Universidade Federal
de São João del-Rei

DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS NATURAIS

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Daniel Bento da Silva

Espalhamento elétron/partícula α

Uma Abordagem Não Perturbativa Aproximada

São João del-Rei - MG

2025

Daniel Bento da Silva

Espalhamento elétron/partícula α

Uma Abordagem Não Perturbativa Aproximada

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de São João del-Rei, em associação ampla com as Universidades Federais de Alfenas e Lavras, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física de partículas
Orientador: André Luiz Mota

São João del-Rei – MG
2025

Este trabalho é dedicado aos meus colegas de classe e aos meus queridos pais.

RESUMO

Neste trabalho, pretende-se descrever modelos de espalhamento de partículas α incididas por elétrons, a partir dessas descrições, foi descoberto que, através da interação entre partículas armadilhadas a laser, em um sistema análogo a baixas energias, foi possível obter, em condições adequadas, estados em que as partículas α interagentes são degenerescentes em relação a energia; partindo desses resultados, foi proposto um modelo de descrição do fator de forma de espalhamento esperando-se encontrar como resposta, um pico de ressonância no qual possa explicar se os experimentos de espalhamento feitos pela equipe de Kegel em 2023 estão relacionados a esses fenômenos de degenerescência gerados pela interação de partículas.

Palavras-chave: Colisões. Poço infinito com interação. Fator de forma. Baixas-energias.

ABSTRACT

In this work, we aim to describe scattering models of α particles incident on electrons. From these descriptions, it was discovered that, through the interaction between laser-trapped particles, in a system analogous to low energies, it was possible to obtain, under appropriate conditions, states in which the interacting α particles are degenerate with respect to energy. Based on these results, a model describing the scattering form factor was proposed, hoping to find a resonance peak in response that could explain whether the scattering experiments carried out by Kegel's team in 2023 are related to these degeneracy phenomena generated by particle interactions.

Keywords: Collisions. Infinite well with interaction. Form factor. Low energies.

Ficha catalográfica elaborada pela Divisão de Biblioteca (DIBIB)
e Núcleo de Tecnologia da Informação (NTINF) da UFSJ,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

d111 da Silva, Daniel.
Espalhamento elétron/partícula alfa : UmaAbordagem Não Perturbativa Aproximada / Daniel da Silva ; orientador André Luiz Mota. -- São João del Rei, 2025.
96 p.

Dissertação (Mestrado - Física) -- Universidade Federal de São João del-Rei, 2025.

1. espalhamento de partículas alfa. 2. interação entre partículas. 3. descrição de fatores de forma. I. Luiz Mota, André , orient. II. Título.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 10

1.1 OBJETIVOS 13

1.1.1 Objetivo Geral 13

1.1.2 Objetivos Específicos 13

2 REVISÃO DE MECÂNICA QUÂNTICA 14

2.1 Mecânica analítica 14

2.2 Mecânica hamiltoniana 16

2.3 Teoria de Hamilton-Jacobi 18

2.4 Aplicação da mecânica hamiltoniana em relatividade 19

2.5 Mecânica Quântica 20

2.6 Notação de dirac 23

2.6.1 Alguns exemplos de aplicação de operadores 25

2.6.2 Produto interno 26

2.7 Teorias de perturbação 27

3 INTERAÇÕES ENTRE ELÉTRONS E PARTÍCULAS α 32

3.1 Descrição quântica do modelo partícula α interagente 32

3.2 Justificativa dos critérios assumidos ao longo da descrição 33

3.3 Partícula armadilhada em um potencial harmônico de 3 dimensões 34

3.4 Sistema de partícula interagente confinadas 34

3.5 Degenerescência dependente da intensidade da interação 36

3.6 Função de onda da partícula armadilhada em um potencial tipo poço infinito com interação em 1 dimensão 38

3.7 Função de onda da partícula armadilhada em um potencial tipo poço infinito com interação em 3 dimensões 41

3.8 Função de onda da partícula em poço de potencial infinito esférico 43

3.9 Conservação de energia e momento relativísticos do átomo de hélio no estudo das interações entre partículas 48

3.9.1 Obtenção da massa faltante (m_{miss}) 50

4 ESPALHAMENTO DE PARTÍCULAS α 52

4.1 Modelo adotado para o projeto 52

4.2 Seção de choque 53

4.3 Fator de forma da amplitude de transição 56

4.4 Resultados Numéricos 59

5 CONCLUSÃO 66

REFERÊNCIAS 68

APÊNDICE A - Partícula em poço de potencial harmônico esférico com interação . 69

APÊNDICE B - Partícula em poço de potencial harmônico esférico com interação . 72

ANEXO A - Solução: Poço de potencial infinito em uma dimensão (1D) 74

ANEXO B - Solução: Oscilador Harmônico Quântico 77

ANEXO C - Momento angular na mecânica quântica 83

ANEXO D - Relações para conversão de coordenadas cartesianas para esféricas . . 89

ANEXO E - Momento angular em coordenadas esféricas 91

ANEXO F - Solução do oscilador harmônico quântico esférico 94

1 INTRODUÇÃO

O estudo da interação quântica, relativística ou não-relativística, entre muitos corpos, é um problema que tem considerável interesse acadêmico dentro do contexto da Teoria Quântica de Campos. Técnicas no tratamento a temperatura zero, temperatura finita, com diferentes potenciais químicos, dentro e fora do equilíbrio termodinâmico, embora aproximadas, foram desenvolvidas ao longo de quase um século da formulação de Heisenberg da Mecânica Quântica. Já o estudo de sistema de poucos corpos (few-body systems), que investiga o comportamento de sistemas clássicos ou quânticos de um pequeno número de constituintes, dispõe-se de outras ferramentas, como a mecânica quântica e a mecânica quântica relativística. Sistemas de poucos corpos usualmente são bons candidatos a possíveis soluções rigorosas (ainda que aproximadas), embora outras abordagens menos rigorosas possam ainda levantar novas ideias e ferramentas a serem aplicadas ao estudo do sistema.

Em um exemplo extremamente bem sucedido do estudo de sistemas de poucos corpos, M. Olshanii (Olshanii,1988) estudou a colisão entre dois átomos na presença de um potencial externo confinante. Olshanii obteve uma expressão para a amplitude de espalhamento efetiva em quase-1D entre dois átomos ultrafrios confinados em uma armadilha óptica, mostrando que a interação entre eles corresponde a uma interação efetiva tipo delta de Dirac (potencial de Huang (Huang, 1987) de intensidade controlada pelo fenômeno da Ressonância de Feshbach (Wilczech, 2006). O fenômeno de ressonância de Feshbach é uma característica de sistemas de muitos corpos, que ocorre em colisões entre dois átomos lentos que formam uma ligação temporária formando um composto instável de tempo de vida curto, a chamada ressonância. O estudo de Olshanii provê, dessa maneira, um excelente exemplo em que o estudo de um sistema com poucos constituintes (dois átomos colidindo e um potencial confinante) tem influência significativa no estudo de sistemas de muitos corpos, fornecendo a descrição da interação entre os constituintes de gases de átomos ultrafrios armadilhados.

Em uma contribuição anterior (Guimarães e Miranda, 2018), foram estudados os estados quânticos a baixas energias de um sistema constituído por uma partícula sujeita a um potencial confinante, descrita por sua função de onda, e uma partícula alvo, descrita pelo potencial de Huang (Huang, 1987) em um procedimento não perturbativo. Como consequência, foram obtidos os autoestados do sistema interagente, mostrando como as autofunções se deformam e como os níveis de energia se modificam em função da intensidade da interação entre as partículas. Em particular, mostrou-se a existência de uma ressonância que ocorre quando a intensidade da interação é tal que as energias dos primeiro e segundo estados se tornam degeneradas. Essas funções de ondas para o sistema não interagente podem ser usadas como uma base de auto-funções para a expansão das soluções do problema de espalhamento em gases ultrafrios armadilhados (Olshanii, 1988; Miranda, 2018). Nesse caso, a expansão não é realizada apenas sobre os estados cuja energia é limitada pela energia total disponível na colisão, mas sobre todos os estados, que emergem como estados virtuais durante o problema de espalhamento.

Obviamente, a conservação total de energia-momento deve ser observada para a solução final, uma superposição de auto-estados da base, mas não necessariamente nos estados intermediários que surgem na solução do problema, uma característica comum bem conhecida no contexto do estudo de sistemas de muitos corpos.

No presente trabalho, estudamos uma variação do problema de colisão com partículas armadilhadas. Inspirados por resultados recentes do espalhamento relativístico de elétrons em partículas α, um problema que descreveremos a seguir, vamos estudar a colisão de núcleons confinados por potenciais armadilhantes (poço de potencial infinito) com um alvo de menores dimensões (elétron) em um Hamiltoniano simplificado, em que o potencial Coulombiano é substituído pelo potencial de Huang (Huang, 1987). Dessa forma, a solução empregada na determinação dos estados quânticos de átomos armadilhados colidindo com um alvo fixo na origem (Guimarães e Miranda, 2018) será estendida para o sistema mencionado acima.

Em uma publicação recente, Kegel e colaboradores (Kegel, 2023) estudaram o núcleo de hélio (partícula α) com foco em seus estados excitados, particularmente a transição do estado fundamental (O_1^+) para o primeiro estado excitado (O_2^+). Apesar de ser um sistema relativamente simples, com dois prótons e dois nêutrons, os estados excitados da partícula α apresentam desafios entre as previsões teóricas e as medições experimentais. A colaboração liderada por Kegel mediu a transição supracitada usando espalhamento inelástico de elétrons, melhorando significativamente a precisão de medições anteriores e confirmando uma discrepância histórica: abordagens teóricas, particularmente a teoria de campo efetivo quiral (χEFT), têm tido sucesso na descrição de propriedades a baixa energia dos núcleons, incluindo o estado fundamental da partícula α. No entanto, a transição para o estado O_2^+ revelou-se mais desafiadora, com discrepâncias entre cálculos teóricos e dados experimentais. O estudo de Kegel e colaboradores, que mediram o fator de forma da transição em uma ampla faixa de valores Q^2 com incertezas reduzidas, enfatiza a importância de *compreender* o fator de forma $F(Q^2)$, uma medida da distribuição de carga dentro do núcleo, para obter insights sobre a estrutura dos estados excitados. Assim, nesse trabalho, estudarmos um modelo simplificado do sistema descrito em (Kegel,2023), contudo considerando os componentes essenciais que podem ser relevantes na determinação do fator de forma, com o objetivo de se determinar o fator de forma da supracitada transição a partir dos autoestados do núcleo interagente e de suas possíveis rotas de decaimento para o estado O_2^+ do núcleo de Hélio.

Como no problema de gases ultrafrios confinados, as autofunções interagentes a serem determinadas podem prover uma base adequada de autofunções nas quais o problema de espalhamento pode ser melhor desenvolto. Para esse propósito, faremos as seguintes hipóteses simplificadoras: Os quatro núcleons estão confinados por um poço de potencial infinito. Será considerado implicitamente a interação entre núcleons estará descrita por uma aproximação de campo médio, uma vez que a interação entre as funções de onda relacionada a cada núcleon só estará considerada indiretamente através do potencial de confinamento com simetria esférica; A interação entre uma partícula incidente (elétron) e os prótons (núcleons que interagem

eletromagneticamente com o elétron) será descrita como uma interação tipo delta localizada no centro da distribuição esférica. Desta forma, as autofunções dos prótons serão deformadas em função da intensidade do acoplamento entre a partícula confinada e o alvo, a exemplo do problema de colisões de átomos em gases ultrafrios armadilhados; nesse sentido, uma grande hipótese simplificadora consiste na suposição de que a interação entre os prótons e o elétron é puntual. Futuramente, uma extensão finita do alvo poderá também ser incluída, utilizando-se a abordagem desenvolvida em (Miranda, 2018).

O fator de forma do espalhamento elétron-partícula α é determinado a partir das amplitudes de transição entre os auto-estados do sistema interagente e do primeiro estado excitado, O_2^+, do nucleon. Para isso, iremos determinar os auto-estados para prótons confinados em função da intensidade do acoplamento (energia-momento) com o alvo (elétron) utilizando o ansatz descrito em (Guimarães e Miranda, 2018), obtido em um processo não perturbativo (semi-computacional). Nesse procedimento, tanto as auto-estados quanto as auto-energias do sistema são determinados em função do quadrivetor energia momento trocado entre elétron e partícula α.

A partir dos auto-estados determinados em função da energia-momento trocados, poderemos determinar o comportamento das autofunções e as autoenergias do sistema interagente, também em função da intensidade de interação. A seção de choque diferencial para o espalhamento mencionado será obtida das amplitudes de transição nas diversas rotas de decaimento até o primeiro estado excitado do núcleo de Hélio. Finalmente, será possível verificar se o surgimento de uma ressonância de monopólo, experimentalmente verificada no espalhamento elétron-partícula α, ocorre devido ao mecanismo de surgimento de uma degenerescência de energia para dada intensidade de interação, a exemplo do que ocorre em colisões de gases ultrafrios armadilhados.

1.1 OBJETIVOS

Nas seções abaixo estão descritos o objetivo geral e os objetivos específicos deste trabalho.

1.1.1 Objetivo Geral

Nosso proposito é mostrar a necessidade do fator de forma para o estudo do espalhamento de partículas particularmente elétrons incidindo átomos de hélio desenvolvendo um modelo teórico do fator de forma em função da massa faltante, compará-lo com os dados experimentais de Kegel e posteriormente mostrar que os resultados aqui presentes podem explicar os efeitos de ressonância como causados por efeitos de degenerescência de estado.

1.1.2 Objetivos Específicos

- Rever os conceitos e soluções analíticas da mecânica quântica (poço infinito e oscilador harmônico quântico e colisões relativísticas).
- Obter os auto-estados e auto-energias de um elétron após uma colisão em um poço de potencial infinito interagindo com um potencial tipo Huang em sistemas 1D e 3D (partícula dentro de uma caixa).
- Obter os auto-estados e auto-energias de um elétron após uma colisão em um poço de potencial infinito esférico interagindo com um potencial tipo Huang.
- Descrever o espalhamento relativístico entre um elétron incidente e uma partícula α em termos das relações de conservação de energia e momento linear relativísticos.(cálculo da massa faltante)
- Fazer uma descrição do fator de forma em função da massa faltante

2 REVISÃO DE MECÂNICA QUÂNTICA

Uma das características mais marcantes da mecânica quântica é a impossibilidade de se medir, em certas circunstâncias, certas grandezas como posição, momento e momento angular com precisão infinita. Isso difere do que se espera de um sistema determinístico, uma vez que a natureza dos sistemas estudados é probabilística. Ao observar como essas probabilidades influenciam o sistema, surgem propriedades menos intuitivas do que as vistas na mecânica clássica, como o "comportamento ondulatório da matéria". Isso evidencia que essas distribuições de probabilidade se comportam como ondas. No entanto, para formalizar essa dinâmica de ondas, é necessário estruturar as ideias mais básicas da mecânica analítica.

2.1 Mecânica analítica

A mecânica analítica é essencialmente a formalização da descrição da mecânica newtoniana, contudo sem a necessidade de considerar as interações de vínculos do sistema, que são restrições geométricas ou cinemáticas ao movimento em estudo (por exemplo, força normal, força de tração etc.). Sem essas restrições, o movimento dos corpos é descrito com base nas energias do sistema composto por um ou mais corpos.
A função que descreve os estados de energia é conhecida como lagrangiana e é definida como:

$$L = T - V \tag{2.1}$$

- T é a energia cinética do sistema para um sistema de n partículas é expressada pela equação a seguir:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{m_i v_i^2}{2} \tag{2.2}$$

- V é a energia potencial de um sistema de n partículas.

O propósito físico consiste em representar de forma matemática a equação do movimento do sistema, ou seja, solucionar as equações diferenciais nas quais são influenciadas pela posição, velocidade e aceleração das partículas; contudo, a função lagrangeana não consegue indicar como essas quantidades mudam ao longo do tempo. Para resolver esse problema, considera-se um elemento mediador dessa variação denominado ação S, que se define como:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt \tag{2.3}$$

- S é a ação;
- L é a lagrangeana;
- t é a variável tempo.

A ação S é chamada de funcional linear, considerada uma relação mais fundamental da mecânica já que está associada à maneira que as energias da função lagrangiana variam no tempo; uma relação extremamente importante para determinar as equações de movimento a partir da equação L considera-se que a ação S sempre seja em um estado estacionário e, portanto, $\frac{dS}{d\varepsilon} = 0$.

Considerando $q(t)$ como uma coordenada de posição genérica (ou canônica) e $\dot{q}(t)$ como a velocidade, temos L dependente dessas variáveis, logo:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q(t), \dot{q}(t), t)\, dt \tag{2.4}$$

No caso considerado a lagrangiana L não depende explicitamente do tempo, podemos escrever, pois:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q(t), \dot{q}(t))\, dt \tag{2.5}$$

Para encontrar o estado estacionário do funcional S, aplica-se a regra da cadeia:

$$\frac{dS}{d\varepsilon} = \frac{\partial S}{\partial q} \cdot \frac{\partial q}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial S}{\partial \dot{q}} \cdot \frac{\partial \dot{q}}{\partial \varepsilon} = 0 \tag{2.6}$$

Para desenvolver essa equação, considera-se uma variação infinitesimal de $q(t)$ e $\dot{q}(t)$ da maneira a seguir:

$$q'(t) = q(t) + \varepsilon \eta(t) \tag{2.7}$$

$$\dot{q}'(t) = \dot{q}(t) + \varepsilon \dot{\eta}(t) \tag{2.8}$$

Em que consideramos a função $\eta(t)$ como contínua em $\mathbf{R}$ e com $\eta(t_2) = \eta(t_1) = 0$, já ε será um valor também contínuo em $\mathbf{R}$ que tenderá a zero durante a análise do problema.

Agora basta derivarmos o funcional S com $q'(t)$ e $\dot{q}'(t)$ compondo suas variáveis, a equação desenvolve para:

$$\frac{dS}{d\varepsilon} = \frac{\partial S}{\partial q'} \cdot \frac{\partial q'}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial S}{\partial \dot{q}'} \cdot \frac{\partial \dot{q}'}{\partial \varepsilon} = 0 \tag{2.9}$$

$$\frac{dS}{d\varepsilon} = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial q'} \cdot \frac{\partial q'}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'} \cdot \frac{\partial \dot{q}'}{\partial \varepsilon} dt = 0 \tag{2.10}$$

$$\frac{dS}{d\varepsilon} = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial q'} \cdot \eta(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'} \cdot \dot{\eta}(t)\, dt = 0 \tag{2.11}$$

$$\frac{dS}{d\varepsilon} = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial q'} \cdot \eta\,(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'} \cdot \dot{\eta}\,(t)\,dt = 0 \tag{2.12}$$

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial q'} \cdot \eta\,(t)\,dt + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'} \cdot \eta\,(t)|_{t_1}^{t_2} - \int_{t1}^{t2} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}'}\right) \cdot \eta\,(t)\,dt = 0 \tag{2.13}$$

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial q'} \cdot \eta\,(t) - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}'}\right) \cdot \eta\,(t)\,dt = 0 \tag{2.14}$$

Como a função $\eta\,(t)$ trata-se de uma função genérica qualquer, toma-se o caso que $\eta\,(t)$ sempre é positivo no intervalo t_2 e t_1, a única solução possível para essa integral é:

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = 0 \tag{2.15}$$

Tal solução vale para qualquer caso do estado estacionário.
Essa é a equação de Euler-Lagrange, no caso acima, foi demonstrado como descrever a dinâmica de apenas uma partícula, para calcular em um sistema de n partículas usa-se sem perda de generalidade, considerando o somatório como formados por termos linearmente independentes:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0 \tag{2.16}$$

2.2 Mecânica hamiltoniana

Uma das limitações da mecânica lagrangiana é que para resolver as n equações diferenciais é solucionar equações de segunda ordem, tal processo torna-se muito trabalhoso, porque L é definida em função de q_i e $\dot{q}_i$, pode-se resolver esse problema convertendo essa função para a hamiltoniana que gera 2n equações diferenciais de primeira ordem eliminando assim os termos $\dot{q}_i$, a partir da relação $s_i = \dot{q}_i$, na formulação hamiltoniana a lagrangiana torna-se $L(q_i, s_i)$:

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial s_i}\right) = 0 \tag{2.17}$$

Considerando $i = 1, 2, 3 \ldots n$ e $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ e passando por uma transformação de Legendre a hamiltoniana descreve-se como:

$$H = \sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t) \tag{2.18}$$

É importante de salientar que a transformação de Legendre só é considerada válida quando o determinante da matriz hessiana W é igual a zero; lembrando a matriz hessiana é a matriz quadrada composta pelas derivadas parciais de segunda ordem de uma função multivariável, em

que cada elemento dessa matriz é escrito como:

$$w_{ij} = \frac{\partial^2 L}{\partial q_i \partial q_j} \tag{2.19}$$

Para o caso da equação 2.19, w_{ij} seria o elemento da linha i e coluna j da matriz. Para resolver as equações diferenciais de Hamilton (funções hamiltonianas) utiliza o princípio da derivada da função implícita:

$$L = \sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - H\left(q_i, p_i, t\right) \tag{2.20}$$

A partir da lagrangiana toma-se sua diferencial:

$$dL = \sum_{i=1}^{n} dp_i \dot{q}_i + p_i d\dot{q}_i - \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt\right) \tag{2.21}$$

$$\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt\right) = \sum_{i=1}^{n} dp_i \dot{q}_i + p_i d\dot{q}_i - \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt\right) \tag{2.22}$$

Através das relações obtidas pela lagrangiana, assim como foi feito na equação 2.18 , substitui-se em 2.23:

$$\sum_{i=1}^{n} \left(\dot{p}_i dq_i + p_i d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt\right) = \sum_{i=1}^{n} dp_i \dot{q}_i + p_i d\dot{q}_i - \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt\right) \tag{2.23}$$

Somando os termos do mesmo lado da equação obtém-se:

$$\sum_{i=1}^{n} \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i}\right) dq_i + \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} - \dot{q}_i\right) dp_i + \left(\frac{\partial L}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial t}\right) dt = 0 \tag{2.24}$$

Já que q_i, p_i e t são consideradas variáveis independentes, conclui-se que as funções hamiltonianas se expressam dessa forma:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{2.25}$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{2.26}$$

$$\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial t} \tag{2.27}$$

Uma das principais razões de conversão para o sistema de Hamilton, tem, diferente da

formulação Lagrangiana que mantem seu valor constante não importando quais tipos de coordenadas sejam adotadas, hamiltonianas são funções que mudam de acordo com o tipo de coordenada escolhida, assim sendo, podemos definir um novo sistema de coordenadas P_i, $\dot{Q}_i$ e K, tal que:

$$dS = \int_{t_1}^{t_2} dL(q,\dot{q},t)\,dt = 0 \tag{2.28}$$

$$dS = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=0}^{n} \left(dp_i\dot{q}_i + p_i d\dot{q}_i - \frac{dH}{dt} \right) dt = 0 \tag{2.29}$$

$$dS' = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=0}^{n} \left(dP_i\dot{Q}_i + P_i d\dot{Q}_i - \frac{dK}{dt} \right) dt = 0 \tag{2.30}$$

Isso indica que essas duas lagrangianas diferem de uma derivada de uma função geradora dependente do tempo ϕ já que por definição $dq(t_1) = dq(t_2) = dp(t_1) = dp(t_2)$.

$$\sum_{i=0}^{n} p_i\dot{q}_i - P_i\dot{Q}_i \; - (H-K) = \frac{d\phi}{dt} \tag{2.31}$$

Analisa-se a variação infinitesimal da função geradora e obtém-se:

$$d\phi = \sum_{i=0}^{n} p_i dq - P_i dQ_i - (H-K)dt \tag{2.32}$$

2.3 Teoria de Hamilton-Jacobi

Como é possível escolher qualquer sistema de coordenadas, optemos por escolher um em que $K = 0$, logo:

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \tag{2.33}$$

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \tag{2.34}$$

Chamando a função ϕ de S (que estará relacionado à ação) conclui-se que:

$$\dot{P}_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} \tag{2.35}$$

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial S}{\partial p_i} \tag{2.36}$$

$$P_i = \alpha_i \tag{2.37}$$

$$Q_i = \beta_i \tag{2.38}$$

Em que α_i e β_i são constantes, e a equação de Hamilton-Jacobi é definida a partir do termo de derivada implícita no tempo da função geradora ou seja:

$$H\left(q_1, q_2, \cdots, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \frac{\partial S}{\partial q_2}, \ldots, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{2.39}$$

Considera-se que a hamiltoniana é definida em função das coordenadas q_n e P_n e será muito útil para a descrição quântica das partículas relativísticas como será visto a seguir.

2.4 Aplicação da mecânica hamiltoniana em relatividade

Ao descrever um sistema relativístico, deve-se ter em mente que, dentro de referenciais inerciais, intervalo espaço-temporal é constante, logo, uma possível descrição lagrangiana deve ser definida proporcional ao intervalo de espaço-tempo, portanto:

$$S[x(t)] \propto \int_A^B \sqrt{c^2 dt^2 - dx^2} \tag{2.40}$$

$$S[x(t)] = \alpha \int_A^B \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} c dt \tag{2.41}$$

Para encontrarmos o parâmetro α podemos usar termos aproximados da função $S[x(t)]$ (series de Taylor) para velocidades muito pequenas em relação a velocidade da luz:

$$S[x(t)] \cong \alpha \int_A^B \left(1 - \frac{v^2}{2c^2}\right) c dt \tag{2.42}$$

Por razões de facilitação de cálculos, a aproximação da lagrangiana é descrita como igual a energia cinética clássica a menos de uma constante, logo $\alpha = -mc^2$:

$$S[x(t)] \cong \int -mc^2 + \frac{mv^2}{2} dt \tag{2.43}$$

Portanto, a ação relativística é descrita como:

$$S[x(t)] = -mc^2 \int_A^B \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} dt \tag{2.44}$$

Consequentemente, temos a lagrangiana do sistema relativístico escrita como:

$$L = -mc^2\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} \tag{2.45}$$

A conversão da lagrangiana em hamiltoniana é tida através da manipulação a seguir:

$$p = \frac{\partial L}{\partial v} = \frac{mv}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \tag{2.46}$$

$$E = H = pv - L = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \tag{2.47}$$

Realizando a razão entre o momento e a energia pode-se concluir que a velocidade é:

$$v = \frac{pc^2}{E} \tag{2.48}$$

Que também pode ser encontrada através da manipulação da equação do momento relativístico:

$$p^2 - \frac{p^2v^2}{c^2} = m^2v^2 \tag{2.49}$$

$$v = \frac{pc^2}{\sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}} \tag{2.50}$$

Comparando as diferentes equações das velocidades temos que a energia relativística é:

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \tag{2.51}$$

Essa relação será útil para o estudo de partículas quânticas nas próximas seções.

2.5 Mecânica Quântica

Durante o início do século XX, diversos experimentos com partículas subatômicas mostraram como seus comportamentos físicos variavam consideravelmente com relação à mecânica clássica. A medição de suas grandezas muitas vezes não poderiam ser feitas com certa precisão; posição, momento e rotação poderiam apenas ser determinadas probabilisticamente, a energia ora é transportada continuamente através de ondas, ora é transportada de maneira agregada por corpúsculos, tudo dependia do tipo de experimento realizado; a chamada dualidade onda-partícula que por muito tempo não pode ser descrita fisicamente de forma satisfatória até os trabalhos de Werner Heisenberg serem publicados, neles encontram-se uma importante relação obtida entre a

mecânica hamiltoniana e a equação de Hamilton-Jacobi vista a pouco.

$$H\left(q_1, q_2, \cdots, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \frac{\partial S}{\partial q_2}, \ldots, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{2.52}$$

De certa forma, para os casos estudados, a hamiltoniana não depende implicitamente do tempo, isso sugere que ação S pode ser escrita como:

$$S = W(x, y, z) - Et \tag{2.53}$$

Observa-se que o vetor da derivada parcial da ação no tempo é perpendicular a superfície S constante, logo podemos associar esse vetor a uma velocidade de fase de uma onda matemática relacionada ao movimento de partículas do sistema.

$$p = \nabla \mathrm{W} \tag{2.54}$$

$$\frac{p^2}{2m} + V = E \tag{2.55}$$

$$p = \sqrt{2m(E - V)} \tag{2.56}$$

$$\nabla \mathrm{W} = \sqrt{2m(E - V)} \tag{2.57}$$

$$Edt = dW = \nabla \mathrm{W} dl = \sqrt{2m(E - V)} dl \tag{2.58}$$

$$u = \frac{dl}{dt} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}} \tag{2.59}$$

Isso significa que a ação S pode ser descrita como uma função que possui um comportamento ondulatório, logo, podemos descrever sistemas microscópicos compostos por corpúsculos (partículas) por "ondas matemáticas", portanto se considerarmos a dinâmica de partícula como um processo ondulatório verdadeiro e o comportamento pela equação da onda temos:

$$\Psi = e^{-\frac{iS}{\hbar}} = e^{-\frac{i}{\hbar}[w(x,y,z) - Et]} \tag{2.60}$$

$$\nabla^2 \Psi - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial^2 t} = 0 \tag{2.61}$$

Por conseguinte, fazendo as manipulações corretas chegamos nas equações:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{2.62}$$

Se aplicarmos os operadores da equação e separando os fatores dependentes do tempo temos:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2(e^{\frac{i}{\hbar}w}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}) + V(e^{\frac{i}{\hbar}w}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}) = i\hbar\frac{\partial\left(e^{\frac{i}{\hbar}w}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\right)}{\partial t} \tag{2.63}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2(e^{\frac{i}{\hbar}w})\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + V(e^{\frac{i}{\hbar}w})\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = E(e^{\frac{i}{\hbar}w})\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{2.64}$$

Chamando $\psi = e^{\frac{i}{\hbar}w}$, o nosso estado estacionário (não depende do tempo) chegamos à conclusão:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \tag{2.65}$$

Essas são as equações de Schrodinger dependente e independente do tempo, respectivamente, Werner Heisenberg chegou à conclusão de que essas são as equações que descrevem o movimento de partículas subatômicas assumindo que seus comportamentos estão associados a um processo ondulatório verdadeiro e não apenas matemático.

Agora a pergunta que deve ser feita é o que está ondulando? Atualmente compreende-se essa ondulação do sistema como uma das características da natureza probabilística do sistema, isto é, podemos apenas medir a possibilidade de tais eventos ocorrerem; uma das maneiras de entender esses fenômenos é por meio do objeto matemático chamado função de onda Ψ que contém as informações da amplitude de probabilidade, que uma vez, por conseguinte, percebemos que essa distribuição varia ao longo do tempo de maneira ondulatória e é exatamente essa onda que pretende-se estudar.

Algo importante a se perceber, é que a função de onda apesar de estar associada à probabilidade de medir um valor para uma grandeza da partícula, ela não pode representar essa propriedade uma vez que, tal função é escrita como um número complexo e não real. Analisando que suas regiões de maior distância do valor nulo (amplitude) são mais prováveis de se encontrar a grandeza nesse valor chamamos Ψ de amplitude de probabilidade, para que as equações nos revelem o resultado físico efetivo, considera-se, sem perda de generalidade, a densidade de probabilidade de posição como sendo o módulo da amplitude de probabilidade, logo:

$$\rho\,(x,y,z,t) = |\Psi\,(x,y,z,t)|^2 = \Psi^*\,(x,y,z,t)\,\Psi\,(x,y,z,t) \tag{2.66}$$

Por definição, se queremos medir a probabilidade de encontrarmos a partícula em determinada

região em um instante t calculamos:

$$\int_e^f \int_c^d \int_a^b \Psi^* (x,y,z,t)\, \Psi (x,y,z,t)\, dxdydz \tag{2.67}$$

Por convenção, desejamos que a função de onda seja normalizada, ou seja, como a probabilidade de encontrar a partícula em todo o espaço é 100%em um instante t, associamos esses cem a um, considera-se:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (x,y,z,t)\, \Psi (x,y,z,t)\, dxdydz = 1 \tag{2.68}$$

Para simplificar a análise dos dados serão tratados primeiramente as funções de onda unidimensionais ao longo do tempo $\Psi (x,t)$, e progressivamente aumentaremos as variáveis para $\Psi (x,y,z,t)$.

2.6 Notação de dirac

Antes de prosseguir na análise de sistemas quânticos, é de interesse físico descrever os chamados estados quânticos através de uma outra simbologia. A motivação para isso uma vez que, quando se representa a amplitude de probabilidade de uma grandeza qualquer através de funções complexas, como as vistas até então, essas expressões tornam-se muito limitantes para expressar os chamados estados quânticos, como cada um destes está relacionado à uma função de onda específica, seria muito trabalhoso escrever ou uma família de soluções por completo (ex: para o oscilador harmônico quântico e o átomo de hidrogênio dependendo cada estado de energia e/ou momento angular haverá uma função de onda ψ associada ao estado.). Uma das maneiras de contornar esse problema é expressando os diferentes estados através da álgebra linear descrevendo as funções de onda através de vetores de maneira compacta, a chamada notação de Dirac.

O espaço vetorial que contém seus estados quânticos em forma de vetores é chamado espaço de Hilbert, um espaço vetorial contido no corpo dos números complexos $\mathbf{C}$, e assim como em qualquer espaço vetorial seus elementos $|\ \psi\rangle$ são compostos por uma combinação linear de versores do tipo: $|\ \psi_n\rangle$, $|\ \psi (x)\rangle$, que formam a base ortonormal desse espaço. Para o caso de grandezas discretas (ex: energia, momento angular, etc.) o vetor é escrito dessa forma:

$$|\ \ \psi\rangle = \sum_{i=0}^{n} c_n |\ \psi_n\rangle \tag{2.69}$$

Quando descrevemos grandezas contínuas (ex: posição x, momento linear p, etc.) usa-se:

$$|\ \psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} C\ (x) |\ x\rangle\, dx \tag{2.70}$$

$$|\,\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} C\,(p)|\,p\rangle\,dp \tag{2.71}$$

Perceba que os elementos $|\,x\rangle$ e $|\,p\rangle$ são exemplos de conjuntos de versores que representam a base pertencente ao mesmo vetor $|\,\psi\rangle$ desse espaço de Hilbert que no caso tem dimensão infinita, outrossim, $C\,(x)$ assim como $C\,(p)$ são respectivamente seus coeficientes, ou seja, escalares que multiplicam os versores e expressam um vetor qualquer $|\,\psi\rangle$. Para passarmos da descrição da mecânica quântica por funções de onda para a notação de Dirac essa relação é por definição dada por:

$$\psi\,(x) = \langle x|\,\psi\rangle \tag{2.72}$$

$$\psi\,(p) = \langle p|\,\psi\rangle \tag{2.73}$$

Portanto:

$$\psi\,(x) = \langle x|\,\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} C\,\left(x'\right)\,\left\langle x|x'\right\rangle dx' = C\,(x) \tag{2.74}$$

$$\psi\,(p) = \langle p|\,\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} C\,\left(p'\right)\,\left\langle p|p'\right\rangle dp' = C\,(p) \tag{2.75}$$

Assim para um espaço de posição ou momento por exemplo tem-se:

$$|\,\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi\,(x)|\,x\rangle\,dx \tag{2.76}$$

$$|\,\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi\,(p)|\,p\rangle\,dp \tag{2.77}$$

Perceba que, sem perda de generalidade, o mesmo vale para o caso discreto:

$$|\,\psi\rangle = \sum_{i=0}^{n} \psi_n|\,\psi_n\rangle \tag{2.78}$$

Observe também que, no caso continuo, o mesmo estado (vetor) $|\,\psi\rangle$ pode ser escrito na base $|\,x\rangle$ e $|\,p\rangle$ mostrando que diferentes bases do sistema podem descrever um mesmo estado completamente. Seja $\hat{A}$ um operador genérico. Denotaremos por $|\,\psi\rangle$, como um auto-estado, de modo que:

$$\hat{A}\,|\,\psi\rangle = A|\,\psi\rangle \tag{2.79}$$

É através da conversão de números reais em operadores que nós quantizamos um sistema, de

tal forma que:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{2.80}$$

Exprimem-se como operadores tal que:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V\left(\hat{X}\right) \tag{2.81}$$

Para termos o ferramental para manipular as equações devemos levar em conta que o produto dos operadores não necessariamente comuta. Para calcular o quanto essas operações não comutam pode-se usar a relação definida a seguir:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{2.82}$$

No caso dos operadores de posição e momento o colchete de Poisson é:

$$\left[\hat{X}, \hat{P}\right] = i\hbar \tag{2.83}$$

2.6.1 Alguns exemplos de aplicação de operadores

- Sejam $|\, n\rangle$ auto-estados de um operador hermitiano. Então, a relação de completude para representar um operador identidade se escreve:

$$\sum_n |\, n\rangle \langle n| \; = \hat{I} \tag{2.84}$$

  Quando o espectro é contínuo, por exemplo, no caso do operador de posição, a soma é substituída por uma integral:

$$\int dx |\, x\rangle \langle x| = \hat{I} \tag{2.85}$$

- O hamiltoniano $\hat{H}$ é o operador associado a hamiltoniana, que contém os auto-estados $|\, \psi_n\rangle$ relacionado as n possíveis funções de onda que o sistema pode descrever , e autovalores E_n às possíveis energias do sistema, ambos relacionados por:

$$\hat{H} \,|\, \psi_n\rangle = E_n |\, \psi_n\rangle \tag{2.86}$$

  Lembrando que seus estados são ortonormais portanto:

$$\langle \psi_{n'} |\, \psi_n\rangle = \delta_{nn'} \tag{2.87}$$

- Os $\hat{L}^2$ e $\hat{L}_z$ são operadores do momento angular total e o momento angular da componente z respectivamente, com seus estados quânticos denotados por $|\, l,\, m\rangle$, e as seguintes relações são satisfeitas:

$$\hat{L}^2 \left|\, l,\, m\right\rangle = l\,(l+1)\,\hbar^2 \left|\, l,\, m\right\rangle \tag{2.88}$$

$$\hat{L}_z \,|\, l,\, m\rangle = m\hbar |\, l,\, m\rangle \tag{2.89}$$

2.6.2 Produto interno

Como estamos trabalhando com espaços vetoriais e produtos de vetores por escalares, por conseguinte espera-se trabalhar com produtos de vetores, o que terá maior aplicabilidade para nós é o produto interno. O produto interno é definido como o produto do vetor como outro transposto complexo conjugado na forma:

$$\langle a|\, b\rangle \tag{2.90}$$

Daqui, por comparação com um resultado anterior pode-se inferir que

$$\langle \vec{p}|\vec{x}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}\right)} \tag{2.91}$$

Uma dedução direta deste resultado é a seguinte:

$$\left\langle p \left|\hat{P}\right| x\right\rangle = p\,\langle p|x\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\,\langle p|x\rangle \tag{2.92}$$

Igualando os dois segundos membros, temos:

$$-i\hbar\frac{d}{dx}\,\langle p|x\rangle = \; p\,\langle p|x\rangle \tag{2.93}$$

ou

$$\frac{d\,\langle p|x\rangle}{\langle p|x\rangle} = \frac{i}{\hbar} p dx \tag{2.94}$$

de onde segue que

$$\langle p|x\rangle = Ae^{\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}\right)} \tag{2.95}$$

Para determinar A, note-se que

$$\langle p|x\rangle = Ae^{\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}\right)} \tag{2.96}$$

e, integrando em x,

$$\int dx \langle p|x\rangle \langle x|p'\rangle = |A|^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} dx \tag{2.97}$$

mas

$$1 = \langle p|p'\rangle = |A|^2 2\pi\hbar\delta\left(p-p'\right) \tag{2.98}$$

logo,

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tag{2.99}$$

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}\ px} \tag{2.100}$$

Um vetor do espaço dos estados é descrito por um símbolo $|\ \psi\rangle$, chamado *ket* . Um elemento do dual desse espaço é denotado por $\langle\psi|$, e denominado *bra*. O produto escalar dos estados $|\ a\rangle$, e $\langle b|$ é denotado por $\langle b|a\rangle$, que nesse caso está relacionado com o produto pelo complexo conjugado $\psi^*(x)\,\psi(x)$, se trata de um $bra(c)ket$, justificando seus nomes. Como trabalhamos com uma função de onda normalizada tem-se:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\psi(x)\,\langle x|x\rangle\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\psi(x) dx = 1 \tag{2.101}$$

O estado *ket* pode representar qualquer estado de uma grandeza que se deseja medir, a representação de todos os valores possíveis de um estado quântico é expressa por operadores hermitianos.

A notação de Dirac será útil para resolvermos problema de mecânica quântica que na formulação de função de onda são mais difíceis. Trata-se de acumular diversas informações de sistemas quânticos, organizá-los, estudá-los e resolvermos com o uso da álgebra linear, após isso, convertemos a linguagem de função de onda novamente para uma análise mais concreta, o que ficará melhor perceptível nas seções seguintes.

2.7 Teorias de perturbação

Um problema que nos deparamos ao estudarmos sistemas quânticos é que poucos deles podem ser descritos de maneira exata analiticamente, logo, para esses casos específicos, abrimos mão de um método de cálculo aproximado, tal método é chamado de teoria de perturbações. O tratamento perturbativo somente é possível quando o Hamiltoniano pode ser dividido em uma parcela grande $\hat{H}$ e outra pequena $\lambda\hat{W}$, de forma que a primeira possa ser diagonalizada exatamente (para o nosso caso, usaremos das soluções exatas vistas em seções anteriores para

expressar $\hat{H}$. Dizemos que W representa uma adição energia em relação ao seu estado dito estacionário, λ é um número real multiplicado à $\hat{W}$ bem menor que 1 para que essa adição seja bem pequena, por isso recebe o nome de perturbação e que $\hat{H}$ é o termo não perturbado e $\lambda\hat{W}$ sua perturbação. Numa primeira descrição, pode-se dizer que a segunda parcela ser pequena significa que a contribuição dela para uma energia tem de ser muito menor do que a separação entre aquela energia e as energias mais próximas no espectro do Hamiltoniano. Mais adiante, encontraremos uma especificação mais precisa. Começamos, portanto, com a seguinte expressão para o Hamiltoniano em que estamos interessados:

Definimos a hamiltoniana perturbada como:

$$\widetilde{H} = \hat{H} + \lambda\hat{W} \tag{2.102}$$

Aqui, por hipótese, sabemos diagonalizar $\hat{H}$, isto é, conhecemos os autovalores do sistema não perturbado E_n^i e os seus autovetores $\mid \varphi_n^i\rangle$ que resultam da solução da equação (i=1,2...)

$$\hat{H}_n \left| \varphi_n^i \right\rangle = E_n^i \left| \varphi_n^i \right\rangle \tag{2.103}$$

Estamos interessados nos autovalores e autovetores do Hamiltoniano completo $\widetilde{H}$, ou seja, em resolver a equação de autovalores:

$$\widetilde{H}_n \left| \varphi_n^i \right\rangle = \widetilde{E}_n^i \left| \varphi_n^i \right\rangle \tag{2.104}$$

sendo $\mid \varphi_n^i\rangle$ designa o i-ésimo autovetor do Hamiltoniano de energia n, e $\widetilde{E}_n^i$ o seu autovalor, para o caso de estados não-degenerados. Procuraremos aproximações para E_n^{ji} e $\mid \varphi_n\rangle$ como polinômios em λ, em que j representa o grau do termo que forma o polinômio, e n o número de estado:

$$\widetilde{E}_n = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\lambda^j\right) E_n^j \tag{2.105}$$

$$\widetilde{E}_n^i = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\lambda^j\right) E_n^{ji} \tag{2.106}$$

Em que E_n^0 e E_n^{0i} são os termos não perturbados para os casos degenerados e não degenerados respectivamente, ou seja, os autovalores de $\hat{H}$.

$$\mid \psi_n^i\rangle = \mid \varphi_n^i\rangle + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\lambda^j\right) \mid \psi_n^{ji}\rangle \tag{2.107}$$

Para o caso não-degenerado:

$$|\,\psi_n\rangle = |\,\varphi_n\rangle + \sum_{j=1}^{\infty}\left(\lambda^j\right)|\,\psi_n^j\rangle \tag{2.108}$$

ou também:

$$|\,\psi\rangle = \sum_{j=0}^{\infty}\left(\lambda^j\right)|\,j\rangle \tag{2.109}$$

Em que $|\,0\rangle$ representa o termo não perturbado, ou seja, o autovetor de $\hat{H}$, ou $|\,\varphi_n^0\rangle$, por simplicidade é omitido o fator n.

As equações das correções são, portanto:

$$\left(\hat{H}+\lambda\hat{W}\right)\sum_{j=0}^{\infty}\left(\lambda^j\right)|\,j\rangle = \sum_{i=0}^{\infty}\left(\lambda^i\right)E_n^i\sum_{j=0}^{\infty}\left(\lambda^j\right)|\,j\rangle \tag{2.110}$$

Consequentemente, é com o uso da teoria das perturbações que aproximações cada vez menores e mais refinadas são calculadas seguindo-se um princípio muito semelhante as séries de Taylor. Essas aproximações são calculadas através da separação dos coeficientes λ^k que multiplicam os termos, chamados de Termos de ordem k:

- Termos da energia de ordem 0:

$$\hat{H}\,|0\rangle = E_0|\,0\rangle \tag{2.111}$$

  Lembrando que E_0 já é o termo de correção em primeira ordem.

- Termos da energia de ordem 1:

$$\hat{H}\lambda\,\big|\,1\rangle + \lambda\hat{W}\big|\,0\rangle = \lambda E_1\,|0\rangle + \lambda E_0|\,1\rangle \tag{2.112}$$

$$\hat{H}\,\big|\,1\rangle + \hat{W}\big|\,0\rangle = E_1\,|0\rangle + E_0|\,1\rangle \tag{2.113}$$

$$\left(\hat{H}-E_0\right)\big|\,1\rangle + \left(\hat{W}-E_1\right)\big|\,0\rangle = 0 \tag{2.114}$$

- Termos da energia de ordem 2:

$$\hat{H}\lambda^2|\,2\rangle + \lambda^2\hat{W}|\,1\rangle = \lambda^2 E_2|\,0\rangle + \lambda^2 E_1|\,1\rangle + \lambda^2 E_0|\,2\rangle \tag{2.115}$$

$$\hat{H}|\,2\rangle + \hat{W}|\,1\rangle = E_2|\,0\rangle + E_1|\,1\rangle + E_0|\,2\rangle \tag{2.116}$$

$$\left(\hat{H}-E_0\right)\left|2\right\rangle\ +\left(\ \hat{W}-E_1\right)\left|\ 1\right\rangle\ -\ E_2\left|\ 0\right\rangle=0 \tag{2.117}$$

- Termos da energia de ordem k:

$$\left(\hat{H}-E_0\right)\left|k\right\rangle\ +\left(\ \hat{W}-E_1\right)\left|\ k-1\right\rangle\ -\ E_2\left|\ k-2\right\rangle-E_3\left|\ k-3\right\rangle\ldots-E_k\left|\ 0\right\rangle=0 \tag{2.118}$$

No que se refere as correções de termos de estado, trabalharemos apenas com sistemas em que os autovalores sejam não-degenerados, de forma que cada autovalor pertença a somente um autovetor. Tiraremos essa primeira correção a partir dos termos de ordem 1. Tome-se primeiramente:

$$\left(\hat{H}-E_0\right)\left|\,1\right\rangle+\left(\hat{W}-E_1\right)\left|\,0\right\rangle=0 \tag{2.119}$$

Nosso objetivo é encontrar o termo W_{00} do operador $\hat{W}$, para isso apliquemos o termo *bra* $\left\langle 0\right|$:

$$\left\langle 0\right|\left(\hat{H}-E_0\right)\left|\,1\right\rangle+\left\langle 0\right|\left(\hat{W}-E_1\right)\left|\,0\right\rangle=0 \tag{2.120}$$

$$\left\langle 0\right|\left(E_0-E_0\right)\left|\,1\right\rangle\ +\left\langle 0\right|\ \hat{W}\left|\,0\right\rangle-\left\langle 0\right|E_1\left|\,0\right\rangle=0 \tag{2.121}$$

É importante salientar que $\left\langle m|n\right\rangle\ =0$ para $m\neq n$ caso contrário sempre é possível unir e normalizar os termos para que isso ocorra.

Exemplo: $|\ \psi_n\rangle\ =\ |\,0\rangle\ +\ |\,1\rangle$, se por acaso:

$$\left|\,1\right\rangle=\alpha\left|\,0\right\rangle \tag{2.122}$$

Então:

$$|\,\psi_n\rangle=(1+\alpha)\left|\,0\right\rangle \tag{2.123}$$

Portanto:

$$|\ \psi_n\rangle\ =\ |\,0\rangle \tag{2.124}$$

Lembrando que isso é apenas possível pelo fato de os sistemas tratados no momento são não-degenerados.

Assim é possível concluir que:

$$\left\langle 0\right|\ \hat{W}\left|\,0\right\rangle-E_1\left\langle 0|0\right\rangle=0 \tag{2.125}$$

$$\langle 0|\ \hat{W}|\,0\rangle = E_1 \tag{2.126}$$

Para encontrar o termo de auto-estados perturbado de ordem um, aplica-se o termo *bra* de tal forma:

$$\left\langle \psi_n^j\right|\left(\hat{H}-E_0\right)\left|\,1\right\rangle + \left\langle \psi_n^j\right|\left(\hat{W}-E_1\right)\left|\,0\right\rangle = 0 \tag{2.127}$$

$$\left\langle \psi_n^j\right|\left(E_n^j-E_0\right)|\,1\rangle\ + \left\langle \psi_n^j\right|\ \hat{W}|\,0\rangle - \left\langle \psi_n^j\right| E_1|\,0\rangle = 0 \tag{2.128}$$

$$\left(E_n^j-E_0\right)\left\langle \psi_n^j\right|1\rangle\ + \left\langle \psi_n^j\right|\ \hat{W}|\,0\rangle\ = 0 \tag{2.129}$$

$$\left\langle \psi_n^j\right|1\rangle = \frac{\left\langle \psi_n^j\right|\ \hat{W}|\,0\rangle}{E_0-E_n^j} \tag{2.130}$$

Por definição escrevemos a identidade como:

$$\hat{I} = |\,0\rangle\langle 0| + \sum_{n\neq 0}\sum_j |\,\psi_n^j\rangle\left\langle \psi_n^j\right| \tag{2.131}$$

Aplicando esse operador ao termo temos:

$$\sum_{n\neq 0}\sum_j |\,\psi_n^j\rangle\left\langle \psi_n^j\right|1\rangle = \sum_{n\neq 0}\sum_j \frac{\left|\,\psi_n^j\right\rangle\left\langle \psi_n^j\right|\hat{W}\left|\,0\right\rangle}{E_0-E_n^j} \tag{2.132}$$

$$|\,1\rangle\ -\ |\,0\rangle\langle 0|\,1\rangle\ = |\,1\rangle = \sum_{n\neq 0}\sum_j \frac{\left\langle \psi_n^j\right|\ \hat{W}|\,0\rangle}{E_0-E_n^j}|\,\psi_n^j\rangle \tag{2.133}$$

Estamos apresentando a teoria das perturbações utilizando-se da notação de Dirac, é importante lembrar que sempre é possível converter essas aproximações para funções de onda com auxílio das relações $\psi(x) = \langle x|\,\psi\rangle$ e $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\,\psi\rangle$ para sistemas em espaços unidimensionais e tridimensionais respectivamente. Durante a análise dos sistemas que serão vistos nos próximos capítulos, serão usados esses métodos de aproximação omitindo os procedimentos observados nessa seção, já escrevendo as soluções em funções de onda, permitindo de a notação fique mais concisa, permitindo uma melhor comparação dos cálculos teóricos com os experimentos realizados.

3 INTERAÇÕES ENTRE ELÉTRONS E PARTÍCULAS α

Durante o avanço das tecnologias em física experimental, renovou-se o interesse no estudo de partículas presas por armadilhas de potenciais. No que diz respeito as inovações que surgiram ao longo das décadas, como o resfriamento de gases confinados por laser em armadilhas óticas, tornou-se possível analisar sistemas de partículas atômicas de maneiras mais refinadas como nunca antes possível. Neste contexto surge o interesse em trabalhar com sistemas interagentes de poucos corpos, para esse trabalho, o átomo de hélio será o sistema que nos interessa.

Nos trabalhos realizados por Kegel em 2023 foram estudados vários experimentos de espalhamento de partículas α do estado fundamental para o primeiro estado excitado. Na colaboração liderada por Kegel mediu a transição supracitada usando espalhamento inelástico de elétrons; foram descobertos um pico de ressonância no fator de forma de transição de estado da partícula espalhada, contudo, antes de especificar-se o que seria esse fator de forma, optou-se por tratar nesse capítulo somente a interação de partículas durante o espalhamento.

Ao incidir partículas sobre outras, é importante salientar que quando um corpo se aproxima do outro, os campos interagentes (interação eletromagnética, interação forte, etc.) tornam-se mais intensos, logo, tal efeito tem implicações em como a função de onda será descrita fisicamente e esse será o interesse desse capítulo.

Através dos trabalhos feitos por (Kegel, 2023) e (Guimarães e Miranda, 2018), que serão tomados como base, serão descritos modelos teóricos do sistema do átomo de hélio e sua interação com elétrons, indo do mais simplificado e progressivamente refinando a descrição tentando se aproximar de resultados comparáveis a modelos experimentais, objetivo final é descobrir se é possível concluir se efeitos de degenerescência de estado podem explicar o efeito de ressonância no fator de forma e comparar esses valores aos dados experimentais de (Kegel, 2023).

3.1 Descrição quântica do modelo partícula α interagente

Nosso interesse é descrever um modelo atômico do hélio sofrendo colisões por elétrons em um sistema análogo à baixas temperaturas utilizando como base as soluções de partículas presas em poços de potencial, nos quais estarão no capítulo de Anexo A. No contexto mais genérico a hamiltoniana que descreve tal sistema interagente é descrita por:

$$H = \sum_{i=1}^{2} \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i}\Psi + v_{eff}(\vec{r}_i)\Psi - \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{|r_i - r|}\Psi \tag{3.1}$$

Com $\hat{p}_i$ representando os operadores momento linear para dois prótons localizados nas posições r_1 , r_2 e v_{eff} sendo o potencial de confinamento efetivo de campo médio, agindo sobre cada um dos prótons, gerados pelo outro próton e pelos dois nêutrons (usualmente dado pelos potenciais efetivos estáticos Ads-QCD (Carlucci, 2008)), mas aqui representados por um potencial simplificado, e o último termo representa a interação entre a função de onda do próton

e o elétron localizado na posição. Por essa razão, o sistema correspondente ao Hamiltoniano simplificado é dado por:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2\mu}\Psi + v_{eff}(\vec{r})\Psi - g\delta(\vec{r})\Psi \tag{3.2}$$

em que:

$$v_{eff}(\vec{r}) = \lim_{\Lambda\to\infty} \Lambda\Theta(|\vec{r}| - r_0) \tag{3.3}$$

Nesse caso, $\Theta(r)$ é a distribuição de Heaviside e é o r_0 raio do núcleo. O Hamiltoniano deve ser comparado ao Hamiltoniano efetivo a campo médio original, e corresponde a uma aproximação da equação 3.1. Porém, o Hamiltoniano permite soluções analíticas fechadas, ainda que qualitativamente, esperamos que reproduza a dinâmica do espalhamento elétron/partícula α anteriormente descrita. O potencial de interação entre elétron e núcleon está representado, como uma simplificação, por um acoplamento efetivo e pela função delta de Dirac, $g\delta(\vec{r})$ como se o fenômeno fosse descrito com o elétron "estático"e "localizado"na posição de raio zero (o que ocorre na verdade, é que o efeito do campo elétrico do elétron produz é descrito como uma função delta de Dirac, a localização da partícula incidente não pode ser descrita por razões de indeterminações quânticas). Isso significa que deve-se descrever o hamiltoniano como sendo aplicado sobre a função de onda da partícula α (Ψ) mesmo sabendo que o objeto que o incide é o elétron, finalmente, o símbolo μ representa a massa reduzida entre o núcleo e o elétron.

3.2 Justificativa dos critérios assumidos ao longo da descrição

Primeiramente, é importante mostrar como a interação de partículas causada pela sua colisão modifica a função de onda do sistema em questão, pelo fato de os experimentos envolverem gases armadilhados a laser e portanto comparáveis a sistemas de baixa energia, serão utilizados certos aspectos da teoria do espalhamento de partículas quânticas, principalmente serão utilizadas aproximações por series de Taylor, assim, modelando as condições iniciais do sistema considerando os primeiros termos da série (os de ordem zero e primeira ordem) relativos a função de onda e potenciais da nossa descrição (interação coulombiana entre elétron e partícula α, aproximação do espalhamento). A seguir, usaremos os trabalhos desenvolvidos por Olshanii (1998) em conjunto com os trabalhos de Guimarães e Miranda (2018) como base de um modelo análogo a um gás ultrafrio, nos quais envolvem o choque entre partículas α sujeitas a armadilhas óticas e seu espalhamento resultante, com seus resultados descreveremos uma colisão entre um elétron e uma partícula α armadilhada, posteriormente o sistema será refinado adicionando novas variáveis e condições que facilitarão o cálculo e farão com que nossas soluções, ainda que aproximadas, estejam progressivamente mais próximas da solução exata.

3.3 Partícula armadilhada em um potencial harmônico de 3 dimensões

A necessidade de entender a colisão e o espalhamento entre um elétron e uma partícula α a baixas energias obriga-nos a observar sistemas mais generalizados primeiramente para posteriormente simplificá-los; Olshanii em 1998 desenvolveu o cálculo de uma colisão a baixas energias que será muito útil para uma análise inicial e consequentemente a modelagem dos sistemas de nosso interesse. Observemos sua descrição do sistema através da equação de Schrodinger.

No sistema estudado por Olshanii uma partícula confinada por um potencial harmônico nas direções x e y interagem (colidem) com alvo localizado no centro da armadilha óptica, representado por potencial tipo delta, com acoplamento g A hamiltoniana do sistema é descrita como:

$$\left[\frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} + g\delta(r)\frac{\partial}{\partial r}(r\cdot) + \hat{H}_\perp(\hat{p}_x, \hat{p}_y, x, y)\right]\Psi = E\Psi \tag{3.4}$$

A interação que confina a partícula estudada é dada pelo potencial harmônico simétrico axialmente em x e y:

$$\hat{H}_\perp = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega_\perp^2\left(x^2+y^2\right)}{2} \tag{3.5}$$

A interação entre a partícula confinada e o alvo (um segundo átomo) é modelada como aproximadamente um pseudo-potencial de Huang:

$$g\delta(r)\frac{\partial}{\partial r}(r\cdot) \tag{3.6}$$

No qual $g = \frac{2\pi\hbar^2 a}{\mu}$ e $\mu = \frac{m}{2}$ em que μ é a massa reduzida dos dois átomos com m sendo a massa de um deles; além disso, pode-se notar que a regularização do operador $\frac{\partial}{\partial r}(r\cdot)$ remove a divergência da onda de espalhamento, o que será bem útil para a solução desse sistema segundo Olshanii (1998) mas não será utilizado em nossas descrições.

É perceptível nessa análise de interação que quando a partícula incidida se aproxima da partícula alvo a função de onda pode ser descrita como sistema preso em um poço de potencial; nas próximas seções serão usados princípios da simulação de Olshanii (1998) para descrever esses sistemas em outros caso de armadilhamento.

3.4 Sistema de partícula interagente confinadas

Nessa seção serão estudados de maneira mais qualitativa certos aspectos físicos de partículas confinadas por poços de potencial infinito em uma ou mais dimensões. A dinâmica de movimento

geral desses sistemas é descrita pela equação de Shrodinger da forma:

$$-\nabla^2\Psi(r)+g\delta(r)\Psi(r)-E\Psi(r)=0 \tag{3.7}$$

no qual o termo $-\nabla^2\Psi(r)$ está relacionado ao momento da partícula, $g\delta(r)$ é relacionado a natureza da intensidade e interação entre as partículas e E a energia do sistema análogo a um ultrafrio (serão consideradas as energias E como as soluções de poço de potencial infinito com interação por aproximação por séries de Taylor, por termos de ordem zero e primeira ordem dependendo do nível de precisão) finalmente, por motivos de simplificação,considera-se $\frac{\hbar^2}{2\mu}=1$.

Um dos métodos de resolução que podem ser utilizados é a análise do sistema discretizado, para encontrar a solução utilizamos o método da relaxação para aproxima-la, assim, define-se a equação:

$$\kappa\frac{\partial\Psi(r,\tau)}{\partial\tau}=-\nabla^2\Psi(r,\tau)+g\xi(r)\Psi(r,\tau)-E(\tau)\Psi(r,\tau) \tag{3.8}$$

Em que a variável τ é um número imaginário e κ é a constante de relaxação, $\xi(r)$ trata-se do termo relacionado a função delta de Dirac e $E(\tau)$ está associado à configuração da função de onda, de tal forma que:

$$E(\tau)=\frac{\int\left(-\Psi^*\nabla^2\Psi+g\xi(r)\Psi^*\Psi\right)dr}{\int\Psi^*\Psi dr} \tag{3.9}$$

A discretização secciona o espaço interior ao poço infinito em $(N_x+1)\times(N_y+1)\times(N_z+1)$ setores em que $\frac{N_x}{L_x}=\frac{N_y}{L_y}=\frac{N_z}{L_z}=h$.

Considerando tudo isso, o laplaciano ∇^2 aplicado ao Ψ é calculado como:

$$\begin{aligned}\nabla^2\Psi=&\left(\frac{N_x}{L_x}\right)^2\left(\Psi_{i+1,j,k}-2\Psi_{i,j,k}+\Psi_{i-1,j,k}\right)+\\&\left(\frac{N_y}{L_y}\right)^2\left(\Psi_{i,j+1,k}-2\Psi_{i,j,k}+\Psi_{i,j-1,k}\right)+\\&\left(\frac{N_z}{L_z}\right)^2\left(\Psi_{i,j,k+1}-2\Psi_{i,j,k}+\Psi_{i,j,k-1}\right)\end{aligned} \tag{3.10}$$

em que:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\tau}=\frac{\Psi_{i,j,k,\tau+1}-\Psi_{i,j,k,\tau}}{\Delta\tau} \tag{3.11}$$

A função delta de Dirac, agora para o sistema discretizado, é descrito como uma função delta de Kroniker de forma que interagindo com uma partícula incidente através de um poço do tipo Huang. Esse modelo procura reproduzir aproximadamente o sistema estudado experimentalmente por Kegel, ou seja, estudamos uma partícula confinada em poço de potencial infinito interagindo na origem com outra partícula como uma aproximação para uma a interação entre o elétron

incidente e os núcleons confinado no núcleo de Hélio.

$$\delta_{i,j,k} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = \frac{L_x}{2}, j = \frac{L_y}{2},\ k = \frac{L_z}{2} \\ 0, & \text{para todos os outros casos.} \end{cases} \tag{3.12}$$

Considerando $\Delta\tau = it$, que na aproximação de tempo imaginário, é real, substituindo os termos na equação tem-se:

$$\Psi_{i,j,k,\tau+1} = \Psi_{i,j,k,\tau} + \frac{1}{\kappa}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_{i,j,k,\tau} + g\delta_{i,j,k}\Psi_{i,j,k,\tau} - E(\tau)\Psi_{i,j,k,\tau}\right) \tag{3.13}$$

A condição de convergência é calculada com relação a evolução de τ como

$$\left|\frac{(E(\tau+1) - E(\tau))}{E(\tau+1)}\right| < \varepsilon \tag{3.14}$$

Com base nessa razão, calcula-se o *limite de convergência*, o qual diminui conforme τ avança ao infinito tendendo a um determinado valor, de acordo com o número de passos espera-se que o valor convirja para uma quantidade menor que o raio ε, ou a solução não nos será útil pois os valores serão muito imprecisos.

Segundo os trabalhos de Guimarães e Miranda (2018), em um espaço de $51\times51\times1001$ partições, as funções de energia e acoplamento são da ordem de grandeza h^{-2} por causa das simplificações de valores, logo, podem se expressar como quantidades invariantes h^2E e h^2g respectivamente. A equação converge para um raio $\varepsilon \leq 10^{-7}$ para qualquer valor de g em um $\tau = 1000$; as diferenças entre a aproximação pelo método da relaxação e os valores exatos, para o caso da partícula não-interagente ($g = 0$) em que $n_x = n_y = n_z = 1$ é de $0,0033$ o que é uma boa aproximação.

3.5 Degenerescência dependente da intensidade da interação

Um dos fenômenos físicos que surgem da consideração da interação elétron-nucleon do sistema é o surgimento da degenerescência (estados quânticos diferentes com a mesma energia) sobre a energia. Considerando o sistema quasi-unidimensional, ou seja, com $L_z >> L_x = L_y = L$, e a interação entre as partículas nula, logo, $g = 0$), a energia é a mesma do poço infinito tridimensional:

$$E_{n_z} = \frac{\pi^2}{L^2}\left(2 + n_z^2\frac{L^2}{L_z^2}\right) \tag{3.15}$$

O intervalo entre dois estados de energias consecutivas é, portanto:

$$\Delta\mathrm{E} = \frac{\pi^2}{L_z^2}(2n_z + 1)) \tag{3.16}$$

Porém a adição de um acoplamento $(g \neq 0)$ ao sistema aumenta o nível de energia do sistema. O gráfico abaixo feito por Guimarães e Miranda (2018) apresenta os valores de energia do sistema de partícula armadilhada em um poço infinito em função do acoplamento g:

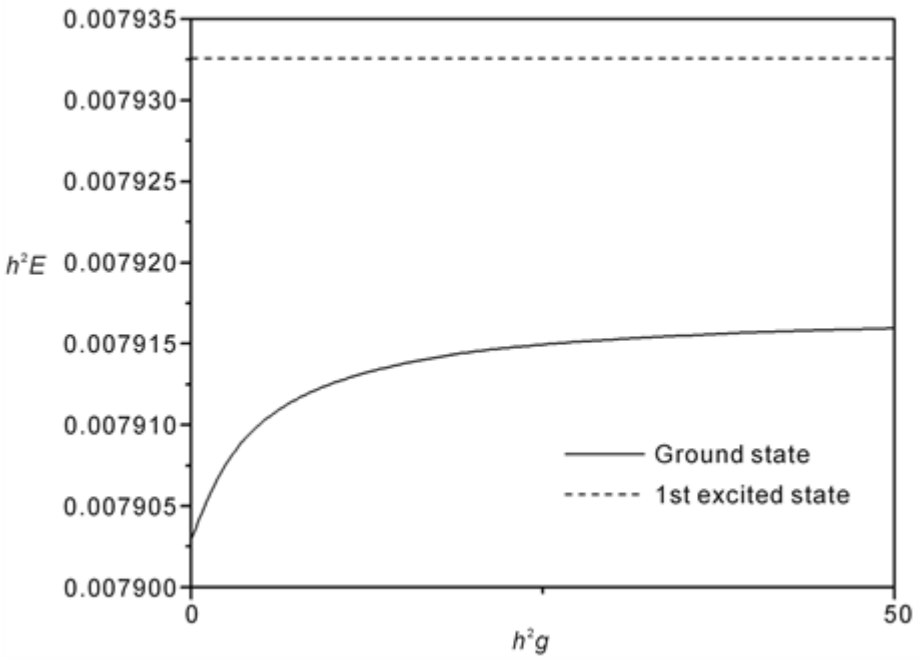

Figura 1: *Energia do sistema em função da intensidade do acoplamento g. Guimarães e Miranda (2018).*

Como foi dito no primeiro paragrafo da seção 3.4, o acoplamento e as energias do sistema é proporcional a h^{-2} por esse motivo os dados relacionados puderam pela escala invariante h^2E e h^2g como se usa-se os termos E e g por razão de simplificação dos cálculos durante a análise.

Partindo da análise do gráfico podemos chegar a certas conclusão. A primeira é que no estado fundamental do sistema (E_0) aumenta em função do aumento de h^2g e chega em um limite assintótico no qual:

$$\lim_{g\to\infty} h^2E_0 = 7.916836x10^{-3} \tag{3.17}$$

A segunda é que o primeiro estado excitado permanece inalterado com $h^2E_1 = 7,932565 \times 10^{-3}$, isso se deve pelo fato de que para uma solução com uma função de onda para o potencial de poço infinito sem interação e com paridade ímpar, $\Psi\left(x,y,\frac{L_z}{2}+\varepsilon\right) = -\Psi\left(x,y,\frac{L_z}{2}-\varepsilon\right)$ e portanto $\Psi\left(x,y,\frac{L_z}{2}\right) = 0$ logo, pelo fato da interação eletron-nucleon ser proporcional a função delta de Dirac o estado não é afetado enquanto primeiro estado excitado ou qualquer estado com Ψ tendo paridade ímpar.

Uma das consequências disso, é a ocorrência de uma degenerescência na energia do sistema, de acordo com Guimarães e Miranda (2018), para o exemplo do sistema a seguir, de geometria quasi-unidimensional com um L_z grande o suficiente alcança-se uma condição em que $(E_0 = E_1)$. Considera-se o sistema com $N_x = N_y = 26$ e $N_z = 1000$ na Fig. 2 :

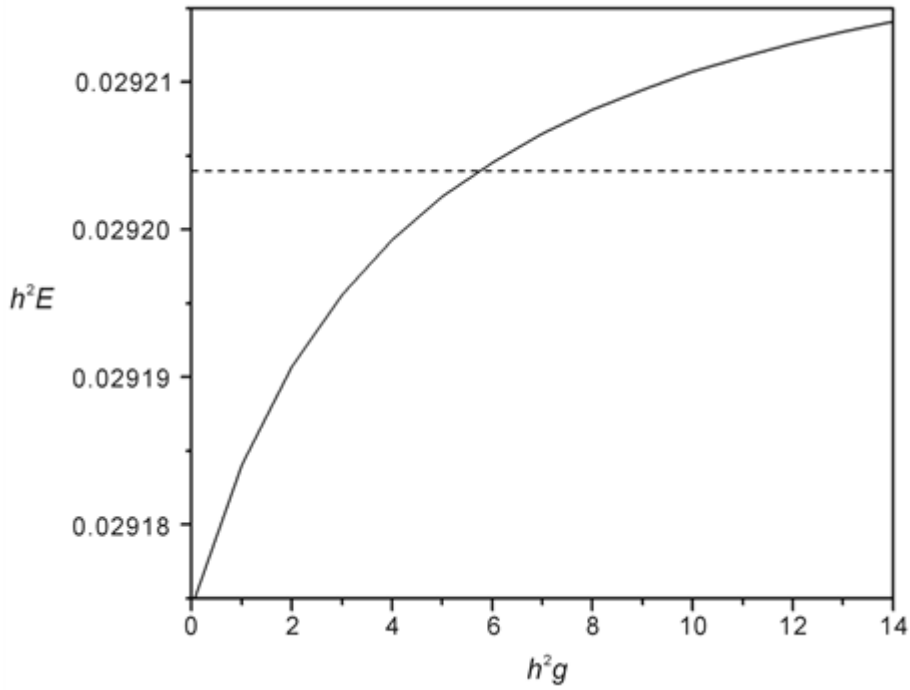

Figura 2: *Energia do sistema em função da intensidade do acoplamento g para um sistema com L_z suficientemente grande. Guimarães e Miranda (2018).*

Através dos dados gráficos é possível ver que o ponto em que os dois estados possuem a mesma energia ocorre em $h^2g \approx 5,7$, é importante mencionar que o valor de acoplamento g está relacionado com certas variáveis, uma em especial é a carga elétrica que será essencial para descrever o sistema de interação na colisão de um elétron com um átomo de hélio.

A partir desse resultado, pretende-se descrever, nos próximos capítulos, modelos de interação elétron-núcleon baseados no que foi visto nessa seção e o fator de forma de espalhamento e posteriormente demonstrar se fenômenos de degenerescência são capazes de produzir os efeitos de ressonância descritos por Kegel.

3.6 Função de onda da partícula armadilhada em um potencial tipo poço infinito com interação em 1 dimensão

A seguir será estudado um sistema em que um nucleon é incidido por um elétron em um poço de potencial infinito e após o fenômeno ocorrer será determinado a função de onda desse mesmo elétron em um espaço unidimensional. Analisando os resultados vistos em Guimarães e Miranda (2018), percebe-se que a função de onda nas regiões mais distantes do ponto $(\frac{L_x}{2})$ são indiferenciáveis da solução do poço infinito não-perturbado ($g = 0$), já para regiões próximas ao ponto $(\frac{L_x}{2})$, vemos um pico no ponto $(\frac{L_x}{2})$. Ver Fig. 3

É possível perceber uma descontinuidade em relação a primeira derivada da função de onda, por esse motivo, para simular o efeito de interação na função de onda, podemos sugerir-la como

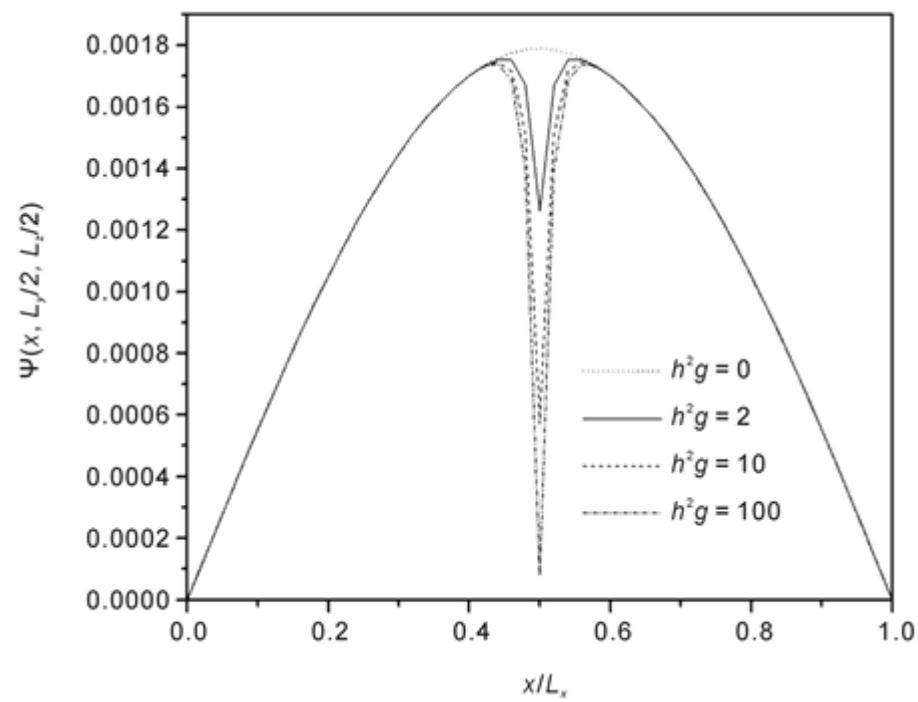

Figura 3: *função de onda para um sistema unidimensional de colisão entre partículas (dois átomos de hélio) com intensidade do acoplamento g entre elas. Guimarães e Miranda (2018).*

um produto da solução não perturbada com uma família de funções exponenciais da forma:

$$\Psi_x(x) = N\left(1 - Be^{-\gamma|x-x_c|}\right) sen\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \tag{3.18}$$

ou para $\frac{n_x \pi}{L_x} = k$,

$$\Psi_x(x) = N\left(1 - Be^{-\gamma|x-x_c|}\right) sen\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \tag{3.19}$$

Essa segunda função se equivale à anterior, apenas deslocamos o referencial do sistema em x_c e não normalizamos a função de onda, o que será deixado para o final dos cálculos.

Agora calcula-se as derivadas de primeira e segunda ordem:

$$\Psi'_x(x) = \gamma B e^{-\gamma|x|} sgn(x) cos(kx) + k\left(1 - Be^{-\gamma|x|}\right) sen(kx) \tag{3.20}$$

$$\begin{aligned} \Psi''_x(x) = \left(2\gamma\delta(x) - \gamma^2 sgn(x)^2\right) Be^{-\gamma|x|} cos(kx) \\ -2k\gamma B sgn(x) e^{-\gamma|x|} sen(kx) - k^2\left(1 - Be^{-\gamma|x|}\right) cos(kx) \end{aligned} \tag{3.21}$$

Substituindo-se esses resultados na equação do sistema temos:

$$\begin{aligned} -\left(2\gamma\delta\left(x\right)-\gamma^2 sgn(x)^2\right)Be^{-\gamma|x|}cos(kx) \\ +2k\gamma Bsgn\left(x\right)e^{-\gamma|x|}sen\left(kx\right)+k^2\left(1-Be^{-\gamma|x|}\right)cos(kx) \\ +g\delta\left(x\right)\left(1-Be^{-\gamma|x|}\right)cos(kx)=E\left(1-Be^{-\gamma|x|}\right)cos(kx) \end{aligned} \tag{3.22}$$

Para a equação mostrar soluções físicas estáveis é necessário remover os termos dependentes da função delta de Dirac, isso só é possível se:

$$2\gamma B\delta\left(x\right)e^{-\gamma|x|}cos(kx) \ =g\delta\left(x\right)\left(1-Be^{-\gamma|x|}\right)cos(kx) \tag{3.23}$$

Escolhamos a condição de contorno em que x tenda a zero e dividamos pela função delta dos dois lados:

$$2\gamma B= \ g\left(1-B\right) \tag{3.24}$$

$$B=\frac{g}{g+2\gamma} \tag{3.25}$$

O termo de ordem zero da energia em função da interação elétron-partícula é, pois, descrita por:

$$E=k^2+\frac{B}{1-B}\gamma^2=k^2+\frac{g}{2}\gamma \tag{3.26}$$

A seguir trabalharemos com as seguintes aproximações para um r muito pequeno:

$$e^{-\gamma|x|}\cong 1-\gamma sgn(x)x \tag{3.27}$$

$$cos(kx)\cong 1 \tag{3.28}$$

$$sen\left(kx\right)\cong kx \tag{3.29}$$

Substituindo na equação e escolhendo os termos de primeira ordem, já que os de ordem zero já foram calculados, tem-se:

$$-\gamma^2\left(B\gamma sgn(x)x\right)+2k^2x\gamma Bsgn\left(x\right)+k^2B\left(\gamma sgn(x)x\right)=E\left(B\gamma sgn(x)x\right) \tag{3.30}$$

$$E=3k^2-\gamma^2 \tag{3.31}$$

Substituindo os termos de primeira ordem na equação 3.22 e eliminando os de ordem diferente temos a equação de 2º grau com a variável γ:

$$\gamma^2 + \frac{g}{2}\gamma - 2k^2 = 0 \tag{3.32}$$

$$\gamma = \frac{\sqrt{g^2 + 32k^2} - g}{4} \tag{3.33}$$

Em seguida, deve-se encontrar os termos de segunda ou maior ordem, refinado-se o cálculo até determinarmos uma boa aproximação para a função de onda, lembrando que para os primeiros valores, os erros são da ordem de $\frac{x^2}{L_x^2} < \frac{|x|}{L_x}$ e tende a diminuir conforme termos de ordem superior são adicionados ao cálculo (Miranda, 2018). Entretanto, acrescentar esses termos de ordem superior implicará em utilizarmos mais coeficientes livres alem dos únicos presentes na equação 3.19, B e γ.

3.7 Função de onda da partícula armadilhada em um potencial tipo poço infinito com interação em 3 dimensões

O sistema que envolve um poço infinito tridimensional possuirá uma solução análoga (utilizando-se dos mesmos argumentos e análise) ao que foi mostrado na seção anterior. Considerando o centro do poço de potencial no ponto $r = 0$, a função de onda será descrita com valores muito próximos a solução:

$$\Psi(x,y,z) = \left(1 - Be^{-\gamma r}\right) cos(k_x x) \cos(k_y y) \cos(k_z z) \tag{3.34}$$

Percebe-se como a solução se trata de uma extensão da solução unidimensional, com isso em mente, apenas é necessário calcular suas derivadas parciais e substituí-las na equação de Schrodinger.

Toma-se as primeiras derivadas parciais:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = [\gamma B sgn(x,y,z)\, e^{-\gamma r} cos(k_x x) - \left(1 - Be^{-\gamma r}\right) k_x sen\,(k_x x)] \cos(k_y y) \cos(k_z z) \tag{3.35}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial y} = [\gamma B sgn(x,y,z)\, e^{-\gamma r} cos(k_y y) - \left(1 - Be^{-\gamma r}\right) k_y sen\,(k_y y)] \cos(k_x x) \cos(k_z z) \tag{3.36}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial z} = [\gamma B sgn(x,y,z)\, e^{-\gamma r} cos(k_z z) - \left(1 - Be^{-\gamma r}\right) k_z sen\,(k_z z)] \cos(k_y y) \cos(k_x x) \tag{3.37}$$

Lembrando que, por definição:

$$sgnx\,(x,y,z) = \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \tag{3.38}$$

O laplaciano da função de onda pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}\nabla^2\Psi\,(x,y,z) = {} & 2\left(f_x k_x sen\,(k_x x) - \left(f_{xx} + (1-f)\,k_x^2\right) cos(k_x x)\right)\cos\,(k_y y)\cos\,(k_z z) \\ & + 2\left(f_y k_y sen\,(k_y y) - \left(f_{yy} + (1-f)\,k_y^2\right) cos(k_y y)\right) cos(k_x x)\cos\,(k_z z) \\ & + 2\left(f_z k_z sen\,(k_z z) - \left(f_{zz} + (1-f)\,k_z^2\right) cos(k_z z)\right) cos(k_x x)\cos\,(k_y y)\end{aligned} \tag{3.39}$$

Para simplificar a notação das equações, em Guimarães e Miranda (2018) foram utilizados:

$$f = Be^{-\gamma r} \tag{3.40}$$

$$f_x = -\gamma sgnx\,(x,y,z)\,f \tag{3.41}$$

$$f_y = -\gamma sgny\,(x,y,z)\,f \tag{3.42}$$

$$f_z = -\gamma sgnz\,(x,y,z)\,f \tag{3.43}$$

$$f_{xx} = \left(\gamma^2 sgnx^2 - 2\gamma\delta_x\right) f \tag{3.44}$$

$$f_{yy} = \left(\gamma^2 sgny^2 - 2\gamma\delta_y\right) f \tag{3.45}$$

$$f_{zz} = \left(\gamma^2 sgnz^2 - 2\gamma\delta_z\right) f \tag{3.46}$$

Por conseguinte, substituindo esses valores na equação de Schrodinger resulta em:

$$\begin{aligned} & 2\left(f_x k_x sen\,(k_x x) - \left(f_{xx} + (1-f)\,k_x^2\right) cos(k_x x)\right)\cos\,(k_y y)\cos\,(k_z z) \\ & + 2\left(f_y k_y sen\,(k_y y) - \left(f_{yy} + (1-f)\,k_y^2\right) cos(k_y y)\right) cos(k_x x)\cos\,(k_z z) \\ & + 2\left(f_z k_z sen\,(k_z z) - \left(f_{zz} + (1-f)\,k_z^2\right) cos(k_z z)\right) cos(k_x x)\cos\,(k_y y) \\ & + g\xi\,(r)\,(1-f)\,cos(k_x x)\cos\,(k_y y)\cos\,(k_z z) \;=\; E\,(1-f)\,cos(k_x x)\cos\,(k_y y)\cos\,(k_z z)\end{aligned} \tag{3.47}$$

Para encontrar a solução da equação acima devemos remover os termos que levam a regimes

assintóticos, o que equivale a dizer que:

$$-2\gamma(\delta_x+\delta_y+\delta_z)f+g\xi(r)(1-f)=0 \tag{3.48}$$

Como por definição:

$$\xi(r)=\delta_x+\delta_y+\delta_z \tag{3.49}$$

podemos eliminar os termos delta da equação e concluir que no ponto $r=0$:

$$g(1-B)=2\gamma B \tag{3.50}$$

$$B=\frac{g}{g+2\gamma} \tag{3.51}$$

A energia pode ser encontrada pelo mesmo método a partir dos termos de 1ª ordem:

$$Er=k_r^2-\gamma^2 r+\frac{2\left(k_x^2x+k_y^2y+k_z^2z\right)}{x^2+y^2+z^2}r \tag{3.52}$$

lembrando que:

$$\left.\frac{\left(k_x^2x+k_y^2y+k_z^2z\right)}{x^2+y^2+z^2}\right|_{x=y=z}=\frac{k_r^2}{3}=\frac{k^2}{3} \tag{3.53}$$

por conseguinte:

$$E=\frac{5}{3}k^2-\gamma^2 \tag{3.54}$$

$$\gamma=\frac{\sqrt{g^2+\frac{32}{3}k^2}-g}{4} \tag{3.55}$$

3.8 Função de onda da partícula em poço de potencial infinito esférico

Até este momento tem-se estudado casos de partículas α presas em potenciais quadrados, com isso em mente para alcançar uma melhor aproximação de uma partícula interagente seria considerarmos um potencial tal que:

$$V(r)=\begin{cases}0, & \text{para } r\leq a\\ \infty, & \text{para } r>a\end{cases} \tag{3.56}$$

No sistema de coordenadas cartesianas usado nas seções anteriores considera-se somente a

região em que $V(x,y,z)=0$, portanto:

$$-\nabla^2\Psi(x,y,z)+g\delta(r)\Psi(x,y,z)-E\Psi(x,y,z)=0 \tag{3.57}$$

Para trabalharmos com coordenadas esféricas, além de converter seus valores das coordenadas originalmente utilizadas, deve-se considerar posição da partícula α como sendo o ponto zero do sistema além de ser o centro de massa do sistema, o que é possível, uma vez que, a massa do núcleo é muito maior que o elétron, com isso, o operador laplaciano é escrito como:

$$\nabla_x^2+\nabla_y^2+\nabla_z^2=\frac{\partial^2}{\partial^2 r}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{l(l+1)}{r^2} \tag{3.58}$$

Como o momento angular não depende de interações centrais, tanto em mecânica clássica quanto quântica, pode-se separar o termo não dependente da distância, logo, a função de onda pode ser convertida de forma simplificada como:

$$\Psi(x,y,z)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{3.59}$$

Podemos solucionar a equação de Schrodinger para a parte $R_{nl}(r)$ da função de onda, portanto a equação diferencial a ser resolvida para o caso em que a interação elétron-nucleon é nula $g=0$ é dada por:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[-\frac{\partial^2}{\partial^2 r}-\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{nl}(r)=ER_{nl}(r) \tag{3.60}$$

Para objetivos de simplificação da notação, consideremos:

$$k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2} \tag{3.61}$$

logo:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial^2 r}-\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{nl}(r)=k^2R_{nl}(r) \tag{3.62}$$

Podemos, para manter uma notação mais concisa, realizar no sistema a substituição $\rho=kr$ na equação diferencial, o que resulta:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial^2 \rho}-\frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}+\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R_{nl}(\rho)+R_{nl}(\rho)=0 \tag{3.63}$$

Novamente, substituindo na equação 3.63 a função de onda em relação a distância pela

igualdade:

$$R_{nl}(\rho) = \frac{u_{nl}(\rho)}{\rho} \tag{3.64}$$

assim, temos a equação diferencial abaixo:

$$\frac{\partial^2 u_{nl}(\rho)}{\partial^2 \rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u_{nl}(\rho) + u_{nl}(\rho) = 0 \tag{3.65}$$

essa é a clássica equação diferencial de Bessel em coordenadas esféricas, cuja a solução são as soluções de Bessel.

$$j_l(\rho) = (-1)^l \left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\right)^l \left(\frac{sen(\rho)}{\rho}\right) \tag{3.66}$$

$$n_l(\rho) = -(-1)^l \left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\right)^l \left(\frac{cos(\rho)}{\rho}\right) \tag{3.67}$$

no qual também pode ser possível escrever a solução como forma de função complexa:

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + i n_l(\rho) \tag{3.68}$$

em que a função conjugada pode ser escrita por:

$$h_l^{(2)}(\rho) = \left[h_l^{(1)}(\rho)\right]^* \tag{3.69}$$

com isso, a função de onda é a combinação linear dessas equações:

$$u_{nl}(\rho) = A j_l(\rho) + B n_l(\rho) \tag{3.70}$$

Como serão estudados sistemas de gases ultrafrios podemos considerar o momento das partículas $l = 0$, desconsiderando a energia cinética orbital.

Aplicando as condições de contorno temos $u_{nl}(a) = 0$, logo:

$$u_{n0}(\rho) = A j_0(\rho) \tag{3.71}$$

Sendo $j_0(ka) = 0$, por razões de existência e consistência.

$$u_{n0}(kr) = Akr\, j_0(kr)\, Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{3.72}$$

$$R_{n0}(kr) = A j_0(k_{n0} r)\, Y_{0m}(\theta, \phi)) \tag{3.73}$$

Agora, ao descrever a função de onda espalhada temos:

$$R_{n0}(kr) = \left(1 - Be^{-\gamma r}\right) \frac{A}{kr} j_0(k_{n0} r) \tag{3.74}$$

consequentemente conclui-se:

$$R_{n0}(kr) = A\left(1 - Be^{-\gamma r}\right) \frac{sen(kr)}{kr} \tag{3.75}$$

ao aplicar essa função de onda na equação de Schrodinger defina anteriormente:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial^2 r} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + g\delta(r)\right] A\left(1 - Be^{-\gamma|r|}\right) \frac{sen(kr)}{kr} = E\left(1 - Be^{-\gamma r}\right) \frac{sen(kr)}{kr} \tag{3.76}$$

Serão definidas a seguir, para organizar as operações com derivadas, as funções:

$$R_{n0}(kr) = A \cdot f(r) \cdot g(r) \tag{3.77}$$

em que

$$f(r) = \left(1 - Be^{-\gamma|r|}\right) \tag{3.78}$$

$$g(r) = \frac{\sin(kr)}{kr} \tag{3.79}$$

assim:

$$f'(r) = B\gamma sign(r) e^{-\gamma|r|} \tag{3.80}$$

$$f''(r) = -B\gamma^2 e^{-\gamma|r|} + 2B\gamma\delta(r) e^{-\gamma|r|} \tag{3.81}$$

$$g'(r) = \frac{k\cos(kr)}{kr} - \frac{\sin(kr)}{kr^2} \tag{3.82}$$

$$g''(r) = -\frac{k^2\sin(kr)}{kr} - \frac{2k\cos(kr)}{kr^2} + \frac{2\sin(kr)}{kr^3} \tag{3.83}$$

portanto:

$$\nabla^2 = A\left[f''(r)g(r) + 2f'(r)g'(r) + f(r)g''(r) + \frac{2}{r}\left(f'(r)g(r) + f(r)g'(r)\right)\right] \tag{3.84}$$

Realizando as substituições adequadas a equação de Schrodinger é descrita como:

$$\begin{aligned} EA\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\frac{sen\,(kr)}{kr} = A[&-\left(-B\gamma^2e^{-\gamma|r|}+2B\gamma\delta\,(r)\,e^{-\gamma|r|}\right)\frac{\sin\,(kr)}{kr} \\ &-2B\gamma\text{sign}\,(r)\,e^{-\gamma|r|}\left(\frac{kcos(kr)}{kr}-\frac{sin(kr)}{kr^2}\right) \\ &-\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\left(-\frac{k^2sin(kr)}{kr}-\frac{2kcos(kr)}{kr^2}+\frac{2sin(kr)}{kr^3}\right) \\ -\frac{2}{r}&\left(B\gamma\text{sign}\,(r)\,e^{-\gamma|r|}\frac{\sin\,(kr)}{kr}+\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\left(\frac{kcos(kr)}{kr}-\frac{sin(kr)}{kr^2}\right)\right) \\ &+g\delta\,(r)\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\frac{sin(kr)}{kr}] \end{aligned} \tag{3.85}$$

Para eliminar os termos delta de Dirac é necessário respeitar a igualdade:

$$2B\gamma+g\,(1-B)=0 \tag{3.86}$$

portanto:

$$B=\frac{g}{g-2\gamma} \tag{3.87}$$

enfim:

$$\begin{aligned} A[&-\left(-B\gamma^2e^{-\gamma|r|}+2B\gamma\delta\,(r)\,e^{-\gamma|r|}\right)\frac{\sin\,(kr)}{kr}-2B\gamma\text{sign}\,(r)\,e^{-\gamma|r|}\left(\frac{kcos(kr)}{kr}\right) \\ &-\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\left(-\frac{k^2sin(kr)}{kr}\right)-\frac{2}{r}\left(B\gamma\text{sign}\,(r)\,e^{-\gamma|r|}\frac{\sin\,(kr)}{kr}\right) \\ &+g\delta\,(r)\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\frac{sin(kr)}{kr}]=EA\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\frac{sen\,(kr)}{kr} \end{aligned} \tag{3.88}$$

Com o uso dos princípios de teoria de perturbação podemos encontrar a energia do sistema interagente com a aproximação de ordem zero a seguir:

$$B\gamma^2-2B\gamma\text{sign}\,(r)\left(\frac{cos(kr)}{r}\right)+k^2\,(1-B)-\frac{2}{r}\,(B\gamma\text{sign}\,(r))=E\,(1-B) \tag{3.89}$$

Eliminando os termos $\text{sign}\,(r)$ encontra-se:

$$E\,(B)=\frac{\gamma^2B}{1-B}+k^2 \tag{3.90}$$

e a energia em função da intensidade de interação a partir da substituição:

$$E\,(g)=\frac{g\gamma}{2}+k^2 \tag{3.91}$$

A seguir trabalharemos com as seguintes aproximações para muito r pequeno:

$$e^{-\gamma|r|} \cong (1-\gamma sgn(r)r) \tag{3.92}$$

$$\frac{cos(kr)}{kr} \cong \left(\frac{1}{kr}-\frac{kr}{2}\right) \tag{3.93}$$

$$\frac{\sin(kr)}{kr} \cong \left(1-\frac{(kr)^2}{6}\right) \tag{3.94}$$

Para encontrar energia em função da intensidade de acoplamento com a aproximação de primeira ordem para a função de onda $R_{n0}(kr)$.

$$\left[-\left(B\gamma^2\gamma sgn(r)r\right)+2B\gamma ksgn(r)\frac{kr}{2}+k^2\gamma Bsgn(r)r+\frac{2}{r}\left(B\gamma sgn(r)\frac{(kr)^2}{6}\right)\right]=EB\gamma sgn(r)r \tag{3.95}$$

$$E=\left[2k^2-\gamma^2+\frac{k^2}{3}\right] \tag{3.96}$$

Temos a energia em aproximação de primeira ordem da função de onda como:

$$E=\left[\frac{7k^2}{3}-\gamma^2\right] \tag{3.97}$$

por fim, o termo γ em função de g, por substituição, é:

$$\gamma^2+\frac{g\gamma}{2}-\frac{4k^2}{3}=0 \tag{3.98}$$

$$\gamma=-\frac{g}{4}+\sqrt{\frac{g^2}{16}+\frac{4k^2}{3}} \tag{3.99}$$

3.9 Conservação de energia e momento relativísticos do átomo de hélio no estudo das interações entre partículas

A metodologia que empregamos para a solução da equação de Schrödinger $H\Psi = E\Psi$ corresponde à utilização da solução ansatz desenvolvida em (Guimarães e Miranda, 2018), uma vez que a interação coulombiana foi substituída pelo potencial de Huang, dado por $g\delta(\vec{r}_i)$, onde g é a constante de acoplamento efetiva. A solução ansatz permite a determinação da constante de acoplamento efetiva em função da diferença de energia entre a autofunção interagente ($g \neq 0$)

para a autofunção não interagente ($g = 0$). Por outro lado, essa diferença de energia também pode ser determinada através das relações de conservação de energia e momento relativísticos na colisão elétron/partícula, resultando em uma expressão E_g, o acoplamento efetivo, em função da energia e dos momentos trocados.

O Quadri-vetor energia-momento do núcleo é definido por:

$$P_\mu = \begin{pmatrix} P_0 \\ P_1 \\ P_2 \\ P_3 \end{pmatrix} \tag{3.100}$$

Em que o termo zero representa a energia do sistema e o restante são os momentos do sistema partícula α.

Considerando o sistema do átomo de hélio, o nosso objetivo é determinar o estado de energia e momento da partícula α e, a partir da transferência dessas quantidades, descrever a energia de interação entre partículas; para isso, sabemos que um elétron relativístico incidirá no núcleo (que consideraremos como parado, portanto o tri-momento zerado, $P_a = 0$) resultando após a colisão a energia-momento trocados como o elétron é:

$$q^\mu = \begin{pmatrix} \frac{E-E'}{c} \\ p_x - p'_x \\ p_y - p'_y \\ p_z - p'_z \end{pmatrix} \tag{3.101}$$

Utilizando o princípio de conservação de energia relativística e de momento antes e depois da colisão, temos:

$$E_{incio} = |E_i - E_f| + m_{He_i} c^2 \tag{3.102}$$

$$E_{fim} = \sqrt{m_{He_i}^2 c^4 + |q|^2 c^2} + E_g \tag{3.103}$$

onde E_g é a energia do primeiro estado excitado do próton confinado.

Temos:

$$\left|E_i - E_f\right| + m_{He} c^2 = E_g + \sqrt{m_{He}^2 c^4 + |q|^2 c^2} \tag{3.104}$$

$$\left|E_i - E_f\right|^2 + m_{He}^2 c^4 + E_g^2 + 2\left|E_i - E_f\right| m_{He} c^2 - 2E_g\left(\left|E_i - E_f\right| + m_{He} c^2\right) = m_{He}^2 c^4 + |q|^2 c^2 \tag{3.105}$$

Por definição o módulo do vetor energia-momento trocado é:

$$|Q|^2 = |q|^2 - \left|\frac{E_i - E_f}{c}\right|^2 \tag{3.106}$$

Por conseguinte, com a substituição dos termos em questão pelo termo de energia momento trocado encontraremos:

$$E_g^2 + 2\left|E_i - E_f\right| m_{He}^2 c^4 - 2E_g\left(\left|E_i - E_f\right| + m_{He}c^2\right) - |Q|^2 c^2 = 0 \tag{3.107}$$

$$E_g^2 - 2E_{incio}E_g + 2\left|E_i - E_f\right| m_{He}c^2 - |Q|^2 c^2 = 0 \tag{3.108}$$

$$E_g = E_{incio} \pm \sqrt{E_{incio}^2 - 2\left|E_i - E_f\right| m_{He}c^2 + |Q|^2 c^2} \tag{3.109}$$

3.9.1 Obtenção da massa faltante (m_{miss})

Primeiramente, para entender o que é massa faltante, é preciso ter em mente que uma partícula pode, dependendo da colisão relativística, ganhar ou perder energia, momento ou massa. Em uma colisão entre um elétron e uma partícula α, a seguir temos a descrição do estado de energia antes e depois da colisão:

$$E_{início} = |E_i - E_f| + m_{He_i}c^2 \tag{3.110}$$

$$E_{fim} = \sqrt{m_{He_f}^2 c^4 + |q|^2 c^2} \tag{3.111}$$

Consideraremos no sistema a velocidade da luz unitária c=1 e a conservação de energia temos:

$$\left|E_i - E_f\right|^2 + 2m_{He_i}\left|E_i - E_f\right| + m_{He_i}^2 = m_{He_f}^2 + |q|^2 \tag{3.112}$$

A partir da relação acima podemos encontrar a massa final através das manipulações a seguir:

$$\left|E_i - E_f\right|^2 + 2m_{He_i}\left|E_i - E_f\right| + m_{He_i}^2 = m_{He_f}^2 + |q|^2 \tag{3.113}$$

$$m_{He_f}^2 = \left|E_i - E_f\right|^2 + 2m_{He_i}\left|E_i - E_f\right| + m_{He_i}^2 - |q|^2 \tag{3.114}$$

Por definição o modulo do vetor energia-momento trocado é:

$$|Q|^2 = |q|^2 - \left|\frac{E_i - E_f}{c}\right|^2 \tag{3.115}$$

para c=1 tem-se:

$$|Q|^2 = |q|^2 - \left|E_i - E_f\right|^2 \tag{3.116}$$

substituindo a eq. 3.116 na equação 3.114 temos:

$$m_{He_f}^2 = m_{He_i}^2 + 2m_{He_i}\left|E_i - E_f\right| - |Q|^2 \tag{3.117}$$

$$m_{Hef} = \sqrt{m_{He_i}^2 + 2m_{He_i}\left|E_i - E_f\right| - |Q|^2} \tag{3.118}$$

Por definição, a massa faltante é a diferença das quantidade de massa antes e depois.

$$m_{miss} = m_{Hef} - m_{He_i} \tag{3.119}$$

ou seja:

$$m_{miss}(|Q|^2) = \sqrt{m_{He_i}^2 + 2m_{He_i}\left|E_i - E_f\right| - |Q|^2} - m_{He_i} \tag{3.120}$$

4 ESPALHAMENTO DE PARTÍCULAS α

Após termos finalizado toda a análise de vários modelos de interação elétron-núcleon, serão usadas certas definições retiradas desses sistemas para descrever o espalhamento de partículas partir da descrição de parâmetros (amplitude de espalhamento, seção de choque etc.) e finalmente compará-los com os trabalhos de Kegel (2023).

4.1 Modelo adotado para o projeto

Neste capítulo será estudado o espalhamento de elétrons colidindo com um sistema de gases ultrafrios compostos por partículas α; para esse sistema em questão será adotada a partir da equação de Shrodinger desse fenômeno:

$$H = \sum_{i=1}^{2} \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i}\Psi + v_{eff}\left(\vec{r}_i\right)\Psi + g\sum_{i=1}^{2}\delta\left(\vec{r}_i\right)\Psi \tag{4.1}$$

No qual:

- $g\sum_{i=1}^{2}\delta\left(\vec{r}_i\right)$ é o termo de interação coulombiana do elétron (aproximado como um potencial delta de Huang) com a partícula α incidente, como essas interações serão consideradas de campo médio podemos considerar um fenômeno equivalente como originado de um único ponto $g\delta\left(\vec{r}\right)$;
- $v_{eff}\left(\vec{r}_i\right)$ representa o campo forte gerado entre os prótons e nêutrons do átomo, que nesse sistema será aproximado como um poço de potencial esférico de raio a;
- O momento do sistema será considerado como de uma única partícula espalhada.

A equação de Shrodinger que descreve o sistema espalhado é escrita como:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[-\frac{\partial^2}{\partial^2 r} - \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l\left(l+1\right)}{r^2}\right]R_{nl}\left(r\right) = ER_{nl}\left(r\right) \tag{4.2}$$

Isso levando em consideração que a partícula incidente (elétron) só pode existir na região não infinita de potencial.

Lembrando que a função de onda completa é dada por:

$$\Psi\left(x,y,z\right) = R_{nl}\left(r\right)Y_{lm}\left(\theta,\phi\right) \tag{4.3}$$

Em que o termo $Y_{lm}\left(\theta,\phi\right)$ trata-se do trecho que remete ao momento angular da partícula cuja a solução é dada na seção de anexo E; durante a análise de espalhamento não será considerada a mudança do momento angular da partícula durante sua colisão com o elétron, isso se deve pelo fato de estarmos estudando o sistema como um gás ultrafrio, logo $l = 0$, portanto a equação

diferencial relativa à dinâmica da função de onda é descrita por:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[-\frac{\partial^2}{\partial^2 r}-\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right]R_{nl}(r)=ER_{nl}(r) \tag{4.4}$$

O qual trata-se de mesma estruturação do sistema já solucionado da seção anterior. A partir de agora usaremos esta solução para o estudo de espalhamento e por conseguinte compará-lo com os estudos de Kegel (2023).

4.2 Seção de choque

Para entender melhor a descrição do espalhamento quântico é necessário definir a seção de choque, para isso, imaginemos um sistema simples, clássico, uma partícula incidente em um centro de espalhamento. No nosso caso, queremos trabalhar com uma partícula clássica pontual sendo disparada contra uma região compacta (uma esfera), que chega com uma energia E e um parâmetro de impacto b (distância entre a trajetória retilínea incidente e a reta paralela que passa pelo centro da esfera), após o impacto, pode-se descrever um ângulo de espalhamento θ. De maneira simplificada, considera-se a trajetória do elétron em um mesmo plano e que o recuo da partícula incidida com maior massa próximo de zero. Em se tratando de teorias clássicas, o nosso objetivo é encontrar ângulo de espalhamento θ com base no parâmetro de impacto b de acordo com a figura a seguir:

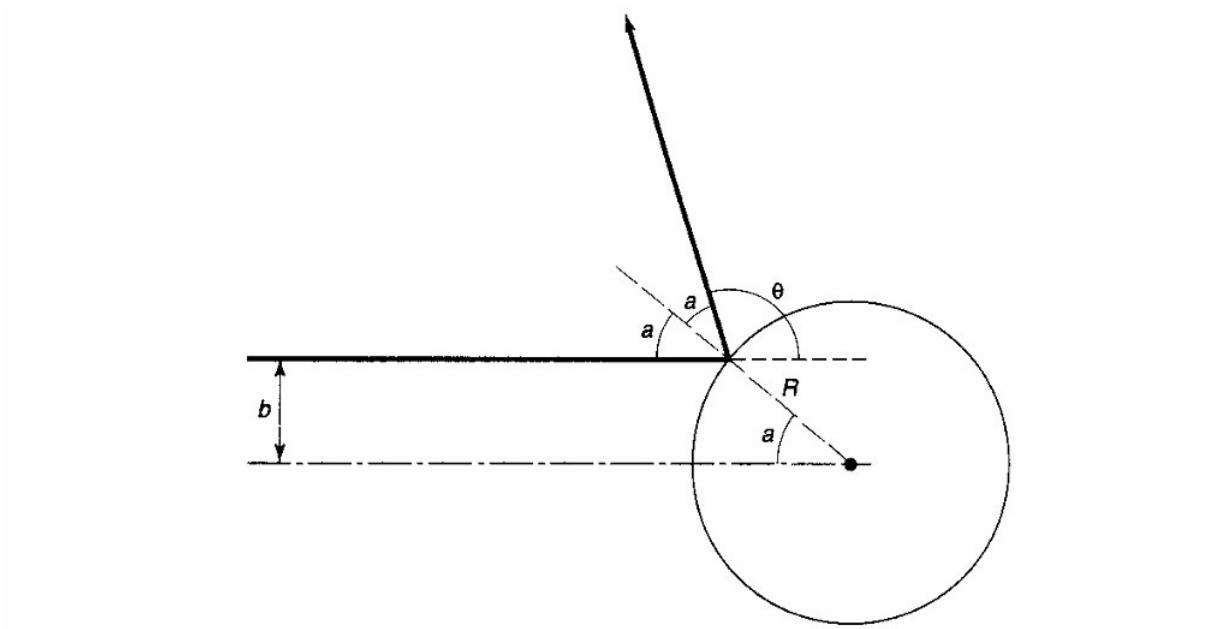

Figura 4: *espalhamento clássico de partícula sobre esfera compacta (Griffiths)*

Aplicando-se geometria euclidiana básica temos:

$$b=R\sin\left(\frac{\pi}{2}-\frac{\theta}{2}\right)=R\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{4.5}$$

assim por análises de espalhamento clássicas conclui-se que:

$$\theta = \begin{cases} 2\cos^{-1}\left(\frac{b}{R}\right), & \text{para } b \leq R \\ 0, & \text{para } b > R \end{cases} \tag{4.6}$$

No caso geral, a partícula incidente passará por uma área generalizada $d\sigma = bdbd\phi$ e será refletida passando por um ângulo sólido $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$, Podemos definir partindo desses

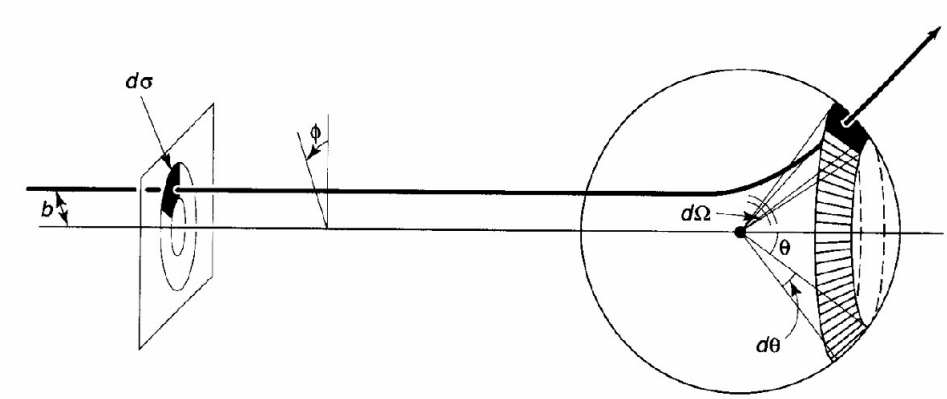

Figura 5: *espalhamento genérico de partícula, de uma área infinitesimal inicial incidente para área infinitesimal final espalhada (Griffiths)*

valores a relação de proporcionalidade a seguir:

$$d\sigma = D(\theta)\, d\Omega \tag{4.7}$$

No qual $D(\theta)$ é o valor que estará relacionado a seção de choque de espalhamento, em que ao substituir os valores temos:

$$D(\theta) = \frac{b}{\sin\theta}\left|\frac{db}{d\theta}\right| \tag{4.8}$$

Ao se utilizar a equação 4.9 pode-se descrever a seção de choque total:

$$\sigma = \int D(\theta)\, d\Omega \tag{4.9}$$

De modo simplificado, a área total do feixe incidente σ é espalhada pelo alvo pela área Ω. Por exemplo, no caso do espalhamento por esfera compacta,

$$\sigma = \frac{R^2}{4}\int d\Omega = \pi R^2 \tag{4.10}$$

Na teoria quântica do espalhamento, contudo, opera-se de forma diferente, não trajetórias bem determinadas mas ondas incidentes relacionadas a probabilidades. Imaginamos por exemplo, uma onda plana incidente, $\psi(z) = Ae^{ikz}$, que se move na direção z e encontra um potencial de

espalhamento produzindo uma onda esférica de saída (Fig. 6). Isto é, buscamos soluções para a equação de Schrodinger na forma geral

$$\psi(r,\theta) \cong A\left[e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right] \tag{4.11}$$

em que o termo e^{ikz} remete a onda incidente e $f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$ é a onda espalhada esfericamente (As

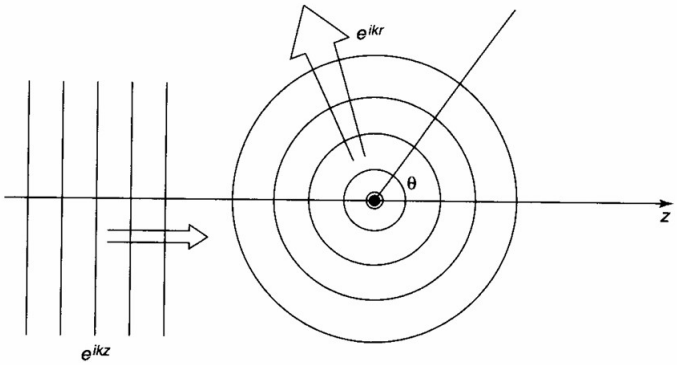

Figura 6: *espalhamento da função de onda sobre esfera compacta (Griffiths)*

ondas esféricas carregam um fator de $\frac{1}{r}$, pois essa porção de $|\psi|^2$ deve seguir $\frac{1}{r^2}$ para conservar a probabilidade.) O número de onda $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ está relacionado à energia das partículas incidentes de modo usual.

Como fizemos anteriormente, devemos supor que o alvo seja azimutalmente simétrico; no caso mais geral, a amplitude f da onda esférica de saída poderia depender de, bem como de e. O problema todo está em determinar a amplitude de espalhamento $f(\theta)$; ela estabelece a probabilidade de espalhamento em uma determinada direção θ, e, portanto, está relacionada à seção de choque diferencial. Na verdade, a probabilidade de que a partícula incidente que se move em uma velocidade v passe através da área infinitesimal em um tempo dt é igual ao quadrado absoluto da amplitude de espalhamento, que é obtida ao resolvermos a equação de Schrodinger).

$$dP = |\psi_{incidente}|^2 dV = |A|^2 (vdt)\, d\sigma \tag{4.12}$$

Porém, isso se iguala à probabilidade de que a partícula se espalhe no ângulo sólido correspondente $d\Omega$:

$$dP = \left|\psi_{espalhada}\right|^2 dV = |A|^2 \frac{|f|^2}{r^2}(vdt)\, r^2 d\Omega \tag{4.13}$$

a partir da qual, $d\sigma = |f|^2 d\Omega$, e, portanto,

$$D(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \tag{4.14}$$

o quadrado da amplitude de transição é a definição do fator de forma que será usada nas descrições posteriores.

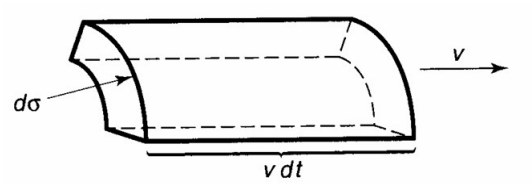

Figura 7: *volume infinitesimal de integração da função de onda incidente (Griffiths)*

4.3 Fator de forma da amplitude de transição

Tendo em vista todas as soluções anteriormente envolvendo partículas α armadilhadas sofrendo choques por elétrons, foi possível perceber algo muito significativo, dependendo das condições nas quais prendem-se esses corpos (armadilhas óticas) podem-se encontrar soluções como,

$$\psi_g = A\left(1 - Be^{-\gamma r}\right)\frac{1}{kr}j_0\left(kr\right) \tag{4.15}$$

O sistema elétron-próton confinado é descrito pelo elemento de matriz de transição,

$$\left\langle P:\psi_1;E:p_i'\left|V_g\right|P:\psi_0;E:p_i\right\rangle \tag{4.16}$$

em que o próton sofre uma transição do estado fundamental ψ_0 para o primeiro estado excitado ψ_1, o elétron vai do estado (auto-estado do momento) p_i para o estado p_i' e V_g é o potencial de espalhamento entre o elétron e o próton.

a amplitude de transição terá sua descrição baseada em:

$$\left\langle \psi_1\left|V_g\right|\psi_0\right\rangle \tag{4.17}$$

Como $\mid \psi_0\rangle$ e $\mid \psi_1\rangle$ são autoestados estacionários da função de onda do próton confinado, elas não são autofunções do hamiltoniano interagente (com o termo de potencial em g), mas do hamiltoniano livre, chamando o hamiltoniano livre de H_0 o hamiltoniano interagente é dado por:

$$H_i = H_0 + V_g \tag{4.18}$$

com

$$V_g = -g\delta\left(\vec{r}\right) \tag{4.19}$$

como $|\,\psi_0\rangle$ e $|\,\psi_1\rangle$ são ortogonais e autofunções de H_0, temos:

$$\langle\psi_1|H_i|\,\psi_0\rangle = \left\langle\psi_1\left|H_0+V_g\right|\psi_0\right\rangle = \langle\psi_1|H_0|\,\psi_0\rangle + \left\langle\psi_1\left|V_g\right|\psi_0\right\rangle = \left\langle\psi_1\left|V_g\right|\psi_0\right\rangle \tag{4.20}$$

portanto o fator de forma pode ser avaliado por:

$$F = \left|\left\langle\psi_1\left|V_g\right|\psi_0\right\rangle\right|^2 = \left|\langle\psi_1|H_i|\,\psi_0\rangle\right|^2 \tag{4.21}$$

Não sabemos como H_i atua em $|\,\psi_0\rangle$ e $|\,\psi_1\rangle$ mas sabemos como ela atua em $|\,\psi_{ng}\rangle$:

$$H_i|\,\psi_{ng}\rangle = E_{ng}|\,\psi_{ng}\rangle \tag{4.22}$$

e a matriz identidade,

$$I = \sum_j |\,\psi_{ng}\rangle\langle\,\psi_{ng}| \tag{4.23}$$

Assim introduzindo uma relação de completeza na base dos auto estados de H_i, temos:

$$\begin{aligned}\left\langle\psi_1\left|V_g\right|\psi_0\right\rangle &= \langle\,\psi_1|\,V_g\sum_j|\,\psi_{gj}\rangle\langle\,\psi_{gj}|\;\;|\,\psi_0\rangle = \sum_j\left\langle\psi_1\left|V_g\right|\psi_{gj}\right\rangle\langle\,\psi_{gj}|\,\psi_0\rangle \\ &= \sum_j\left\langle\psi_1\left|E_g\right|\psi_{gj}\right\rangle\langle\,\psi_{gj}|\,\psi_0\rangle \;= \sum_j E_g\langle\,\psi_1|\,\psi_{gj}\rangle\langle\,\psi_{gj}|\,\psi_0\rangle \\ &= \sum_j E_{ng}\langle\,\psi_1|\,\psi_{gj}\rangle\langle\,\psi_{gj}|\,\psi_0\rangle \cong E_0\langle\,\psi_1|\,\psi_{gj}\rangle\langle\,\psi_{gj}|\,\psi_0\rangle\end{aligned} \tag{4.24}$$

essa aproximação no final vem do fato de como estamos considerando um regime de baixas energias não é necessário considerar todos os termos do somatório mas somente o termo de transição do estado fundamental para o primeiro estado excitado. Para calcular o fator de forma desse espalhamento devemos escrever tais termo como:

$$\langle\,\psi_1|\,\psi_{gj}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r\psi_1^*(r)\,\psi_{gj}(r) \tag{4.25}$$

$$\langle\,\psi_{gj}|\,\psi_0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r\psi_{gj}^*(r)\,\psi_0(r) \tag{4.26}$$

Considerando que os estados interagentes de maior energia devem ter uma pequena sobreposição entre os estados não interagentes em questão, aproximaremos o fator de forma por:

$$F = \left|E_0\langle\,\psi_1|\,\psi_{gj}\rangle\langle\,\psi_{gj}|\,\psi_0\rangle\right|^2 \tag{4.27}$$

As funções de onda para o estado fundamental e primeiro estado excitado de um próton

confinado no poço de potencial esférico.

$$R_0(kr) = A_0 \frac{sen(k_0 r)}{k_0 r} \tag{4.28}$$

$$R_1(kr) = A_1 \frac{sen(k_1 r)}{k_1 r} \tag{4.29}$$

No qual k_0 e k_1 são os números de onda que satisfazem as condições de contorno correspondentes aos 2 primeiros estados de menor energia e A_0 e A_1 são as constantes de normalização.

As funções de onda interagentes são dadas por:

$$R_{n0}(kr) = A_n \left(1 - Be^{-\gamma r}\right) \frac{sen(kr)}{k_n r} \tag{4.30}$$

com:

$$B = \frac{g}{g - 2\gamma} \tag{4.31}$$

$$\gamma = -\frac{g}{4} + \sqrt{\frac{g^2}{16} + \frac{4k^2}{3}} \tag{4.32}$$

Como calculado anteriormente, e k_0 e k_1 novamente, os números de onda que satisfazem as condições de contorno para $n = 0$ e $n = 1$.

Os números de onda k_n são determinados partir das condições de contorno que devem se anular em $r = a$, sendo a o raio do núcleo de Hélio, em nosso modelo. Considerando apenas as funções de onda de simetria esférica $(s, l = 0)$, temos:

$$R_n(kr) = A_n \frac{sen(kr)}{k_n r} \tag{4.33}$$

com:

$$k_n = \frac{(n+1)\pi}{a} \tag{4.34}$$

As mesmas condições de fronteira se aplicam em resultando Assim, nos mesmos números de onda.

$$R_n(kr) = A_n \frac{sen(kr)}{k_n r} \tag{4.35}$$

$$R_{n0}(kr) = A_n \left(1 - Be^{-\gamma r}\right) \frac{sen(kr)}{k_n r} \tag{4.36}$$

As constantes de normalização são determinadas:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3 r \psi_0^* (r) \psi_0 (r) = 1 \tag{4.37}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3 r \psi_1^* (r) \psi_1 (r) = 1 \tag{4.38}$$

Em que B e γ já foram determinadas, e a energia dos estados interagentes é dada por:

$$E = k^2 + \frac{g}{2}\gamma \tag{4.39}$$

4.4 Resultados Numéricos

Em 2023, Kegel e colaboradores realizaram um conjunto de experimentos com o objetivo de investigar com alta precisão o fator de forma da ressonância de monopólo existente no espalhamento do núcleo de Hélio por elétrons, cobrindo um amplo intervalo de momentos quadrados, uma vez que os dados anteriores eram fragmentados e pouco precisos. A intenção foi obter medidas contínuas e confiáveis.

Foi utilizado como fonte dos elétrons feixes contínuo com energias de 450, 690 e 795 MeV, colidindo com gás hélio criogênico encapsulado em célula de alumínio, com controle de densidade e temperatura. Dois espectrômetros magnéticos cobrindo ângulos que deram acesso direto ao pico elástico e ao pico de ressonância monopolar ($\sim$ 20MeV acima do estado fundamental) foram usados como detectores. A montagem experimental separou, de forma eficiente, os eventos elásticos (pico em zero) e os de ressonância ($\sim$ 20MeV), permitindo análise limpa dos dois processos simultaneamente.

A fig. 8 abaixo traz o espectro de eventos em função da massa faltante obtido por Kegel e colaboradores (adaptada de Kegel [9]). Em azul, são mostrados os dados para energia de feixe de 450 MeV e um ângulo central de espalhamento de 20,1°. Os dados são comparados com a simulação do pico elástico do ^4He (verde) e com as contribuições de fundo (BG) do alvo da célula de Alumínio (laranja).

Usando nossos resultados para os autoestados do nosso modelo de núcleon confinado por um poço de potencial esférico interagindo com um alvo central, como uma aproximação para a interação elétron-partícula α, estimamos numericamente a probabilidade de ocorrência da transição do estado O_1^+ para o estado O_2^+ do núcleo (ou seja, em nosso modelo, do estado fundamental $\mid \psi_1\rangle$ em um instante de tempo anterior à colisão para o estado fundamental $\mid \psi_2\rangle$ em um instante após a colisão), em função do acoplamento g da interação de Huang, que modela a interação entre o nucleon e o elétron incidente. Esta probabilidade é dada por:

$$Probabilidade = \left|\langle \psi_1 (t = -\infty) \mid \psi_2 (t = +\infty)\rangle\right|^2 \tag{4.40}$$

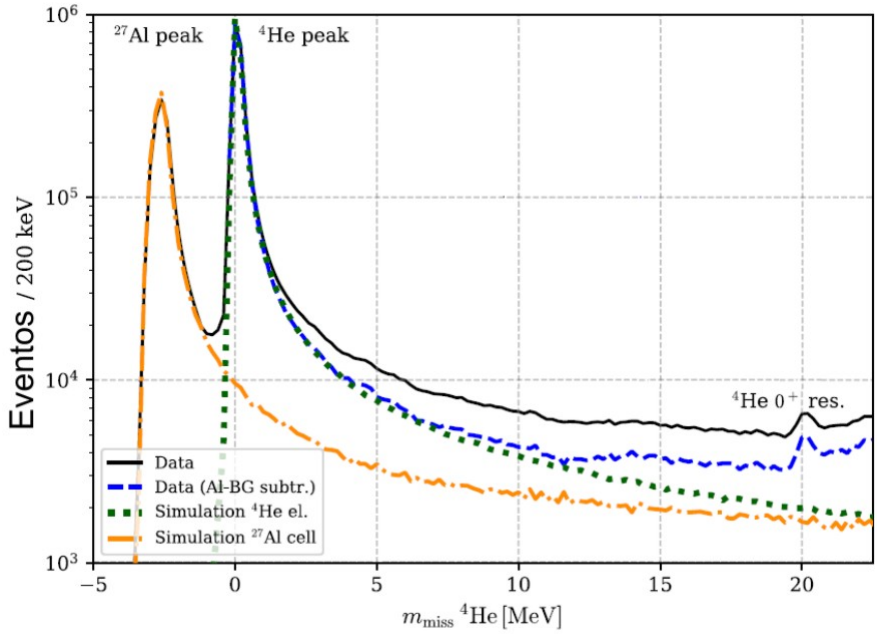

Figura 8: *Espectro de eventos em função da massa faltante obtido por Kegel e colaboradores (adaptada de Kegel [9]). Em azul, são mostrados os resultados de interesse, dados para energia de feixe de 450 MeV e um ângulo central de espalhamento de 20,1°. As demais curvas não se aplicam a nosso estudo.*

Vamos considerar que a interação entre o elétron incidente e o núcleon alvo ocorre durante um curto intervalo de tempo, $t = 2\tau$. Desta forma, para calcularmos a probabilidade acima, consideramos que os estados não se modificam nos intervalos entre $-\infty \leq t \leq -\tau$ e $\tau \leq t \leq +\infty$. Para calcular a amplitude de probabilidade de transição, devemos evoluir o estado inicial $|\,\psi_1(-\tau)\rangle$ do instante de tempo $-\tau$ para o instante $t = 0$, assim como evoluir de volta $|\,\psi_2(\tau)\rangle$ do instante final τ para o instante $t = 0$, usando a equação de Schrodinger

$$\hat{H}|\,\Psi\rangle = i\hbar\frac{\partial|\,\Psi\rangle}{\partial t} \tag{4.41}$$

cuja a solução é:

$$|\,\psi(\tau)\rangle = exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau)|\,\psi(0)\rangle \tag{4.42}$$

Expandindo a solução para pequenos intervalos de τ, temos:

$$|\,\psi(\tau)\rangle \cong (1+\frac{i}{\hbar}\tau H)|\,\psi(0)\rangle \tag{4.43}$$

Aplicando 4.43, encontramos:

$$\langle\psi_1(0)\,| = \langle\psi_1(-\tau)\,|(1+\frac{i}{\hbar}\tau H) \tag{4.44}$$

e

$$|\psi_2(0)\rangle = (1+\frac{i}{\hbar}\tau H)|\psi_2(\tau)\rangle \tag{4.45}$$

obtendo:

$$\langle\psi_1(-\tau)|\psi_2(\tau)\rangle = \langle\psi_1|(1+\frac{i}{\hbar}\tau H)(1+\frac{i}{\hbar}\tau H)|\psi_2\rangle \tag{4.46}$$

Desta forma, a amplitude de probabilidade que procuramos é dada por:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_1(-\tau)|\psi_2(\tau)\rangle = \langle\psi_1|1+\frac{i}{\hbar}2\tau H|\psi_2\rangle \tag{4.47}$$

em que mantivemos apenas os termos de ordem 1 em τ, para manter a consistência com a expansão anteriormente realizada na exponencial. Os estados $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ não são autoestados do Hamiltoniano interagente H. No entanto, podemos introduzir uma relação de completeza nos autoestados de H (os estados interagentes $|\psi_{ng}\rangle$ que determinamos anteriormente), obtendo

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\langle\psi_1|1+\frac{i}{\hbar}2\tau H|\psi_{ng}\rangle\langle\psi_{ng}|\psi_2\rangle \tag{4.48}$$

Agora, como sabemos como o Hamiltoniano interagente age sobre os estados $|\psi_{ng}\rangle$, ou seja, como conhecemos as auto-energias dos auto-estados interagentes, obtemos:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}(1+\frac{i}{\hbar}2\tau E_{ng})\langle\psi_1|\psi_{ng}\rangle\langle\psi_{ng}|\psi_2\rangle \tag{4.49}$$

Finalmente, como determinamos explicitamente as expressões em função da direção radial dos estados $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ e $|\psi_{ng}\rangle$, as projeções $\langle\psi_1|\psi_{ng}\rangle$ e $\langle\psi_{ng}|\psi_2\rangle$ podem ser, em princípio, facilmente calculadas por

$$\langle\psi_1|\psi_{ng}\rangle = \int 4\pi r^2 A_1\frac{sin(k_1 r)}{k_1 r}A_{ng}(1+B_n e^{-\gamma_n r})\frac{sin(k_n r)}{k_n r}dr \tag{4.50}$$

e expressão semelhante para $\langle\psi_{ng}|\psi_2\rangle$. Como comentamos anteriormente, esses resultados podem ser escritos como função de apenas 1 parâmetro, a intensidade da interação de Huang g. Os resultados podem ser obtidos analiticamente, embora resulte em expressões consideravelmente longas. Dessa forma, foram gerados com auxílio do software de processamento algébrico Maple V. Na figura 9 trazemos a Probabilidade de ocorrência da transição$|\psi_1\rangle \rightarrow |\psi_2\rangle$ em função da intensidade de acoplamento g, calculada como descrito acima.

Observa-se um primeiro pico de maior intensidade, associado ao pico de espalhamento elástico do resultado experimental, e um segundo pico, a que estamos associando a ressonância de monopólo. Embora esse segundo pico seja mais acentuado do que no resultado experimental,

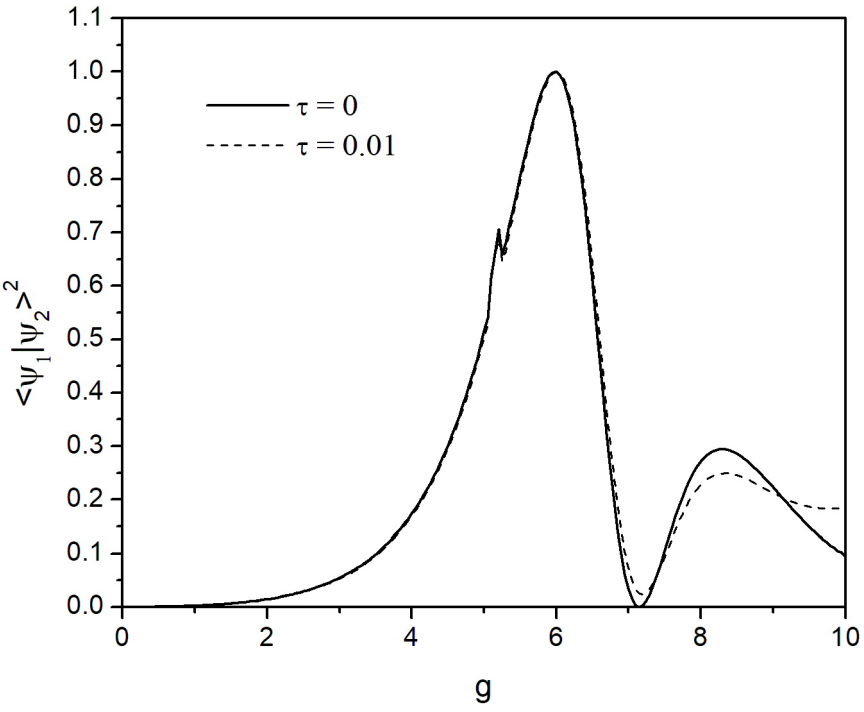

Figura 9: *A probabilidade de transição do estado fundamental para o primeiro estado excitado do núcleo de He em função da intensidade do acoplamento g. A linha sólida corresponde à interação instantânea ($\tau = 0$), e a linha tracejada ao valor $\tau = 0,01$.*

lembramos que nosso resultado corresponde a uma simplificação dos detalhes da interação forte, que mantém o nucleon confinado no núcleo, sendo substituída por um potencial do tipo poço esférico, e da interação eletromagnética entre o elétron incidente e o nucleon alvo, substituída pela interação de Huang. Dessa forma, podemos esperar que nossos resultados reproduzam apenas qualitativamente os resultados experimentais, resultados mais precisos deveriam levar em conta um melhor detalhamento das interações envolvidas. Também vale a pena observar que, na implementação numérica da expansão nos auto-estados $\mid \psi_{ng}\rangle$, introduzida na (Eq. 4.49), consideramos apenas os dois primeiros auto-estados de H, $\mid \psi_{1g}\rangle$ e $\mid \psi_{2g}\rangle$, que hipoteticamente fornecerão as maiores contribuições para a transição entre os estados $\mid \psi_1\rangle$ e $\mid \psi_2\rangle$. De fato, avaliamos os mesmos resultados apresentados na Fig. 9 introduzindo também o auto-estado $\mid \psi_{3g}\rangle$, o que introduziu correções de menor ordem, imperceptíveis na escala da mesma figura.

Para uma melhor comparação com os resultados experimentais obtidos por Kegel seus colaboradores, avaliamos também a massa faltante em função de g durante essa transição. O processo que avaliamos pode ser considerado como a representação da seguinte sequência de eventos: No instante inicial, temos um nucleon confinado no núcleo em seu estado fundamental, $\mid \psi_1\rangle$. Este nucleon é alvejado por um elétron incidente de alta energia, promovendo-o para um estado interagente $\mid \psi_{ng}\rangle$, a energia transferida para o nucleon é parametrizada pelo acoplamento g, e dada por $E_{ng} = (n\pi)^2 + \frac{1}{2}g\gamma_n$. Finalmente, após o fim da interação com o elétron, o nucleon

decai para o estado $\mid \psi_2\rangle$, emitindo energia $E = E_{ng} - E_2$. Estamos assumindo, em princípio, que toda a energia perdida na transição de $\mid \psi_{ng}\rangle$, para $\mid \psi_2\rangle$ seja emitida por radiação não detectada, correspondendo, assim, à massa faltante $m_{miss} = E_{ng} - E_2 = (n^2 - 4)\pi^2 + \frac{1}{2}g\gamma_n$. No resultado experimental de Kegel, a escala da massa faltante está deslocada para que $m_{miss} = 0$ coincida exatamente com o pico (máximo) do número de eventos. Dessa forma, para comparar nossos resultados com os resultados experimentais, deslocamos também nossa escala de forma a que os máximos teórico e experimental coincidam. Assim usamos, em nossos gráficos, a massa faltante deslocada,

$$m_{miss}(n) = (n^2 - 1,8317)\pi^2 + \frac{1}{2}g\gamma_n \tag{4.51}$$

Ressalvamos que a não coincidência entre o pico de probabilidade em nosso modelo e o pico do espalhamento elástico nos resultados experimentais precisa ser melhor entendida. Com essa escolha, a massa faltante pode então ser avaliada em função de g através da média ponderada da expressão acima pela probabilidade de ocorrência de cada rota $\mid \psi_1\rangle \rightarrow \mid \psi_{ng}\rangle \rightarrow \mid \psi_2\rangle$ resultando em

$$\langle m_{miss}\rangle = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} m_{miss}(n) \mid \langle \psi_1 \mid \psi_{ng}\rangle \langle \psi_{ng} \mid \psi_2\rangle \mid^2}{\sum_{n=1}^{\infty} \mid \langle \psi_1 \mid \psi_{ng}\rangle \langle \psi_{ng} \mid \psi_2\rangle \mid^2} \tag{4.52}$$

Por fim, com os resultados da probabilidade da transição $\mid \psi_1\rangle \rightarrow \mid \psi_2\rangle$ em função de g e de g em função de m_{miss}, invertendo-se a relação 4.51, obtemos $|\langle \psi_1 \mid \psi_2\rangle|^2 \times m_{miss}$, a ser comparado com os resultados experimentais de Kegel e colaboradores. Nossos resultados estão mostrados na Fig. 11. As probabilidades foram normalizadas para que $|\langle \psi_1 \mid \psi_2\rangle|^2{}_{max} = 1$, para a comparação dos resultados com diferentes valores de τ. Observa-se o comportamento qualitativamente similar ao apresentado nos resultados experimentais: a probabilidade de ocorrência de eventos apresenta um pico pronunciado em torno de $m_{miss} = 0$, decaindo à medida que m_{miss} cresce, com um segundo pico menor (porém bem mais pronunciado que o experimental, em nosso resultado) a um valor finito de $m_{miss} \approx 20,21MeV$. Para a conversão da escala de energia que utilizamos para a escala em MeV, devemos considerar que, em nossos cálculos, absorvemos inicialmente um fator $\hbar^2/2m$ e, posteriormente, o fator $1/a^2$, em nossa definição da energia E. Adicionalmente, devemos considerar que o núcleo de Hélio (partícula α) é constituída por dois prótons confinados (além de dois nêutrons), que, assumimos, interagem simultaneamente (e de forma independente, em nosso modelo) com o feixe de elétrons incidente, duplicando a energia perdida para cada valor de g. Assim, cada unidade da nossa escala utilizada corresponde a $2 \times \frac{\hbar^2}{2ma^2} = 4,166MeV$, onde usamos $\hbar = 1,0546 \times 10^{-33}Js$, e, para a massa do próton, $m = 1,6726 \times 10^{-27}kg$ Para o raio do poço de potencial esférico, a, consideramos que o raio estimado para o núcleo de Hélio é $r = 1,6782 \times 10^{-15}m$, e que o raio quadrático esperado para nosso nucleon confinado em um poço de potencial esférico, no estado fundamental, pode ser calculado de $\langle \psi_1 \left| r^2 \right| \psi_1\rangle$, resultando

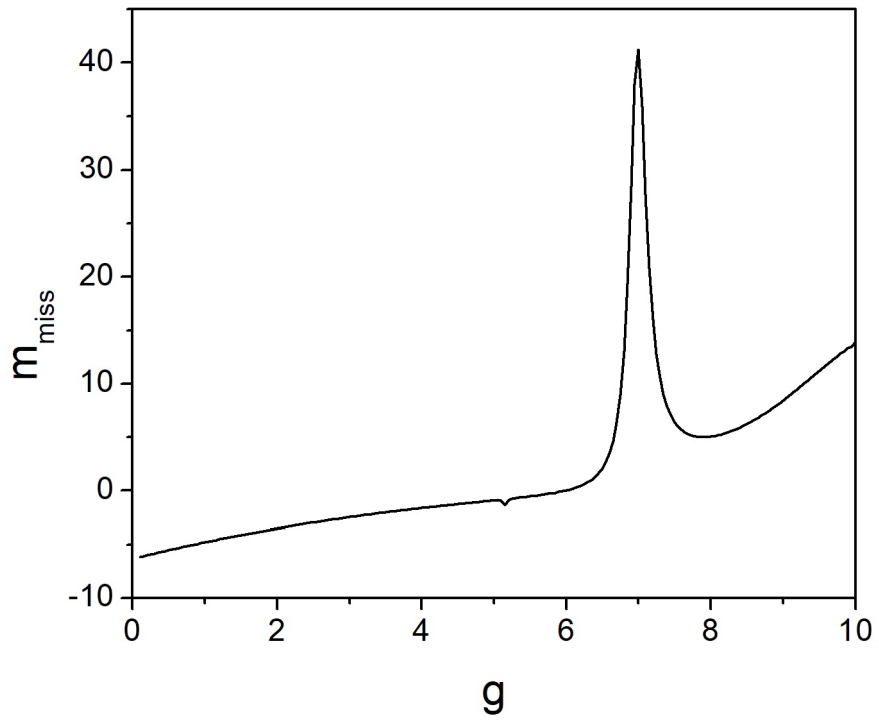

Figura 10: *O valor esperado da energia perdida no espalhamento inelástico (massa faltante) em função da intensidade do acoplamento g. O valor de m_{miss} está deslocado para que o pico correspondente ao espalhamento elástico teórico coincida com o experimental, conforme descrito no texto.*

em $\langle r^2 \rangle = 0,2827a^2$. Dessa forma, podemos estimar $a^2 = r^2/0.2827 = 0.9964 \times 10^{-29}m^2$, resultando em $a = 3.1565 \times 10^{-15}m$. Na Fig. 11, podemos constatar que o segundo pico (ressonância de monopólo) ocorre para $m_{miss} \approx 5,08$. Fazendo a conversão de nossa escala para uma escala em MeV, como descrito acima, esse segundo pico, em nossos resultados, está localizado em $m_{miss} = 21,16MeV$, surpreendentemente próxima do valor experimental $m_{miss} = 20,21MeV$.

Devemos ressaltar também o papel de considerarmos um tempo finito de interação entre nosso sistema (partícula confinado em um poço de potencial esférico) com o potencial de Huang, ou seja, considerarmos $\tau \neq 0$. O efeito pode ser visualizado tanto nos resultados apresentados na Fig. 9 quanto na Fig. 11 – há uma elevação na curva da probabilidade de transição, para valores maiores de g ou de m_{miss}. O mesmo efeito é observado nos resultados experimentais mostrados na Fig. 8 (curva azul tracejada), especialmente quando comparados aos resultados simulados (curva verde pontilhada). Assim, podemos inferir que considerar o tempo de interação entre alvo e partícula incidente age no sentido de reduzir a intensidade do segundo pico e de elevar o número de eventos para altos valores de m_{miss}, aproximando mais nossos resultados teóricos dos experimentais.

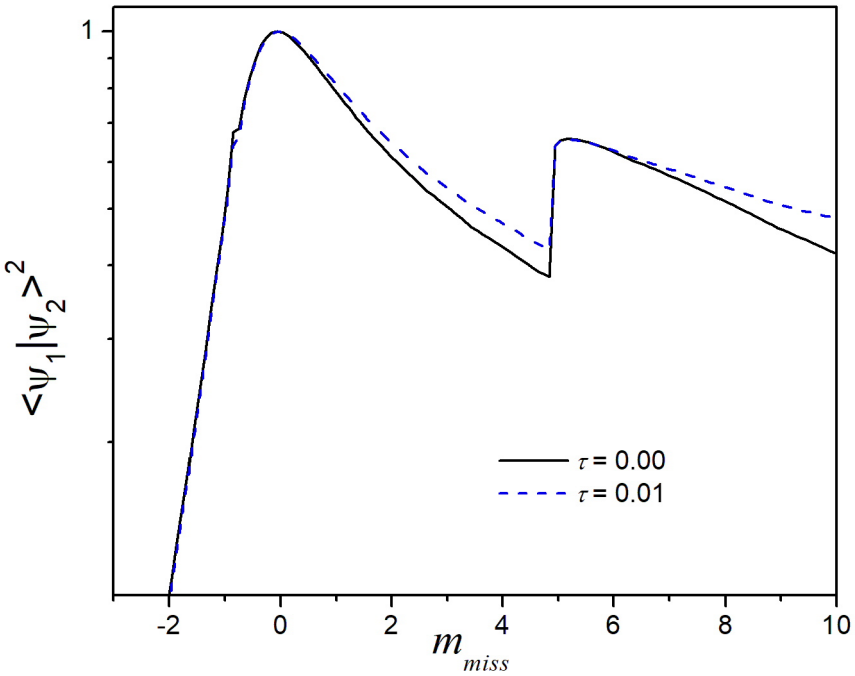

Figura 11: *A probabilidade de transição do estado fundamental para o primeiro estado excitado do núcleo de He em função da massa faltante (deslocada, ver texto). A linha sólida corresponde à interação instantânea ($\tau = 0$), e a linha tracejada ao valor $\tau = 0,01$. Observa-se, como no resultado experimental, um segundo pico de eventos em um valor de miss $\neq 0$.*

5 CONCLUSÃO

Nesse trabalho, realizamos uma análise da ressonância monopolar no espalhamento de núcleos de hélio por elétrons, baseando-se em dados experimentais obtidos por Kegel e colaboradores em 2023. Para isso, eles utilizaram feixes de elétrons de diferentes energias colidindo com gás hélio criogênico, permitindo separar eficientemente eventos elásticos e inelásticos. Os dados experimentais foram comparados com um sistema simplificado, no qual modelamos a interação entre um nucleon confinado em um potencial esférico e um elétron incidente, usando a interação de Huang como aproximação da interação eletromagnética. Calculamos os auto-estados e auto-energias dos nucleons confinados em seu estado fundamental e excitados, assim como os auto-estados e auto-energias dos nucleons confinados interagindo com o potencial de Huang. Com estes resultados, estimamos a probabilidade de transição do estado fundamental para o estado excitado do núcleo, dependendo da intensidade do acoplamento, quantidade comparável ao número de eventos observados experimentalmente por Kegel.

Os cálculos mostraram boa concordância qualitativa com os dados experimentais, reproduzindo o pico principal associado ao espalhamento elástico e o segundo pico relacionado à ressonância monopolar. O modelo considerou apenas os dois primeiros auto-estados principais, já que estes fornecem as maiores contribuições para a transição estudada. Adicionalmente, a massa faltante foi avaliada em função do acoplamento, permitindo a comparação direta com os resultados experimentais. Ao incluir a consideração de um tempo finito de interação ($\tau \neq 0$), o modelo ajustou melhor a intensidade dos picos, aproximando-se mais da distribuição experimental observada.

Os resultados obtidos mostram que mesmo uma modelagem simplificada, baseada em um potencial esférico e na interação de Huang, é capaz de reproduzir de forma qualitativa as principais características experimentais do espalhamento de núcleos de Hélio por elétrons. Em especial, o segundo pico identificado, associado à ressonância monopolar, aparece na mesma faixa de energia (cerca de $21MeV$), mostrando que o modelo captura aspectos essenciais do fenômeno físico. As discrepâncias, como o excesso de intensidade no segundo pico, são atribuídas às simplificações adotadas no tratamento das interações nucleares fortes.

A inclusão de um tempo finito de interação revelou-se um fator importante para refinar os resultados, pois permitiu descrever com mais fidelidade a forma do espectro experimental. Para avanços futuros, a consideração de interações mais detalhadas, assim como a inclusão de mais auto-estados poderiam melhorar a concordância quantitativa. A utilização de um potencial de confinamento harmônico, conforme desenvolvido no Apêndice - A, por fornecer uma descrição mais próxima da interação forte, pode promover uma significativa melhora no perfil da curva de probabilidade que encontramos nesse trabalho. Considerar a interação entre os quatro nucleons confinados também devem contribuir para uma melhor descrição quantitativa do fenômeno.

Contribuições futuras também podem vir de um melhor entendimento do mecanismo que relaciona o espalhamento relativístico do elétron com o núcleo e a intensidade do acoplamento

de Huang e o tempo de interação. Em particular, a relação entre o quadri-vetor momento energia trocado, Q^2, e a massa faltante (conforme descrevemos no texto), é fundamental para a obtenção do fator de forma da ressonância monopolar, permitindo que esta quantidade seja também comparada aos resultados experimentais de Kegel e colaboradores.

REFERÊNCIAS

[1] Ottermann, C. R. Et Al., Elastic Electron Scattering From 3He And 4He, Nuclear Physics A436 688-698 (1985).

[2] Huang, K. Statistical Mechanics. Wiley, New York, (1987).

[3] Olshanii, M., Atomic scattering in the presence of an external confinement and a gas of impenetrable bosons. Physical Review Letters, 81, 5, 938 (1998).

[4] Wilczec, F; Resonating with Feshbach, MIT Physics Annual, 35, (2006).

[5] M. V. Carlucci, F. Giannuzzi, G. Nardulli, M. Pellicoro, and S. Stramaglia, Eur. Phys. J. C57, 569, 0711.2014 (2008).

[6] D. Griffths, Introduction to Elementary Particles, Wiley-VCH; 2a edição (2008).

[7] Guimarães e Miranda, P.; Freitas, D. N.; Mota, A. L.; Quantum States of Interacting Atoms in Quasi-One-Dimensional Ultracold Trapped Gases, Journal of Modern Physics, 9, 443-460, (2018).

[8] Miranda, P. G. ; Correções não perturbativas para espalhamentos atômicos na presença de confinamento transverso, Tese de Doutorado, Programa de Pós-graduação em Física e Química dos Materiais, UFSJ, (2018).

[9] S. Kegel et. al., Measurement of the α-Particle Monopole Transition Form Factor Challenges Theory: A Low-Energy Puzzle for Nuclear Forces?, Physical Review Letters 130, 152502 (2023).

[10] Evgeny Epelbaum, Probing the Helium Nucleus beyond the Ground State, Physics 16, 58 (2023).

[11] LEMOS, Nivaldo. Mecânica Analítica. Rio de Janeiro: LF Editorial; 2ª edição, (2013).

APÊNDICE A - Partícula em poço de potencial harmônico esférico com interação

A solução estudada neste trabalho considera a interação nuclear como um poço de potencial infinito, o que trata-se de uma aproximação muito rudimentar Como está mostrado na equação E.228 a solução da função de onda em um poço de potencial harmônico é dada por:

$$R_{nl}(r) = N_{nl} r^l L_n^{l+\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu\omega}{\hbar} r^2\right) e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2} \tag{E.1}$$

para o caso análogo a um sistema de baixas energias considera-se $l = 0$, consequentemente, a partir das soluções dos sistemas com interação vistos nos capítulos anteriores, a equação de Schrodinger é descrita como:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial^2 r} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + g\delta(r)\right] A\left(1 - Be^{-\gamma|r|}\right) e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2} = EA\left(1 - Be^{-\gamma r}\right) e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2} \tag{E.2}$$

separa-se os termos da equação e resolve-se cada um deles separadamente. Considera-se:

$$f(r) = A\left(1 - Be^{-\gamma|r|}\right) e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2} \tag{E.3}$$

portanto,

$$\frac{\partial f}{\partial r} = A\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(1 - Be^{-\gamma|r|}\right) \cdot e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2} + \left(1 - Be^{-\gamma|r|}\right) \cdot \frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2}\right] \tag{E.4}$$

separando os termos entre:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(1 - Be^{-\gamma|r|}\right) = B\gamma sgn(r) e^{-\gamma|r|} \tag{E.5}$$

$$\frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2} = -\frac{\mu\omega}{\hbar} r e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2} \tag{E.6}$$

logo

$$\frac{\partial f}{\partial r} = A\left[B\gamma sgn(r) e^{-\gamma|r|} e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2} - \left(1 - Be^{-\gamma|r|}\right) \frac{\mu\omega}{\hbar} r e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2}\right] \tag{E.7}$$

e

$$\frac{2}{r}\frac{\partial f}{\partial r} = \frac{2A}{r}\left[B\gamma sgn(r) e^{-\gamma|r|} e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2} - \left(1 - Be^{-\gamma|r|}\right) \frac{\mu\omega}{\hbar} r e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2}\right] \tag{E.8}$$

Substituindo esses resultados na equação E.2 tem-se:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial^2 r}\right] A\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2} = 2B\gamma\delta(r)\,e^{-\gamma|r|}e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2} + B\gamma^2 e^{-\gamma|r|}e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2}$$
$$-2B\gamma\mathrm{sgn}(r)\,e^{-\gamma|r|}\frac{\mu\omega}{\hbar}re^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2} \tag{E.9}$$
$$+\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\frac{\mu^2\omega^2r^2}{\hbar^2}e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2}$$

e aplicando os operadores tem-se:

$$A[2B\gamma\delta(r)\,e^{-\gamma|r|}e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2} + B\gamma^2 e^{-\gamma|r|}e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2}$$
$$-2B\gamma\mathrm{sgn}(r)\,e^{-\gamma|r|}\frac{\mu\omega}{\hbar}re^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2} - \left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\frac{\mu\omega}{\hbar}e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2} + \left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\frac{\mu^2\omega^2r^2}{\hbar^2}e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2}]$$
$$+\frac{2A}{r}\left[B\gamma sgn(r)\,e^{-\gamma|r|}e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2} - \left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\frac{\mu\omega}{\hbar}re^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2}\right]$$
$$+g\delta(r)A\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2} = EA\left(1-Be^{-\gamma r}\right)e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2} \tag{E.10}$$

ou,

$$[2B\gamma\delta(r)\,e^{-\gamma|r|} + B\gamma^2 e^{-\gamma|r|} - 2B\gamma\mathrm{sgn}(r)\,e^{-\gamma|r|}\frac{\mu\omega}{\hbar}r$$
$$-\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\frac{\mu\omega}{\hbar} + \left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\frac{\mu^2\omega^2r^2}{\hbar^2}]$$
$$+\frac{2}{r}\left[B\gamma sgn(r)\,e^{-\gamma|r|} - \left(1-Be^{-\gamma|r|}\right)\frac{\mu\omega}{\hbar}r\right] \tag{E.11}$$
$$+g\delta(r)\left(1-Be^{-\gamma|r|}\right) = E\left(1-Be^{-\gamma r}\right)$$

Para eliminar os termos delta de Dirac é necessário respeitar a igualdade:

$$2B\gamma + g(1-B) = 0 \tag{E.12}$$

portanto:

$$B = \frac{g}{g-2\gamma} \tag{E.13}$$

Com o uso dos princípios de teoria de perturbação podemos encontrar a energia do sistema interagente com a aproximação de ordem zero a seguir:

$$B\gamma^2 - 3(1-B)\frac{\mu\omega}{\hbar} = E(1-B) \tag{E.14}$$

$$E = \frac{B\gamma^2}{(1-B)} - 3\frac{\mu\omega}{\hbar} \tag{E.15}$$

$$E = \frac{g\gamma}{2} - 3\frac{\mu\omega}{\hbar} \tag{E.16}$$

A seguir trabalharemos com a seguinte aproximação para muito r pequeno:

$$e^{-\gamma|r|} \cong \left(1 - \gamma sgn(r)r + \gamma^2 r^2\right) \tag{E.17}$$

Para encontrar energia em função da intensidade de acoplamento com a aproximação de primeira ordem para a função de onda, descreve-se:

$$\begin{aligned} &\left[-B\gamma^3 sgn(r)r - 2\frac{\mu\omega}{\hbar}B\gamma \mathrm{sgn}\,(r)\,r - \frac{\mu\omega}{\hbar}B\gamma sgn(r)r+\right] \\ &+\frac{2}{r}\left[B\gamma^3 \mathrm{sgn}\,(r)\,r^2 - \frac{\mu\omega}{\hbar}B\gamma sgn(r)rr\right] = EB\gamma sgn(r)r \end{aligned} \tag{E.18}$$

Temos a energia em aproximação de primeira ordem da função de onda como:

$$\gamma^2 - 5\frac{\mu\omega}{\hbar} = E \tag{E.19}$$

Por fim, o termo γ em função de g, por substituição, é:

$$\gamma^2 + \frac{g\gamma}{2} - 2\frac{\mu\omega}{\hbar} = 0 \tag{E.20}$$

$$\gamma = \frac{-g + \sqrt{g^2 + 32\frac{\mu w}{\hbar}}}{4} \tag{E.21}$$

APÊNDICE B - Partícula em poço de potencial harmônico esférico com interação

A partir da definição do fator de forma:

$$F = |\left\langle \psi_1 | \psi_{gj} \right\rangle \left\langle \psi_{gj} | \psi_0 \right\rangle|^2 \tag{E.22}$$

e da solução do potencial harmônico com simetria esférica,

$$R_{nl}(r) = N_{nl} r^l L_n^{l+\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu\omega}{\hbar} r^2 \right) e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2} \tag{E.23}$$

pode-se calcular separadamente partes do fator considerando regimes de baixas energias ($l = 0$) como,

$$\left\langle \psi_1 | \psi_{gj} \right\rangle = 2 \int_0^\infty dr r^2 \left(1 - B e^{-\gamma r}\right) e^{-\frac{\mu\omega}{\hbar} r^2} \sqrt{1 - \frac{\mu\omega r^2}{\hbar}} \tag{E.24}$$

como essa integral diverge, pode-se considerar a integração limitada dentro da região do desvio padrão (região onde a partícula tende a maior probabilidade de ser encontrada fora do valor-médio), uma vez que trata-se de um regime a baixas energias logo:

$$\left\langle r^2 \right\rangle = 2 \int_0^\infty dr r^4 e^{-\frac{\mu\omega}{\hbar} r^2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \left(\frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{-5/2} \tag{E.25}$$

impondo esse limite de integração temos para o primeiro termo do fator de forma

$$\left\langle \psi_1 | \psi_{gj} \right\rangle \cong 2 \int_0^{\frac{3\sqrt{\pi}}{8}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{-5/2}} dr r^2 \left(1 - B(1 - \gamma r)\right) \left(1 - \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2\right) \left(1 - \frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}\right) \tag{E.26}$$

cujo resultado é:

$$\begin{aligned} &2 \int_0^{\frac{3\sqrt{\pi}}{8}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{-5/2}} \left[(1-B) r^2 + B\gamma r^3 - \frac{3\mu\omega}{2\hbar}(1-B) r^4 - \frac{3\mu\omega}{2\hbar} B\gamma r^5 + \frac{\mu^2\omega^2}{2\hbar^2}(1-B) r^6 + \frac{\mu^2\omega^2}{2\hbar^2} B\gamma r^7 \right] dr \\ &= 2 \left[\frac{(1-B)}{3} r^3 - \frac{3(1-B)\mu\omega}{10\hbar} r^5 + \frac{(1-B)\mu^2\omega^2}{14\hbar^2} r^7 + \frac{B\gamma}{4} r^4 - \frac{B\gamma\mu\omega}{4\hbar} r^6 + \frac{B\gamma\mu^2\omega^2}{16\hbar^2} r^8 \right]_0^{\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{-5/2}} \end{aligned} \tag{E.27}$$

já para o segundo termo tem-se:

$$\left\langle \psi_{gj} | \psi_0 \right\rangle = 2 \int_0^{\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{-5/2}} dr r^2 \left(1 - B(1 - \gamma r)\right) \left(1 - \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2\right) \left(1 - \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2\right) \tag{E.28}$$

que pode ser escrito como:

$$2\int_0^a \left[(1-B)\,r^2 + B\gamma r^3 + 2x\,(B-1)\,r^4 + x^2\,(1-B)\,r^6 - 2B\gamma x r^5 + B\gamma x^2 r^7\right] dr \tag{E.29}$$

em que defini-se $a = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}x^{-5/2}$ e $x = \frac{\mu\omega}{\hbar}$ resultando em:

$$\begin{aligned}\langle\psi_{gj}|\psi_0\rangle = 2\Bigg[&(1-B)\frac{1}{3}(\frac{3\sqrt{\pi}}{4})^3(\frac{\mu\omega}{\hbar})^{-15/2} + B\gamma\frac{1}{4}(\frac{3\sqrt{\pi}}{4})^4(\frac{\mu\omega}{\hbar})^{-10}\\ +2(B-1)\frac{1}{5}(\frac{\mu\omega}{\hbar})(\frac{3\sqrt{\pi}}{4})^5(\frac{\mu\omega}{\hbar})^{-25/2} &+ (1-B)\frac{1}{7}(\frac{\mu\omega}{\hbar})^2(\frac{3\sqrt{\pi}}{4})^7(\frac{\mu\omega}{\hbar})^{-35/2}\\ -2B\gamma\frac{1}{6}(\frac{\mu\omega}{\hbar})(\frac{3\sqrt{\pi}}{4})^6(\frac{\mu\omega}{\hbar})^{-15}.&+ B\gamma\frac{1}{8}(\frac{\mu\omega}{\hbar})^2(\frac{3\sqrt{\pi}}{4})^8(\frac{\mu\omega}{\hbar})^{-20}\Bigg]\end{aligned} \tag{E.30}$$

Como já foi dito ao longo do trabalho estamos tratando de um sistema de baixas energias só será necessário considerar os termos de maior ordem a sr acoplador no fator de forma F. Em futuros projetos poderá-se concluir se essa descrição é mais precisa que as soluções de poços de potencial infinito.

ANEXO A - Solução: Poço de potencial infinito em uma dimensão (1D)

Nessa primeira solução, por conveniência, usaremos a notação de função de onda, o problema a ser analisado consiste em descrever a função de onda de uma partícula em um espaço unidimensional cujo um campo de potencial dito confinante age no sistema de tal forma que:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{para } 0 < x < L \\ \infty, & \text{para } x \leq 0 \; e \; x \geq L \end{cases} \tag{E.31}$$

Considera que a partícula não pode ser encontrada nas regiões onde seu potencial é infinito, $\psi(x) = 0$ para $x \leq 0$ e $x \geq L$, portanto será necessário apenas calcular a equação de Schrodinger na região $0 < x < L$, primeiramente seus estados estacionários (independente do tempo) logo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x} = E\psi \tag{E.32}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \tag{E.33}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x} = -\omega^2\psi \tag{E.34}$$

tal que:

$$\omega = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{E.35}$$

resolvendo essa equação diferencial básica encontra-se que:

$$\psi(x) = Ae^{i\omega x} + Be^{-i\omega x} \tag{E.36}$$

Aplicando as condições de contorno da função:

$$\psi(0) = A + B = 0 \tag{E.37}$$

$$B = -A \tag{E.38}$$

$$\psi(x) = A\left(e^{i\omega x} - e^{-i\omega x}\right) = 2Asen(\omega x) \tag{E.39}$$

$$\psi(L) = 2Asen(\omega L) = 0 \tag{E.40}$$

porém:

$$2Asen(n\pi) = 0 \tag{E.41}$$

portanto:

$$\omega = \frac{n\pi}{L} \tag{E.42}$$

Comparando os valores podemos encontrar as energias possíveis e descrever a função de onda:

$$\omega = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{L} \tag{E.43}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2mL^2} \tag{E.44}$$

$$\psi(x) = 2Asen\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \tag{E.45}$$

Agora devemos encontrar A para normalizar a função de onda:

$$\int_0^L \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = 4\,|A|^2 \int_0^L sen^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx \tag{E.46}$$

$$\int_0^L sen^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx = \frac{1}{2}\int_0^L 1 - cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right)dx = \frac{1}{2}\left(x|_0^L - sen\left(\frac{2\pi nx}{L}\right)\Big|_0^L\right) = \frac{L}{2} \tag{E.47}$$

$$\int_0^L \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = 4\,|A|^2\,L \tag{E.48}$$

lembrando que:

$$2\,|A|^2\,L = 1 \tag{E.49}$$

$$A = \sqrt{\frac{1}{2L}} \tag{E.50}$$

portanto,

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} sen\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \tag{E.51}$$

Podemos concluir que como não há uma dependência da função com relação a dimensão um resultado tridimensional seria:

$$\psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sqrt{\frac{2}{L_y}}\sqrt{\frac{2}{L_z}}\, sen\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right) sen\left(\frac{n_y\pi}{L}y\right) sen\left(\frac{n_z\pi}{L}z\right) \tag{E.52}$$

e para a energia tem-se:

$$E_{n_x n_y n_2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right) \tag{E.53}$$

ANEXO B - Solução: Oscilador Harmônico Quântico

O oscilador harmônico é um dos sistemas físicos de maior importância nos nossos estudos, tanto de mecânica clássica quanto quântica, isso se deve porque além de ser um sistema de solução analítica exata, qualquer interação de um sistema que gere um poço de potencial, pode ser aproximada a um oscilador harmônico, isso será bastante útil em um estudo futuro em teoria de perturbações.

Para esse sistema, uma solução a partir do emprego das funções de onda torna o problema muito difícil de se resolver de maneira analítica, assim como compreender o fenômeno físico de forma concreta, por tais motivos será usada a notação de Dirac.

A energia mecânica do sistema é:

$$E = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \tag{E.54}$$

transformando tudo isso para operadores tem-se:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{X}^2}{2} \tag{E.55}$$

pode-se manipular as equações de tal forma que:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{\hat{P}^2}{m\hbar\omega} + \frac{m\omega\hat{X}^2}{\hbar}\right) \tag{E.56}$$

$$\widehat{P'} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{P} \tag{E.57}$$

$$\widehat{X'} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X} \tag{E.58}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\widehat{P'}^2 + \widehat{X'}^2\right) \tag{E.59}$$

Seus colchetes de Poisson são:

$$\left[\hat{X}', \hat{P}'\right] = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\left[\hat{X}, \hat{P}\right] = \frac{1}{\hbar}i\hbar = i \tag{E.60}$$

assim, incorporando os elementos da eq. E.60 a eq. E.59 tem-se:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left[\left(\widehat{X}' + i\widehat{P}'\right)\left(\widehat{X}' - i\widehat{P}'\right) + i\left[\hat{X}', \hat{P}'\right]\right] \tag{E.61}$$

define-se:

$$\hat{a} = \frac{\widehat{X}' + i\widehat{P}'}{\sqrt{2}} \tag{E.62}$$

$$\hat{a}^{\dagger} = \frac{\widehat{X}' - i\widehat{P}'}{\sqrt{2}} \tag{E.63}$$

logo, reescreve-se a hamiltoniana como:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{\dagger} - \frac{1}{2}\right) \tag{E.64}$$

A partir disso, calculamos os colchetes de Poisson:

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}\right] = 1 \tag{E.65}$$

$$\left[\hat{a}^{\dagger}\hat{a}, \hat{a}\right] = -\hat{a} \tag{E.66}$$

$$\left[\hat{a}^{\dagger}\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}\right] = \hat{a}^{\dagger} \tag{E.67}$$

com essas relações, pode-se escrever a hamiltoniana também pode ser escrita como:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \tag{E.68}$$

Para limpar a notação definimos o operador número $\hat{N}$ como:

$$\hat{N} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a} \tag{E.69}$$

portanto,

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \tag{E.70}$$

É necessário demonstrar certas propriedades do sistema para calcularmos a sua função de onda, que serão mostradas a seguir.

1ª propriedade: Todos os auto-estados de $\hat{N}$ são maiores ou igual a zero.
Prova:

$$\left|\hat{a}|\ \varphi_n^j\right\rangle\right|^2 \geq 0 \tag{E.71}$$

$$\left\langle \varphi_n^j \middle| \hat{a}^\dagger \hat{a} \middle| \varphi_n^j \right\rangle \geq 0 \tag{E.72}$$

$$n \left\langle \varphi_n^j \middle| \varphi_n^j \right\rangle \geq 0 \tag{E.73}$$

Portanto, $n \geq 0$.
2ª propriedade: Se o termo $\hat{a}|\ \varphi_0^j\Big\rangle$ é sempre zero, então para qualquer vetor $|\ \varphi\rangle$ também ser ele deve ser escrito como uma combinação linear de termos do tipo $|\ \varphi_0^j\Big\rangle$.
Prova:

$$\hat{a}|\ \varphi_0^j\Big\rangle = 0 \tag{E.74}$$

$$n^j \left\langle \varphi_n^j \middle| \varphi_n^j \right\rangle = 0 \tag{E.75}$$

logo os $n = 0$, assim, definindo um estado genérico:

$$|\ \varphi\rangle = \sum_j \alpha_j |\ \varphi_n^j\rangle \tag{E.76}$$

$$\hat{a}|\ \varphi\rangle = \hat{a} \sum_j \alpha_j |\ \varphi_n^j\rangle = \sum_j \alpha_j \hat{a}|\ \varphi_n^j\rangle = 0 \tag{E.77}$$

$$\hat{a}|\ \varphi_n^j\rangle = 0 \tag{E.78}$$

Mas isso é verdade apenas se $n^j = 0$, conclui-se:

$$|\ \varphi\rangle = \sum_j \alpha_j |\ \varphi_0^j\Big\rangle \tag{E.79}$$

3ª propriedade: Os termos $\hat{a}|\ \varphi_n^j\Big\rangle$ são um auto-estado de $\hat{N}$ com seus autovalores sendo $(n-1)$.
Prova:

$$\hat{a}\Big|\ \varphi_n^j\rangle = \left[\hat{a}^\dagger \widehat{a}, \hat{a}\right]\Big|\ \varphi_n^j\rangle = (\hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N})\ |\ \varphi_n^j\rangle = \hat{N}\hat{a}|\ \varphi_n^j\rangle - \hat{a}n|\ \varphi_n^j\rangle \tag{E.80}$$

$$\hat{N}\hat{a}\left|\varphi_n^j\right\rangle = (n-1)\,\hat{a}\left|\varphi_n^j\right\rangle \tag{E.81}$$

4ª propriedade: Os autovalores de $\hat{N}$ são números inteiros positivos.
Prova:

Com a 1ª propriedade e a 3ª, percebe-se que o grupo de autovetores são números sucessores com o valor mínimo sendo o zero isso é apenas possível se são números inteiros positivos.
5ª propriedade: Os autovalores de $\hat{a}^\dagger$ são diferentes de zero.
Prova:

$$\left|\hat{a}^\dagger\left|\varphi_n^j\right\rangle\right|^2 \geq 0 \tag{E.82}$$

$$\left\langle\varphi_n^j\left|\hat{a}\hat{a}^\dagger\right|\varphi_n^j\right\rangle \geq 0 \tag{E.83}$$

$$\left\langle\varphi_n^j\left|\hat{N}+1\right|\varphi_n^j\right\rangle \geq 0 \tag{E.84}$$

$$(n+1)\left\langle\varphi_n^j\middle|\varphi_n^j\right\rangle \geq 0 \tag{E.85}$$

portanto, $n \neq 0$.
6ª propriedade: Os termos $\hat{a}^\dagger\left|\varphi_n^j\right\rangle$ é um auto-estado de $\hat{N}$ com seus autovalores sendo $(n+1)$.
Prova:

$$\hat{a}^\dagger\left|\varphi_n^j\right\rangle = \left[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}^\dagger\right]\left|\varphi_n^j\right\rangle = (\hat{N}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{N})\left|\varphi_n^j\right\rangle = \hat{N}\hat{a}^\dagger\left|\varphi_n^j\right\rangle - \hat{a}^\dagger n\left|\varphi_n^j\right\rangle \tag{E.86}$$

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger\left|\varphi_n^j\right\rangle = (n+1)\,\hat{a}^\dagger\left|\varphi_n^j\right\rangle \tag{E.87}$$

7ª propriedade: Se o estado quântico de energia n for não degenerado, o estado de energia $n+1$ também será.
Prova:

Se o estado quântico de energia n for não degenerado, então:

$$\left|\varphi_n^i\right\rangle = \lambda\left|\varphi_n^j\right\rangle \tag{E.88}$$

pela 6ª propriedade:

$$\hat{a}^\dagger\left|\varphi_n^i\right\rangle = \alpha\left|\varphi_{n+1}^i\right\rangle \tag{E.89}$$

$$\hat{a}^{\dagger}\left|\varphi_n^j\right\rangle = \beta\left|\varphi_{n+1}^j\right\rangle \tag{E.90}$$

portanto:

$$\begin{aligned}(n+1)\,\alpha\left|\varphi_{n+1}^i\right\rangle &= (n+1)\,\hat{a}^{\dagger}\left|\varphi_n^i\right\rangle = \hat{N}\hat{a}^{\dagger}\left|\varphi_n^i\right\rangle \\ \lambda\hat{N}\hat{a}^{\dagger}\left|\varphi_n^j\right\rangle &= \lambda\,(n+1)\,\hat{a}^{\dagger}\left|\varphi_n^j\right\rangle = \lambda\,(n+1)\,\beta\left|\varphi_{n+1}^j\right\rangle\end{aligned} \tag{E.91}$$

8ª propriedade: Todos os auto-estados do oscilador harmônico quântico são não-degenerados.
Prova:

$$\hat{a}\left|\varphi_0^i\right\rangle = \frac{\widehat{X'} + i\widehat{P'}}{\sqrt{2}}\left|\varphi_0^i\right\rangle = 0 \tag{E.92}$$

$$m\omega x\varphi_0^i(x) - ii\hbar\frac{\partial\varphi_0^i(x)}{\partial x} = 0 \tag{E.93}$$

$$-ii\hbar\frac{d}{dx}\varphi_0^i(x) = x\varphi_0^i(x) \tag{E.94}$$

ou também:

$$\int\frac{d\varphi_0^i(x)}{\varphi_0^i(x)} = -\int\frac{m\omega}{\hbar}xdx \tag{E.95}$$

$$ln\left(\frac{\varphi_0^i(x)}{\varphi_0^i(0)}\right) = -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \tag{E.96}$$

$$\varphi_0^i(x) = \varphi_0^i(0)\,e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \tag{E.97}$$

9ª propriedade: Com todas as propriedades anteriores pode-se descobrir os valores de α e β:

$$\hat{a}^{\dagger}\left|\varphi_n\right\rangle = \alpha\left|\varphi_{n+1}\right\rangle \tag{E.98}$$

$$\left\langle\varphi_n\left|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\right|\varphi_n\right\rangle = n\left\langle\varphi_n\middle|\varphi_n\right\rangle = \alpha^*\alpha\left\langle\varphi_{n+1}\middle|\varphi_{n+1}\right\rangle \tag{E.99}$$

$$\alpha = \sqrt{n} \tag{E.100}$$

$$\hat{a}^{\dagger}\left|\varphi_n\right\rangle = \beta\left|\varphi_{n+1}\right\rangle \tag{E.101}$$

$$\left\langle \varphi_n \left| \hat{a}\hat{a}^{\dagger} \right| \varphi_n \right\rangle = (n+1)\left\langle \varphi_n \middle| \varphi_n \right\rangle = \beta^{*}\beta\left\langle \varphi_{n+1} \middle| \varphi_{n+1} \right\rangle \tag{E.102}$$

$$\beta = \sqrt{n+1} \tag{E.103}$$

Agora podemos descrever a função de onda do oscilador harmônico quântico usando a notação de Dirac, com base nas propriedades definidas anteriormente. Definimos:

$$\hat{a}^{\dagger n}|\varphi_0\rangle = \sqrt{n!}|\varphi_n\rangle \tag{E.104}$$

$$\left\langle x \left| \hat{a}^{\dagger n}|\varphi_0 \right.\right\rangle = \left\langle x \left| \sqrt{n!} \right| \varphi_n \right\rangle \tag{E.105}$$

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{m\omega\hat{x}}{\hbar}\right)^n \varphi_0(x) \tag{E.106}$$

$$\varphi_n(x) = \frac{\varphi_0(0)}{\sqrt{n!}}(-1)^n\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right)^n\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{m\omega\hat{x}}{\hbar}\right)^n e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \tag{E.107}$$

Através do processo de renormalização temos:

$$\varphi_0(0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \tag{E.108}$$

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \tag{E.109}$$

$$\varphi_1(0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}xe^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \tag{E.110}$$

ANEXO C - Momento angular na mecânica quântica

O primeiro passo para escrever o momento angular na mecânica quântica é transformá-lo em um operador, podemos estabelecer uma relação em ter o momento angular total e e suas componentes como:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \tag{E.111}$$

Lembrando que por definição cada componente é descrita dessa forma:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \tag{E.112}$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \tag{E.113}$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \tag{E.114}$$

Ao trabalhar com operadores é importante sabermos suas relações de comutação, será apenas necessário saber essa que se apresentam a seguir:

$$\left[\hat{r}_i, \hat{r}_j\right] = 0 \tag{E.115}$$

$$\left[\hat{p}_i, \hat{p}_j\right] = 0 \tag{E.116}$$

$$\left[\hat{r}_i, \hat{p}_j\right] = i\hbar\delta_{ij} \tag{E.117}$$

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z \tag{E.118}$$

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = 0 \tag{E.119}$$

Uma das maneiras de simplificar as relações de comutação define-se os seguintes operadores:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \tag{E.120}$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \tag{E.121}$$

As relações de comutação mais importantes em termos de $\hat{L}_+$ e $\hat{L}_-$ para o estudo do momento angular são:

$$\left[\hat{L}_z, \hat{L}_+\right] = \hbar \hat{L}_+ \tag{E.122}$$

$$\left[\hat{L}_z, \hat{L}_-\right] = -\hbar \hat{L}_- \tag{E.123}$$

$$\left[\hat{L}_+, \hat{L}_-\right] = 2\hbar \hat{L}_z \tag{E.124}$$

$$\left[L^2, L_-^+\right] = 0 \tag{E.125}$$

Dentre um conjunto de operadores que comutam pode se escolher por conveniência $\hat{L}^2$ e $\hat{L}_z$ tal que:

$$\hat{L}^2 |\ \psi\rangle = \hbar^2 l\,(l+1)\,|\ \psi\rangle \tag{E.126}$$

$$\hat{L}_z |\ \psi\rangle = \hbar m |\ \psi\rangle \tag{E.127}$$

Para descrever sistemas quânticos pode-se levar em consideração certas propriedades:
1ª Propriedade $l\,(l+1) \geq 0$:
Demonstração:

$$\left|\hat{L}|\ \psi\rangle\right|^2 \geq 0 \tag{E.128}$$

$$\left\langle \psi \left| \hat{L}^2 \right| \psi \right\rangle \geq 0 \tag{E.129}$$

$$\hbar^2 l\,(l+1)\,\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \tag{E.130}$$

por esta razão para eq. E.130 ser verdadeira é necessário que $l\,(l+1) \geq 0$.
2ª Propriedade: $-l \leq m \leq l$:
Demonstração:

Tomemos o produto de $\hat{L}_+|\ \psi\rangle$ por seu transposto complexo conjugado:

$$\left|\hat{L}_+|\ \psi\rangle\right|^2 \geq 0 \tag{E.131}$$

$$\left\langle \psi \left| \hat{L}_{-}\hat{L}_{+} \right| \psi \right\rangle \geq 0 \tag{E.132}$$

$$\left\langle \psi \left| \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + i\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] \right| \psi \right\rangle \geq 0 \tag{E.133}$$

$$\left(\hbar^2 l\left(l+1\right) - \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m\right)\left\langle \psi | \psi \right\rangle \geq 0 \tag{E.134}$$

para a inequação E.134 ser verdadeira é necessário que:

$$l\left(l+1\right) - m^2 - m \geq 0 \tag{E.135}$$

cujas soluções são $l \geq m$ ou $m \geq -\left(l+1\right)$, enquanto para:

$$\left|\hat{L}_{-} | \psi\right\rangle\right|^2 \geq 0 \tag{E.136}$$

$$\left\langle \psi \left| \hat{L}_{+}\hat{L}_{-} \right| \psi \right\rangle \geq 0 \tag{E.137}$$

$$\left\langle \psi \left| \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - i\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] \right| \psi \right\rangle \geq 0 \tag{E.138}$$

$$\left(\hbar^2 l\left(l+1\right) - \hbar^2 m^2 + \hbar^2 m\right)\left\langle \psi | \psi \right\rangle \geq 0 \tag{E.139}$$

$$l\left(l+1\right) - m^2 + m \geq 0 \tag{E.140}$$

cujas soluções são $-l \geq m$ ou $\left(l+1\right) \geq m$, portanto,$-l \leq m \leq l$.
3ª Propriedade: Se $\hat{L}_{-} | l, -l\rangle = 0$ ou $\hat{L}_{-} | l, m\rangle = 0$ então $m = -l$:
Demonstração:

$$\hat{L}_{+}\hat{L}_{-} | l, m\rangle = 0 \tag{E.141}$$

$$\left(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - i\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right]\right) | l, m\rangle = 0 \tag{E.142}$$

$$\hbar^2\left(l\left(l+1\right) - m^2 + m\right) | l, m\rangle = 0 \tag{E.143}$$

isso só é verdadeiro a única solução possível é $m = -l$.
4ª Propriedade: $\hat{L}_{-} | l, m\rangle$ é auto-estado de $\hat{L}^2$ e $\hat{L}_z$:

Demonstração:

$$\hat{L}^2\left(L_-|\,l,m\rangle\right) = l\left(l+1\right)\hbar^2\hat{L}_-|\,l,m\rangle \tag{E.144}$$

$$\hat{L}_z\left(L_-|\,l,m\rangle\right) = \left(m-1\right)\hbar\hat{L}_-|\,l,m\rangle \tag{E.145}$$

lembrando que $\left[\hat{L}^2,\hat{L}_-\right] = 0$, logo

$$\hat{L}^2\hat{L}_-|\,l,m\rangle = \hat{L}_-\hat{L}^2|\,l,m\rangle = \hat{L}_-l\left(l+1\right)\hbar^2|\,l,m\rangle = l\left(l+1\right)\hbar^2\hat{L}_-|\,l,m\rangle \tag{E.146}$$

Para o caso em que $\left[\hat{L}^2,\hat{L}_-\right] = -\hbar\hat{L}_-$, pode-se considerar:

$$\hat{L}_z\left(\hat{L}_-|\,l,m\rangle\right) = \hat{L}_-\left(\hat{L}_z|\,l,m\rangle\right) - \hbar\hat{L}_-|\,l,m\rangle = \left(m-1\right)\hbar\hat{L}_-|\,l,m\rangle \tag{E.147}$$

5ª Propriedade: se temos as relações $\hat{L}_+|\,l,l\rangle = 0$ e $\hat{L}_+|\,l,m\rangle = 0$, portanto $m = l$.
Demonstração:

$$\left\langle l,m\left|\hat{L}_-\hat{L}_+\right|l,m\right\rangle = 0 \tag{E.148}$$

$$\left\langle l,m\left|\left(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + i\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]\right)\right|l,m\right\rangle = 0 \tag{E.149}$$

$$\hbar^2\left(l\left(l+1\right) - m^2 - m\right) = 0 \tag{E.150}$$

isso só é verdadeiro a única solução possível $m = l$.
6ª Propriedade:$\hat{L}_+|\,l,m\rangle$ é auto-estado de $\hat{L}^2$ e $\hat{L}_z$.
Demonstração:

$$\hbar^2\left(l\left(l+1\right) - m^2 - m\right) = 0 \tag{E.151}$$

$$\hbar^2\left(l\left(l+1\right) - m^2 - m\right) = 0 \tag{E.152}$$

lembrando que $\left[\hat{L}^2,\hat{L}_+\right] = 0$, logo

$$\hbar^2\left(l\left(l+1\right) - m^2 - m\right) = 0 \tag{E.153}$$

Para o caso em que $\left[\hat{L}^2,\hat{L}_+\right] = \hbar\hat{L}_+$, pode-se considerar:

$$\hbar^2\left(l\left(l+1\right) - m^2 - m\right) = 0 \tag{E.154}$$

7ª e 8ª Propriedade: os valores de l e m podem ser inteiros ou semi-inteiros.
Demonstração: ver o argumento da 4ª propriedade da solução de oscilador harmônico quântico.

Com essas todas propriedades definidas, pode-se empregar representações de momento angular. Temos que descrever o valor C, para isso, faça-se uso da equação E.155:

$$\hat{L}_+ |\, l,m\rangle = C|\, l,m+1\rangle \tag{E.155}$$

$$\left\langle l,m \left| \hat{L}_+\hat{L}_- \right| l,m \right\rangle = C^2 \langle l,m+1|l,m+1\rangle \tag{E.156}$$

$$\left\langle l,m \left| \left(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - i\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]\right) \right| l,m \right\rangle = C^2 \tag{E.157}$$

$$\hbar^2 \left\langle l,m \left| \left(l\,(l+1) - m^2 + m\right) \right| l,m \right\rangle = C^2 \tag{E.158}$$

$$\hbar^2 \left(l\,(l+1) - m^2 + m\right) = C^2 \tag{E.159}$$

$$C = \hbar\sqrt{l\,(l+1) - m\,(m-1)} \tag{E.160}$$

Quanto a descrição do valor D, para isso, usa-se a relação da eq. E.161:

$$\hat{L}_- |\, l,m\rangle = D|\, l,m-1\rangle \tag{E.161}$$

$$\left\langle l,m \left| \hat{L}_-\hat{L}_+ \right| l,m \right\rangle = D^2 \langle l,m+1|l,m+1\rangle \tag{E.162}$$

$$\left\langle l,m \left| \left(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + i\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]\right) \right| l,m \right\rangle = D^2 \tag{E.163}$$

$$\hbar^2 \left\langle l,m \left| \left(l\,(l+1) - m^2 - m\right) \right| l,m \right\rangle = D^2 \tag{E.164}$$

$$\hbar^2 \left(l\,(l+1) - m^2 - m\right) = D^2 \tag{E.165}$$

$$D = \hbar\sqrt{l\,(l+1) - m\,(m+1)} \tag{E.166}$$

Consequentemente, para os operadores $\hat{L}_+$ e $\hat{L}_-$ temos:

$$\hat{L}_+ |\, l,m\rangle = \hbar\sqrt{l\,(l+1) - m\,(m-1)}\,|\, l,m+1\rangle \tag{E.167}$$

$$\hat{L}_- |\, l,m\rangle = \hbar\sqrt{l\,(l+1) - m\,(m+1)}\,|\, l,m-1\rangle \tag{E.168}$$

ANEXO D - Relações para conversão de coordenadas cartesianas para esféricas

$$x = R\sin\theta\cos\varphi \tag{E.169}$$

$$y = R\sin\theta\sin\varphi \tag{E.170}$$

$$z = R\cos\theta \tag{E.171}$$

$$R = \sqrt{x^2+y^2+z^2} \tag{E.172}$$

$$\frac{\partial R}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \sin\theta\cos\varphi \tag{E.173}$$

$$\frac{\partial R}{\partial y} = \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \sin\theta\sin\varphi \tag{E.174}$$

$$\frac{\partial R}{\partial z} = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \cos\theta \tag{E.175}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{zx}{R^3}\frac{1}{\sin\theta} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{R} \tag{E.176}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{zy}{R^3}\frac{1}{\sin\theta} = \frac{\cos\theta\sin\varphi}{R} \tag{E.177}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial z} = \frac{-1}{\sin\theta}\left(\frac{1}{R}-\frac{z^2}{R^3}\right) = -\frac{\sin\theta}{R} \tag{E.178}$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\cos^2\varphi\frac{y}{x^2} = -\frac{\sin\varphi}{R\sin\theta} \tag{E.179}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos^2 \varphi}{x} = \frac{\cos \varphi}{R \sin \theta} \tag{E.180}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0 \tag{E.181}$$

$$\begin{gathered} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial R}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} = \\ \sin \theta \cos \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\cos \theta \cos \phi}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{R \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{gathered} \tag{E.182}$$

$$\begin{gathered} \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial R}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} = \\ \sin \theta \sin \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{R \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{gathered} \tag{E.183}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial R}{\partial z} \cdot \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} = \cos \theta \cdot \frac{\partial}{\partial R} - \frac{\sin \theta}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \tag{E.184}$$

ANEXO E - Momento angular em coordenadas esféricas

Os operadores de momento angular em coordenadas cartesianas são descritas como:

$$\hat{L}|\ \psi\rangle = \hbar^2 l\,(l+1)\,|\ \psi\rangle \tag{E.185}$$

$$\hat{L}_z|\ \psi\rangle = \hbar m|\ \psi\rangle \tag{E.186}$$

Podemos escrever os operadores de cada coordenada do momento angular reescrevendo os operadores das equações E.112, E.113 e E.114 como:

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{E.187}$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{E.188}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{E.189}$$

Com as relações de conversão de coordenadas cartesianas para esféricas temos:

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{E.190}$$

$$\hat{L}_y = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{E.191}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{E.192}$$

O momento angular total é uma aplicação de seus operadores de coordenadas tal que:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial^2\theta} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}\right) = \\ -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}\right)\end{aligned} \tag{E.193}$$

A partir de agora, será descrita a função de onda do momento angular total e eixo z. Aplicando os operadores de momento angular em coordenadas polares sobre um estado genérico

encontramos:

$$\hat{L}^2 |\, l,m\rangle = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial^2\varphi} \right) |\, l,m\rangle = \hbar^2 l\,(l+1)\,|\, l,m\rangle \tag{E.194}$$

e para a função de onda tem-se:

$$\left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial^2\varphi} \right) Y_{lm}(\theta,\varphi) - l\,(l+1)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) = 0 \tag{E.195}$$

Considerando o caso de variáveis separáveis:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = f(\theta)\,g(\varphi) \tag{E.196}$$

É possível solucionar a equação para cada coordenada:

$$\left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial^2\varphi} \right) f(\theta) - l\,(l+1)\,f(\theta) = 0 \tag{E.197}$$

$$-i\hbar \frac{\partial g(\varphi)}{\partial\varphi} = \hbar m g(\varphi) \tag{E.198}$$

Para a coordenada φ, a solução é:

$$\frac{\partial g(\varphi)}{\partial\varphi} = i m g(\varphi) \tag{E.199}$$

$$g(\varphi) = e^{im\varphi} \tag{E.200}$$

porém:

$$e^{im0} = e^{in2\pi} = 1 \tag{E.201}$$

portanto o termo da componente z do momento angular m em todo tipo de momento angular é um número inteiro assim como do momento angular total l.

Por conseguinte para a coordenada θ, a solução é:

$$\left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial^2\varphi} \right) Y_{lm}(\theta,\varphi) - l\,(l+1)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) = 0 \tag{E.202}$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y_{lm}(\theta,\varphi)}{\partial\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} Y_{lm}(\theta,\varphi) - l\,(l+1)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) = 0 \tag{E.203}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta}\right)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}f(\theta)-l(l+1)f(\theta)=0 \tag{E.204}$$

Essa é a equação diferencial cuja solução são os polinômios de Lagrange:

$$f(\theta)=P_{lm}(\cos\theta) \tag{E.205}$$

Por fim, a solução para a parte não radial da função de onda tem a proporcionalidade:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)\propto P_{lm}(\cos\theta)\,e^{im\varphi} \tag{E.206}$$

ANEXO F - Solução do oscilador harmônico quântico esférico

A função de onda geral em coordenadas esféricas é:

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{E.207}$$

Como o oscilador harmônico quântico esférico depende apenas do parâmetro r, podemos utilizar somente o termo $R_{nl}(r)$ da função de onda para solucionar a equação de Schrodinger e por conseguinte realizar o produto com $Y_{lm}(\theta,\varphi)$, já solucionada nas seções anteriores.

A equação de Schrodinger para esse sistema é descrita como:

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{E.208}$$

Substituindo os termos r na equação usando a relação $\rho = \left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\right)r$ e aplicando os operadores temos como resultado:

$$\frac{d^2R(\rho)}{d^2\rho} + \frac{2}{\rho}\frac{dR(\rho)}{d\rho} - \rho^2R(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho^2}R(\rho) + \frac{2E}{\hbar\omega}R(\rho) = 0 \tag{E.209}$$

Para encontrar o solução desta equação diferencial, podemos aproximada-la para o limite em que $\rho \to \infty$, e nos da essa equação:

$$\frac{d^2R(\rho)}{d^2\rho} - \rho^2R(\rho) = 0 \tag{E.210}$$

cuja solução é:

$$R(\rho) = Ae^{-\frac{1}{2}\rho^2} \tag{E.211}$$

agora, seguindo o limite:

$$\rho \to 0 \tag{E.212}$$

$$\frac{d^2R(\rho)}{d^2\rho} + \frac{2}{\rho}\frac{dR(\rho)}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}R(\rho) = 0 \tag{E.213}$$

Como cada termo da equação são a função a ser descoberta e suas derivadas de varias ordens, a família de soluções dessa equação diferencial é:

$$R(\rho) = \rho^t \tag{E.214}$$

Substituindo nessa equação encontramos a relação:

$$t\,(t-1)\,\rho^{t-2}+2t\rho^{t-2}-l\,(l+1)\,\rho^{t-2}=0 \tag{E.215}$$

$$t\,(t-1)+2t-l\,(l+1)=0 \tag{E.216}$$

A única solução física aceitável para a equação E.216 é $t=l$.

Seguindo dessa solução podemos dizer que a solução geral é um produto de uma função exponencial com uma serie polinômios com o termo ρ^t, logo:

$$R\,(\rho)=\rho^l\sum_{k=0}^{\infty}a_k\rho^k e^{-\frac{\rho^2}{2}} \tag{E.217}$$

$$\frac{dR\,(\rho)}{d\rho}=\sum_{k=0}^{\infty}a_k\left[(l+k)\,\rho^{k+l-1}-\rho^{l+k+1}\right]e^{-\frac{\rho^2}{2}} \tag{E.218}$$

$$\frac{d^2R\,(\rho)}{d^2\rho}=\sum_{k=0}^{\infty}a_k\left[(l+k)\,(l+k-1)\,\rho^{k+l-2}-(2l+2k+1)\,\rho^{l+k}+\rho^{l+k+2}\right]e^{-\frac{\rho^2}{2}} \tag{E.219}$$

Ao substituir os termos acima na equação temos:

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{\infty}a_k\Big[&(l+k)(l+k-1)\rho^{k+l-2}-(2l+2k+1)\rho^{l+k}+\rho^{l+k+2}\\&+2(l+k)\rho^{k+l-2}-2\rho^{l+k}-\rho^{l+k+2}-l(l+1)\rho^{l+k-2}\\&+\frac{2E}{\hbar\omega}\rho^{l+k}\Big]=0\end{aligned} \tag{E.220}$$

que pode ser reescrito como:

$$\sum_{k=0}^{\infty}a_k\left[k\,(2l+k+1)\,\rho^{k+l-2}+\left(\frac{2E}{\hbar\omega}-(2l+2k+3)\right)\rho^{l+k}\right]=0 \tag{E.221}$$

Podemos determinar os primeiros termos do somatório com $k=0,1$ consequentemente o valor a_0 é indeterminado, será necessário defini-lo inicialmente, já o termo a_1 é descrito com base na manipulação da equação para obter os resultados:

$$a_1\left[(2l+2)\,\rho^{l-1}+\left(\frac{2E}{\hbar\omega}-(2l+5)\right)\rho^{l+1}\right]=0 \tag{E.222}$$

$$\sum_{k=2}^{\infty}\left[a_{k+2}\left(k+2\right)\left(2l+k+3\right)+a_k\left(\frac{2E}{\hbar\omega}-\left(2l+2k+3\right)\right)\right]\rho^{l+k}=0 \tag{E.223}$$

$$a_{k+2}=-\frac{\frac{2E}{\hbar\omega}-\left(2l+2k+3\right)}{\left(k+2\right)\left(2l+k+3\right)}a_k \tag{E.224}$$

Quando for preciso encontrar a energia do sistema considera-se a_{k+2} para k suficientemente alto, assim como seus termos sucessores, assim:

$$\frac{2E}{\hbar\omega}-\left(2l+2s+3\right)=0 \tag{E.225}$$

$$E=\hbar\omega\left(l+s+\frac{3}{2}\right) \tag{E.226}$$

$$a_{k+1}=-\frac{k-s}{\left(k+1\right)\left(l+k+\frac{3}{2}\right)}a_k \tag{E.227}$$

Cada um dos termos a_k esta associada a uma solução geral chamada polinômios de Laguerre ${L_n}^{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r^2\right)$, assim temos a solução geral como:

$$R_{nl}\left(r\right)=N_{nl}r^l L_n^{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r^2\right)e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2} \tag{E.228}$$