FORMALISMO PDTO EM COORDENADAS ESFÉRICAS

Raphael Nicolas Domingos Maia[1]
João Philipe Macedo Braga[2]

RESUMO

A modificação da equação de Schrödinger em coordenadas polares e esféricas visa elaborar e resolver problemas bidimensionais e tridimensionais dentro do contexto desse formalismo, investigando os efeitos da métricas não euclidianas com simetrias polares e esféricas na dinâmica de partículas quânticas. O principal objetivo é a implementação do Formalismo do Operador de Translação Dependente da Posição (PDTO). Para isso, modificaremos o espaço utilizando coordenadas generalizadas, com o intuito de encontrar o operador de Translação Generalizado em três coordenadas devidamente generalizadas, usando coordenadas esféricas. A justificativa deste trabalho e do uso deste formalismo é a criação de uma ferramenta para ensino e pesquisa. Como exemplo, a resolução do problema do ponto quântico infinito, utilizando uma mudança de coordenadas que torna a equação idêntica à encontrada na bibliografia de Griffiths, obtendo como resultado harmônicos esféricos com dependência da métrica. No entanto, podemos demonstrar que essa mudança de coordenadas implica que as soluções da equação de Schrödinger no espaço euclidiano podem ser adaptadas para este formalismo, porém com a dependência da métrica.

Palavras-chave: Mecânica Quântica; PDTO; Equação de Schrödinger.

UFC, Departamento de Física, Discente, nicolasmaia501@gmail.com[1]
UNILAB, ICEN, Docente, philipe@unilab.edu.br[2]

INTRODUÇÃO

A mecânica quântica é um campo fascinante e intrincado da física, crucial para a compreensão de fenômenos em escalas atômicas e subatômicas. Neste trabalho, utilizaremos o formalismo de Schrödinger em coordenadas esféricas, com o objetivo de modificar o espaço, que deixará de ser isotrópico, de modo que os efeitos geométricos não possam ser negligenciados. Para isso, será necessário alterar a equação de Schrödinger. Utilizaremos o formalismo do Operador de Translação Dependente da Posição (PDTO, do inglês Position Dependent Translation Operator), no qual adicionaremos uma métrica tanto na componente radial quanto na componente angular, estabelecendo um elo entre essas componentes.

Uma consequência significativa é a perda de isotropia do espaço devido às mudanças na métrica, o que afeta as resoluções dos problemas. No entanto, essa abordagem permite derivar soluções, como harmônicos esféricos dependentes da métrica, oferecendo novos insights sobre problemas quânticos, como, por exemplo, na física de materiais. No mundo real, não existem condutores ideais, o que nos leva a considerar o comportamento de partículas em materiais heterogêneos, onde tanto a posição quanto a geometria precisam ser levadas em consideração.

O objetivo deste trabalho é modificar a equação de Schrödinger em coordenadas esféricas e a resolver alguns problemas, como o do ponto quântico infinito. A justificativa para a modificação reside no fato de que muitos problemas requerem o uso de simetria esférica. Vale ressaltar que, por estarmos lidando com partículas subatômicas, o potencial utilizado é o coulombiano, que depende essencialmente de uma simetria esférica.

METODOLOGIA

Para a realização deste trabalho, primeiramente desenvolvemos o operador de Translação Generalizado utilizando coordenadas ortogonais. Inicialmente, usamos coordenadas generalizadas (q1, q2, e q3). Partindo dessa ideia, consideramos uma partícula bem localizada em |dq1, dq2, dq3>, que é levada para |dq1 +(g11)-1/2 ,dq2+ (g22)-1/2, dq3 + (g33)-1/2 >. Dessa forma, além de perdermos a isotropia do espaço, também perdemos a aditividade, o que significa que cada ponto do espaço possui propriedades distintas.

Em seguida, utilizamos as coordenadas esféricas. Uma vez definidas as coordenadas, escolhemos a métrica. Na parte radial, usaremos g(r)-1/2, o que nos proporcionará mais liberdade de escolha. No entanto, para a parte angular, consideramos que o resultado de sua derivada (ou taxa de variação) em relação a r seja g(r)-1/2. Assim, estabelecemos uma relação entre as coordenadas. Dessa forma, ao mudarmos o sistema de coordenadas e expressá-lo em termos de η, obtivemos uma equação de distância de pontos idêntica à equação de distância entre pontos (ds) no espaço euclidiano. A vantagem disso é que podemos resolver os problemas que envolvem a métrica da mesma forma que resolvemos anteriormente e, após encontrarmos o resultado, basta realizar a mudança de coordenadas para o espaço com a métrica modificada.

Com essas considerações, passamos para a resolução do problema do ponto quântico infinito, onde a partícula está limitada a uma região esférica de raio R, em que o potencial dentro dessa esfera é nulo e a métrica do espaço respeita a seguinte relação, $grr=(1+ar)^{-2}$. Consequentemente, temos $\eta=(1/\gamma)\ln(1+\gamma x)$. Para resolver o problema, precisamos fazer uma mudança de coordenada, que chamaremos de ξ. Isso implica que a métrica angular depende de $\xi=\eta N(\eta)$, levando-nos a uma equação idêntica à equação de Schrödinger na componente radial.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O estudo das coordenadas esféricas foi aprofundado no formalismo PDTO, resultando em uma

ISSN: 2447-6161

equação muito semelhante à equação de Schrödinger em coordenadas esféricas. No entanto, nesse sistema, o espaço deixa de ser isotrópico devido à métrica. Dessa forma, os efeitos geométricos não podem mais ser desprezados, e a aditividade nas translações espaciais é perdida. Contudo, ao considerarmos uma métrica na parte angular vinculada à parte radial, obtemos como resultado uma equação de Schrödinger idêntica à equação de Schrödinger no espaço euclidiano.

Resolvemos o problema do ponto quântico esférico, obtendo os harmônicos esféricos como solução, mas com dependência da métrica. No caso particular em que a métrica é igual a 1, recuperamos a solução encontrada no livro de Griffiths.

CONCLUSÕES

Este formalismo permitiu a modificação das principais equações da mecânica quântica e clássica em um espaço não isotrópico. Embora essa abordagem tenha tornado a resolução dos problemas mais complexa, especialmente devido à perda da isotropia, conseguimos encontrar soluções adequadas, como os harmônicos esféricos dependentes da métrica. No caso específico em que a métrica é igual a 1, as equações se tornam idênticas às apresentadas na literatura, como no livro de Griffiths.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à FUNCAP pela bolsa concedida e à UNILAB.

REFERÊNCIAS

[1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Lalöe, Quantum Mechanics,Vol.1 Hermann e John Wiley Sons, Paris, 1977).

[2] D. J. GRIFFITHS, Introduction to Quantum Mechanics. 2. ed. Cambridge, England: Cambridge University Press,2011.

[3] J.P.M. BRAGA, Mecânica Quântica Não-aditiva, Tese de Doutorado, Programa de Pós-graduação do Departamento de Física da UFC, 2015.

[4] J.J. SAKURAI, Modern Quantum Mechanics(Addison-Wesley, Los Angeles, 1994), Rev. ed.

[5] J. STEWART, Cálculo. Vol. 2 7ª edição norte-americana.

[6[N. A. LEMOS. Mecânica Analítica. Departamento de Física UNiversidade Federal Fluminense.

[7] I. S. SOKOLNIKOFF, Tensor Analysis, John Wiley Sons, New York 1964