KRAMERS, H. A. Wellenmechanik und halbzahlige quantisierung. *Z. Physik*, Springer, v. 39, p. 828–840, 1926. Citado na página 13.
- LAANE, J. Experimental determination of vibrational potential energy surfaces and molecular structures in electronic excited states. *The Journal of Physical Chemistry A*, ACS Publications, v. 104, n. 33, p. 7715–7733, 2000. Citado na página 38.
- LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. Elsevier Science, 1981. (Course of Theoretical Physics). ISBN 9780080503486. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=SvdoN3k8EysC>>. Citado 4 vezes nas páginas 19, 23, 44 e 48.
- LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Mechanics: Volume 1 (Course of Theoretical Physics)*. 3. ed. [s.n.], 1976. ISBN 0750628960. Disponível em: <<http://www.worldcat.org/isbn/0750628960>>. Citado na página 38.
- LANGER, R. E. On the connection formulas and the solutions of the wave equation. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 51, p. 669–676, Apr 1937. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.51.669>>. Citado 5 vezes nas páginas 13, 14, 34, 37 e 40.
- LIOUVILLE, J. *Journal de Mathematiques*, v. 2, 16, 418, 1837. Citado na página 12.
- LIVERTS, E. Z.; MANDELZWEIG, V. B.; TABAKIN, F. Analytic calculation of energies and wave functions of the quartic and pure quartic oscillators. *Journal of Mathematical Physics*, v. 47, n. 6, p. 062109, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.2209769>>. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 41.
- LÜTZEN, J. Joseph liouville's contribution to the theory of integral equations. *Historia Mathematica*, Elsevier, v. 9, n. 4, p. 373–391, 1982. Citado na página 12.
- MAIZ, F.; ALFAIFY, S. Quantum anharmonic oscillator: The airy function approach. *Physica B: Condensed Matter*, v. 441, p. 17–20, 2014. ISSN 0921-4526. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S092145261400074X>>. Citado na página 42.
- MARIZ, A. H.; OLIVEIRA, P. M. Aproximações analíticas para os níveis de energia do poço de poten. *Revista de Ensino de Física*, v. 7, n. 1, 1985. Disponível em: <<http://www.sbfisica.org.br/rbef/pdf/vol07a03.pdf>>. Citado na página 16.
- MERZBACHER, E. *Quantum Mechanics*. Wiley, 1998. ISBN 9780471887027. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=6Ja_QgAACAAJ>. Citado 6 vezes nas páginas 13, 18, 19, 22, 23 e 32.
- MOREHEAD, J. J. Asymptotics of radial wave equations. *Journal of Mathematical Physics*, v. 36, n. 10, p. 5431–5452, 1995. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.531270>>. Citado na página 14.

OCOLA, E. J.; LAANE, J. Anomeric effect in five-membered ring molecules: Comparison of theoretical computations and experimental spectroscopic results. *The Journal of Physical Chemistry A*, ACS Publications, v. 125, n. 1, p. 327–337, 2020. Citado na página 38.

OU, Y.; CAO, Z.; SHEN, Q. Exact energy eigenvalues for spherically symmetrical three-dimensional potential. *Physics Letters A*, v. 318, n. 1, p. 36–39, 2003. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037596010301404X>>. Citado na página 17.

PAULI, W. Über das wasserstoffspektrum vom standpunkt der neuen quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*, Springer, v. 36, n. 5, p. 336–363, 1926. Citado na página 13.

RADUTA, A. A.; BUGANU, P. Application of the sextic oscillator with a centrifugal barrier and the spheroidal equation for some x(5) candidate nuclei. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, IOP Publishing, v. 40, n. 2, p. 025108, jan 2013. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0954-3899/40/2/025108>>. Citado na página 38.

RAYLEIGH, L. *proc. Roy. Soc (London)*, A86, 207, 1912. Citado na página 12.

ROSA, P. S. Louis de broglie e as ondas de matéria. *Campinas: Unicamp*, 2004. Citado na página 12.

SAKURAI, J. J. *Modern quantum mechanics; rev. ed.* Reading, MA: Addison-Wesley, 1994. ISBN 0201539292. Disponível em: <<https://cds.cern.ch/record/1167961>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 23.

SANTIAGO, A.; RODRIGUES, H. Efeitos de amortecimento sobre um oscilador x^3 . *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 27, p. 245–249, 2005. Citado na página 38.

SCHIFF, L. I. *Quantum mechanics*. 3. ed., 24. print. ed. New York: McGraw-Hill, 1987. (International series in pure and applied physics). ISBN 978-0-07-085643-1. Citado 4 vezes nas páginas 13, 22, 23 e 32.

SCHRÖDINGER, E. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Physical review*, APS, v. 28, n. 6, p. 1049, 1926. Citado na página 12.

SILVA, A. A. A.; ANDRADE-NETO, A. Cálculo da taxa de ionização do átomo de hidrogênio em campo elétrico uniforme via método wkb. *Revista Brasileira de Ensino de Física [online]*, v. 32, n. 2, p. 2306, 2010. Citado na página 16.

SILVA, A. A. A.; ANDRADE-NETO, A. Cálculo da taxa de ionização por campo de um átomo próximo a uma superfície metálica: aplicação ao microscópio iônico de campo. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 34, 2012. Citado na página 16.

TKACHUK, V. M. Binding of neutral atoms to ferromagnetic wire. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 60, p. 4715–4717, Dec 1999. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.60.4715>>. Citado na página 44.

VELOSO, J. d. C.; BAKKE, K. Point charge subject to an attractive inverse-square-type potential and anharmonic-type potentials. *Universe*, v. 9, n. 3, 2023. ISSN 2218-1997. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2218-1997/9/3/151>>. Citado 3 vezes nas páginas 41, 43 e 48.

VIEIRA, S.; BAKKE, K. Semiclassical analysis of the interaction of the magnetic quadrupole moment of a neutral particle with axial electric fields in a uniformly rotating frame. *Foundations of Physics*, Springer, v. 50, p. 735–748, 2020. Citado na página 16.

WALD, S. S.; LU, P. Application of the higher order modified WKB method to the Lennard-Jones potential. *The Journal of Chemical Physics*, v. 61, n. 11, p. 4680–4685, 08 2003. ISSN 0021-9606. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1681790>>. Citado na página 16.

WENTZEL, G. Eine verallgemeinerung der quantenbedingungen für die zwecke der wellenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, Springer, v. 38, n. 6, p. 518–529, 1926. Citado na página 13.

XU, Z.; MA, M.; LIU, P. Self-energy-modified poisson-ernst-planck equations: Wkb approximation and finite-difference approaches. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 90, p. 013307, Jul 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.013307>>. Citado na página 15.

YI, H. S.; LEE, H. R.; SOHN, K. S. Semiclassical quantum theory and its applications in two dimensions by conformal mapping. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 49, p. 3277–3282, May 1994. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.49.3277>>. Citado na página 14.

ZWAAN, A. Intensitäten im ca-funkenspektrum. *Academisch Proefschrift*, 1929. Citado na página 14.