

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICO-QUÍMICA

APLICAÇÕES DA FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA
MECÂNICA QUÂNTICA A SISTEMAS MOLECULARES

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS.

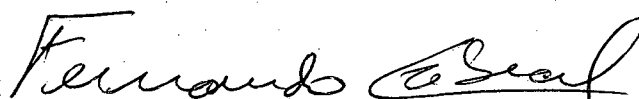
CARLOS ALBERTO KUHNEN

DEZEMBRO - 1981

APLICAÇÕES DA FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA A
SISTEMAS MOLECULARES

CARLOS ALBERTO KUHNEN

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA E APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO
ORIENTADOR E MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA.



PROF. FERNANDO CABRAL, Ph.D.

ORIENTADOR



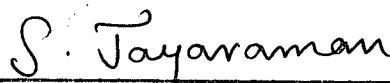
PROF. FARUK J. NOME AGUILERA, Ph.D.

COORDENADOR

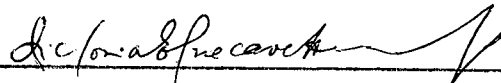
BANCA EXAMINADORA:



PROF. FERNANDO CABRAL, Ph.D.



PROF. SUBRAMANIA JAYARAMAN, Ph.D.



PROFª VITÓRIA HERSCOVITZ, Drª

À minha esposa
e filhas

AGRADECIMENTOS

Meus agradecimentos

Ao Prof. Fernando Cabral, pela orientação deste trabalho;

Aos meus amigos e colegas pela atenção e apoio dispensados;

Ao Carlos Duarte, por seu cuidadoso e paciente trabalho de datilografia;

À Biblioteca do Instituto de Física da UFRG pelo fornecimento de inúmeras referências bibliográficas.

Aos Professores Subramania Jayaraman e Vitória Herscovitz por suas críticas e sugestões.

RESUMO

Este trabalho é baseado em uma reinterpretação do formalismo de Schrödinger, a formulação hidrodinâmica, a partir de uma definição de velocidade quântica apresentada recentemente na literatura. Considera-se a aplicação deste formalismo a estados estacionários de sistemas representados por potenciais moleculares. São obtidos alguns níveis de energia para o potencial de Barbanis (isotrópico e anisotrópico), para um oscilador anarmônico tridimensional, e para o potencial de Henon-Heiles. Os resultados encontrados concordam com os apresentados na literatura e obtidos por outros métodos.

ABSTRACT

In the present work, we develop a hydrodynamical formulation of the well-known Schrödinger's Quantum Mechanics, using a definition of "Quantum Velocity" as introduced recently in the literature. This formalism is then applied to study the stationary states of molecular systems. Specifically, the energy levels are determined for an anharmonic three dimensional oscillator modeled by a potential due to Barbanis and for a potential of Henon-Heiles. The results obtained agree well with the results encountered in literature.

Í N D I C E

RESUMO	v
ABSTRACT	vi
INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO I - FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA	3
1. Introdução	3
2. Equações da Formulação Hidrodinâmica ...	6
3. As Equações de Movimento e o Princípio da Superposição	11
4. Derivação das Equações de Movimento a partir do Princípio de Hamilton	19
CAPÍTULO II - APLICAÇÕES DA FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA A ESTADOS LIGADOS	24
1. Introdução	24
2. Problemas Quânticos Simples	24
3. Átomo de Hidrogênio	27
4. O Oscilador Harmônico em uma Dimensão ..	31
5. Oscilador Harmônico Bidimensional	33
CAPÍTULO III - FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA APLICADA À FÍSICA MOLECULAR	66
1. Introdução	66
2. O Hamiltoniano de Barbanis	66
2.1 - O Hamiltoniano Isotrópico de Barbanis	66
2.2 - O Hamiltoniano Anisotrópico de Barbanis	77
3. O Oscilador Harmônico Tridimensional Acoplado	79
4. O Sistema de Henon-Heiles	84
CAPÍTULO IV - COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES	128
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	134

INTRODUÇÃO

Neste trabalho apresentamos o formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica com o intuito de aplicá-lo a alguns sistemas quânticos a nível molecular.

No primeiro capítulo é desenvolvido o formalismo hidrodinâmico, seguindo-se o procedimento adotado em trabalhos recentes apresentados na literatura. A derivação das equações de movimento análogas ao caso clássico é feita a partir da equação de Schrödinger e da definição de velocidade quântica dada por Hirschfelder. Estas mesmas equações são obtidas a partir de uma generalização do princípio de Hamilton com o lagrangeano convenientemente definido. Neste capítulo mostra-se também a validade do princípio da superposição para as soluções das equações de movimento.

No segundo capítulo apresenta-se a aplicação do formalismo hidrodinâmico para estados estacionários. Inicialmente, consideram-se dois exemplos simples, quais sejam, o de uma partícula livre e o de uma partícula em um poço quadrado infinito, os resultados sendo idênticos aos obtidos através do formalismo usual. A seguir são analisados o átomo de hidrogênio e o oscilador harmônico uni e bidimensional e novamente se constata que apesar de o procedimento e a interpretação dada serem diferentes dos do formalismo usual, obtêm-se os mesmos resultados.

O terceiro capítulo é dedicado à solução de sistemas quânticos a nível molecular, ou seja, consideram-se hamiltonianos, recentemente apresentados na literatura, que tentam descrever as interações moleculares. Inicialmente propõem-se soluções aproximadas para o potencial de Barbanis, onde se investiga tan-

to o caso isotrópico como o anisotrópico. Para o potencial de Barbanis isotrópico é verificada a validade das soluções propostas para diferentes valores do parâmetro de acoplamento e para o caso anisotrópico investiga-se a validade das soluções frente a um aumento na anisotropia do sistema. O segundo sistema analisado consiste no oscilador anarmônico tridimensional, que pode ser encarado como uma generalização do potencial de Barbanis para três dimensões. O terceiro e último sistema analisado é o dado pelo hamiltoniano de Henon-Heiles. Este sistema é caracterizado por uma perturbação no potencial, maior do que no caso de Barbanis. Isto leva a um cálculo mais laborioso para obtenção dos níveis de energia; além disto, a verificação da validade das soluções propostas mostra-nos que a mesma se dá dentro de uma faixa menor de valores do parâmetro de acoplamento. Para todos os sistemas estudados obtém-se alguns níveis de energia que são comparados aos valores obtidos por outros métodos na literatura recente.

No quarto e último capítulo são apresentadas as conclusões relativas a este trabalho e abordados alguns aspectos de uma tentativa de generalização relativística do formalismo hidrodinâmico.

CAPÍTULO I

A FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA1. INTRODUÇÃO

O estabelecimento da teoria quântica deu-se a partir de fracassos experimentais apresentados pela física clássica ao final do século XIX e início deste século, tendo ocorrido na década de vinte o seu desenvolvimento matemático a partir dos trabalhos de Schrödinger^[1] e Heisenberg^[2]. No entanto, a equação de Schrödinger e o formalismo matricial de Heisenberg passam a ter significado físico à medida que as quantidades matemáticas usadas se tornam passíveis de uma interpretação que possibilite o conhecimento de fenômenos físicos. Assim é que os trabalhos de Bohr^[3], Born^[4], De Broglie^[5] e Pauli^[6] forneceram o que chamamos de interpretação usual da teoria quântica.

Esta interpretação física da teoria quântica está centrada em torno da interpretação probabilística dada por Born para o módulo quadrado da função de onda, do princípio da incerteza derivado inicialmente por Heisenberg, bem como do princípio da complementaridade de Bohr. O princípio da incerteza, como se sabe, advém do fato de supormos que a função de onda (e sua interpretação probabilística) fornece uma completa especificação do estado de um sistema individual. Porém, devemos observar que o princípio da incerteza está ligado a medidas de grandezas físicas e, como se sabe, não se desenvolveu até hoje completamente uma teoria quântica de medidas, enquanto, por outro lado, usa-se intuitivamente o estabelecido por Bohr de que todos os experimen

tos devem ser descritos em termos clássicos. Isto, segundo Von Weizsäcker^[7], implica em aparente paradoxo; pois a física clássica sucedeu (devido às suas limitações) a teoria quântica e a teoria quântica deve ser verificada através de experimentos que, segundo Bohr, devem ser descritos classicamente!

Convém salientar que o princípio da incerteza pode também ser obtido como uma limitação inerente e inevitável na precisão de qualquer medida, desde que assumamos, como Bohr^[3] e outros, que a simples transferência de um quantum do sistema em observação para os aparelhos de medida é inerentemente imprevisível e incontrolável, e não sujeita a uma análise racional ou a uma tentativa de descrição. Bohr^[3] resumiu o ponto de vista abordado acima no princípio da complementaridade que estabelece estarmos restringidos a conceitos não definidos precisamente, sendo tal imprecisão inerente a estes conceitos, como por exemplo momento^o e posição ou partícula e onda.

Podemos tentar resumir a interpretação usual da teoria quântica a partir de dois postulados mutuamente consistentes, quais sejam: a função de onda com sua interpretação probabilística determina de maneira completa a possível especificação do estado de um sistema individual; o processo de transferência de um quantum do sistema observado para os aparelhos de medida é inerentemente imprevisível, incontrolável e não passível de análise.

A teoria quântica trouxe incontestáveis progressos para um conhecimento mais acurado dos fenômenos microscópicos; no entanto, seria errôneo considerá-la como uma teoria final, capaz de nos legar todas as informações possíveis, no domínio do muito pequeno^[8].

Ademais, não devemos nos arraigar à idéia de uma única

possível interpretação do formalismo matemático de Schrödinger e, neste sentido, paralelamente ao desenvolvimento da mecânica ondulatória e sua interpretação probabilística, desenvolveu-se também uma interpretação alternativa da teoria quântica. Esta interpretação, em contraste com a usual, nos levaria a conceber cada sistema individual como tendo um estado precisamente definido e cujas mudanças no tempo seriam determinadas por leis definidas de forma análoga (mas não idêntica) às equações clássicas do movimento. Segundo estas idéias, as probabilidades quanto-mecânicas seriam consideradas como uma necessidade prática e não como uma manifestação de uma falta inerente na completa determinação das propriedades da matéria no domínio quântico [8].

Madelung [9], De Broglie [5] e Rosen [10] sugeriram inicialmente que, ao escrevermos a função de onda (no espaço de coordenadas) como $\Psi = \rho^{1/2} e^{iS/\hbar}$ (onde tanto $\rho^{1/2}$ como S são reais), podemos interpretar ρ como a densidade de probabilidade de partículas que possuam velocidade $\vec{v} = \vec{\nabla}S/m$. Mais tarde Bohm [8,11,12] desenvolveu de forma lógica e consistente o raciocínio acima, considerando Ψ como um campo atuante na partícula que satisfaça a equação de Schrödinger e que o momentum da partícula esteja restrito a $\vec{P} = \vec{\nabla}S$; era seu ponto de vista, também, que não podemos prever ou controlar a localização precisa de uma partícula, mas temos, na prática, um ensemble estatístico com densidade de probabilidade $\rho = |\Psi|^2$. Além disso, o uso da estatística não seria inerente à estrutura conceitual, mas uma mera consequência de nossa ignorância acerca das condições iniciais da partícula. Paralelamente aos trabalhos de Bohm, houve autores como Takabayasi [13,14], Epstein [15] e outros que atacaram o problema de uma reinterpretação de formalismo de Schrödinger. Nos últimos

anos com os trabalhos de Rosen^[16], Berkowitz e Skiff^[17], Viggier^[18,19], Wong^[20], Kan e Griffin^[21], Bialynicki-Birula^[22,23], de la Peña-Auerbach e colaboradores^[24,25] e Hirschfelder e colaboradores^[26,27,28,29], delineou-se de forma mais nítida a possibilidade de outras interpretações do formalismo da teoria quântica, possibilitando o ataque a problemas quânticos sob outro ponto de vista, que se expressa através do formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica.

2. EQUAÇÕES DA FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA

A derivação das equações nas quais se baseia o formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica, será feita seguindo-se os trabalhos de Madelung^[9] e Bohm^[8] e as idéias recentes apresentadas por Hirschfelder^[26,27,28,29]. Na representação de coordenadas da mecânica quântica o operador momentum de uma partícula é definido por $P_{op} = -i\hbar\vec{\nabla}$; o formalismo hidrodinâmico sugere a introdução de uma velocidade quântica relacionada ao momentum de uma partícula de massa "m", através da equação:

$$\vec{P}_{op}\Psi = m\vec{V}\Psi = m(\vec{v} + i\vec{v}_i)\Psi, \quad (I.1)$$

\vec{v} e \vec{v}_i sendo funções reais que representam respectivamente as componentes real e imaginária da velocidade quântica \vec{V} e Ψ , a função de onda que descreve a partícula. (Observe-se que no caso clássico, $\vec{v}_i = 0$ e $\vec{P} = m\vec{v}$).

Podemos expressar \vec{v} e \vec{v}_i em termos da função de onda tomando a complexa conjugada da equação (I.1)

$$(\vec{P}_{op} \Psi)^* = m(\vec{v} - i\vec{v}_i)\Psi^* \quad (I.2)$$

e reescrevendo as equações (I.1) e (I.2) como:

$$\vec{v} + i\vec{v}_i = -\frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} \ln \Psi \quad (I.3)$$

$$\vec{v} - i\vec{v}_i = \frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} \ln \Psi^* .$$

Obtemos, então, as equações para \vec{v} e \vec{v}_i :

$$\vec{v} = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln (\Psi^*/\Psi) \quad (I.4)$$

$$\vec{v}_i = -\frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln (\Psi^*\Psi). \quad (I.5)$$

As equações (I.4) e (I.5) são básicas no formalismo hidrodinâmico pois, a partir delas e da equação de Schrödinger, obtem-se as equações da conservação da energia e da continuidade. Começamos por escrever, sem perda de generalidade, a função de onda como:

$$\Psi = \rho^{1/2} e^{iS/\hbar} \quad (I.6)$$

onde tanto "ρ" como "S" são reais. Note-se que a função de onda assim definida nos permite separar a equação de Schrödinger em uma parte real e outra imaginária; com esse intuito substitui-se a função de onda definida em (I.6) na equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \frac{P^2}{2m} \Psi + V\Psi \quad (I.7)$$

obtendo para potenciais independentes da velocidade:

$$\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho - \frac{\partial S}{\partial t} - V = \Psi^{-1} \frac{P^2}{2m} \Psi \quad (I.8)$$

Utilizando agora a equação (I.1), expandimos o segundo membro da equação (I.8):

$$\begin{aligned} \psi^{-1} \frac{\vec{P} \cdot \vec{P}}{2m} \psi &= (2\psi)^{-1} \vec{P} \cdot (\vec{v} + i\vec{v}_i) \psi = \frac{1}{2} mv^2 + \\ &+ i(m\vec{v} \cdot \vec{v}_i - \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}) + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i - \frac{1}{2} mv_i^2 \end{aligned} \quad (I.9)$$

Substituindo a expressão para $\psi^{-1} \frac{p^2}{2m} \psi$ dada na equação (I.9), na equação (I.8), e igualando as partes reais e imaginárias de ambos os membros obtemos:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2} mv^2 - \frac{1}{2} mv_i^2 + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V \quad (I.10)$$

e

$$\frac{\hbar}{2\rho} \frac{\partial}{\partial t} \rho = m\vec{v} \cdot \vec{v}_i - \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (I.11)$$

Podemos agora reescrever as equações (I.10) e (I.11) observando que, a partir da função de onda $\psi = \rho^{1/2} e^{iS/\hbar}$, obtemos para \vec{v} e \vec{v}_i respectivamente:

$$\vec{v} = \vec{\nabla} S / m \quad (I.12)$$

e

$$\vec{v}_i = -\frac{\hbar}{2m} \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \rho \quad (I.13)$$

Inserindo-se a expressão para \vec{v}_i na equação (I.11) resulta:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (I.14)$$

que é a equação de continuidade para um fluido com densidade " ρ " e velocidade \vec{v} . Por esta razão, este formalismo recebe a denominação de formulação hidrodinâmica. Deve-se notar, no entanto,

que a equação (I.14) é apresentada usualmente [30,31] como uma equação de continuidade para a densidade de probabilidade, ou seja:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (\text{I.15})$$

onde $\rho = |\Psi|^2$ é a densidade de probabilidade e $\vec{J} = (i\hbar/2m) (\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi)$ é o fluxo de densidade de probabilidade. Note-se que a relação entre \vec{v} e \vec{J} é:

$$\vec{v} = \vec{J}/\rho \quad (\text{I.16})$$

relação usada inicialmente por Madelung [9], Landau [32] e London [33] para definição de \vec{v} na formulação hidrodinâmica.

Examinemos agora a equação (I.10). Para estados estacionários $E = -\partial S/\partial t$ e portanto obtemos

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{2} m v_i^2 + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V \quad (\text{I.17})$$

Utilizando as definições para \vec{v} e \vec{v}_i dadas nas equações (I.12) e (I.13), podemos reescrever a equação (I.17) como:

$$E = \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho^{1/2}} \nabla^2 \rho^{1/2} \quad (\text{I.18})$$

equação que podemos interpretar mais claramente, tomando inicialmente o limite clássico, ou seja, quando $\hbar \rightarrow 0$ S é solução da equação de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica [8]

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} + V = 0 \quad (\text{I.19})$$

Assim, a equação (I.18) pode ser interpretada como uma generalização da equação de Hamilton-Jacobi, o que significa dizer que a partícula descreve uma trajetória clássica, não estan-

do, porém, somente sob a ação de um potencial externo, mas também sob a influência de um potencial quântico dado por

$$V_{\text{QUÂNTICO}} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho^{1/2}} \nabla^2 \rho^{1/2} \quad (\text{I.20})$$

devido à interação da partícula com seu próprio campo Ψ . Esta interpretação, sugerida inicialmente por Bohm^[8,11], explicaria porque uma partícula não pode alcançar pontos onde a função de onda é nula, pois para estes pontos o potencial quântico torna-se infinito. Além disto salientaria o efeito de uma medida sobre o estado quântico de um sistema, pois ao se efetuar a medida de um observável, altera-se o campo ρ levando a uma conseqüente alteração em $V_{\text{Quântico}}$ e portanto no movimento do sistema. De La Peña-Auerbach^[25], ao derivar a equação de Schrödinger, tratando o problema de uma partícula sob o ponto de vista estocástico, interpreta o potencial quântico não a partir da equação (I.20), mas a partir da forma desmembrada contida na equação (I.17) (os dois termos que contêm \vec{v}_i naquela equação), onde \vec{v}_i é considerada como a componente estocástica da velocidade, e as indeterminações na trajetória de uma partícula dar-se-iam face ao caráter aleatório do movimento. Este ponto de vista apresentado por De La Peña-Auerbach tem sido sustentado por diversos autores ao analisarem a conexão entre a mecânica quântica e a teoria de processos markovianos^[34,35,36,37]. Outro aspecto importante evidenciado na equação (I.18) é que podemos inferir dela as circunstâncias em que não há diferença entre o movimento clássico e o quântico, o que corresponde a $V_{\text{quântico}} = \text{constante}$, o que já foi assinalado por Rosen^[16], Berkowitz^[17] e Lembra^[38].

Um limite da equação (I.18), que nos interessará particularmente, corresponde ao caso das funções de onda com parte es

pacial real. Neste caso, a velocidade quântica possui apenas a componente imaginária, e a equação (I.17) pode ser escrita como

$$E - V = \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i - \frac{1}{2} m v_i^2, \quad (\text{I.21})$$

que é uma equação multidimensional de Riccati. Note-se que a equação (I.21) deveria ser escrita formalmente como:

$$E_n - V = \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{i(n)} - \frac{1}{2} m v_{i(n)}^2 \quad (\text{I.22})$$

onde E_n é a energia do n-ésimo auto estado de H, e $\vec{v}_{i(n)}$ é a componente imaginária da velocidade quântica, definida por (equação (I.5)):

$$\vec{v}_{i(n)} = - \frac{\hbar}{m} \vec{\nabla} \ln |\Psi_n| \quad (\text{I.23})$$

sendo Ψ_n a autofunção correspondente ao n-ésimo estado. A equação (I.22), por se tratar de uma equação diferencial de primeira ordem, embora não linear, pode ser integrada numericamente de forma mais rápida, em alguns casos, que a equação de Schrödinger correspondente [39,40], fornecendo, como era de se esperar, os mesmos resultados [41].

3. AS EQUAÇÕES DE MOVIMENTO E O PRINCÍPIO DA SUPERPOSIÇÃO.

Neste parágrafo considerar-se-ão apenas estados estacionários, ou seja, nos ateremos à equação (I.10) sob a forma (I.17):

$$E - V = \frac{1}{2} mv^2 + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i - \frac{1}{2} mv_i^2 \quad (\text{I.24})$$

que, com a equação (I.14), constituem a base do formalismo hidrodinâmico. Intencionalmente, existe uma grande semelhança entre as equações do formalismo hidrodinâmico e as da mecânica clássica; consoante com esta filosofia introduzimos de forma análoga à definição clássica de velocidade, um parâmetro " t_i "^[24], tal que

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t_i} = \vec{v}_i \quad (\text{I.25})$$

e um parâmetro " t " a partir de

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \vec{v} \quad (\text{I.26})$$

onde \vec{r} é o vetor posição. Através destas definições pode-se buscar soluções

$$\begin{aligned} \vec{r} &= \vec{r}(t_i, t) \\ \vec{v} &= \vec{v}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (\text{I.27})$$

$$\vec{v}_i = \vec{v}_i(\vec{r})$$

que nos trazem informação equivalente à da solução da equação de Schrödinger; para isto devem ser encontradas as equações de movimento que darão como soluções $\vec{r} = \vec{r}(t_i, t)$. A estas soluções denominamos linhas de fluxo^[24].

As linhas de fluxo reais, que são análogas às trajetórias clássicas, são soluções particulares do conjunto de equações:

$$\frac{dx}{v_x} = \frac{dy}{v_y} = \frac{dz}{v_z} \quad (\text{I.28})$$

onde v_x , v_y e v_z são as componentes cartesianas retangulares de \vec{v} e onde subentende-se que t_i deve ser constante. Da mesma forma, em adição às linhas de fluxo reais, podemos construir um conjunto de linhas de fluxo imaginárias (para t constante) a partir do conjunto de equações:

$$\frac{dx}{v_{ix}} = \frac{dy}{v_{iy}} = \frac{dz}{v_{iz}} \quad (\text{I.29})$$

onde v_{ix} , v_{iy} , v_{iz} são as componentes retangulares de \vec{v}_i .

Neste ponto, convém salientar que os parâmetros " t " e " t_i " (que podemos chamar de "tempo real" e "tempo imaginário") têm como finalidade parametrizar as linhas de fluxo reais e imaginárias, não lhes sendo atribuída, nesta instância, interpretação física. No entanto, das equações (I.25) e (I.26) vê-se que estamos introduzindo um "tempo bidimensional" (t, t_i) que, na transição à mecânica clássica, se torna o tempo no sentido usual. (Esta não é a primeira vez em que se defende o uso do espaço real e de trajetórias complexas. Veja-se, por exemplo, McLaughlin^[42] que analisou a penetração de barreiras de potencial, com o uso de integrais de caminho de Feynman^[43], introduzindo um tempo complexo.

A obtenção das equações de movimento é feita a partir da aplicação do operador $\vec{\nabla}$ à equação (I.24), o que resulta em

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} - m \frac{d\vec{v}_i}{dt_i} = - \vec{\nabla} \left(V + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i \right) , \quad (\text{I.30})$$

onde $\frac{d}{dt}$ é a derivada hidrodinâmica, ou seja:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \quad (\text{I.31})$$

Como podemos ver, a equação (I.30) é uma generalização da segunda lei de Newton, tendo-se agora uma componente imaginária da velocidade e a adição de um termo ao potencial; ademais, ela contém explicitamente o limite clássico, pois neste caso $\vec{v}_i \rightarrow 0$, obtendo-se

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = - \vec{\nabla} V \quad (\text{I.32})$$

No caso de funções de onda com parte espacial real, $\vec{v} = 0$ e a equação (I.30) fornece:

$$m \frac{d\vec{v}_i}{dt_i} = - \vec{\nabla} \left(- V - \frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i \right) \quad (\text{I.33})$$

equação que também mantém a forma da segunda lei de Newton, $\vec{F} = m\vec{a}$; no entanto, a "força" F difere da força clássica. Isto implica que os sistemas quânticos obedecem a uma equação de movimento análoga à do caso clássico^[44,45], mas a expressão correspondente à "força" contém um termo correspondente à contribuição do campo definido pela densidade (campo ρ) ao potencial. Podemos ver isto mais facilmente reescrevendo a equação (I.33) como:

$$m \frac{d\vec{v}_i}{dt_i} = - \vec{\nabla} \left[\frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{\rho \nabla^2 \rho - (\vec{\nabla} \rho)^2}{\rho^2} \right) - V \right] \quad (\text{I.34})$$

onde a "força" se torna infinita em pontos que correspondem aos nós da função de onda, o que nos impele a concluir que a partícula não poderia localizar-se em tais pontos, em concordância com o sugerido inicialmente por Bohm^[8].

As soluções das equações de movimento do formalismo hidrodinâmico apresentadas satisfazem o princípio da superposição, apesar de esta propriedade não ser tão evidente, como já foi assinalado por Bialynicki-Birula^[22].

Consideramos as formas gerais das expressões para \vec{v} e \vec{v}_i de um estado caracterizado pela função de onda Ψ , onde:

$$\Psi = \sum_{j=1} a_j \Psi_j \quad (\text{I.35})$$

sendo Ψ_j as auto-funções

$$\Psi_j = \rho_j^{1/2} e^{i\phi_j} \quad (\text{I.36})$$

Desta forma podemos escrever o fluxo de densidade de probabilidade para o n-ésimo estado como:

$$\begin{aligned} -\rho \vec{v} = & \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \left(\sum_{j=1} a_j \rho_j^{1/2} e^{i\phi_j} \right) \left(\sum_{j=1} a_j^* e^{-i\phi_j} \vec{\nabla} \rho_j^{1/2} \right) - \right. \\ & - \left(i \sum_{j=1} a_j \rho_j^{1/2} e^{i\phi_j} \right) \left(\sum_{j=1} a_j^* \rho_j^{1/2} e^{-i\phi_j} \vec{\nabla} \phi_j \right) - \\ & - \left(\sum_{j=1} a_j^* \rho_j^{1/2} e^{-i\phi_j} \right) \left(\sum_{j=1} a_j e^{i\phi_j} \vec{\nabla} \rho_j^{1/2} \right) - \\ & \left. - \left(i \sum_{j=1} a_j^* \rho_j^{1/2} e^{-i\phi_j} \right) \left(\sum_{j=1} a_j \rho_j^{1/2} e^{i\phi_j} \vec{\nabla} \phi_j \right) \right\} \quad (\text{I.37}) \end{aligned}$$

Utilizando as definições para \vec{v} e \vec{v}_i de cada j-ésimo estado, que são respectivamente:

$$\vec{v}_j = \frac{\hbar}{m} \vec{\nabla} \phi_j \quad (\text{I.38})$$

$$\vec{v}_{i,j} = -\frac{\hbar}{m} \cdot \frac{1}{\rho_j^{1/2}} \vec{\nabla} \rho_j^{1/2} \quad (\text{I.39})$$

obtemos o seguinte resultado para \vec{v} :

$$\vec{v} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\sum_{j=1}^{\infty} a_j^* \Psi_j^* (\vec{v}(j) - i\vec{v}_{i(j)})}{\sum_{j=1}^{\infty} a_j^* \Psi_j^*} + \frac{\sum_{j=1}^{\infty} a_j \Psi_j (\vec{v}(j) + i\vec{v}_{i(j)})}{\sum_{j=1}^{\infty} a_j \Psi_j} \right\}, \quad (\text{I.40})$$

equação que pode ser reescrita como:

$$\vec{v} = \text{Re} \left\{ \frac{\sum_{j=1}^{\infty} a_j \Psi_j (\vec{v}(j) + i\vec{v}_{i(j)})}{\sum_{j=1}^{\infty} a_j \Psi_j} \right\} \quad (\text{I.41})$$

Como exemplo podemos considerar dois estados (ρ_1, \vec{v}_1) e (ρ_2, \vec{v}_2) , que são soluções das equações do movimento; podemos construir uma família de estados caracterizados por três parâmetros e descritos por (ρ, \vec{v}) , onde ρ é definido por:

$$\rho = |a_1|^2 \rho_1 + |a_2|^2 \rho_2 + 2 \text{Re} \{ a_1^* a_2 (\rho_1 \rho_2)^{1/2} \exp(i\phi) \} \quad (\text{I.42})$$

e \vec{v} (dada pela equação (I.41)) é igual a:

$$\begin{aligned} \vec{v} = & [|a_1|^2 \rho_1 \vec{v}_1 + |a_2|^2 \rho_2 \vec{v}_2 + 2 \text{Re} \{ a_1^* a_2 (\rho_1 \rho_2)^{1/2} (\vec{v}_1 + \vec{v}_2) e^{i\phi} \} - \\ & - \frac{1}{2} \text{Im} \{ a_1 a_2^* (\rho_1 \rho_2)^{1/2} (\vec{v}_{i2} - \vec{v}_{i1}) e^{i\phi} \}] (|a_1|^2 \rho_1 + |a_2|^2 \rho_2 + \\ & + 2 \text{Re} \{ a_1^* a_2 (\rho_1 \rho_2)^{1/2} e^{i\phi} \})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{I.43})$$

onde

$$\phi = \frac{m}{\hbar} \int_{r_0}^r (\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot d\vec{r} + \beta \quad (\text{I.44})$$

é a diferença de fase entre Ψ_1 e Ψ_2 . Estes resultados particulares são idênticos aos obtidos inicialmente por Bialynicki-Birula [22]. Note-se que a integral de linha na equação (I.44) deve ser avaliada ao longo de uma curva qualquer que não passe pelos vórtices da função de onda e que, além disso, o resultado da integração não depende do caminho percorrido. (Podemos chegar a esta conclusão notando que \vec{v} é irrotacional.)

Comparando os resultados expressos em (I.42) e (I.43), com a forma usual da superposição de duas funções de onda Ψ_1 e Ψ_2 , ou seja:

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2 \quad (\text{I.45})$$

vemos que os resultados são idênticos, desde que:

$$a_1 = C_1 \quad \text{e} \quad a_2 = C_2 \quad (\text{I.46})$$

mostrando-nos que, como na formulação usual, no formalismo hidrodinâmico a superposição de duas soluções das equações de movimento também é solução destas equações.

Resta-nos mostrar, agora, a expressão para a componente imaginária da velocidade quântica do referido estado; para isso partimos de:

$$\vec{v}_i = - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \Psi^* \Psi \quad (\text{I.47})$$

onde a função de onda é dada pelas equações (I.35) e (I.36).

Desenvolvendo a equação (I.47), achamos:

$$\vec{v}_i = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\sum_{j=1}^{\infty} a_j \Psi_j (\vec{v}_{i(j)} - i \vec{v}_{(j)})}{\sum_{j=1}^{\infty} a_j \Psi_j} + \frac{\sum_{j=1}^{\infty} a_j^* \Psi_j^* (\vec{v}_{i(j)} + i \vec{v}_{(j)})}{\sum_{j=1}^{\infty} a_j^* \Psi_j^*} \right\} \quad (\text{I.48})$$

que pode ser escrita compactamente como:

$$\vec{v}_i = \text{Re} \left\{ \frac{\sum_{j=1}^{\infty} a_j \Psi_j (\vec{v}_{i(j)} - i \vec{v}_{(j)})}{\sum_{j=1}^{\infty} a_j \Psi_j} \right\} \quad (\text{I.49})$$

Novamente, no caso de termos dois estados, agora caracterizados por $(\vec{v}_1, \vec{v}_{i1})$ e $(\vec{v}_2, \vec{v}_{i2})$, podemos construir um estado que seja a superposição destes dois, dado por (\vec{v}, \vec{v}_i) , onde \vec{v} é dado através da equação (I.43) e \vec{v}_i , dado a partir da equação (I.49), por:

$$\begin{aligned} \vec{v}_i = & [|a_1|^2 \rho_1 \vec{v}_{i1} + |a_2|^2 \rho_2 \vec{v}_{i2} + \text{Re} \{ a_1^* a_2 (\rho_1 \rho_2)^{1/2} (\vec{v}_{i1} + \vec{v}_{i2}) e^{i\Phi} \} + \\ & + \text{Im} \{ a_1 a_2^* (\rho_1 \rho_2)^{1/2} (\vec{v}_2 - \vec{v}_1) e^{i\Phi} \}] (|a_1|^2 \rho_1 + \\ & + |a_2|^2 \rho_2 + 2 \text{Re} \{ a_1^* a_2 (\rho_1 \rho_2)^{1/2} e^{i\Phi} \})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{I.50})$$

onde Φ é definido como na equação (I.44).

No caso particular de funções de onda com parte espacial real, $\Phi = 0$ e obtemos:

$$\vec{v}_i = \frac{|a_1|^2 \rho_1 \vec{v}_{i1} + |a_2|^2 \rho_2 \vec{v}_{i2} + \text{Re} \{ a_1^* a_2 (\rho_1 \rho_2)^{1/2} (\vec{v}_{i1} + \vec{v}_{i2}) \}}{|a_1|^2 \rho_1 + |a_2|^2 \rho_2 + 2 \text{Re} \{ a_1^* a_2 (\rho_1 \rho_2)^{1/2} \}} \quad (\text{I.51})$$

onde, tanto aqui como na equação (I.50), $\rho_1^{1/2}$ e $\rho_2^{1/2}$ são expressos como:

$$\begin{aligned} \rho_1^{1/2}(\mathbf{r}) &= \exp \left\{ - \frac{m}{\hbar} \int_{r_0}^r \vec{v}_{i1} \cdot d\vec{s} \right\} \\ \rho_2^{1/2}(\mathbf{r}) &= \exp \left\{ - \frac{m}{\hbar} \int_{r_0}^r \vec{v}_{i2} \cdot d\vec{s} \right\} \end{aligned} \quad (\text{I.52})$$

o que nos mostra, novamente, a concordância com o princípio da superposição na formulação usual da teoria quântica.

Podemos mostrar ainda a equivalência entre o formalismo hidrodinâmico e o usual, notando que é possível expressar o valor esperado de qualquer quantidade física em termos de ρ e \vec{v} [22] (ou em termos de \vec{v} e \vec{v}_i); para tanto consideremos como exemplo a integral de superposição de dois estados (P_{12}) em termos de ρ e \vec{v} , que na formulação usual é expressa como:

$$P_{12} = |(\psi_1 | \psi_2)|^2 \quad (\text{I.53})$$

Na formulação hidrodinâmica, P_{12} toma a forma:

$$P_{12} = \left| \int d^3r (\rho_1 \rho_2)^{1/2} \exp \left[i \frac{m}{\hbar} \int_{r_0}^r (\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot d\vec{s} \right] \right|^2 \quad (\text{I.54})$$

expressão que podemos escrever em termos de \vec{v} e \vec{v}_i como:

$$P_{12} = \left| \int d^3r \exp \left\{ i \frac{m}{\hbar} \int_{r_0}^r [(\vec{v}_2 + i\vec{v}_{12}) - (\vec{v}_1 - i\vec{v}_{11})] \cdot d\vec{s} \right\} \right|^2. \quad (\text{I.55})$$

Observe-se que a integral de linha não depende da trajetória percorrida, pois os campos vetoriais definidos por \vec{v} e \vec{v}_i são irrotacionais; note-se também que a troca do ponto inicial r_0 afeta unicamente a fase na integral da equação (I.54) (ou de (I.55)).

4. DERIVAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE MOVIMENTO A PARTIR DO PRINCÍPIO DE HAMILTON.

Como salientamos anteriormente, existe uma grande ana-

logia entre o formalismos hidrodinâmico e as equações clássicas do movimento. A idéia de que, em princípio, podemos construir um método numérico para resolver a equação de Schrödinger a partir da construção de segmentos de linhas de fluxo reais e imaginárias e determinando-se a variação de \vec{v} e \vec{v}_i ao longo destas linhas, foi sugerida inicialmente por Hirschfelder^[24]. Mostraremos aqui que a descrição de sistemas quânticos através de equações de movimento análogas às equações clássicas, mas com a introdução do conceito de tempo como uma grandeza bidimensional (complexa) e caracterizada por t e t_i , traz consigo uma generalização do princípio de Hamilton com a qual podemos derivar as equações de movimento (e portanto a equação de Schrödinger). Para tanto, começamos por escrever o princípio de mínima ação como:

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} \int_{t_{i1}}^{t_{i2}} L dt dt_i = 0 \quad (I.56)$$

onde o lagrangeano L é da forma:

$$L = L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N, \dot{q}_{i1}, \dot{q}_{i2}, \dots, \dot{q}_{iN}, t, t_i) \quad (I.57)$$

e:

$$q_j = q_j(t, t_i)$$

$$\dot{q}_j = \dot{q}_j(q_j) = \frac{\partial q_j}{\partial t} \quad (I.58)$$

$$\dot{q}_{ij} = \dot{q}_{ij}(q_j) = \frac{\partial q_j}{\partial t_i}$$

Agora, consideremos a projeção das trajetórias de cada partícula no plano determinado por (t, t_i) , cujos pontos extre-

mos sejam (t_1, t_{i1}) e (t_2, t_{i2}) . Para obter a trajetória que minimize a ação I, usamos o procedimento usual apresentado na literatura^[46,47]. Começamos por associar um parâmetro com todos os caminhos vizinhos possíveis de forma que para $\alpha = 0$, e $q_j = q_j(\alpha, t, t_i)$ a trajetória seja a que minimize a integral, ou seja, a condição de mínimo é:

$$\frac{\partial I}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha = 0} = 0 \quad (I.59)$$

As trajetórias vizinhas possíveis, (que são funções das variáveis independentes α , t e t_i) podem ser expressas como:

$$q_j = q_j(0, t, t_i) + \alpha \eta_j(t, t_i) \quad (I.60)$$

onde η_j são funções de t e t_i que tenham derivadas primeiras contínuas e tais que

$$\eta_j(t, t_{i1}) = \eta_j(t, t_{i2}) = 0 \quad (I.61)$$

$$\eta_j(t_1, t_i) = \eta_j(t_2, t_i) = 0$$

Assim minimizamos I, partindo da equação (I.59):

$$\begin{aligned} \frac{\partial I}{\partial \alpha} = & \int_{t_1}^{t_2} \int_{t_{i1}}^{t_{i2}} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial^2 q_j}{\partial t \partial \alpha} + \right. \\ & \left. + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{ij}} \frac{\partial^2 q_j}{\partial t_i \partial \alpha} \right) dt dt_i \quad (I.62) \end{aligned}$$

Integrando os dois últimos termos por partes obtém-se:

$$\frac{\partial I}{\partial \alpha} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{t_{i1}}^{t_{i2}} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} \right) dt dt_i +$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{t_{i1}}^{t_{i2}} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} \right) \Big|_{t_1}^{t_2} dt_i + \int_{t_1}^{t_2} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{ij}} \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} \right) \Big|_{t_{i1}}^{t_{i2}} dt - \\
& - \int_{t_1}^{t_2} \int_{t_{i1}}^{t_{i2}} \sum_{j=1}^N \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} + \frac{d}{dt_i} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{ij}} \right) \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} \right] dt dt_i
\end{aligned} \tag{I.63}$$

e utilizando as equações (I.60) e (I.61) obtemos finalmente:

$$\frac{\partial I}{\partial \alpha} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{t_{i1}}^{t_{i2}} \sum_{j=1}^N \left[\frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{d}{dt_i} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{ij}} \right) \right] \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} dt dt_i . \tag{I.64}$$

Para $\alpha = 0$ o integrando se anula, pois $\eta_j(t, t_i)$ são funções que satisfazem as equações (I.61).

Obtém-se então:

$$\frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{d}{dt_i} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{ij}} \right) = 0 \quad j = 1, 2, \dots, N \tag{I.65}$$

que, como se pode ver, consistem numa generalização das equações de Euler-Lagrange^[46]. As equações de movimento, que podemos obter também a partir da equação de Schrödinger, podem ser derivadas do lagrangeano:

$$L = \sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{2} m_j \dot{q}_j^2 - \frac{1}{2} m_j \dot{q}_{ij}^2 \right) - \sum_{j=1}^N \left(\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_j} \dot{q}_{ij} + \sum_{k>j} V_{jk} \right) \tag{I.66}$$

onde V_{jk} representa a interação entre as partículas, que consideramos como dependendo apenas da separação entre elas, e onde se supõe que o termo $\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_j} \dot{q}_{ij}$ (que representa um potencial quântico atuante em cada partícula e que está relacionado com a função de onda que descreve o sistema) dependa só de q_j . Utilizando

a equação (I.65) obtêm-se as equações de movimento:

$$m_j \frac{d\dot{q}_j}{dt} - m_j \frac{d\dot{q}_i}{dt_i} = - \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\sum_{k>j} V_{jk} + \right. \\ \left. + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_j} \dot{q}_{ij} \right); \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (\text{I.67})$$

No caso de uma partícula única, em três dimensões a equação (I.67) fornece:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} - m \frac{d\vec{v}_i}{dt_i} = - \vec{\nabla} \left(\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V \right) \quad (\text{I.68})$$

que é exatamente a equação (I.30), obtida a partir da equação de Schrödinger. Como se pode notar, a generalização do princípio de Hamilton dada pela equação (I.56), traz consigo uma demonstração do princípio da correspondência, pois um mesmo lagrangeano nos leva a equações que descrevem fenômenos quânticos bem como fenômenos puramente clássicos, sem que seja necessário tomar o limite $\hbar \rightarrow 0$ diretamente^[45]. O resultado $\vec{v}_i = 0$, para o caso clássico, advém da definição de velocidade quântica (equação (I.1)).

CAPÍTULO II

APLICAÇÕES DA FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA A ESTA- DOS ESTACIONÁRIOS

1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo apresentam-se alguns resultados de problemas quânticos simples, utilizando-se o formalismo hidrodinâmico desenvolvido no capítulo anterior. Como veremos, a utilização deste formalismo fornece os mesmos resultados que o procedimento usual, estando, no entanto, baseada em uma diferente descrição da mecânica quântica. É interessante notar que alguns problemas quânticos podem ser resolvidos de forma rápida e simples através do formalismo hidrodinâmico [26,27], ao passo que outros são mais convenientemente solucionados com o formalismo usual. Antes de apresentarmos resultados para o átomo de hidrogênio e para o oscilador harmônico, veremos os resultados que o formalismo hidrodinâmico produz quando aplicado a problemas quânticos mais simples como o da partícula livre e o de uma partícula em um poço infinito.

2. PROBLEMAS QUÂNTICOS SIMPLES

A) Partícula Livre

Começemos por utilizar o formalismo hidrodinâmico no caso ideal dos estados estacionários de uma partícula quântica livre. Neste caso, a probabilidade de encontrar a partícula em

qualquer ponto do espaço é a mesma, isto é, $\rho = \text{constante}$, o que fornece, pela (I.13), $\vec{v}_i = 0$. Podemos ver também que a equação de continuidade fornece uma identidade^[41], $0 \equiv 0$, pois consideramos estados estacionários. Como vimos, para estados estacionários $E = -\partial S/\partial t$ e a equação (I.17) torna-se (com $\vec{v}_i = 0$):

$$E = \frac{1}{2} mv^2 \quad (\text{II.1})$$

Podemos, então, tomar:

$$\vec{v} = \pm \left(\sqrt{\frac{2E_x}{m}} \vec{i} + \sqrt{\frac{2E_y}{m}} \vec{j} + \sqrt{\frac{2E_z}{m}} \vec{k} \right) \quad (\text{II.2})$$

onde $E = E_x + E_y + E_z$.

A equação (I.26) fornece $\vec{r}(t)$:

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 + \vec{v}t \quad (\text{II.3})$$

onde \vec{r}_0 é o vetor posição inicial. Devemos observar que estes são os resultados clássicos para o problema de uma partícula livre. A equação (II.1) permite qualquer valor de energia positiva para a partícula (espectro contínuo) e, a partir da equação (II.2) e da definição de \vec{v} , podemos obter a função de onda que descreve o comportamento ondulatório da partícula:

$$\psi^*/\psi = \exp \left\{ -2i \frac{m}{\hbar} \int \vec{v} \cdot d\vec{S} \right\} \quad (\text{II.4})$$

Utilizando (II.2) e integrando (em coordenadas cartesianas) obtemos:

$$\psi^*/\psi = \exp \left\{ \pm 2i \left[\sqrt{\frac{2mE_x}{\hbar^2}} x + \sqrt{\frac{2mE_y}{\hbar^2}} y + \sqrt{\frac{2mE_z}{\hbar^2}} z \right] \right\} \quad (\text{II.5})$$

ou seja:

$$\psi = A e^{\pm i \vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (\text{II.6})$$

onde A pode ser obtida a partir da normalização de ψ , e $|\vec{k}| = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

B) Poço Quadrado Infinito Unidimensional

O problema agora consiste em obter o espectro de energia e as auto-funções para uma partícula confinada em um poço quadrado infinito, ou seja, em uma dimensão o potencial é:

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & 0 < x < a \\ V(x) &= \infty & x = 0, x = a \end{aligned} \quad (\text{II.7})$$

Neste caso, para estados estacionários, a equação de continuidade fornece uma identidade com os dois membros nulos, e como $\vec{v} = 0$ (parte espacial das funções de onda, reais) a equação (I.17) fornece:

$$E = \frac{\hbar}{2} \frac{dv_i}{dx} - \frac{1}{2} mv_i^2 \quad (\text{II.8})$$

que após integrada fornece:

$$v_i = \sqrt{\frac{2E}{m}} \cdot \text{tg}(kx + \phi) \quad (\text{II.9})$$

onde $k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}$ e ϕ é uma constante a determinar a partir das condições de contorno. Para tanto, partimos do fato de que quando $x \rightarrow 0$ e $x \rightarrow a$, $v_i \rightarrow +\infty$ e $v_i \rightarrow -\infty$ respectivamente. Escolhendo a primeira das possibilidades temos:

$$v_i(x=0) = \text{tg} \phi = -\infty, \quad (\text{II.10})$$

$$\text{logo} \quad \phi = - \left(2n + \frac{1}{2} \right) \pi ; n = 1, 2, \dots \infty \quad (\text{II.11})$$

Para $x = a$, $v_i = +\infty$; portanto

$$ka - \left(2n + \frac{1}{2} \right) \pi = - \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (\text{II.12})$$

$$ka = n\pi ; n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{II.13})$$

Observe-se que, se tivéssemos escolhido a segunda possibilidade ($v_i(x=0) = +\infty$ e $v_i(x=a) = -\infty$), teríamos obtido $ka = -n\pi$, o que não altera os auto-valores da energia (como também a densidade de probabilidade, pois corresponde a uma mudança de 180° na fase da função de onda). Utilizando a definição de k obtemos:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (\text{II.14})$$

e as auto-funções (obtidas a partir da integração da equação (II.8) são:

$$\Psi_n(x) = A \text{ sen } \frac{n\pi}{a} x \quad (\text{II.15})$$

onde $A = \sqrt{2/a}$ é obtida da normalização de Ψ .

Como podemos ver, o formalismo hidrodinâmico fornece os mesmos resultados que o procedimento usual, fato já salientado por vários autores [8, 22, 26, 41].

3. ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

Apresentamos agora alguns resultados do formalismo hidrodinâmico quando aplicado ao átomo de hidrogênio. Para maior

simplicidade, abstraímos o movimento do centro de massa e consideramos o problema de uma partícula de massa reduzida " μ " sujeita a um potencial do tipo:

$$V = \frac{e^2}{r} \quad (\text{II.16})$$

Desta forma, a equação (I.17) toma a forma:

$$E + \frac{e^2}{r} = \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i - \frac{1}{2} \mu v_i^2 - \frac{1}{2} \mu v^2 \quad (\text{II.17})$$

Expressando o operador $\vec{\nabla}$ em coordenadas esféricas, o resultado para \vec{v}_i é:

$$\begin{aligned} \vec{v}_i = \frac{\hbar}{\mu} \left[\frac{\ell+1}{r} - \frac{1}{na_0} - \frac{\ell-n}{r} \frac{L_{n+\ell}^{2\ell}(2r/na_0)}{L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2r/na_0)} \right] \vec{\mu}_r - \\ - \frac{\hbar}{\mu r} \frac{d}{d\theta} \ln P_\ell^{m_\ell}(\cos \theta) \vec{\mu}_\theta \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

onde n , ℓ e m_ℓ são os números quânticos principal, orbital e magnético respectivamente; $L_{n+\ell}^{2\ell}(2r/na_0)$ são os polinômios associados de Laguerre e $P_\ell^{m_\ell}(\cos \theta)$ são os polinômios associados de Legendre. A expressão acima para \vec{v}_i é válida para $n \geq 2$; para o estado fundamental o resultado é ($n = 1$, $\ell = 0$, $m_\ell = 0$):

$$\vec{v}_i = \frac{\hbar}{\mu a_0} \vec{\mu}_r = \alpha c \vec{\mu}_r \quad (\text{II.19})$$

onde $a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2}$ é o raio de Bohr, e $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ é a constante de estrutura fina. A componente real da velocidade quântica pode ser obtida a partir da equação (I.4):

$$\vec{v} = \frac{m_\ell \hbar}{\mu r \sin \theta} \vec{\mu}_\phi \quad (\text{II.20})$$

Note-se que para estados com $m_\ell = 0$ temos $\vec{v} = 0$. (Parte espacial das funções de onda, real).

Os níveis de energia podem ser encontrados com a substituição das equações (II.18) e (II.20) na equação (II.17):

$$\begin{aligned}
 E_{n(\ell, m_\ell)} = & -\frac{e^2}{r} + \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[(\ell+1)r - \frac{r^2}{na_0} - (\ell-n) \frac{r L_{n+\ell}^{2\ell}(2r/na_0)}{L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2r/na_0)} \right] - \right. \\
 & - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \ln P_\ell^{m_\ell}(\cos\theta) \right) \left. - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\ell+1}{r} - \frac{1}{na_0} - \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{\ell-n}{r} \frac{L_{n+\ell}^{2\ell}(2r/na_0)}{L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2r/na_0)} \right]^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \ln P_\ell^{m_\ell}(\cos\theta) \right]^2 - \right. \\
 & \left. - \frac{1}{2} \mu \left[\frac{m_\ell \hbar}{\mu r \sin\theta} \right]^2 \right. \quad (II.21)
 \end{aligned}$$

Efetuada-se as derivadas, desenvolvendo os quadrados e utilizando as fórmulas de recorrência para os polinômios associados de Laguerre e Legendre obtêm-se a expressão usual para os níveis de energia:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (II.22)$$

onde começamos com $n = 1$, fazendo uso do resultado dado na equação (II.19).

Do resultado obtido para \vec{v}_i , expresso nas equações (II.18) e (II.19), podemos obter as linhas de fluxo $\vec{r}(t_i)$. Para o estado fundamental o resultado é:

$$r = \frac{\hbar}{\mu a_0} t_i + c. \quad (II.23)$$

onde c é uma constante arbitrária que não altera as propriedades do sistema, note-se também que a inclinação da reta está relacionada com a energia da partícula, de forma similar ao caso clássico.

Para o primeiro estado excitado com $\ell = 0$ ($n = 2$) obtemos:

$$\begin{aligned} (4a_0 - r) e^{r/2a_0} &= A e^{\omega t_i} & 0 < r < 4a_0 \\ (r - 4a_0) e^{r/2a_0} &= B e^{\omega t_i} & r > 4a_0 \end{aligned} \quad (\text{II.24})$$

e no caso de momentum angular diferente de zero ($\ell=1; m_\ell = 0$), obtêm-se:

$$\begin{aligned} (2a_0 - r) e^{r/2a_0} &= C e^{\omega t_i} & 0 < r < 2a_0 \\ (r - 2a_0) e^{r/2a_0} &= D e^{\omega t_i} & r > 2a_0 \end{aligned} \quad (\text{II.25})$$

onde $\omega = \frac{\hbar}{4\mu a_0^2}$ e A, B, C e D são constantes arbitrárias. Estas linhas de fluxo são apresentadas nos gráficos II.1, II.2 e II.3.

Observe-se que só apresentamos as equações $\theta(t_i)$ para os estados "S", $\ell = 0$, onde $\theta = \text{constante}$; para os demais estados, r não se expressa mediante funções elementares de t_i , fato que torna difícil obter $\theta(t_i)$. Ao invés disto, procuramos as equações das trajetórias análogas às soluções $r = r(\theta)$ para o problema de Kepler, a partir da equação:

$$\frac{dr}{v_{ir}} = \frac{rd\theta}{v_{i\theta}} \quad (\text{II.26})$$

onde v_{ir} e $v_{i\theta}$ são as componentes radial e angular respectivamente de $\vec{v}_i(r, \theta)$.

Utilizando a equação (II.18), obtemos:

$$\int \frac{dr}{\frac{r^2}{na_0} - (\ell+1)r + \frac{(\ell-n)r \cdot L_{n+\ell}^{2\ell}(2r/na_0)}{L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2r/na_0)}} = \int \frac{P_{\ell}^{m_{\ell}}(\cos\theta)d\theta}{\frac{d}{d\theta} P_{\ell}^{m_{\ell}}(\cos\theta)} \quad (\text{II.27})$$

equação, que integrada fornece, para cada valor de n, ℓ e m_{ℓ} a equação da trajetória $r(\theta)$. Note-se que para $m_{\ell} = \ell = 0$ não podemos usar a equação acima pois $\theta(t_i) = \text{constante}$, ou seja, para todos os estados "S" as equações das trajetórias são circunferências. As trajetórias para $n = 1, \ell = 0, m_{\ell} = 0, n = 2, \ell = 1$ e $m_{\ell} = 0, n = 2, \ell = 1$ e $m_{\ell} = \pm 1$ são ilustradas nos gráficos II.4A, II.4B e II.4C.

4. OSCILADOR HARMÔNICO EM UMA DIMENSÃO

Apresentaremos agora os resultados do formalismo hidrodinâmico para uma partícula de massa "m" sujeita ao potencial $\frac{1}{2} k x^2$. Neste caso, a equação de Ricatti (I.21) fornece:

$$E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = \frac{\hbar}{2} \frac{dv_i}{dx} - \frac{1}{2} mv_i^2 \quad (\text{II.28})$$

e a equação de movimento é:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{\hbar}{2} \frac{dv_i}{dx} \right] \quad (\text{II.29})$$

A solução da equação (II.36) para o n-ésimo estado é:

$$v_i(n) = \omega x - 2n \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m}} \frac{H_{n-1}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x)}{H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x)} \quad (\text{II.30})$$

onde $n \geq 1$ e $H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x)$ são os polinômios de Hermite. Para o estado fundamental

$$v_i = \omega x \quad (\text{II.31})$$

nos gráficos II.5A, II.5B e II.6 mostra-se v_i como função da posição para os três primeiros estados.

A obtenção dos níveis de energia pode ser feita a partir da substituição de $v_i(n)$ na equação (II.28), o que resulta em:

$$\begin{aligned} E_n - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 &= \frac{\hbar}{2} \left\{ \omega - \frac{2n\omega}{H_n(\xi)} [2\xi H_{n-1}(\xi) - H_n(\xi)] \right\} + \\ &+ 4 n^2 \omega \frac{H_{n-1}^2(\xi)}{H_n^2(\xi)} - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + 2 n \omega \xi \hbar \frac{H_{n-1}(\xi)}{H_n(\xi)} - \\ &- 2 n^2 \hbar \omega \frac{H_{n-1}^2(\xi)}{H_n^2(\xi)} \end{aligned} \quad (\text{II.32})$$

onde $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$, e fez-se uso das fórmulas de recorrência para os polinômios de Hermite. Rearranjando os termos e cancelando os termos comuns, obtemos:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II.33})$$

resultado este que mostra novamente que os resultados do formalismo hidrodinâmico não diferem dos do formalismo usual.

A partir do conhecimento de $v_i(n)$, podemos obter as linhas de fluxo para qualquer estado, integrando a equação

$v_i = dx/dt_i$; para o estado fundamental as linhas de fluxo são:

$$x = A e^{\omega t_i} \quad (\text{II.34})$$

onde A é uma constante que não altera as propriedades físicas do sistema. Observe-se que obtemos os valores positivos de x ($x > 0$) com valores positivos de A , e valores negativos de x ($x < 0$) obtemos com valores negativos de A . Para outros estados as soluções que fornecem as linhas de fluxo não são triviais. Os gráficos ^{5A} II.7, ^{5B} II.8 e ⁶ II.9 mostram a componente imaginária da velocidade como função da posição para os três primeiros estados do oscilador harmônico. Note-se que para os estados excitados, v_i apresenta pontos de descontinuidade, vórtices, correspondentes aos nós da função de onda. Esta descontinuidade de v_i representa a maior dificuldade computacional para o formalismo hidrodinâmico; por outro lado, o número de divergências caracteriza o número quântico do estado.

Os gráficos ⁷ 10, ⁸ 11 e ⁹ 12 mostram as linhas de fluxo para os três primeiros estados do oscilador. Para cada caso as linhas de fluxo convergem para alguns pontos característicos e o número destes pontos serve para a classificação do estado. Assim, para o primeiro estado temos somente um ponto característico ($x = 0$), para o segundo estado temos dois pontos característicos ($x = \pm a = \pm \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$) e para o terceiro estado temos três pontos característicos ($x = 0, x = \pm \sqrt{\frac{5\hbar}{2m\omega}}$).

5. OSCILADOR HARMÔNICO BIDIMENSIONAL

Obteremos agora as linhas de fluxo e as trajetórias pa

ra o caso de uma partícula de massa "m" em um potencial do tipo:

$$V(x,y) = \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2) \quad (\text{II.35})$$

Neste caso, as soluções para v_i podem ser decompostas em duas componentes ortogonais, ou seja:

$$\vec{v}_i = v_i(x) \hat{x} + v_i(y) \hat{y} \quad (\text{II.36})$$

onde $v_i(x)$ e $v_i(y)$ são soluções de problemas unidimensionais e são dadas por:

$$v_i(x) = \omega x - 2n_x \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m}} \frac{H_{n_x-1}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x)}{H_{n_x}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x)} \quad (\text{II.37})$$

$$v_i(y) = \omega y - 2n_y \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m}} \frac{H_{n_y-1}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} y)}{H_{n_y}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} y)} \quad (\text{II.38})$$

onde $n_x \geq 1$ e $n_y \geq 1$. Para o estado fundamental a solução para \vec{v}_i é:

$$\vec{v}_i = \omega x \hat{x} + \omega y \hat{y} \quad (\text{II.39})$$

onde podemos notar que esta solução para \vec{v}_i do estado fundamental é ortogonal às linhas equipotenciais, ou seja, $\vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} V(x,y) = 0$. Este fato nos auxiliará na solução de problemas mais complexos (quando o potencial apresenta um termo cruzado, por exemplo). As equações das trajetórias para o estado fundamental podem ser obtidas a partir da equação (I.29) e, do resultado acima para \vec{v}_i , obtemos:

$$y = \frac{B}{A} x \quad (\text{II.40})$$

onde A e B são duas constantes de integração. No caso mais geral em que as frequências de oscilação segundo \hat{x} e \hat{y} não são iguais, o resultado para \vec{v}_1 no estado fundamental é:

$$\vec{v}_1 = \omega_1 x \hat{x} + \omega_2 y \hat{y} \quad (\text{II.41})$$

onde ω_1 é a frequência de oscilação na direção \hat{x} e ω_2 , a frequência de oscilação na direção \hat{y} . (O resultado geral para \vec{v}_1 é idêntico aos dados pelas equações (II.37) e (II.38) onde substituímos por ω_1 e ω_2 respectivamente). Neste caso, $\vec{v}_1 \times \vec{\nabla}V(x,y) \neq 0$, mas mesmo assim \vec{v}_1 tem a forma do gradiente de $V(x,y)$ a menos de constantes. ($\vec{\nabla}V(x,y) = m(\omega_1^2 x \hat{x} + \omega_2^2 y \hat{y})$).

As equações das trajetórias para o estado fundamental são agora

$$y = B \left(\frac{x}{A}\right)^{\omega_1/\omega_2} \quad (\text{II.42})$$

ou seja, no caso mais geral em que $\omega_1 \neq \omega_2$ as trajetórias dependem da relação ω_1/ω_2 (isto ocorre mesmo para estados excitados).

Para estados excitados as soluções que fornecem as equações das trajetórias não são triviais. Os gráficos 13,14,15, 16 e 17 mostram as trajetórias "y" como função de "x" para alguns estados do oscilador harmônico bidimensional isotrópico ($\omega_1 = \omega_2$).

Consideraremos agora o oscilador harmônico bidimensional perturbado cujo potencial é dado por:

$$V(x,y) = \frac{1}{2} m\omega_1^2 x^2 + \frac{1}{2} m\omega_2^2 y^2 + \alpha xy \quad (\text{II.43})$$

onde ω_1 e ω_2 são as frequências de oscilação nas direções \hat{x} e \hat{y} respectivamente e α é uma constante tal que $\omega_1\omega_2 > \alpha/m$ (de sorte

que as linhas de nível sejam elipses no plano xy com centro na origem dos eixos coordenados), m sendo a massa da partícula. Este problema pode ser tratado por teoria de perturbação, onde obtemos um valor aproximado da energia do sistema, ou podemos obter o valor exato da energia resolvendo a equação de Schrödinger diretamente. Para ilustrar o formalismo proposto procuramos a energia do estado fundamental para este problema procurando uma solução para a equação:

$$E - V(x,y) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial v_{ix}(x,y)}{\partial x} + \frac{\partial v_{iy}(x,y)}{\partial y} \right) - \frac{1}{2} m v_{ix}^2 - \frac{1}{2} m v_{iy}^2 . \quad (\text{II.44})$$

Para $\alpha = 0$, conhecemos as soluções $v_{ix} = \omega_1 x$ e $v_{iy} = \omega_2 y$ onde são satisfeitas as condições $\vec{v}_i \rightarrow \infty$ quando $x \rightarrow \infty$ e/ou $y \rightarrow \infty$ e $\vec{\nabla} \times \vec{v}_i = 0$. Além disto, vimos que \vec{v}_i tinha a forma do gradiente de $V(x,y)$. Neste caso:

$$\vec{\nabla} V = (m\omega_1^2 x + \alpha y)\hat{x} + (m\omega_2^2 y + \alpha x)\hat{y} ; \quad (\text{II.45})$$

assim temos agora soluções da forma:

$$\begin{aligned} v_{ix}(x,y) &= a_1 x + a_2 y \\ v_{iy}(x,y) &= b_1 y + b_2 x \end{aligned} \quad (\text{II.46})$$

onde a_1 , a_2 e b_1 , b_2 são constantes a determinar. Como $\vec{\nabla} \times \vec{v}_i = 0$, obtemos $a_2 = b_2 = a_0$. Substituímos agora as expressões de $v_{ix}(x,y)$ e $v_{iy}(x,y)$ na equação (II.44), obtendo o seguinte sistema de equações:

$$E = \frac{\hbar}{2} (a_1 + b_1)$$

$$\omega_1^2 = a_1^2 + a_0^2$$

$$\omega_2^2 = a_0^2 + b_1^2$$

(II.47)

$$\beta = a_0 (a_1 + b_1)$$

onde $\beta = \alpha/m$. Resolvendo o sistema achamos:

$$a_0^2 = \beta^2 \left[\frac{\omega_1^2 + \omega_2^2 + 2 \sqrt{\omega_1^2 \omega_2^2 - \beta^2}}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + 4\beta^2} \right] \quad (\text{II.48})$$

$$a_1 = \left[\omega_1^2 - \beta^2 \left(\frac{\omega_1^2 + \omega_2^2 + 2 \sqrt{\omega_1^2 \omega_2^2 - \beta^2}}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + 4\beta^2} \right) \right]^{1/2} \quad (\text{II.49})$$

$$b_1 = \left[\omega_2^2 - \beta^2 \left(\frac{\omega_1^2 + \omega_2^2 + 2 \sqrt{\omega_1^2 \omega_2^2 - \beta^2}}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + 4\beta^2} \right) \right]^{1/2} \quad (\text{II.50})$$

Observe-se que para $\alpha = 0$ obtemos o resultado $E = \frac{\hbar}{2} (\omega_1 + \omega_2)$, e que, no caso de um oscilador isotrópico, o resultado para a energia é:

$$E = \hbar \omega \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - \beta^2/\omega^4}} \quad (\text{II.51})$$

que podemos reescrever como:

$$E = \frac{\hbar \omega}{2} \{ \sqrt{1 - \beta^2/\omega^2} + \sqrt{1 - \beta^2/\omega^2} \} \quad (\text{II.52})$$

Este resultado (exato) pode ser comparado com o dado pela teoria de perturbação, expandindo-se os radicandos para $\beta \ll \omega$. Vê-se que os resultados são idênticos.

Ao analisar os resultados até agora obtidos, podemos constatar que o divergente de \vec{v}_1 para o estado fundamental do oscilador harmônico é uma constante, constante esta que representa a energia do sistema. Mostraremos agora que, mesmo no caso mais geral quando as linhas equipotenciais são elipses no plano xy (com os centros não necessariamente no centro dos eixos coordenados), a divergência de \vec{v}_1 é uma constante e representa uma característica do oscilador harmônico no estado fundamental. Para isso partimos de $\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_1 = \text{constante}$, ou seja:

$$\frac{\partial v_{ix}(x,y)}{\partial x} = c_1, \quad v_{ix}(x,y) = c_1 x + f_1(y):$$

$$\frac{\partial v_{iy}(x,y)}{\partial y} = c_2, \quad v_{iy}(x,y) = c_2 y + f_2(x):$$
(II.53)

Como o rotacional de \vec{v}_1 é zero temos:

$$\frac{df_1}{dy} = \frac{df_2}{dx}$$
(II.54)

e portanto:

$$f_1(y) = ay + b$$

$$f_2(x) = ax + d.$$
(II.55)

Logo, as soluções possíveis para v_{ix} e v_{iy} são:

$$v_{ix} = c_1 x + ay + b$$

$$v_{iy} = c_2 y + ax + d$$
(II.56)

que são soluções para o problema cujo potencial é:

$$V(x,y) = \frac{1}{2} m\omega_1^2 x^2 + \frac{1}{2} m\omega_2^2 y^2 + \alpha xy + \beta x + \gamma y$$
(II.57)

onde α , β e γ são constantes que satisfazem as condições necessárias para que as equipotenciais sejam elipses no plano xy . A energia para o estado fundamental é

$$E = \frac{\hbar}{2} (\sqrt{\omega_1^2 - a^2} + \sqrt{\omega_2^2 - a^2}) - \left[\frac{a^2}{2m} (\beta^2 + \gamma^2) + \frac{\beta^2}{2m} (\omega_2^2 - a^2) + \frac{\gamma^2}{2m} (\omega_1^2 - a^2) - \frac{\alpha\gamma\beta}{m} (\sqrt{\omega_1^2 - a^2} + \sqrt{\omega_2^2 - a^2}) \right] (a^2 - \sqrt{\omega_1^2 - a^2} \sqrt{\omega_2^2 - a^2})^{-2} \quad (\text{II.58})$$

onde a é definido por:

$$a^2 = \frac{\alpha^2}{m^2} \left(\frac{\omega_1^2 + \omega_2^2 + 2\sqrt{\omega_1^2\omega_2^2} - \alpha^2/m^2}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + 4\alpha^2/m^2} \right) \quad (\text{II.59})$$

Como exemplo podemos considerar um oscilador harmônico bidimensional localizado em campos elétricos transversos, ou seja, um potencial do tipo:

$$V(x,y) = \frac{1}{2} m\omega_1^2 x^2 + \frac{1}{2} m\omega_2^2 y^2 - q\epsilon_x x - q\epsilon_y y \quad (\text{II.60})$$

onde " q " é a carga da partícula cuja massa é " m " e ϵ_x e ϵ_y representam os campos elétricos segundo as direções x e y respectivamente. Como agora $\alpha = 0$, a equação (II.58) fornece:

$$E = \frac{\hbar\omega_1}{2} \left(1 - \frac{q^2 \epsilon_x^2}{m^2 \hbar^2 \omega_1^3} \right) + \frac{\hbar\omega_2}{2} \left(1 - \frac{q^2 \epsilon_y^2}{m^2 \hbar^2 \omega_2^3} \right) \quad (\text{II.61})$$

resultado este, que nos é familiar. No próximo capítulo, quando da aplicação do formalismo hidrodinâmico à física molecular, entenderemos as idéias aqui desenvolvidas a hamiltonianos que representam interações moleculares para os quais não há solução analítica da equação de Schrödinger.

GRÁFICO II.1 - LINHAS DE FLUXO PARA O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO NO ES-
TADO FUNDAMENTAL. ($n = 1, \ell = 0, m_\ell = 0$)

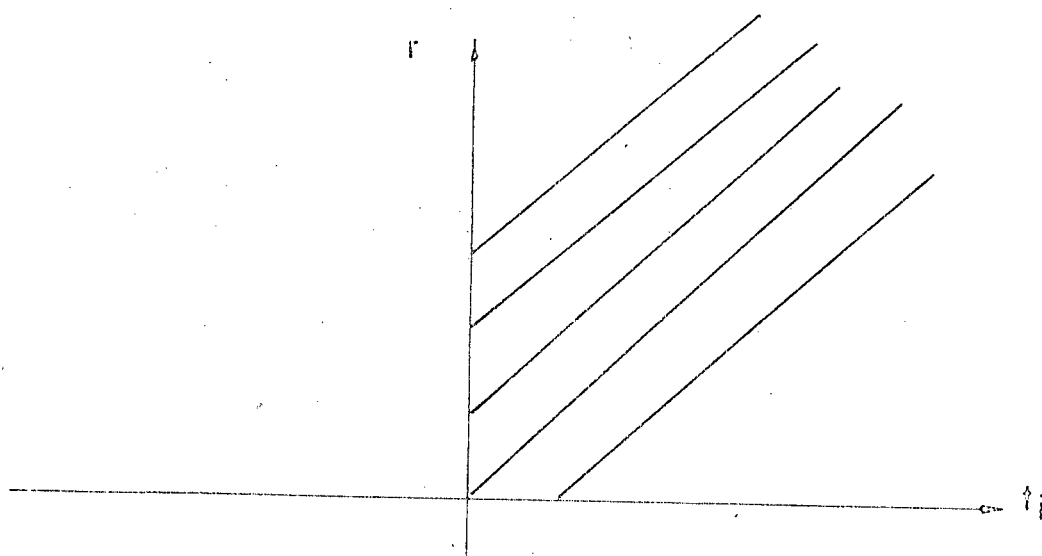


GRÁFICO II.2 - LINHAS DE FLUXO PARA O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO;

ESTADO ($n = 2$, $l = 0$, $m_l = 0$)

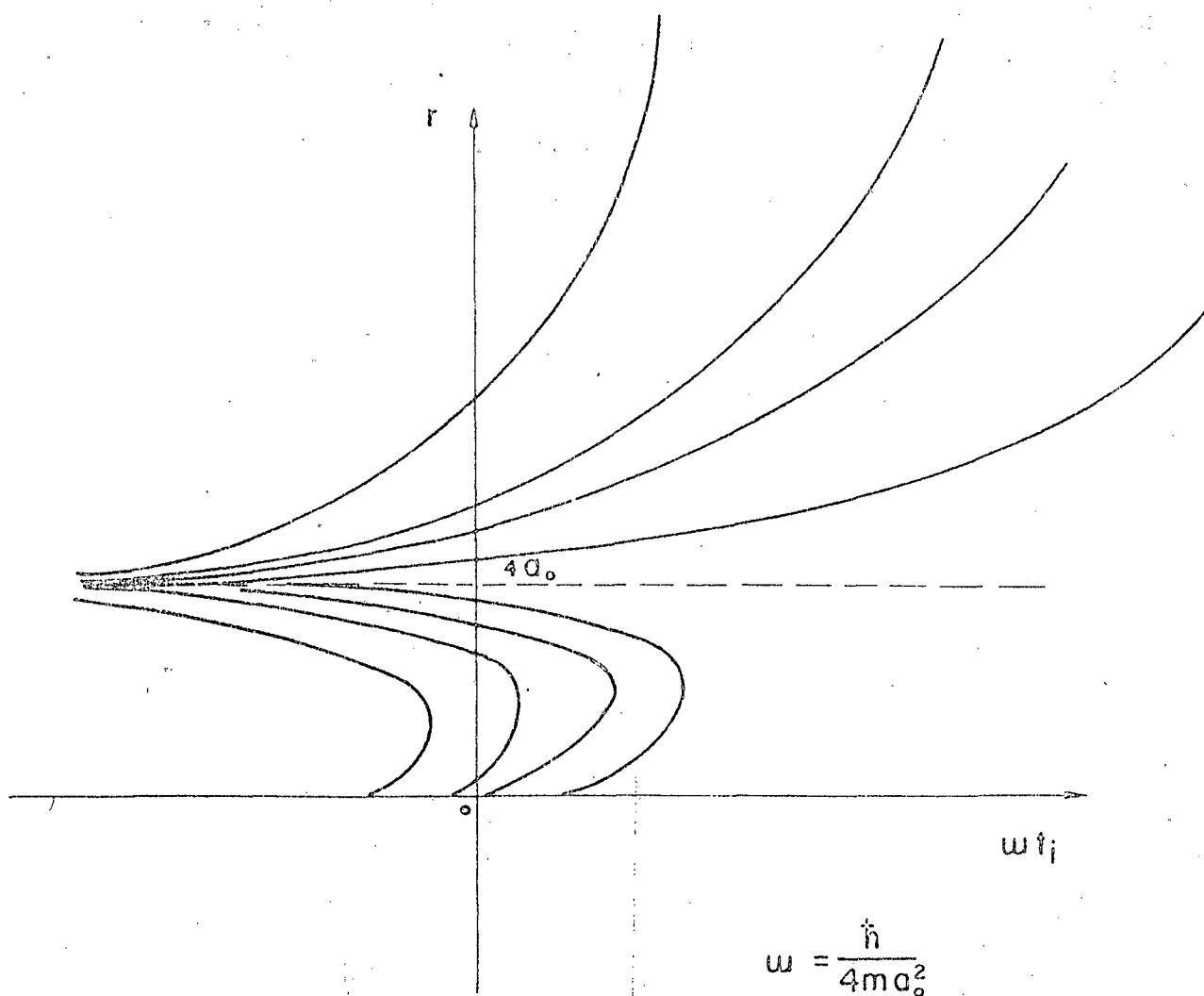
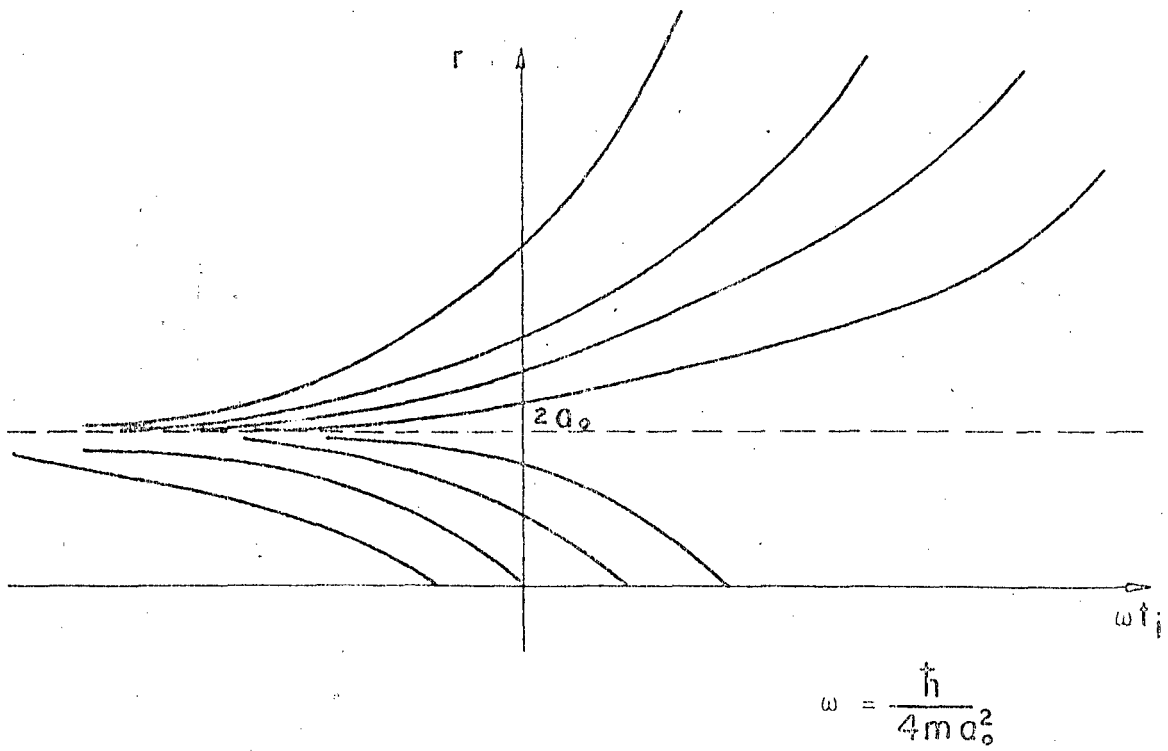
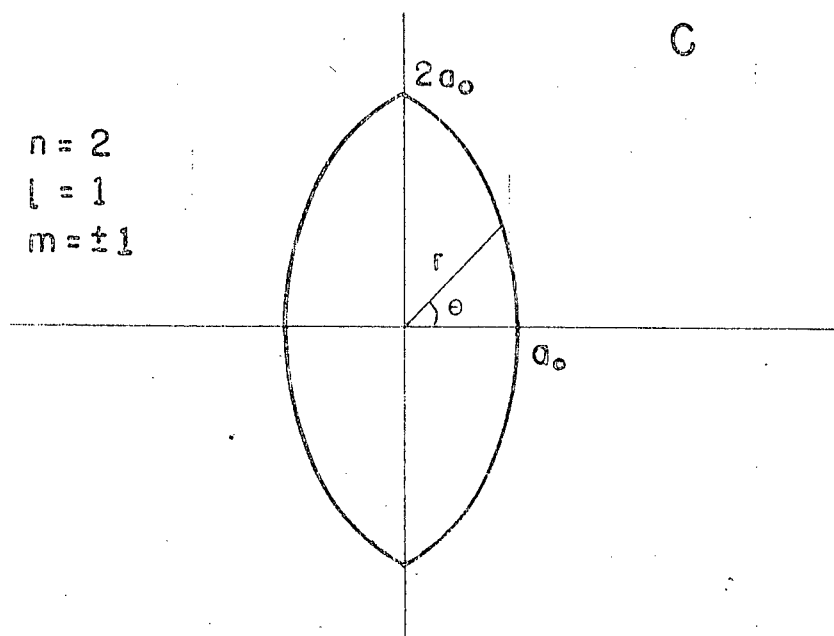
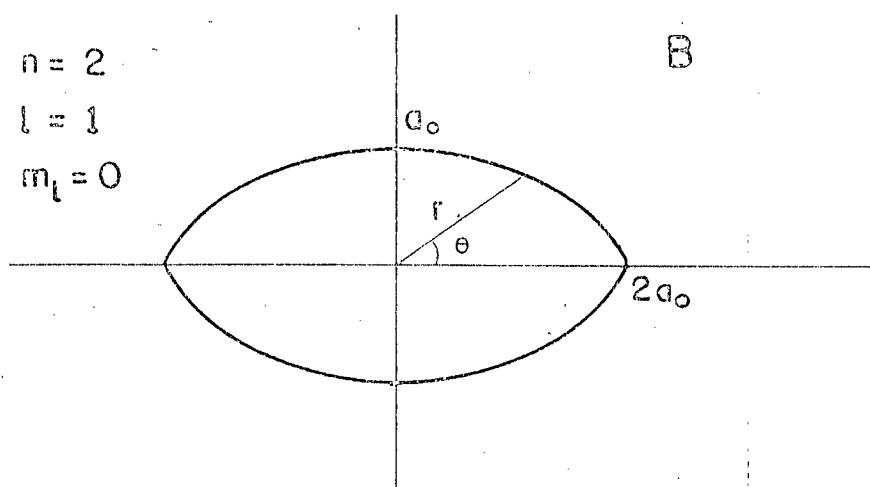
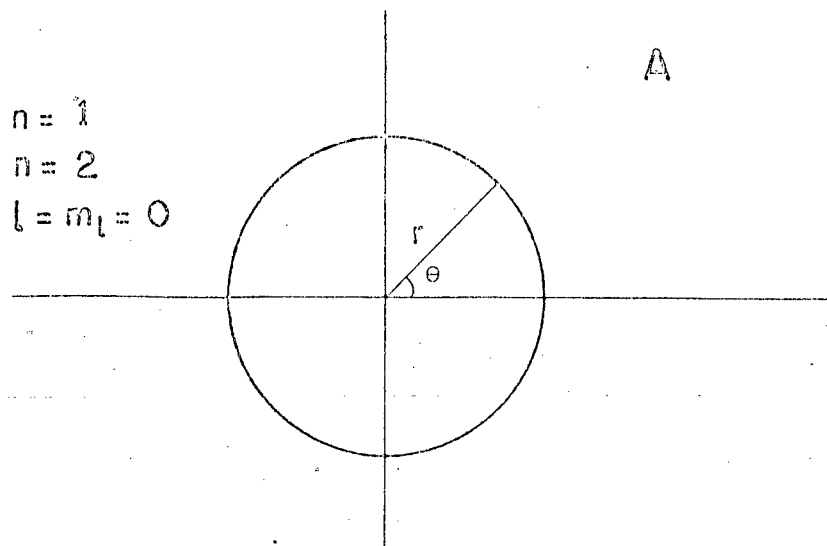


GRÁFICO II.3 - LINHAS DE FLUXO PARA O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO ESTAD-
DO ($n = 2$, $l = 1$, $m_l = 0$)



GRÁFICOS II.4A, II.4B e II.4C - TRAJETÓRIAS $r = r(\theta)$ (ANÁLOGAS AO PROBLEMA DE KEPLER) PARA ALGUNS ESTADOS DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO.



GRÁFICOS II.5A e II.5B - COMPONENTE IMAGINÁRIA DA VELOCIDADE
QUÂNTICA PARA OS DOIS PRIMEIROS ESTADOS
DO OSCILADOR HARMÔNICO UNIDIMENSIONAL
($n = 0$ e $n = 1$)

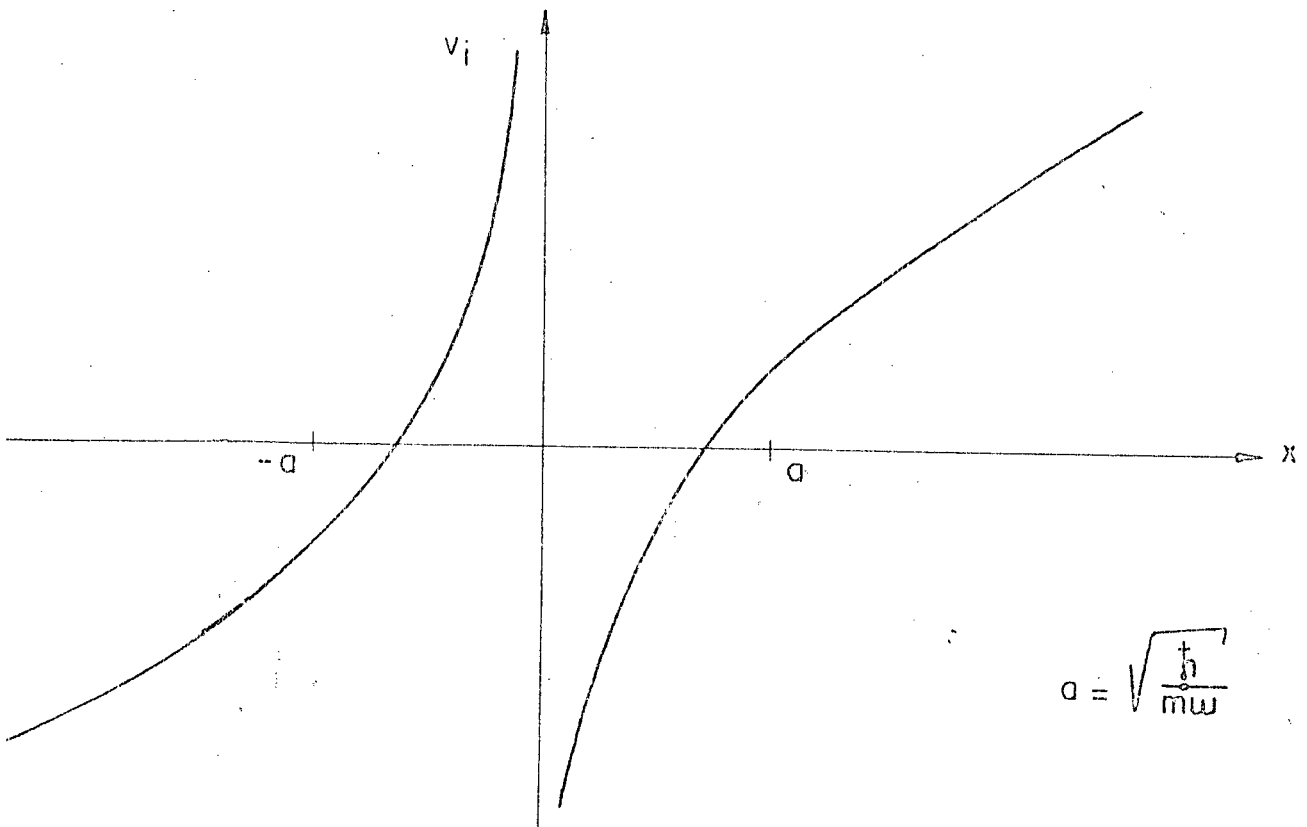
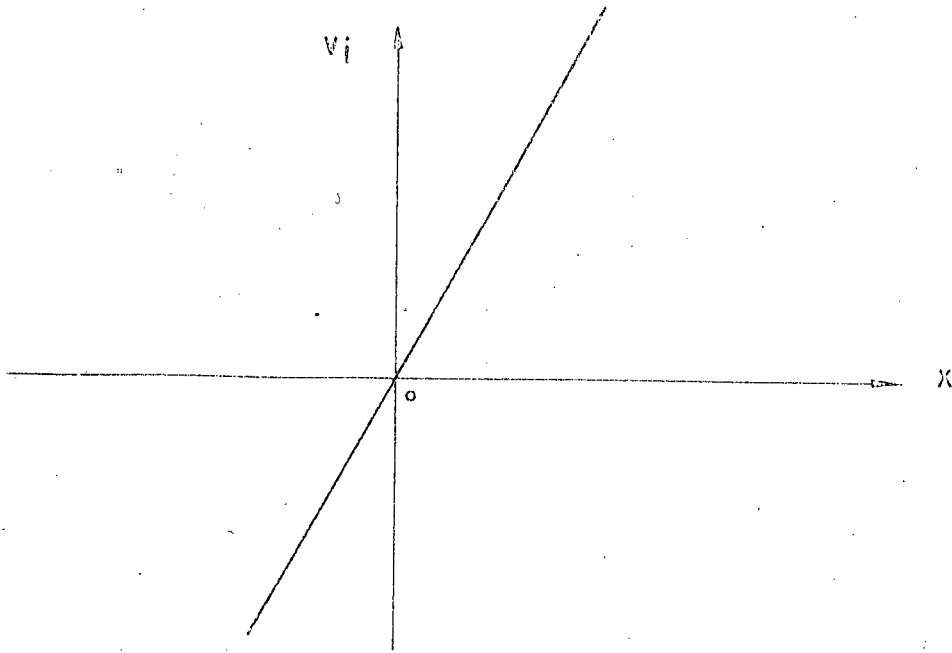


GRÁFICO II.6 - COMPONENTE IMAGINÁRIA DA VELOCIDADE QUÂNTICA PARA
O SEGUNDO ESTADO EXCITADO DO OSCILADOR HARMÔNICO
UNIDIMENSIONAL. ($n = 2$)

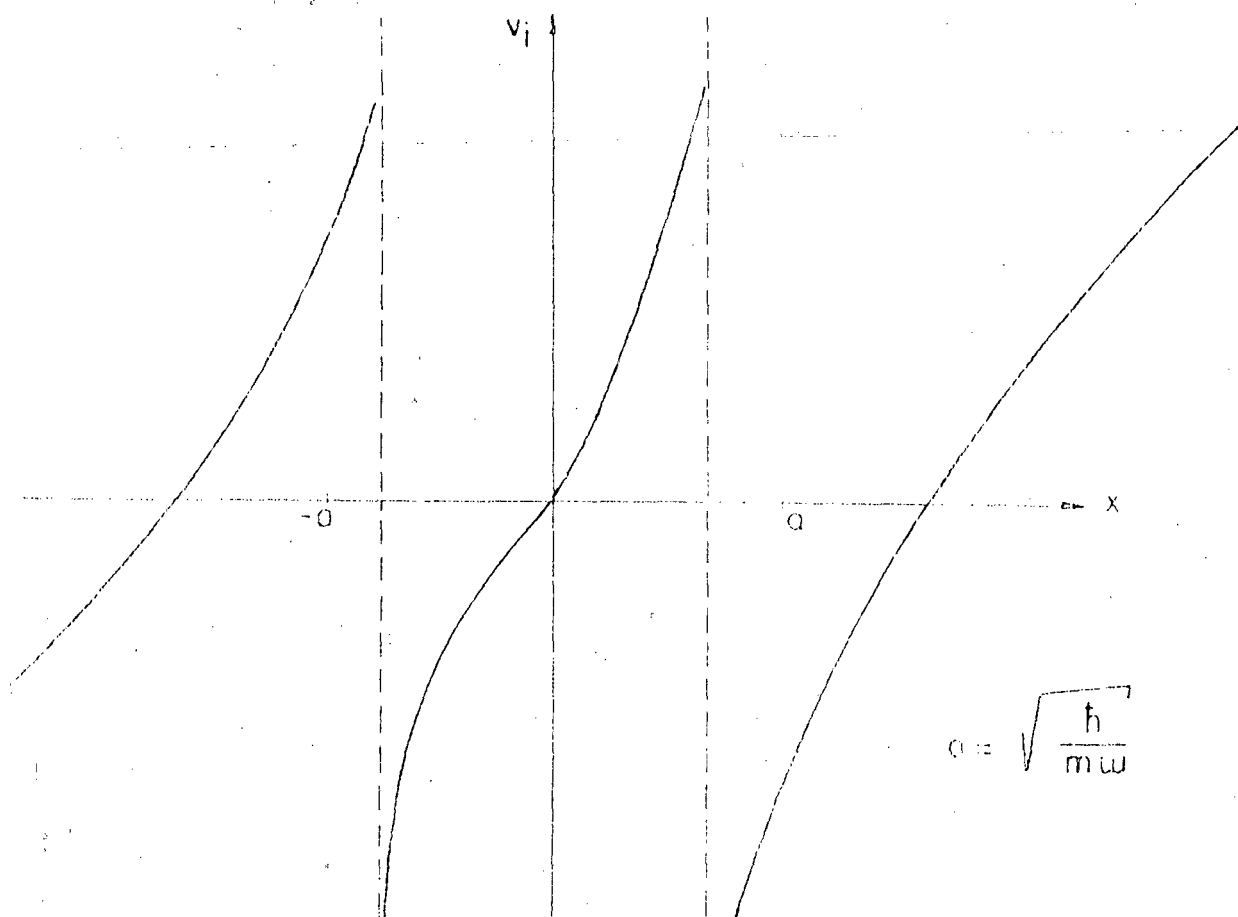


GRÁFICO II.7 - LINHAS DE FLUXO $X(t_i)$ PARA O ESTADO FUNDAMENTAL
DO OSCILADOR HARMÔNICO UNIDIMENSIONAL. ($n = 0$)

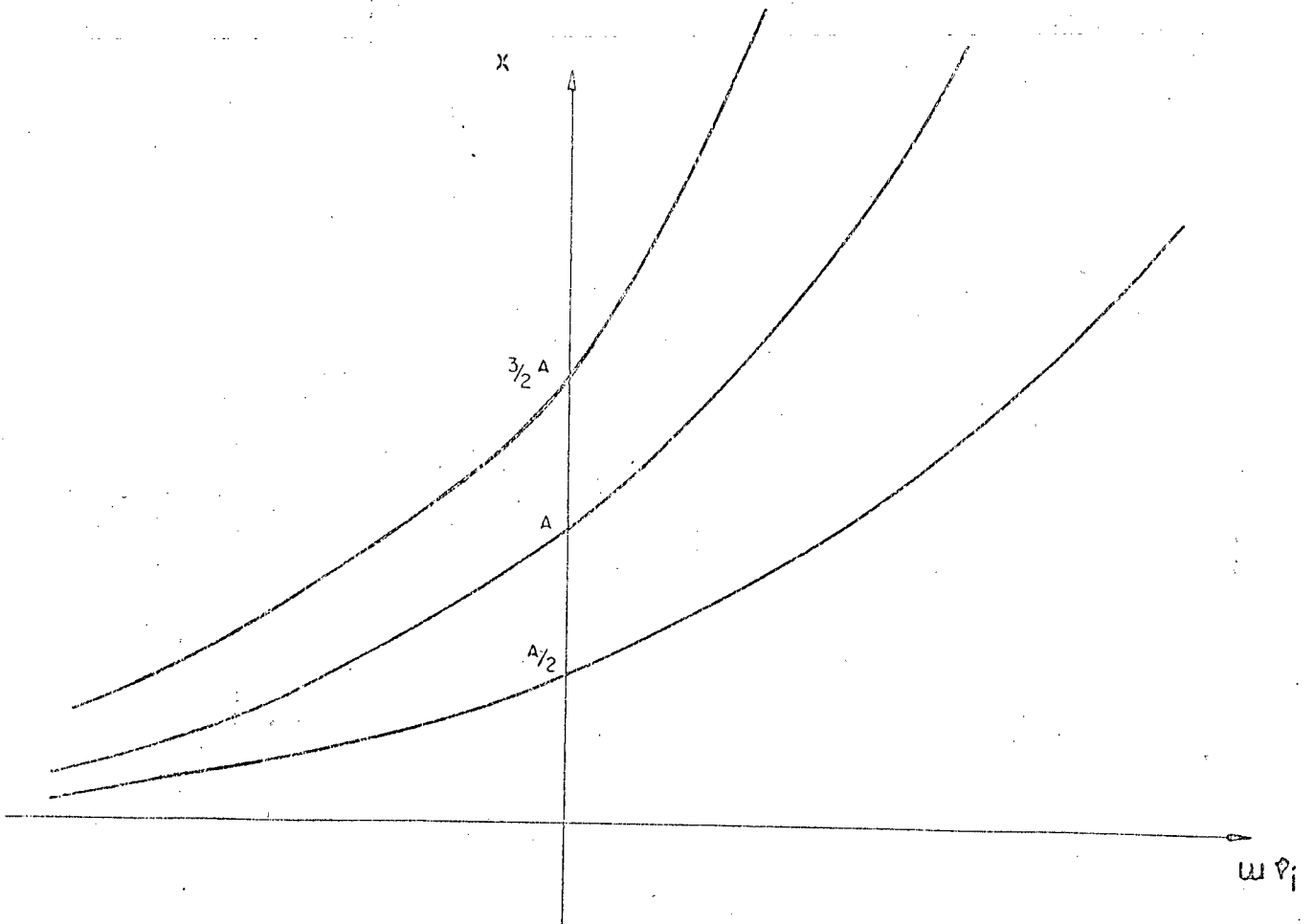


GRÁFICO II.8 - LINHAS DE FLUXO $X(t_1)$ PARA O PRIMEIRO ESTADO EXCITADO DO OSCILADOR HARMÔNICO UNIDIMENSIONAL. ($n = 1$)

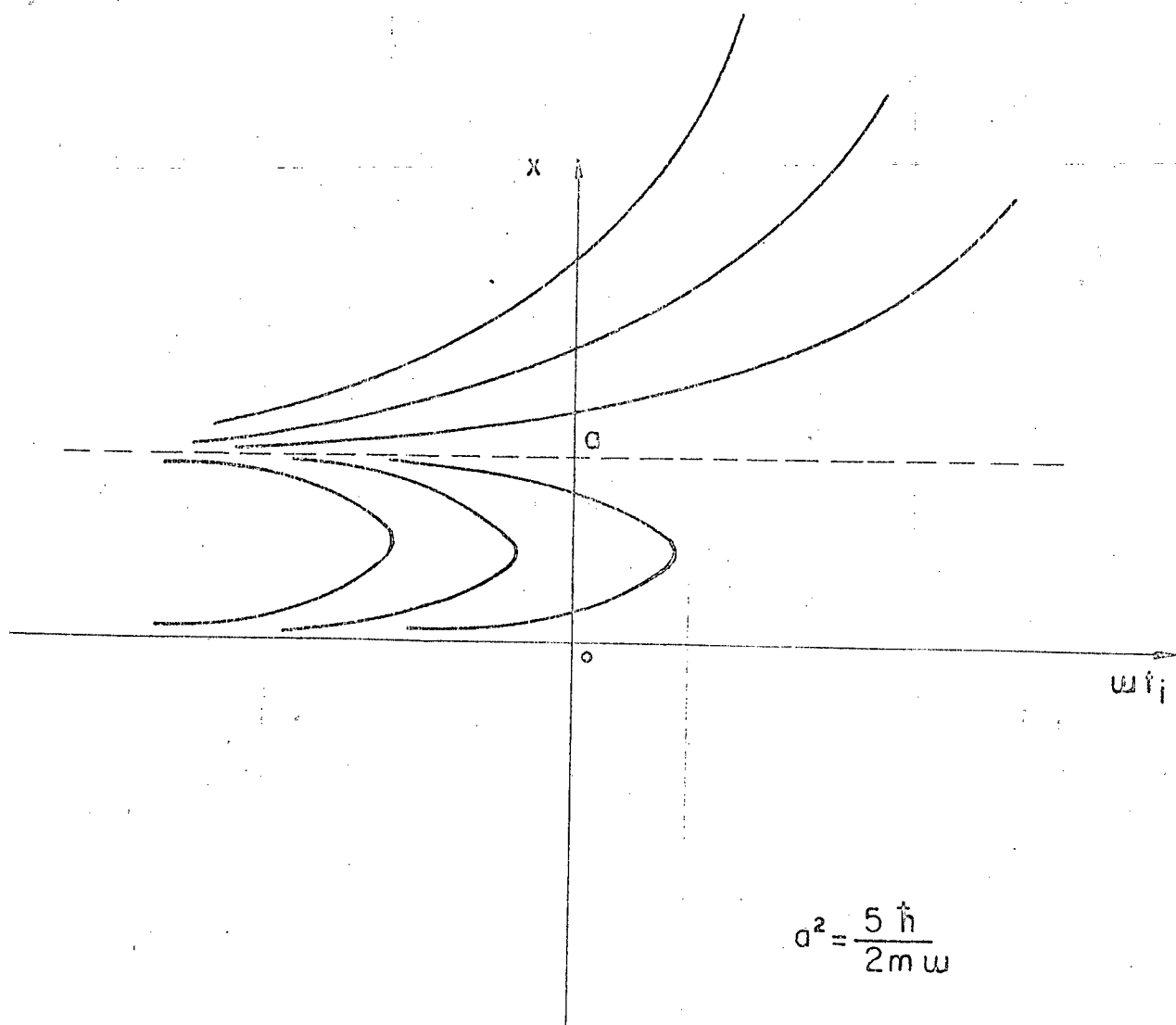


GRÁFICO II.9 - LINHAS DE FLUXO $X(t_i)$ PARA O SEGUNDO ESTADO EXCITADO DO OSCILADOR HARMÔNICO UNIDIMENSIONAL. ($n=2$)

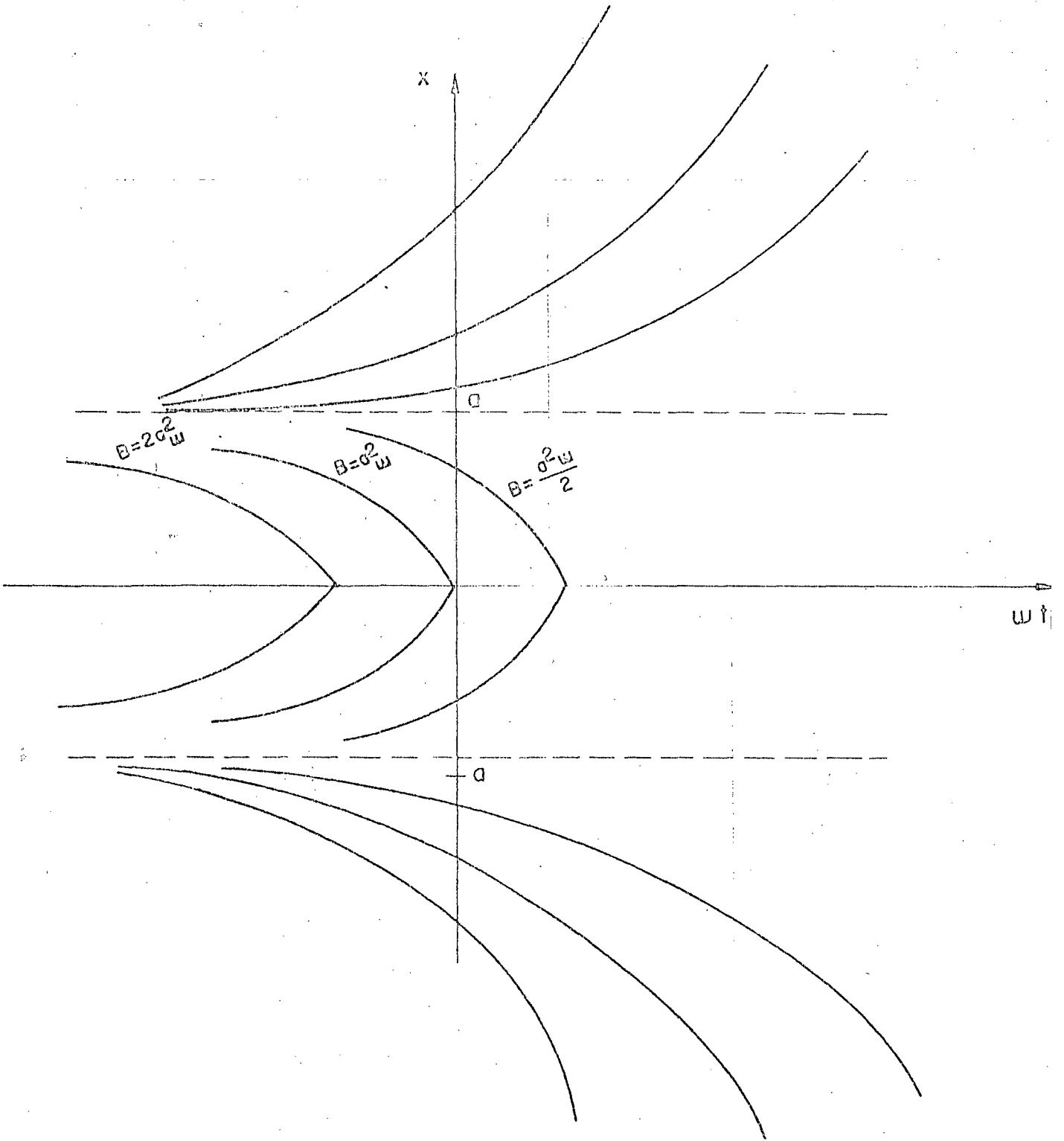
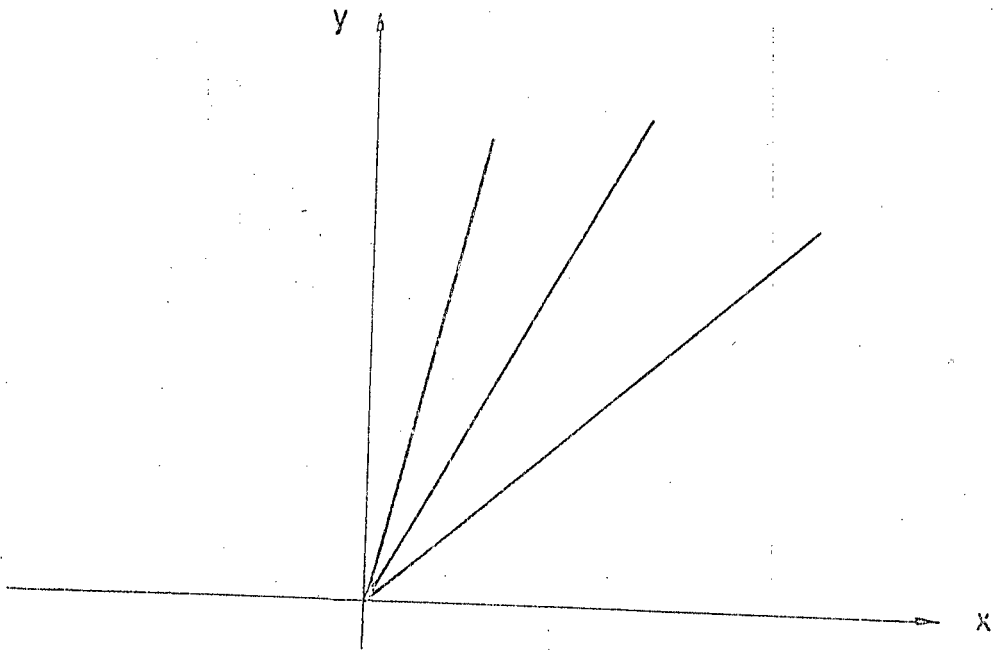


GRÁFICO II.10 - TRAJETÓRIAS $y = y(x)$ PARA O ESTADO FUNDAMENTAL DO OSCILADOR HARMÔNICO ISOTRÓPICO BIDIMENSIONAL.



GRÁFICOS II.11A e II.11B - TRAJETÓRIAS PARA OS DOIS PRIMEIROS ES
TADOS EXCITADOS DO OSCILADOR BIDIMEN-
SIONAL ISOTRÓPICO ($n_x = 1, n_y = 0$ e
 $n_x = 0, n_y = 1$ RESPECTIVAMENTE).

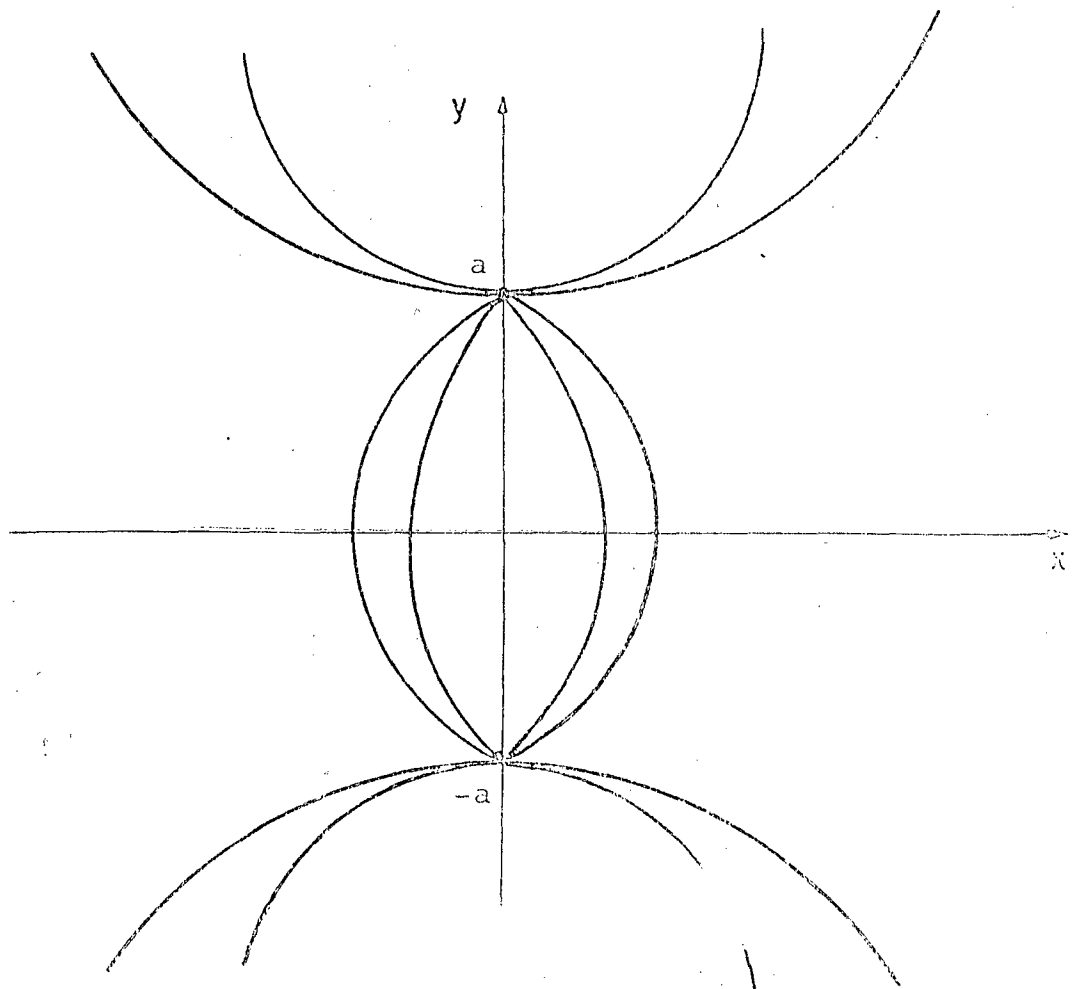
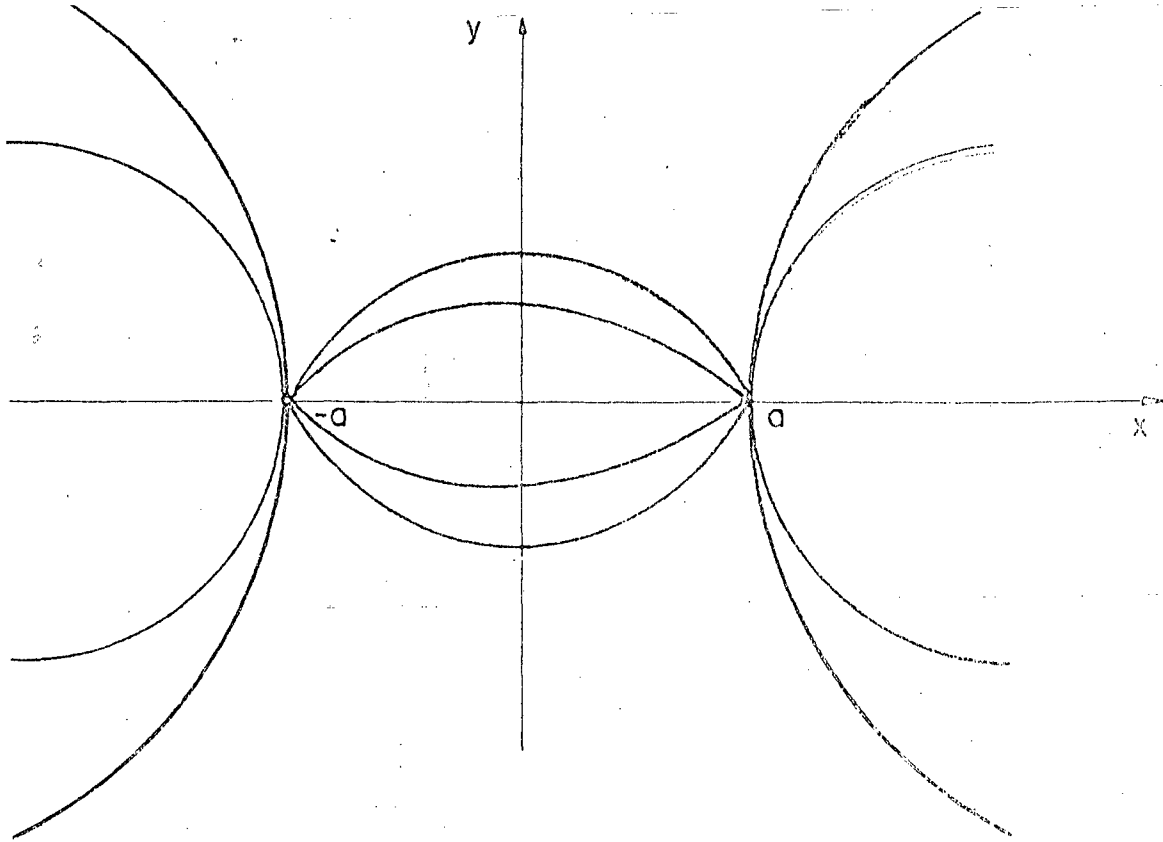


GRÁFICO II.12 - TRAJETÓRIAS PARA O ESTADO $n_x = 1, n_y = 1$ DO OSCILADOR HARMÔNICO BIDIMENSIONAL ISOTRÓPICO.

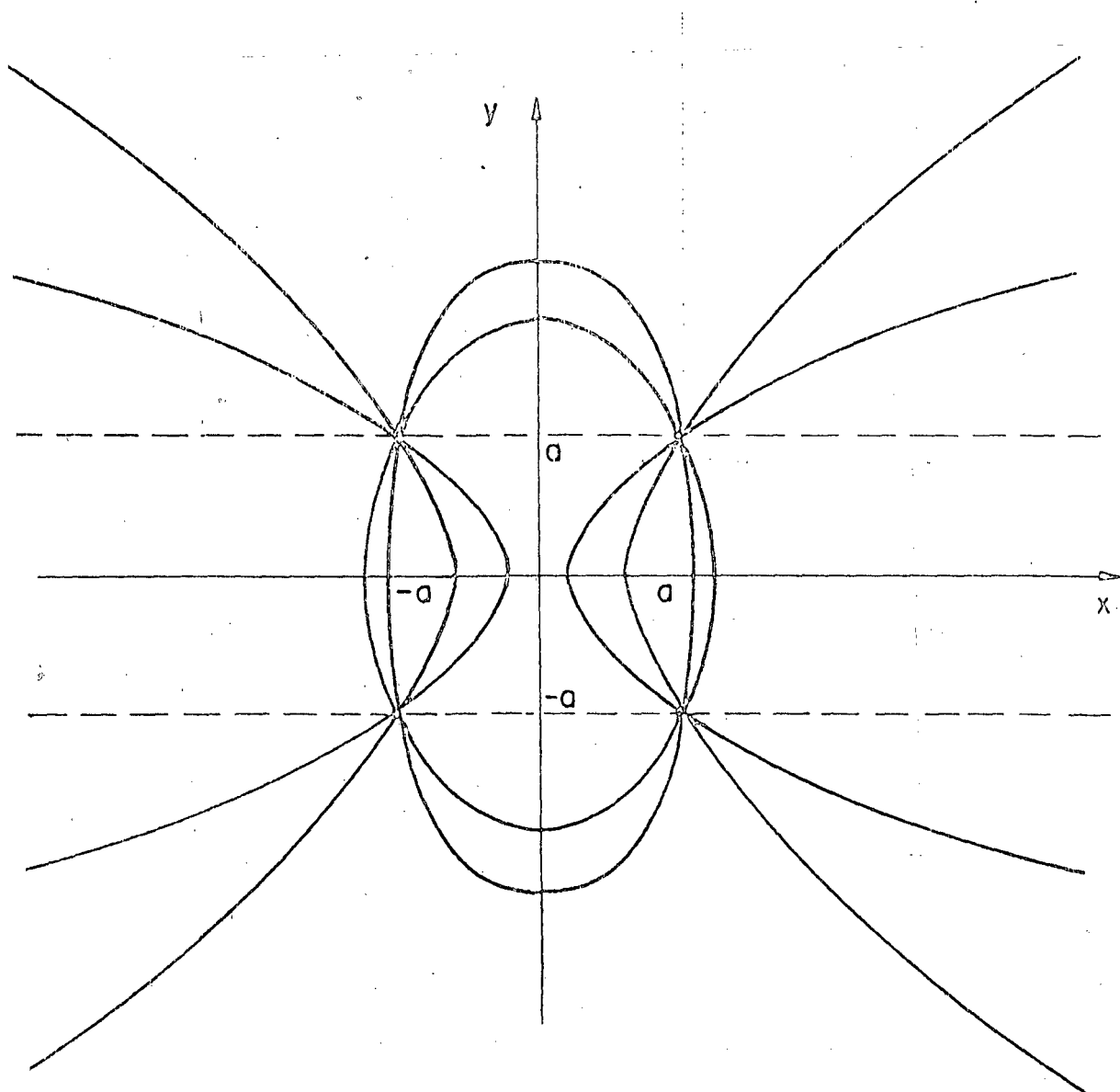
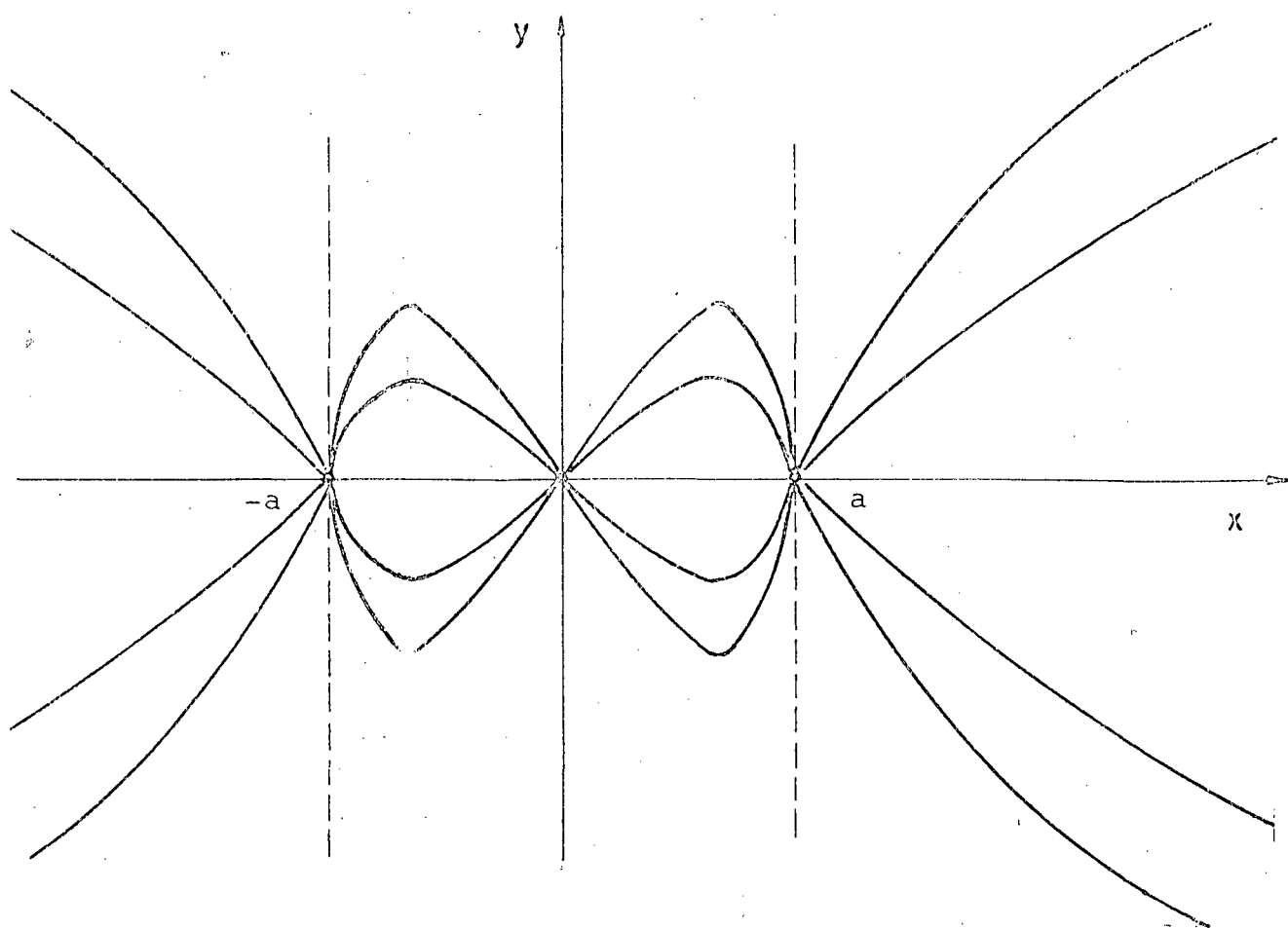


GRÁFICO II.13 - TRAJETÓRIAS PARA O OSCILADOR HARMÔNICO BIDIMEN -
SIONAL ISOTRÓPICO ESTADO $n_x = 2$ e $n_y = 0$.



CAPÍTULO III

FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA APLICADA À FÍSICA

MOLECULAR

1 - INTRODUÇÃO

Iremos tratar agora da aplicação do formalismo hidrodinâmico a alguns problemas discutidos em trabalhos de física molecular [48,49,50]. Analisaremos inicialmente o hamiltoniano de Barbanis, que nos fornece um exemplo simples de acoplamento. Veremos que, por analogia com os resultados obtidos no Capítulo II para o oscilador harmônico bidimensional, podemos obter as energias de alguns estados para o sistema de Barbanis. Estes valores são próximos dos valores obtidos na literatura através do cálculo variacional linear [48,49], ou de métodos semiclássicos [50,51].

2. - O HAMILTONIANO DE BARBANIS

2.1 - O Hamiltoniano "Isotrópico" de Barbanis

Em trabalhos recentes [48,50,52] tem-se estudado o caráter irregular dos espectros moleculares, propondo-se modelos moleculares que tratam as moléculas como um conjunto de osciladores acoplados, de sorte que o hamiltoniano que as descreve não é integrável.

Um hamiltoniano muito estudado [48,49,50,53] como modelo molecular é o hamiltoniano isotrópico de Barbanis:

$$H = \frac{P_x^2}{2\mu} + \frac{P_y^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x^2 + y^2) - \alpha xy^2 \quad (\text{III.1})$$

onde ω é a frequência de oscilação segundo as direções \hat{x} e \hat{y} . O termo αxy^2 expressa o acoplamento entre os osciladores (sendo " α " a constante de acoplamento) e μ é a massa reduzida do sistema.

Como consideramos estados estacionários e as funções de onda que descrevem o sistema são reais, utilizamos a equação de Schrödinger sob a forma dada na equação (I.21), ou seja:

$$E - V(x, y) = \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i - \frac{1}{2} \mu v_i^2. \quad (\text{III.2})$$

Expressando \vec{v}_i em termos de componentes ortogonais:

$$\vec{v}_i = v_{ix}(x, y) \hat{x} + v_{iy}(x, y) \hat{y}. \quad (\text{III.3})$$

Utilizando o potencial dado na equação (III.1) obtemos:

$$E - \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x^2 + y^2) + \alpha xy^2 = \frac{\hbar}{2} \frac{\partial v_{ix}}{\partial x} - \frac{1}{2} \mu v_{ix}^2 + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial v_{iy}}{\partial y} - \frac{1}{2} \mu v_{iy}^2. \quad (\text{III.4})$$

Para obtenção dos níveis de energia do sistema, começamos por observar que estamos tratando basicamente de um oscilador harmônico bidimensional. Vimos no capítulo anterior, que, para este problema, no caso isotrópico, \vec{v}_i é ortogonal às linhas equipotenciais e que em um caso mais geral \vec{v}_i tem a forma do gradiente do potencial. O gradiente do potencial dado no hamiltoniano em (III.1) é:

$$\vec{\nabla} V(x, y) = (\mu \omega^2 x - \alpha y^2) \hat{x} + (\mu \omega^2 y - 2\alpha xy) \hat{y} \quad (\text{III.5})$$

assim, considerando que temos um acoplamento no potencial espera mos que \vec{v}_i tenha uma forma alterada em relação à da expressão dada em (III.5), ou seja, estimamos que as componentes v_{ix} e v_{iy} de \vec{v}_i para o estado fundamental do sistema de Barbanis sejam dados por:

$$v_{ix}(x,y) = ax + b_1y + b_2 \quad (\text{III.6})$$

$$v_{iy}(x,y) = by + c_1xy \quad (\text{III.7})$$

onde a , b_1 , b_2 , b e c_1 são constantes que devem ser determina - das, como veremos a seguir, a fim de que se obtenha a energia do sistema. Observamos agora que, como estamos buscando uma solução aproximada para a equação (III.4), podemos calcular a energia mé dia do sistema através do valor esperado do hamiltoniano:

$$\langle E \rangle_{00} = \iiint \psi_0^* H \psi_0 d^3x \quad (\text{III.8})$$

onde ψ_0 é a função de onda (aproximada) que descreve o estado fundamental do sistema caracterizado pelo hamiltoniano H . Como $H\psi_0 = E\psi_0$, utilizando (III.2) podemos reescrever a equação (III.8) como:

$$\langle E \rangle_{00} = \iiint \left(\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i - \frac{1}{2} \mu v_i^2 + V \right) \rho d^3x \quad (\text{III.9})$$

onde $\rho = |\psi_0|^2$ é a densidade de probabilidade.

Antes de começarmos a utilizar a expressão aproximada de \vec{v}_i para o cálculo de $\langle E \rangle_{00}$, devemos notar que, como $\vec{\nabla} \times \vec{v}_i = 0$, temos $c_1 = 2b_1$, assim reescrevemos v_{ix} e v_{iy} como:

$$v_{ix}(x,y) = ax + b_1y^2 + b_2 \quad (\text{III.10})$$

$$v_{iy}(x,y) = by + 2b_1xy \quad (\text{III.11})$$

Introduzindo agora \vec{v}_i dado pelas equações (III.10) e (III.11) na expressão para $\langle E \rangle_{00}$ dada em (III.9), obtemos:

$$\langle E \rangle_{00} = \frac{\hbar}{2}(a+b) - \frac{1}{2}\mu b_2^2 - \frac{1}{2}\mu b_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (y^4 + 4x^2 y^2) \rho \, dx \, dy \quad (\text{III.12})$$

onde determinamos a , b , b_1 e b_2 através do sistema de equações:

$$\begin{aligned} \omega^2 &= a^2 \\ \omega^2 &= b^2 + 2b_1 b_2 \\ \alpha &= -\mu b_1 (a + 2b) \\ b_1 \hbar &= \mu a b_2 \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

cuja solução leva à seguinte equação para b :

$$b^4 + \omega b^3 - \frac{3}{4} \omega^2 b^2 - \omega^3 b + \frac{1}{4} (\gamma^2 - \omega^4) = 0 \quad (\text{III.14})$$

$$\text{onde: } \gamma^2 = \frac{2\alpha^2 \hbar}{\mu^3 \omega} \quad (\text{III.15})$$

Notemos agora que a determinação de $\langle E \rangle_{00}$ envolve o conhecimento de ρ , assim a partir das equações (III.10) e (III.11) determinamos $\psi_0(x,y)$:

$$\psi_0(x,y) = A \exp \left[-\frac{\lambda_1 x^2}{2} - \frac{\lambda_2 y^2}{2} + \frac{\lambda_3 xy^2}{2} + \frac{\lambda_4 x}{2} \right] \quad (\text{III.16})$$

$$\text{onde: } \lambda_1 = \frac{\mu\omega}{\hbar}, \quad \lambda_2 = \frac{\mu b}{\hbar}, \quad \lambda_3 = \frac{2\alpha}{\hbar(\omega + 2b)}, \quad \lambda_4 = \frac{2\alpha}{\mu\omega(\omega + 2b)}$$

O valor da constante A tiramos da normalização de ψ_0 , ou seja:

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda_1 x^2 - \lambda_2 y^2 + \lambda_3 xy^2 + \lambda_4 x} \, dx \, dy = 1 \quad (\text{III.17})$$

a integral pode ser avaliada expandindo-se os dois últimos ter-

mos do integrando em série e desprezando-se termos de ordem superior, assim:

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 + \lambda_4 x + \frac{\lambda_4^2}{2} x^2 + \lambda_3 x y^2 + \lambda_4 \lambda_3 x^2 y^2 + \frac{\lambda_3^2}{2} x^2 y^4\right) e^{-\lambda_1 x^2 - \lambda_2 y^2} dx dy = 1 \quad (\text{III.18})$$

integrando agora todos os termos, obtemos a seguinte solução aproximada para $|A|^2$:

$$|A|^2 \approx \frac{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}}{\pi \left(1 + \frac{\lambda_3 \lambda_4}{4 \lambda_1 \lambda_2} + \frac{\lambda_4^2}{4 \lambda_1 \lambda_2} + \frac{3 \lambda_3^2}{16 \lambda_1 \lambda_2^2} + \frac{9 \lambda_3^3}{16 \lambda_1^2 \lambda_2^2}\right)} \quad (\text{III.19})$$

observe-se que para $\alpha = 0$, obtemos o resultado para o oscilador harmônico bidimensional, $|A|^2 = (\lambda_1 \lambda_2)^{1/2} / \pi$, e que o denominador na equação (III.19) é na realidade uma série de potências em α . Isto nos mostra que a estimativa feita para \vec{v}_i é semelhante à da teoria da perturbação, apresentada recentemente por Aharonov e Au [54,55].

A partir das equações (III.16) e (III.19) podemos determinar aproximadamente os dois últimos termos na expressão para $\langle E \rangle_{00}$ dada na equação (III.12) ou seja:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho dx dy \approx \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left\{ \frac{3}{\lambda_2} + \frac{3 \lambda_4^2}{16 \lambda_1 \lambda_2^2} + \frac{15 \lambda_4 \lambda_3}{16 \lambda_1 \lambda_2^3} + \frac{105}{64} \frac{\lambda_3^2}{\lambda_1 \lambda_2^4} \right\} \quad (\text{III.20})$$

e

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} 4x^2 y^2 \rho dx dy \approx \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left\{ \frac{1}{\lambda_1 \lambda_2} + \frac{3 \lambda_4^2}{4 \lambda_1^2 \lambda_2} + \frac{9 \lambda_3 \lambda_4}{4 \lambda_1^2 \lambda_2^2} + \frac{45 \lambda_3^2}{16 \lambda_1^2 \lambda_2^3} \right\} \quad (\text{III.21})$$

Devemos notar que as soluções propostas têm um limite

de validade que é imposto pelo valor do parâmetro de acoplamento α . Assim, estudou-se o comportamento das soluções com relação a variações em α . Para tanto, calculou-se $\langle E \rangle_{00}$ para diversos valores de α desde 0,01 a 0,8 e verificou-se a estabilidade da diferença entre a energia do hamiltoniano não perturbado e do hamiltoniano com perturbação ($\Delta E = E_{00} - \langle E \rangle_{00}$). Os resultados estão apresentados na tabela I e no gráfico III.1, onde se pode constatar que ΔE é aproximadamente estável para valores de α até 0,20. Para valores de α acima de 0,20 uma pequena variação $\Delta\alpha$, no parâmetro de acoplamento, acarreta uma variação muito grande em ΔE , o que nos indica que as soluções não são estáveis e, portanto, a hipótese inicial sobre \vec{v}_1 perde sua validade. No formalismo usual isto corresponde ao fato de que não podemos usar teoria da perturbação quando o acoplamento é grande.

A obtenção da energia do sistema para estados excitados pode ser conseguida, utilizando-se os resultados do oscilador harmônico. Assim, para o estado correspondente a $n_x = 1$ e $n_y = 0$ escrevemos:

$$v_{ix} = ax + b_1 y^2 + b_2 - \frac{b_3}{x} \quad (\text{III.22})$$

$$v_{iy} = by + 2b_1 xy$$

sendo a energia do estado dada agora por:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{10} = & \frac{\hbar}{2} (a + b) + \hbar a - \frac{1}{2} \mu b_2^2 - \\ & - \frac{1}{2} \mu b_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (y^4 + 4x^2 y^2) \rho \, dx \, dy + \mu b_3 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (b_1 y^2 + b_2) \rho \frac{dx \, dy}{x} \end{aligned} \quad (\text{III.23})$$

onde $b_3 = \hbar/\mu$ e os coeficientes a , b , b_1 e b_2 estão determina -

dos pelo sistema (III.13). A densidade de probabilidade determinada por (III.22) é agora dada por:

$$\rho(x,y) = |A|^2 x^2 \exp \{ - \lambda_1 x^2 - \lambda_2 y^2 + \lambda_3 xy^2 + \lambda_4 x \} \quad (\text{III.24})$$

onde λ_1 , λ_2 , λ_3 e λ_4 são definidos como antes e avaliamos $|A|^2$ a partir da normalização de ψ , o que nos fornece:

$$|A|^2 = \frac{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}}{\pi \left(\frac{1}{2\lambda_1} + \frac{3\lambda_4^2}{8\lambda_1^2} + \frac{3\lambda_4 \lambda_3^2}{8\lambda_1^2 \lambda_2} + \frac{9\lambda_3^2}{32\lambda_1^2 \lambda_2^2} \right)} \quad (\text{III.25})$$

Podemos agora estimar as integrais na expressão para $\langle E \rangle_{10}$, o que resulta em:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho dx dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left\{ \frac{3}{8\lambda_1 \lambda_2^2} + \frac{9\lambda_4^2}{32\lambda_1^2 \lambda_2^2} + \frac{45\lambda_3 \lambda_4}{32\lambda_1^2 \lambda_2^3} \right\} \quad (\text{III.26})$$

A segunda integral fornece:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} 4x^2 y^2 \rho dx dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left\{ \frac{3}{2\lambda_1^2 \lambda_2} + \frac{15\lambda_4^2}{8\lambda_2 \lambda_1^3} + \frac{45\lambda_3 \lambda_4}{8\lambda_1^3 \lambda_2^2} \right\} \quad (\text{III.27})$$

e:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (b_1 y^2 + b_2) \rho \frac{dx dy}{x} &= \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left[b_1 \left(\frac{\lambda_4}{4\lambda_1 \lambda_2} + \frac{3\lambda_3}{8\lambda_1 \lambda_2^2} \right) + \right. \\ &\left. + b_2 \left(\frac{\lambda_4}{2\lambda_1} + \frac{\lambda_3}{4\lambda_1 \lambda_2} \right) \right] \quad (\text{III.28}) \end{aligned}$$

Para o estado em que $n_x = 0$ e $n_y = 1$ as componentes de \vec{v}_i são:

$$v_{ix} = ax + b_1 y^2 + b_2 \quad (\text{III.29})$$

$$v_{iy} = by + 2b_1 xy - b_3/y$$

e como antes, a energia é:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{01} = & \frac{\hbar}{2}(a+b) + \hbar b - \frac{1}{2} \mu b_2^2 - \frac{1}{2} \mu b_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (y^4 + \\ & + 4x^2 y^2) \rho dx dy + 2\hbar b_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho dx dy \end{aligned} \quad (\text{III.30})$$

onde já foi substituído $b_3 = \hbar/\mu$ e $\rho(x,y)$, calculado a partir de (III.28), é dado por:

$$\rho(x,y) = |A|^2 y^2 \exp \{-\lambda_1 x^2 - \lambda_2 y^2 + \lambda_3 xy^2 + \lambda_4 x\} \quad (\text{III.31}),$$

o que nos permite avaliar as integrais na expressão de $\langle E \rangle_{01}$ de forma similar aos casos anteriores, ou seja, temos:

$$|A|^2 = \frac{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}}{\pi \left(\frac{1}{2\lambda_2} + \frac{\lambda_4^2}{8\lambda_1 \lambda_2} + \frac{3\lambda_3 \lambda_4}{8\lambda_1 \lambda_2^2} + \frac{15\lambda_3^2}{32\lambda_1 \lambda_2^3} \right)} \quad (\text{III.32})$$

e as integrais fornecem:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho dx dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left(\frac{15}{8\lambda_2^3} + \frac{15\lambda_4^2}{32\lambda_1 \lambda_2^3} + \frac{105\lambda_3 \lambda_4}{32\lambda_1 \lambda_2^4} + \frac{945\lambda_3^2}{128\lambda_1 \lambda_2^5} \right) \quad (\text{III.33})$$

e:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} 4x^2 y^2 \rho dx dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left(\frac{3}{2\lambda_1 \lambda_2^2} + \frac{9\lambda_4^2}{8\lambda_1^2 \lambda_2^2} + \frac{45\lambda_3 \lambda_4}{8\lambda_1^2 \lambda_2^3} + \frac{315\lambda_3^2}{32\lambda_1^2 \lambda_2^4} \right) \quad (\text{III.34})$$

e:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho dx dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left(\frac{\lambda_4}{4\lambda_1 \lambda_2} + \frac{3\lambda_3}{8\lambda_1 \lambda_2^2} \right) \quad (\text{III.35})$$

Outro estado analisado corresponde a $n_x = n_y = 1$; neste caso:

$$v_{ix} = ax + b_1 y^2 + b_2 - b_3/x \quad (\text{III.36})$$

$$v_{iy} = by + 2b_1 xy - b_4/y$$

e o resultado para a energia é:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{11} = & \frac{\hbar}{2}(a+b) + \hbar(a+b) - \frac{1}{2} \mu b_2^2 - \frac{1}{2} \mu b_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (y^4 + \\ & + 4x^2 y^2) \rho dx dy + \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (b_1 y^2 + b_2) \rho \frac{dx dy}{x} + 2\hbar b_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho dx dy \end{aligned} \quad (\text{III.37})$$

onde se usaram os resultados $b_3 = \hbar/\mu$ e $b_4 = \hbar/\mu$ com os demais coeficientes determinados a partir de (III.13). A função de onda para este estado, determinada a partir de (III.35) é:

$$\psi_{11}(x,y) = Axy \exp \left\{ -\frac{\lambda_1 x^2}{2} - \frac{\lambda_2 y^2}{2} + \frac{\lambda_3 xy^2}{2} + \frac{\lambda_4 x}{2} \right\} \quad (\text{III.38})$$

sendo que sua normalização leva à seguinte expressão para $|A|^2$:

$$|A|^2 = \frac{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}}{\pi \left(\frac{1}{4\lambda_1 \lambda_2} + \frac{3\lambda_4^2}{16\lambda_1^2 \lambda_2} + \frac{9\lambda_3 \lambda_4}{16\lambda_1^2 \lambda_2^2} + \frac{45\lambda_3^2}{64\lambda_1^2 \lambda_2^3} \right)} \quad (\text{III.39})$$

Estimando o valor das integrais no resultado para $\langle E \rangle_{11}$ encontramos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho dx dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left(\frac{15}{16 \lambda_1 \lambda_2^3} + \frac{45 \lambda_4^2}{64 \lambda_1^2 \lambda_2^3} + \frac{315 \lambda_3 \lambda_4}{64 \lambda_1^2 \lambda_2^4} + \frac{2835 \lambda_3^2}{256 \lambda_1^2 \lambda_2^5} \right) \quad (\text{III.40})$$

e:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} 4x^2 y^2 \rho dx dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left(\frac{9}{16 \lambda_1^2 \lambda_2^2} + \frac{45 \lambda_4^2}{64 \lambda_1^3 \lambda_2^2} + \frac{225 \lambda_3 \lambda_4}{64 \lambda_1^3 \lambda_2^3} + \frac{1575 \lambda_3^2}{256 \lambda_1^3 \lambda_2^4} \right) \quad (\text{III.41})$$

e as duas últimas integrais fornecem:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (b_1 y^2 + b_2) \rho \frac{dx dy}{x} = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left[b_1 \left(\frac{3 \lambda_4}{8 \lambda_1 \lambda_2^2} + \frac{15 \lambda_3}{16 \lambda_1 \lambda_2^3} \right) + b_2 \left(\frac{\lambda_4}{4 \lambda_1 \lambda_2} + \frac{3 \lambda_3}{8 \lambda_1 \lambda_2^2} \right) \right] \quad (\text{III.42})$$

e:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho dx dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left(\frac{3 \lambda_4}{8 \lambda_2 \lambda_1^2} + \frac{9 \lambda_3}{16 \lambda_1^2 \lambda_2^2} \right) \quad (\text{III.43})$$

Os resultados acima foram verificados para dois valores diferentes de α , $\alpha = 1/10$ e $\alpha = 1/9$, e comparados com os resultados apresentados na literatura [48, 53], conseguidos através do método variacional linear. Os resultados são apresentados nas tabelas II e III, nas quais dispomos na primeira coluna os valores das energias em primeira aproximação, ou seja, desprezando-se as integrais nas expressões para $\langle E \rangle$. Na segunda coluna estão os valores da energia (indicada com asterisco) considerando-se os resultados aproximados das integrais, e por último damos os valo

res encontrados na literatura. Deve ser notado que as diferenças percentuais aumentam para níveis de energia mais elevados; isto implica, primeiro, que para estados excitados mais elevados devemos abandonar o uso de uma primeira aproximação e, segundo, que devemos utilizar um maior número de termos no cálculo aproximado das integrais.

Como foi dito, nossos resultados se baseiam no fato de que o potencial estudado toma a forma de um oscilador harmônico para $\alpha = 0$, e neste caso as equipotenciais são circunferências no plano xy . No gráfico III.2 mostramos as linhas de nível do potencial de Barbanis para diversos valores de α , onde se pode constatar o efeito do parâmetro de acoplamento na deformação das linhas de nível mostrando-nos claramente o porquê da instabilidade de ΔE (gráfico III.1) com o crescimento de α , pois neste caso as linhas de nível não podem ser tomadas como sendo aproximadamente circunferências. Nos gráficos III.3A e III.3B apresentam-se as linhas correspondentes a v_{ix} e v_{iy} constantes (para o estado fundamental); deve ser notada a deformação destas linhas quando comparadas com o caso $\alpha = 0$ (o que fornece as linhas paralelas no eixo y e x respectivamente). O gráfico III.4 mostra as linhas de nível para a função de onda do estado fundamental (equação (III.16)), onde podemos ver a semelhança destas linhas com as equipotenciais.

2.2 - O HAMILTONIANO ANISOTRÓPICO DE BARBANIS

Nesta secção utilizamos o formalismo hidrodinâmico para analisar o sistema descrito pelo Hamiltoniano anisotrópico de Barbanis:

$$H = \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{p_y^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu (\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2) - \alpha xy^2 \quad (\text{III.44})$$

onde ω_1 e ω_2 são as frequências segundo as direções \hat{x} e \hat{y} respectivamente. Para este sistema as soluções aproximadas para v_{ix} e v_{iy} também são dadas pelas equações (III.10) e (III.11), e o valor médio da energia para o estado fundamental é:

$$\langle E \rangle_{00} = \frac{\hbar}{2} (a + b) - \frac{1}{2} \mu b_2^2 - \frac{1}{2} \mu b_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (y^4 + 4x^2 y^2) \rho \, dx \, dy \quad (\text{III.45})$$

onde determinamos a , b , b_1 e b_2 através do sistema de equações:

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= a^2 \\ \omega_2^2 &= b^2 + 2b_1 b_2 \\ \alpha &= -\mu b_1 (a + 2b) \\ b_1 \hbar &= \mu a b_2 \end{aligned} \quad (\text{III.46})$$

cuja solução leva à seguinte equação para b :

$$b^4 + \omega_1 b^3 + \left(\frac{1}{4}\omega_1^2 - \omega_2^2\right)b^2 - \omega_1 \omega_2^2 b + \frac{1}{4} (\gamma^2 - \omega_1^2 \omega_2^2) = 0 \quad (\text{III.47})$$

$$\text{onde: } \gamma^2 = \frac{2\alpha^2 \hbar}{\mu^3 \omega_1} \quad (\text{III.48})$$

Como se pode observar, a diferença entre os sistemas

isotrópico e anisotrópico consiste basicamente nos polinômios achados para b (equações (III.14) e (III.47)), sendo que desta forma, após a determinação dos coeficientes, podemos utilizar todos os resultados encontrados para o Hamiltoniano isotrópico. No entanto, para o sistema anisotrópico, a validade de nossa aproximação não depende unicamente do valor do parâmetro de acoplamento (que deve ser pequeno), mas, também do grau de anisotropia do sistema. Isto advém do fato de que para o oscilador harmônico bidimensional anisotrópico \vec{v}_i é aproximadamente ortogonal às linhas equipotenciais quando $\omega_1 \approx \omega_2$. Assim verificou-se a estabilidade das soluções de maneira análoga ao caso isotrópico, mas considerando-se agora $\alpha = 0,08$ e variando-se a diferença $\Delta\omega = \omega_1 - \omega_2$ desde 0,02 até 0,90. Os resultados estão apresentados no gráfico 6, que mostra a variação que $\Delta E = E_{00} - \langle E \rangle_{00}$ sofre com o aumento de $\Delta\omega$. Note-se que ΔE é estável até aproximadamente $\Delta\omega \approx 0,5$.

Os resultados para o sistema anisotrópico quando $\alpha = 0,1$, $\omega_2 = 0,81 \omega_1$ e $\omega_1 = (0,1)^{1/2}$, e para $\alpha = 0,08$ com $\omega_1 = (1,6)^{1/2}$ e $\omega_2 = (0,9)^{1/2}$ estão apresentados nas tabelas IV e V, sendo a disposição de valores feita de forma igual ao caso anterior. Aqui deve ser notado que as diferenças percentuais (para os valores dados em primeira aproximação) são maiores do que aquelas para o caso isotrópico e isto indica que devemos tomar um maior número de termos ao avaliarmos as integrais, para que se consigam melhores resultados. No gráfico III.5 estão apresentadas algumas linhas equipotenciais para o sistema anisotrópico como função da diferença $\Delta\omega$; note-se que à medida que $\Delta\omega$ cresce as linhas de nível deformam-se afastando-se cada vez mais do caso ideal, que corresponde a elipses no plano xy , fato que está intimamente relaciona

do com a estabilidade das soluções (gráfico III.6).

3. O OSCILADOR HARMÔNICO TRIDIMENSIONAL ACOPLADO

Nesta seção generalizam-se os resultados anteriores, analisando um sistema descrito pelo Hamiltoniano:

$$H = \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{p_y^2}{2\mu} + \frac{p_z^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) - \alpha(yx^2 + yz^2) \quad (\text{III.49})$$

onde μ é a massa reduzida do sistema, ω a frequência de oscilação, e α o parâmetro que nos fornece o grau de anarmonicidade do sistema. Neste caso o gradiente do potencial é:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}V(x,y,z) = & (\mu\omega^2 x - 2\alpha xy)\hat{x} + (\mu\omega^2 y - \alpha x^2 - \alpha z^2)\hat{y} + \\ & + (\mu\omega^2 z - 2\alpha yz)\hat{z} \end{aligned} \quad (\text{III.50})$$

Desta forma, analogamente à situação anterior, propomos as soluções aproximadas para as componentes de \vec{v}_i (para o estado fundamental):

$$\begin{aligned} v_{ix} &= a_0 x + a_1 xy \\ v_{iy} &= b_0 y + b_1 x^2 + b_2 z^2 + b_3 \\ v_{iz} &= c_0 z + c_1 yz \end{aligned} \quad (\text{III.51})$$

onde, usando-se o fato de que $\vec{\nabla} \times \vec{v}_i = 0$ obtemos as relações $a_1 = 2b_1$ e $c_1 = 2b_2$. Observe-se que tanto para o problema de Barbanis como para este caso, as componentes de \vec{v}_i correspondentes às coordenadas para as quais o Hamiltoniano é simétrico são sem-

pre antissimétricas e para as coordenadas em que o Hamiltoniano não tem simetria definida a componente de \vec{v}_i correspondente também não apresenta uma simetria definida. O valor da energia é obtido inserindo-se os resultados expressos em (III.51) na equação (III.9) o que fornece:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{00} = & \frac{\hbar}{2} (a_0 + b_0 + c_0) - \frac{1}{2} \mu b_3^2 - \frac{1}{2} \mu b_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (x^4 + \\ & + 4x^2y^2) \rho \, dx \, dy \, dz - \frac{1}{2} \mu b_2^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (z^4 + 4y^2z^2) \rho \, dx \, dy \, dz \end{aligned} \quad (\text{III.52})$$

onde as constantes a_0 , b_0 , c_0 , b_1 , b_2 e b_3 são determinadas a partir do sistema de equações:

$$\begin{aligned} \omega^2 &= a_0^2 + 2b_1b_3 \\ \omega^2 &= b_0^2 \\ \omega^2 &= c_0^2 + 2b_2b_3 \\ \alpha &= -\mu b_1(b_0 + 2a_0) \\ \alpha &= -\mu b_2(b_0 + 2c_0) \\ \hbar(b_1 + b_2) &= \mu b_0b_3 \end{aligned} \quad (\text{III.53})$$

A solução exata deste sistema de equações leva a um polinômio de alta ordem, cuja solução numérica é difícil. Assim, observando que a_0 e c_0 diferem apenas levemente de ω resolvemos o sistema em primeira aproximação:

$$\begin{aligned} a_0 &= \omega - \frac{b_1b_3}{\omega} \\ c_0 &= \omega - \frac{b_2b_3}{\omega} \\ b_1 &= -\frac{\alpha}{\mu(\omega + 2a_0)} \end{aligned} \quad (\text{III.54})$$

$$b_2 = - \frac{\alpha}{\mu(\omega + 2c_0)}$$

$$b_3 = - \frac{\alpha \hbar}{\mu^2 \omega} \left(\frac{1}{\omega + 2a_0} + \frac{1}{\omega + 2c_0} \right)$$

cuja solução leva ao seguinte polinômio:

$$\begin{aligned} X^7 - 9\omega X^6 + 27\omega^2 X^5 + (2\lambda_0 - 27\omega^3) X^4 - 15\omega\lambda_0 X^3 + \\ + 27\omega^2 \lambda_0 X^2 - 6\omega\lambda_0^2 = 0. \end{aligned} \quad (\text{III.55})$$

onde $X = \omega + 2c_0$ e $\lambda_0 = \frac{2\alpha^2 \hbar}{\mu^3 \omega^2}$

O polinômio acima (bem como no caso de Barbanis) foi resolvido através do método de Newton e divisão sintética, usando-se sempre dupla precisão. Após a obtenção dos coeficientes calculamos a densidade de probabilidade para o estado fundamental a partir das equações (III.51):

$$\begin{aligned} \rho(x, y) = |A|^2 \exp \{ - \lambda_1 x^2 - \lambda_2 y^2 - \lambda_3 z^2 + \lambda_4 yx^2 + \\ + \lambda_5 yz^2 + \lambda_6 y \} \end{aligned} \quad (\text{III.56})$$

onde $\lambda_1 = \frac{\mu a_0}{\hbar}$, $\lambda_2 = \frac{\mu \omega}{\hbar}$, $\lambda_3 = \frac{\mu c_0}{\hbar}$, $\lambda_4 = - \frac{2\mu b_1}{\hbar}$, $\lambda_5 = - \frac{2\mu b_2}{\hbar}$,
 $\lambda_6 = - \frac{2\mu b_3}{\hbar}$

Para o cálculo de A, a partir da normalização da função de onda obtida, desenvolvemos os últimos três termos de ρ em série de potências e tomando-se apenas os primeiros termos das séries, o resultado aproximado para $|A|^2$ é:

$$|A|^2 = \frac{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}}{\pi^{3/2}} \left[1 + \frac{3\lambda_4^2}{16\lambda_1^2 \lambda_2} + \frac{\lambda_5 \lambda_4}{8\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} + \frac{3\lambda_5 \lambda_4^2}{32\lambda_1^2 \lambda_2 \lambda_3} + \frac{3\lambda_5^2}{8\lambda_2 \lambda_3^2} + \frac{27\lambda_5^2 \lambda_4^2}{64\lambda_1^2 \lambda_2^2 \lambda_3^2} + \frac{9\lambda_6 \lambda_5 \lambda_4^2}{32\lambda_1^2 \lambda_2^2 \lambda_3} + \frac{9\lambda_4 \lambda_6 \lambda_5^2}{32\lambda_2^2 \lambda_3^2 \lambda_1} \right]^{-1} \quad (\text{III.57})$$

O próximo passo para a determinação da energia do sistema consiste em avaliarmos as integrais contidas na equação (III.52). As duas primeiras integrais fornecem:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \rho \, dx \, dy \, dz = \frac{|A|^2 \pi^{3/2}}{(\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3)^{1/2}} \left\{ \frac{3}{4\lambda_1^2} + \frac{105\lambda_4^2}{64\lambda_1^4 \lambda_2 \lambda_3} + \frac{15\lambda_5 \lambda_4}{32\lambda_1^3 \lambda_2 \lambda_3} + \frac{105\lambda_4 \lambda_5}{64\lambda_1^4 \lambda_2 \lambda_3} + \frac{9\lambda_5^2}{64\lambda_2 \lambda_1^2 \lambda_3^2} + \frac{9\lambda_5^2 \lambda_4^2}{16\lambda_1^4 \lambda_2^2 \lambda_3^2} + \frac{1575\lambda_6 \lambda_5 \lambda_4^2}{256\lambda_1^4 \lambda_2^2 \lambda_3} \right\} \quad (\text{III.58})$$

e:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} 4x^2 y^2 \rho \, dx \, dy \, dz = \frac{|A|^2 \pi^{3/2}}{(\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3)^{1/2}} \left\{ \frac{1}{\lambda_1 \lambda_2} + \frac{45\lambda_4^2}{16\lambda_1^3 \lambda_2^2} + \frac{9\lambda_5 \lambda_4}{8\lambda_1^2 \lambda_3 \lambda_2^2} + \frac{45\lambda_5 \lambda_4^2}{32\lambda_2^2 \lambda_1^3 \lambda_3} + \frac{9\lambda_5^2}{16\lambda_2^2 \lambda_3^2 \lambda_1} + \frac{675\lambda_4^2 \lambda_5^2}{64\lambda_1^3 \lambda_2^3 \lambda_3^2} + \frac{225\lambda_6 \lambda_5 \lambda_4^2}{64\lambda_1^3 \lambda_2^3 \lambda_3} + \frac{135\lambda_6 \lambda_4 \lambda_5^2}{64\lambda_2^3 \lambda_1^2 \lambda_3^2} \right\} \quad (\text{III.59})$$

As duas últimas integrais avaliamos em:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} z^4 \rho \, dx \, dy \, dz = \frac{|A|^2 \pi^{3/2}}{(\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3)^{1/2}} \left\{ \frac{3}{4\lambda_3^2} + \frac{9\lambda_4^2}{64\lambda_1^2 \lambda_2 \lambda_3^2} + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{15\lambda_4\lambda_5}{32\lambda_1\lambda_2\lambda_3} + \frac{45\lambda_5\lambda_4^2}{64\lambda_1^2\lambda_2\lambda_3} + \frac{105\lambda_5^2}{64\lambda_2\lambda_3} + \frac{945\lambda_5^2\lambda_4^2}{\lambda_1^2\lambda_2^2\lambda_3^4} + \\
& + \left. \frac{135\lambda_4\lambda_5\lambda_6}{256\lambda_1\lambda_2\lambda_3} + \frac{315\lambda_4\lambda_5^2\lambda_6}{256\lambda_1\lambda_2^2\lambda_3^4} \right\} \quad \text{(III.60)}
\end{aligned}$$

e:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} 4y^2 z^2 \rho \, dx \, dy \, dz = & \frac{|A|^2 \pi^{3/2}}{(\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3)^{1/2}} \left\{ \frac{1}{\lambda_2 \lambda_3} + \frac{9\lambda_4^2}{16\lambda_1^2 \lambda_2^2 \lambda_3} + \right. \\
& + \frac{3\lambda_4\lambda_5}{2\lambda_1\lambda_2^2\lambda_3} + \frac{27\lambda_4^2\lambda_5}{32(\lambda_1\lambda_2\lambda_3)^2} + \frac{45\lambda_5^2}{16\lambda_2^2\lambda_3} + \frac{675\lambda_4^2\lambda_5^2}{512\lambda_1^2\lambda_2^3\lambda_3^3} + \\
& \left. + \frac{135\lambda_4^2\lambda_5\lambda_6}{64\lambda_1^2\lambda_2^3\lambda_3^2} + \frac{225\lambda_4\lambda_5^2\lambda_6}{64\lambda_1\lambda_2^3\lambda_3^3} \right\} \quad \text{(III.61)}
\end{aligned}$$

Observe-se que os resultados para as integrais foram obtidos com um maior número de termos do que no caso do Hamiltoniano de Barbanis; isto se deve ao fato de que o sistema tridimensional estudado é duplamente acoplado o que requer uma maior precisão no cálculo da energia (Se, por exemplo o sistema possuísse também um acoplamento entre as coordenadas x e z, teríamos um maior número de termos na expressão para a energia e, além disto, para uma aproximação de mesma ordem, as integrais a avaliar forneceriam um maior número de termos).

Os resultados anteriores foram verificados para o caso em que $\alpha = 0,1$, $\omega = \sqrt{0,1}$, $h\omega = 1 \times 10^{-3}$ e $\mu = 1$, estando os resultados apresentados na tabela VI. Observe-se que calculamos com maior precisão apenas a energia correspondente ao estado fundamental (o valor assinalado pelo asterisco) sendo os demais resultados apresentados, calculados desprezando-se as integrais nas

expressões para $\langle E \rangle$.

4. O SISTEMA DE HENON - HEILES

Veremos agora uma última aplicação do procedimento utilizado até aqui, para obtenção do valor aproximado da energia de alguns estados para o potencial de Henon-Heiles. O sistema de Henon-Heiles é descrito pelo Hamiltoniano:

$$H = \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{p_y^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x^2 + y^2) + \alpha (yx^2 - \frac{1}{3} y^3) \quad (\text{III.62})$$

onde, como nos casos anteriores, representamos por α o parâmetro de acoplamento. Para estimarmos soluções aproximadas para v_{ix} e v_{iy} tomamos o gradiente do potencial:

$$\vec{\nabla}V = (\mu\omega^2 x + 2\alpha yx)\hat{x} + (\mu\omega^2 y + \alpha x^2 - \alpha y^2)\hat{y} \quad (\text{III.63})$$

Desta forma tomamos como soluções aproximadas (para o estado fundamental do sistema):

$$v_{ix} \approx ax + 2b_3xy \quad (\text{III.64})$$

$$v_{iy} \approx b_0y + b_2y^2 + b_3x^2 + b_4 \quad (\text{III.65})$$

onde o segundo coeficiente de " v_{ix} " já foi substituído por " $2b_3$ " de sorte que $\vec{\nabla} \times \vec{v}_i = 0$. Deve ser notado que a componente " v_{ix} " é antissimétrica em relação a " x ", devido a simetria do Hamiltoniano com respeito a esta coordenada. (Por este motivo, o termo constante " b_4 " é adicionado a " v_{iy} " e não a " v_{ix} ", procedimento já realizado anteriormente). Introduzindo " \vec{v}_i " dado pelas equa -

ções (III.64) e (III.65) em (III.9) obtemos para a energia do estado fundamental:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{00} = & \frac{\hbar}{2} (a + b_0) - \frac{1}{2} \mu b_4^2 - (2\mu b_3^2 + \mu b_2 b_3) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 y^2 \rho \, dx \, dy - \\ & - \frac{1}{2} \mu b_2^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho \, dx \, dy - \frac{1}{2} \mu b_3^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \rho \, dx \, dy \end{aligned} \quad (\text{III.66})$$

onde determinamos a , b_0 , b_2 , b_3 e b_4 através do sistema de equações:

$$\begin{aligned} \omega^2 &= a^2 + 2b_3 b_4 \\ \omega^2 &= b_0^2 + 2b_2 b_4 \\ \alpha &= \mu b_3 (b_0 + 2a) \\ \alpha/3 &= -\mu b_0 b_2 \\ \hbar(b_2 + b_3) &= \mu b_0 b_4 \end{aligned} \quad (\text{III.67})$$

A solução exata deste sistema é possível, mas em virtude do polinômio obtido ser de alto grau, acarreta problemas na sua solução numérica. Assim, observando-se que " a " e " b_0 " diferem levemente de " ω ", resolvemos o problema em primeira aproximação, ou seja, resolvemos o sistema:

$$\begin{aligned} a &\approx \omega - b_3 b_4 / \omega \\ b_0 &\approx \omega - b_2 b_4 / \omega \\ b_2 &= -\alpha / 3\mu b_0 \\ b_3 &= \frac{\alpha}{\mu(2a + b_0)} \\ b_4 &= \frac{\hbar}{\mu b_0} (b_2 + b_3) \end{aligned} \quad (\text{III.68})$$

cuja solução leva ao seguinte polinômio para " b_0 ":

$$b_0^9 - 3\omega b_0^8 + 3\omega^2 b_0^7 - \omega^3 b_0^6 + \frac{\lambda_0}{2} b_0^5 - \frac{3}{2} \omega \lambda_0 b_0^4 + \omega^2 \lambda_0 b_0^3 + \frac{\lambda_0 b_0}{9} - \frac{2\omega \lambda_0^2}{9} = 0 \quad (\text{III.69})$$

$$\text{onde: } \lambda_0 = \frac{\alpha^2 \hbar}{3\mu^3 \omega}$$

Como anteriormente, calculamos a função de onda aproximada para o sistema, a partir das equações (III.64) e (III.65), com o resultado:

$$\psi(x, y) = A \exp \left\{ -\frac{\lambda_1 x^2}{2} - \frac{\lambda_0 y^2}{2} + \frac{\lambda_3}{2} yx^2 + \frac{\lambda_2}{2} y^3 + \frac{\lambda_4}{2} y \right\} \quad (\text{III.70})$$

$$\text{onde: } \lambda_1 = \frac{\mu a}{\hbar}, \quad \lambda_0 = \frac{\mu b_0}{\hbar}, \quad \lambda_3 = -\frac{2\mu b_3}{\hbar}, \quad \lambda_2 = -\frac{2\mu b_2}{3\hbar},$$

$$\lambda_4 = -\frac{2\mu b_4}{\hbar}$$

O valor de A , tirado da normalização de ψ , é aproximadamente:

$$|A|^2 = \frac{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}}{\pi} \left[1 + \frac{\lambda_4}{2\lambda_0} + \frac{3\lambda_3^2}{16\lambda_0 \lambda_1^2} + \frac{9\lambda_4 \lambda_3^2}{32\lambda_0^2 \lambda_1^2} + \frac{3\lambda_2 \lambda_3}{8\lambda_0^2 \lambda_1} + \frac{15\lambda_2 \lambda_3 \lambda_4}{16\lambda_1 \lambda_0^3} \right]^{-1} \quad (\text{III.71})$$

Para achar $\langle E \rangle_{00}$ devemos avaliar as integrais na equação (III.66), o que é feito utilizando-se a função de onda dada em (III.70). Os resultados são:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 y^2 \rho \, dx \, dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}} \left\{ \frac{1}{4 \lambda_1 \lambda_0} + \frac{45 \lambda_3^2}{64 \lambda_0^2 \lambda_1^3} + \right. \\ \left. + \frac{3 \lambda_4}{8 \lambda_0^2 \lambda_1} + \frac{225 \lambda_4 \lambda_3^2}{64 \lambda_0^3 \lambda_1^3} + \frac{45 \lambda_2 \lambda_3}{32 \lambda_0^3 \lambda_1^2} + \frac{315 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4}{64 \lambda_0^4 \lambda_1^2} \right\} \quad (\text{III.72})$$

e:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho \, dx \, dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}} \left\{ \frac{3}{4 \lambda_0^2} + \frac{15 \lambda_4}{8 \lambda_0^3} + \frac{45 \lambda_3^2}{64 \lambda_1^2 \lambda_0^3} + \right. \\ \left. + \frac{315 \lambda_4 \lambda_3}{128 \lambda_1^2 \lambda_0^4} + \frac{105 \lambda_2 \lambda_3}{32 \lambda_1 \lambda_0^4} \right\} \quad (\text{III.73})$$

e a última integral fornece:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \rho \, dx \, dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}} \left\{ \frac{3}{4 \lambda_1^2} + \frac{3 \lambda_4}{8 \lambda_0 \lambda_1^2} + \frac{105 \lambda_3^2}{64 \lambda_0 \lambda_1^4} + \right. \\ \left. + \frac{315 \lambda_4 \lambda_3^2}{128 \lambda_0^2 \lambda_1^4} + \frac{45 \lambda_2 \lambda_3}{32 \lambda_0^2 \lambda_1^3} + \frac{225 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4}{256 \lambda_0^3 \lambda_1^3} \right\} \quad (\text{III.74})$$

Devemos observar que os resultados anteriores indicam claramente que o Hamiltoniano em questão representa um oscilador harmônico mais fortemente alterado que o Hamiltoniano de Barbanis (dentro da mesma aproximação temos aqui, uma contribuição de maior número de termos).

Para este sistema verificamos também a estabilidade das soluções para diversos valores do parâmetro de acoplamento. Estudamos os casos com $\alpha = 0,5$ até $\alpha = 3,0$ e colocando-se $\omega = 1$, $\mu = 1$ e $\hbar\omega = 1,25 \times 10^{-2}$. Os resultados estão apresentados no grã

figo III.7, onde, como nos casos anteriores, verificou-se a dependência com " α " da diferença entre a energia do oscilador harmônico não perturbado e o resultado aqui calculado. Como é visível, o sistema apresenta estabilidade apenas para uma pequena faixa de valores de α (aproximadamente entre 0 e 1), a partir da qual " ΔE " começa a apresentar uma grande variação para pequenas alterações em " α ".

O cálculo da energia para alguns estados excitados foi feito de forma similar ao do Hamiltoniano de Barbanis, ou seja, para o estado correspondente a $n_x = 1$ e $n_y = 0$ usamos:

$$v_{ix} = ax + 2b_3xy - b_5/x \quad (\text{III.75})$$

$$v_{iy} = b_0y + b_2y^2 + b_3x^2 + b_4$$

Com as soluções v_{ix} e v_{iy} expressas em (III.75), a energia correspondente ao estado é:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{10} = & \frac{\hbar}{2}(a + b_0) + \hbar a - \frac{1}{2} \mu b_4^2 - (2\mu b_3^2 + \mu b_2 b_3) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 y^2 \rho \, dx \, dy - \\ & - \frac{1}{2} \mu b_2^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho \, dx \, dy - \frac{1}{2} \mu b_3^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \rho \, dx \, dy + 2\hbar b_3 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y \rho \, dx \, dy \end{aligned} \quad (\text{III.76})$$

onde usamos o fato de que $b_5 = \hbar/\mu$, e a determinação das demais constantes permanece inalterada (ou seja, são obtidas a partir do sistema dado em (III.68)). Assim, resta avaliar as integrais, para isso notamos que a função de onda que descreve o estado do sistema é:

$$\psi(x, y) = A x \exp \left\{ -\frac{\lambda_1 x^2}{2} - \frac{\lambda_0 y^2}{2} + \frac{\lambda_3 xy^2}{2} + \frac{\lambda_2 y^3}{2} + \frac{\lambda_4 y}{2} \right\} \quad (\text{III.77})$$

da qual, através da normalização, tiramos o valor aproximado de A:

$$|A|^2 = \frac{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}}{\pi} \left[\frac{3}{8\lambda_0 \lambda_1^2} + \frac{9}{16\lambda_0^2 \lambda_1^2} + \frac{315}{128\lambda_0^2 \lambda_1^4} + \frac{1575\lambda_4 \lambda_3^2}{128\lambda_0^3 \lambda_1^4} + \frac{225\lambda_2 \lambda_3}{64\lambda_0^3 \lambda_1^3} + \frac{1575\lambda_2 \lambda_3 \lambda_4}{128\lambda_0^4 \lambda_1^3} \right]^{-1} \quad (\text{III.78})$$

Note-se que procuramos sempre tomar a mesma aproximação para todos os estados e que, por outro lado, poderíamos tomar apenas o primeiro termo do segundo membro da equação (III.78) o que nos levaria unicamente a uma alteração na precisão do resultado obtido. Tendo-se avaliado as quatro integrais que aparecem na equação (III.76), obtendo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho \, dx \, dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}} \left\{ \frac{3}{8\lambda_1 \lambda_0^2} + \frac{15\lambda_4}{16\lambda_1 \lambda_0^3} + \frac{225\lambda_3^2}{128\lambda_0^3 \lambda_1^3} + \frac{1575\lambda_4 \lambda_3^2}{128\lambda_0^4 \lambda_1^3} + \frac{315\lambda_2 \lambda_3}{64\lambda_0^4 \lambda_1^2} + \frac{2835\lambda_2 \lambda_3 \lambda_4}{128\lambda_1^2 \lambda_0^5} \right\}; \quad (\text{III.79})$$

Da mesma forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \rho \, dx \, dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}} \left\{ \frac{15}{8\lambda_1^3} + \frac{15\lambda_4}{16\lambda_0 \lambda_1^3} + \frac{945\lambda_3^2}{64\lambda_0 \lambda_1^5} + \frac{2835\lambda_4 \lambda_3^2}{128\lambda_0^2 \lambda_1^5} + \frac{315\lambda_2 \lambda_3}{64\lambda_0^2 \lambda_1^4} + \frac{1575\lambda_2 \lambda_3 \lambda_4}{128\lambda_0^3 \lambda_1^4} \right\} \quad (\text{III.80})$$

sendo que as duas últimas integrais fornecem:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 y^2 \rho \, dx \, dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}} \left\{ \frac{3}{8\lambda_1^2 \lambda_0} + \frac{9\lambda_4}{16\lambda_1^2 \lambda_0^2} + \right.$$

$$+ \frac{315\lambda_3^2}{128\lambda_1^4\lambda_0^2} + \frac{1575\lambda_3^2\lambda_4}{128\lambda_1^4\lambda_0^3} + \frac{225\lambda_2\lambda_3}{64\lambda_1^3\lambda_0^3} + \frac{1575\lambda_2\lambda_3\lambda_4}{128\lambda_1^3\lambda_0^4} \} \quad (\text{III.81})$$

e:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y \rho \, dx \, dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}} \left\{ \frac{3\lambda_3}{8\lambda_0\lambda_1^2} + \frac{9\lambda_3\lambda_4}{16\lambda_1^2\lambda_0^2} + \frac{3\lambda_2}{8\lambda_0^2\lambda_1} + \right. \\ \left. + \frac{225\lambda_2\lambda_3^2}{128\lambda_1^3\lambda_0^3} + \frac{15\lambda_2\lambda_3}{16\lambda_1\lambda_0^3} + \frac{1575\lambda_2\lambda_3^2\lambda_4}{128\lambda_1^3\lambda_0^4} \right\} \quad (\text{III.82})$$

Para o estado correspondente a $n_x = 0$ e $n_y = 1$ as soluções aproximadas:

$$v_{ix} = ax + 2b_3xy \quad (\text{III.83})$$

$$v_{iy} = b_0y + b_2y^2 + b_3x^2 + b_4 - b_5/y$$

fornecem para a energia do sistema o valor:

$$\langle E \rangle_{01} = \hbar(a + b_0) + \hbar b_0 - \frac{1}{2} \mu b_4^2 - \frac{1}{2} \mu b_2^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho \, dx \, dy - \\ - \frac{1}{2} \mu b_3^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \rho \, dx \, dy - (2 \mu b_3^2 + \mu b_2 b_3) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 y^2 \rho \, dx \, dy + \\ + \hbar b_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y \rho \, dx \, dy + \hbar b_3 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2}{y} \rho \, dx \, dy + \\ + \hbar b_4 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \frac{dx}{y} \, dy \quad (\text{III.84})$$

e a função de onda para este estado (obtida de (III.83)) é:

$$\psi(x, y) = A y \exp \left\{ - \frac{\lambda_1 x^2}{2} - \frac{\lambda_0 y^2}{2} + \frac{\lambda_3 x y^2}{2} + \frac{\lambda_2 y^2}{2} + \frac{\lambda_4 y}{2} \right\} \quad (\text{III.85})$$

o que nos permite avaliar as integrais em (III.84) e obter um valor aproximado para $\langle E \rangle_{01}$.

Para $n_x = n_y = 1$ as componentes de \vec{v}_1 tornam-se:

$$v_{ix} = ax + 2b_3xy - \frac{b_5}{x} \quad (\text{III.86})$$

$$v_{iy} = b_0y + b_2y^2 + b_3x^2 + b_4 - b_6/y$$

e portanto:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{11} = & \frac{\hbar}{2}(a + b_0) + \hbar(a + b_0) - \frac{1}{2} \mu b_4^2 - \frac{1}{2} \mu b_2^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho \, dx \, dy - \\ & - \frac{1}{2} \mu b_3^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \rho \, dx \, dy - (2\mu b_3^2 + \mu b_2 b_3) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 y^2 \rho \, dx \, dy + \\ & + (2\hbar b_3 + \hbar b_2) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y \rho \, dx \, dy + \hbar b_3 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2}{y} \rho \, dx \, dy + \\ & + \hbar b_4 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \frac{dx \, dy}{y} \quad (\text{III.87}) \end{aligned}$$

onde já se usou o resultado $b_5 = b_6 = \hbar/\mu$. Após a obtenção da densidade de probabilidade, avalia-se as integrais e obtém-se o resultado para $\langle E \rangle_{11}$. Mostraremos ainda os resultados para $n_x = 2$, $n_y = 0$ e $n_x = 0$ e $n_y = 0$. Para o estado $n_x = 2$ e $n_y = 0$ temos:

$$v_{ix} = ax + 2b_3xy - \frac{2\hbar x}{\mu(x^2 - \hbar/2\mu a)} \quad (\text{III.88})$$

$$v_{iy} = b_0y + b_2y^2 + b_3x^2 + b_4$$

onde já adiantamos os valores das constantes presentes no último termo de v_{ix} (ou seja $2\hbar/\mu$ e $\hbar/2\mu a$).

Substituindo as componentes de \vec{v}_1 em (III.9) obtemos:

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle_{20} &= \frac{\hbar}{2}(a + b_0) + 2\hbar a - \frac{1}{2} \mu b_4^2 - (2\mu b_3^2 + \mu b_2 b_3) \\
&\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 y^2 \rho \, dx \, dy - \frac{1}{2} \mu b_2^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho \, dx \, dy - \frac{1}{2} \mu b_3^2 \\
&\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \rho \, dx \, dy + 4\hbar b_3 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{yx^2}{x^2 - \hbar/2\mu a} \rho \, dx \, dy
\end{aligned} \tag{III.89}$$

e a função de onda, obtida a partir de (III.88) é:

$$\begin{aligned}
\psi(x, y) &= A(x^2 - \hbar/2\mu a) \exp \left\{ -\frac{\lambda_1 x^2}{2} - \frac{\lambda_0 y^2}{2} + \right. \\
&\left. + \frac{\lambda_3 xy^2}{2} + \frac{\lambda_2 y^3}{2} + \frac{4y}{2} \right\}
\end{aligned} \tag{III.90}$$

Observe-se que, diferentemente dos estados anteriores, agora os nós da função de onda estão levemente alterados (pois "a" difere ligeiramente de "ω") e neste caso com o intuito de economizarmos em quantidade os cálculos envolvidos, avaliamos a constante "A" de forma mais simples ou seja:

$$|A|^2 = \frac{(\lambda_0 \lambda_1)^{1/2}}{\pi} \left[\frac{3}{4\lambda_1^2} + \frac{\hbar^2}{4\mu^2 a^2} - \frac{\hbar}{2\mu a \lambda_1} \right]^{-1} \tag{III.91}$$

e as integrais, ao serem avaliadas dentro desta aproximação fornecem:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 y^2 \rho \, dx \, dy &= \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}} \left\{ \frac{15}{16\lambda_0 \lambda_1^3} + \right. \\
&\left. + \frac{\hbar^2}{16\mu^2 a^2 \lambda_1 \lambda_0} - \frac{3\hbar}{8\mu a \lambda_0 \lambda_1^2} \right\}
\end{aligned} \tag{III.92}$$

e:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho \, dx \, dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}} \left\{ \frac{9}{16 \lambda_1^2 \lambda_0^2} + \frac{3 \hbar^2}{16 \mu a^2 \lambda_0^2} - \frac{3 \hbar}{8 \mu a \lambda_1 \lambda_0^2} \right\}, \quad (\text{III.93})$$

sendo que as duas últimas são:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \rho \, dx \, dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}} \left\{ \frac{105}{16 \lambda_1^4} + \frac{3 \hbar^2}{16 \mu^2 a^2 \lambda_1^2} + \frac{15 \hbar}{8 \mu a \lambda_1^3} \right\} \quad (\text{III.94})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{yx^2}{x^2 - \hbar/2\mu a} \rho \, dx \, dy = \frac{|A|^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_0)^{1/2}} \left\{ \frac{15 \lambda_3}{16 \lambda_0 \lambda_1^3} - \frac{3 \hbar \lambda_3}{8 \mu a \lambda_0 \lambda_1^2} \right\} \quad (\text{III.95})$$

Para o estado $n_x = 0$ e $n_y = 2$ as aproximações para v_{ix} e v_{iy} são:

$$v_{ix} = ax + 2b_3 xy \quad (\text{III.96})$$

$$v_{iy} = b_0 y + b_2 y^2 + b_3 x^2 + b_4 - \frac{2 \hbar}{\mu (y^2 - \hbar/2\mu b_0)}$$

Agora, a energia do estado é dada por:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{02} &= \frac{\hbar}{2} (a + b_0) + 2 \hbar b_0 - \frac{1}{2} \mu b_4^2 - (2 \mu b_3^2 + \mu b_2 b_3) \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 y^2 \rho \, dx \, dy - \frac{1}{2} \mu b_2^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho \, dx \, dy - \frac{1}{2} \mu b_3^2 \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \rho \, dx \, dy + 2 \hbar b_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y^3}{y^2 - \hbar/2\mu b_0} \rho \, dx \, dy + \\ &+ 2 \hbar b_3 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{yx^2}{y^2 - \hbar/2\mu b_0} \rho \, dx \, dy + \end{aligned}$$

$$+ 2 \hbar b_4 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{Y}{y^2 - \hbar/2\mu b_0} \rho \, dx \, dy \quad (\text{III.97})$$

e a função de onda aproximada para o estado é:

$$\psi(x,y) = A(y^2 - \hbar/2\mu b_0) \exp \left\{ -\frac{\lambda_1 x^2}{2} - \frac{\lambda_0 y^2}{2} + \frac{\lambda_3 xy^2}{2} + \frac{\lambda_2 y^3}{2} + \frac{\lambda_4 y}{2} \right\} \quad (\text{III.98})$$

que após normalizada é empregada para avaliar as integrais na equação (III.97), da mesma maneira que o caso anterior. Os resultados obtidos para o sistema de Henon-Heiles foram utilizados para o caso em que $\alpha = 1$, $\mu = 1$ e $\omega = 1$ e também $\hbar\omega = 1,25 \times 10^{-2}$, e estão apresentados na tabela VII. Os valores que não estão assinalados por asterisco foram calculados desprezando-se a contribuição das integrais, o que explica as diferenças percentuais maiores em relação aos valores achados na literatura^[48]. Note-se também, o aumento das diferenças percentuais para estados excitados mais elevados, o que nos impede a concluir que para energias mais elevadas o comportamento do sistema afasta-se mais do de um oscilador harmônico, levando-nos a buscar mais e mais termos nas séries obtidas a partir das integrais nas expressões para a energia; além disso, a medida que a energia se aproxima da energia de dissociação, nossas aproximações para estados excitados perde sua validade.

Para o sistema de Henon-Heiles mostramos nos gráficos III.8A e III.8B as linhas de nível para $v_{ix} = \text{constante}$ e $v_{iy} = \text{constante}$, respectivamente (para o estado fundamental). Note-se a alteração destas linhas em relação ao caso de Barbanis e em relação ao caso $\alpha = 0$ (que corresponde a linhas paralelas aos eixos

\hat{y} e \hat{x} respectivamente). No gráfico III.9) apresenta-se as linhas de nível correspondentes a $\psi = \text{constante}$, onde devemos notar que o fato de as linhas não serem sempre curvas fechadas significa na realidade a possibilidade de dissociação da molécula (o mesmo deve ser dito para o caso de Barbanis).

TABELA I - ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DO SISTEMA DE BARBANIS
"ISOTRÓPICO" PARA ALGUNS VALORES DO PARÂMETRO DE ACO-
PLAMENTO.

PARÂMETROS: $h\omega = 1,25 \times 10^{-3}$, $\omega = (0,1)^{1/2}$, $\mu = 1$.

α	$\langle E \rangle_{\infty} (x 10^{-3})$
0,01	1,24995
0,02	1,24979
0,03	1,24959
0,05	1,24887
0,07	1,24743
0,08	1,24664
0,09	1,24575
0,10	1,24473
0,15	1,23802
0,20	1,22833
0,30	1,19880
0,40	1,15264
0,50	1,08433
0,60	0,98570
0,70	0,84470
0,80	0,64306

GRÁFICO III.1 - VARIACÃO DE $\Delta E = E_{00} - \langle E \rangle_{00}$ COM O PARÂMETRO DE ACOPLAMENTO α PARA O SISTEMA DE BARBANIS "ISOTRÓPICO".

PARÂMETROS: $h\omega = 1,25 \times 10^{-3}$

$\omega = (0,1)^{1/2}$, $\mu = 1$.

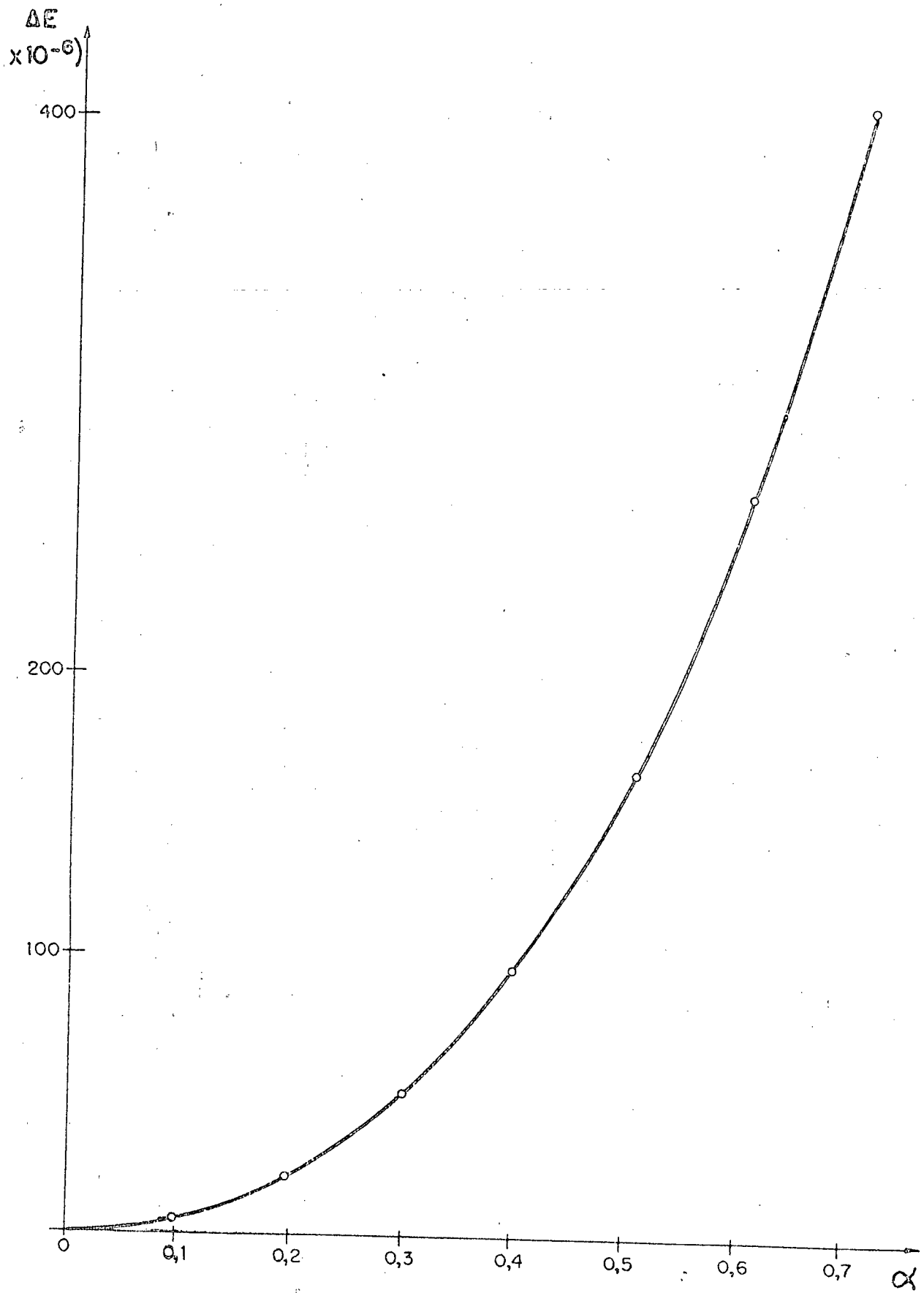


TABELA II - ENERGIA DE ALGUNS ESTADOS PARA O SISTEMA DE BARBANIS
"ISOTRÓPICO".

PARÂMETROS: $h\omega = 1,25 \times 10^{-3}$, $\omega = (0,1)^{1/2}$, $\mu = 1$,
 $\alpha = 0,1$.

$\langle E \rangle$: VALORES DA ENERGIA EM PRIMEIRA APROXIMAÇÃO
(DESPREZANDO-SE AS INTEGRAIS NAS EXPRESSÕES
CORRESPONDENTES A ΔE).

$\langle E \rangle^*$: VALORES DA ENERGIA AVALIANDO-SE APROXIMADAMEN-
TE AS INTEGRAIS.

$\langle E \rangle_{Lit}$: VALORES DA ENERGIA ENCONTRADOS NA REFERÊN-
CIA [48].

$n_x \ n_y$	$\langle E \rangle \ (x \ 10^{-3})$	$\langle E \rangle^* \ (x \ 10^{-3})$	$\langle E \rangle_{Lit} \ (x \ 10^{-3})$
00	1,24826	1,24474	1,2467
01	2,49652	2,48189	2,4779
10	2,49826	2,48266	2,4912
02	3,74478		3,6891
11	3,74652	3,68320	3,7100
20	3,74826		3,7420
03	4,99304		4,8830
12	4,99478		4,9030
21	4,99652		4,9580
30	4,99826		4,9910
04	6,24129		6,0570
13	6,24304		6,0740
22	6,24478		6,1450
31	6,24652		6,2020
40	6,24826		6,2420

TABELA III - ENERGIA DE ALGUNS ESTADOS PARA O SISTEMA DE BARBA -
NIS "ISOTRÓPICO".

PARÂMETROS: $h\omega = 1 \times 10^{-3}$, $\alpha = 1/9$,

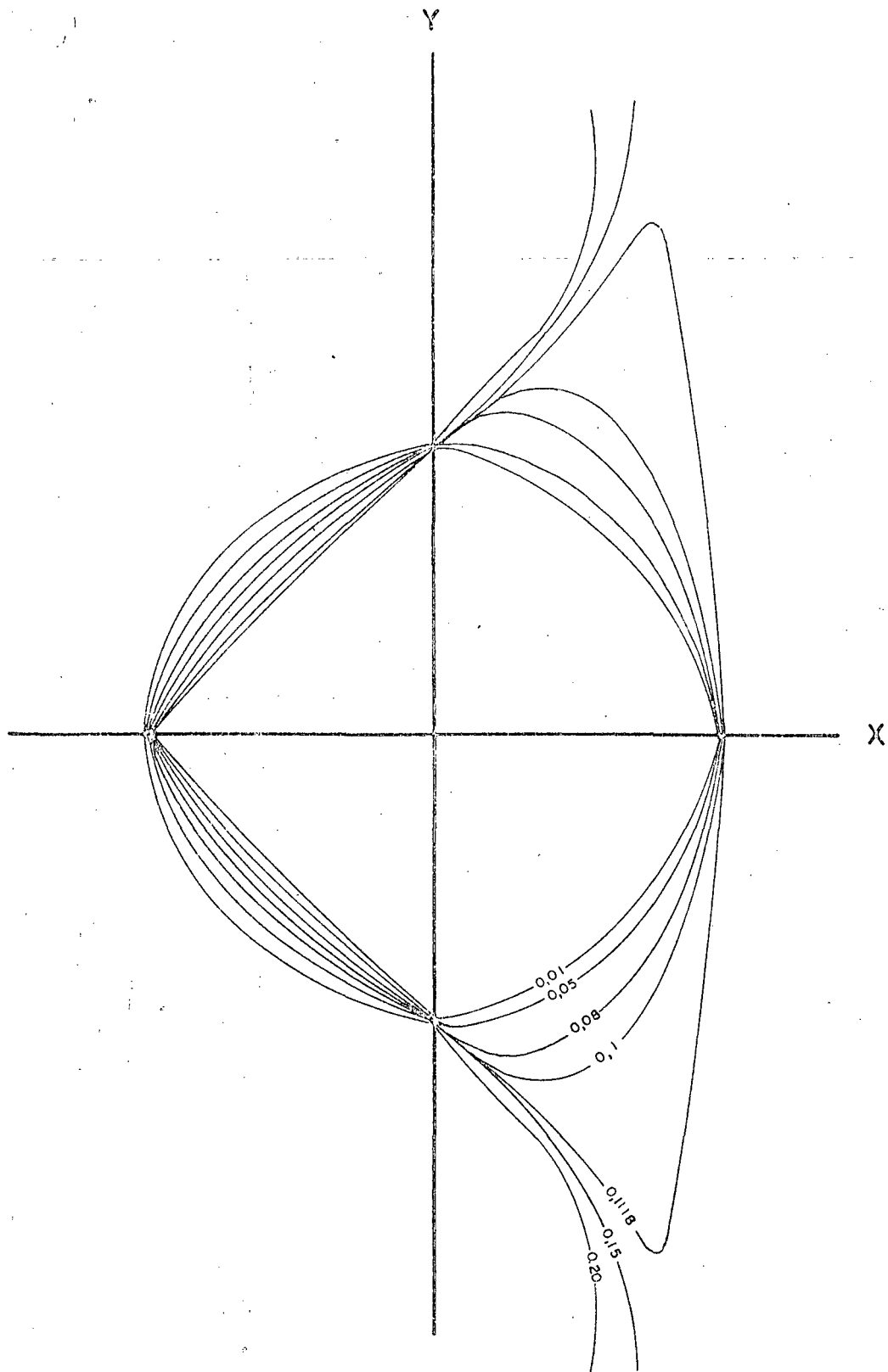
<E> : VALORES DA ENERGIA EM PRIMEIRA APROXIMAÇÃO
(DESPREZANDO-SE AS INTEGRAIS NAS EXPRESSÕES
CORRESPONDENTES A ΔE).

<E>* : VALORES DA ENERGIA AVALIANDO-SE APROXIMADAMEN-
TE AS INTEGRAIS.

<E>_{Lit} : VALORES DA ENERGIA ENCONTRADOS NA REFERÊN-
CIA [48].

$n_x n_y$	$\langle E \rangle (x 10^{-3})$	$\langle E \rangle^* (x 10^{-3})$	$\langle E \rangle_{Lit} (x 10^{-3})$
00	0,99964	0,99892	0,9970
01	1,99928	1,99626	1,9830
10	1,99964	1,99698	1,9930
02	2,99892		2,9520
11	2,99928	2,98504	2,9620
20	2,99964		2,9930
03	3,99856		3,9080
12	3,99892		3,9240
21	3,99928		3,9670
30	3,99964		3,9930
04	4,99820		4,8470
13	4,99856		4,8610
22	4,99892		4,9170
31	4,99928		4,9620
40	4,99964		4,9930

GRÁFICO III.2 - LINHAS DE NÍVEL PARA O POTENCIAL DE BARBANIS "ISO
TRÓPICO" PARA DIFERENTES VALORES DE .
PARÂMETROS: $\omega = (0,1)^{1/2}$, $\mu = 1$.



GRÁFICOS III.3A e III.3B - LINHAS DE NÍVEL PARA AS DUAS COMPONENTES DE \vec{v}_1 PARA O SISTEMA DE BARBANIS NO ESTADO FUNDAMENTAL.

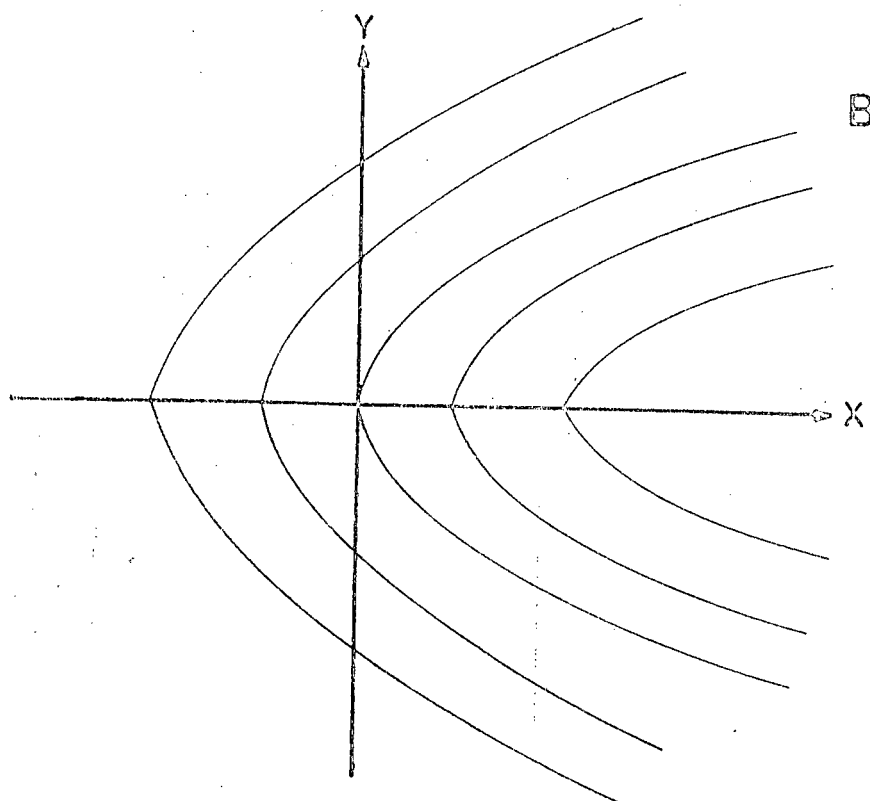
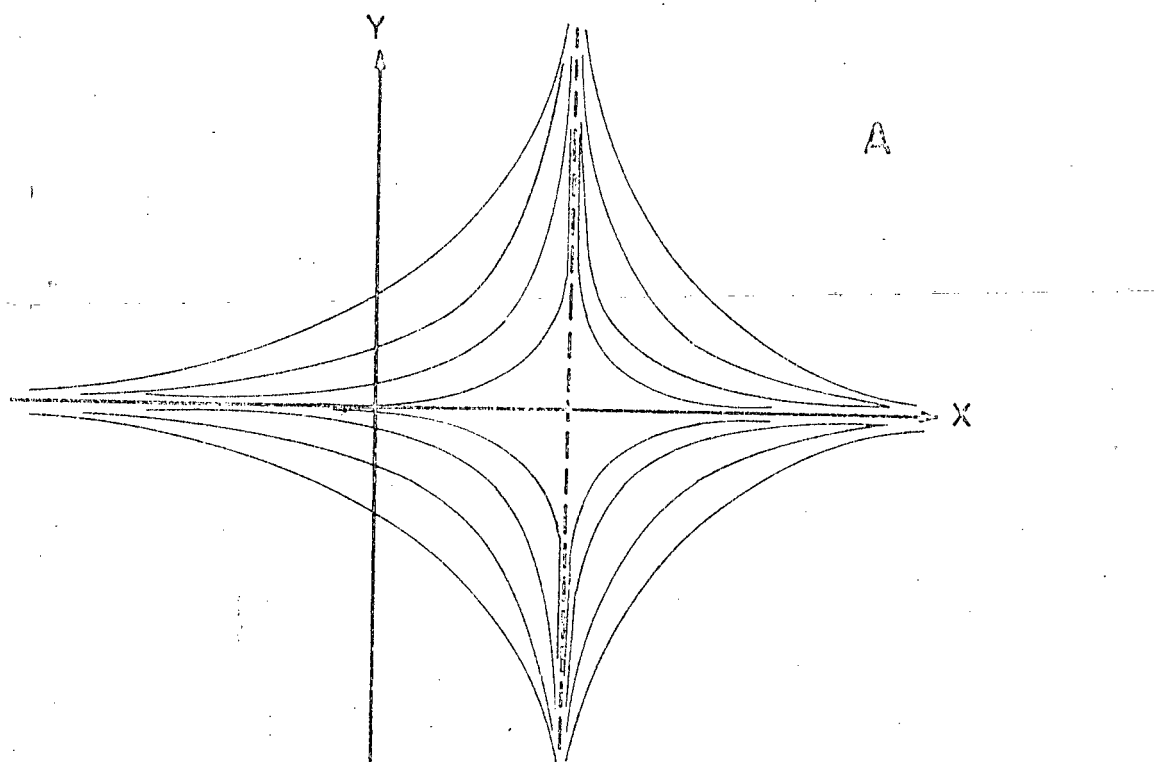


GRÁFICO III.4 - LINHAS DE NÍVEL DA FUNÇÃO DE ONDA DO SISTEMA DE BARBANIS "ISOTRÓPICO" NO ESTADO FUNDAMENTAL.

PARÂMETROS: $\alpha = 0,05$, $\lambda_1 = 80,000$

$\lambda_2 = 79,972$, $\lambda_3 = 26,673$

$\lambda_4 = 0,333$

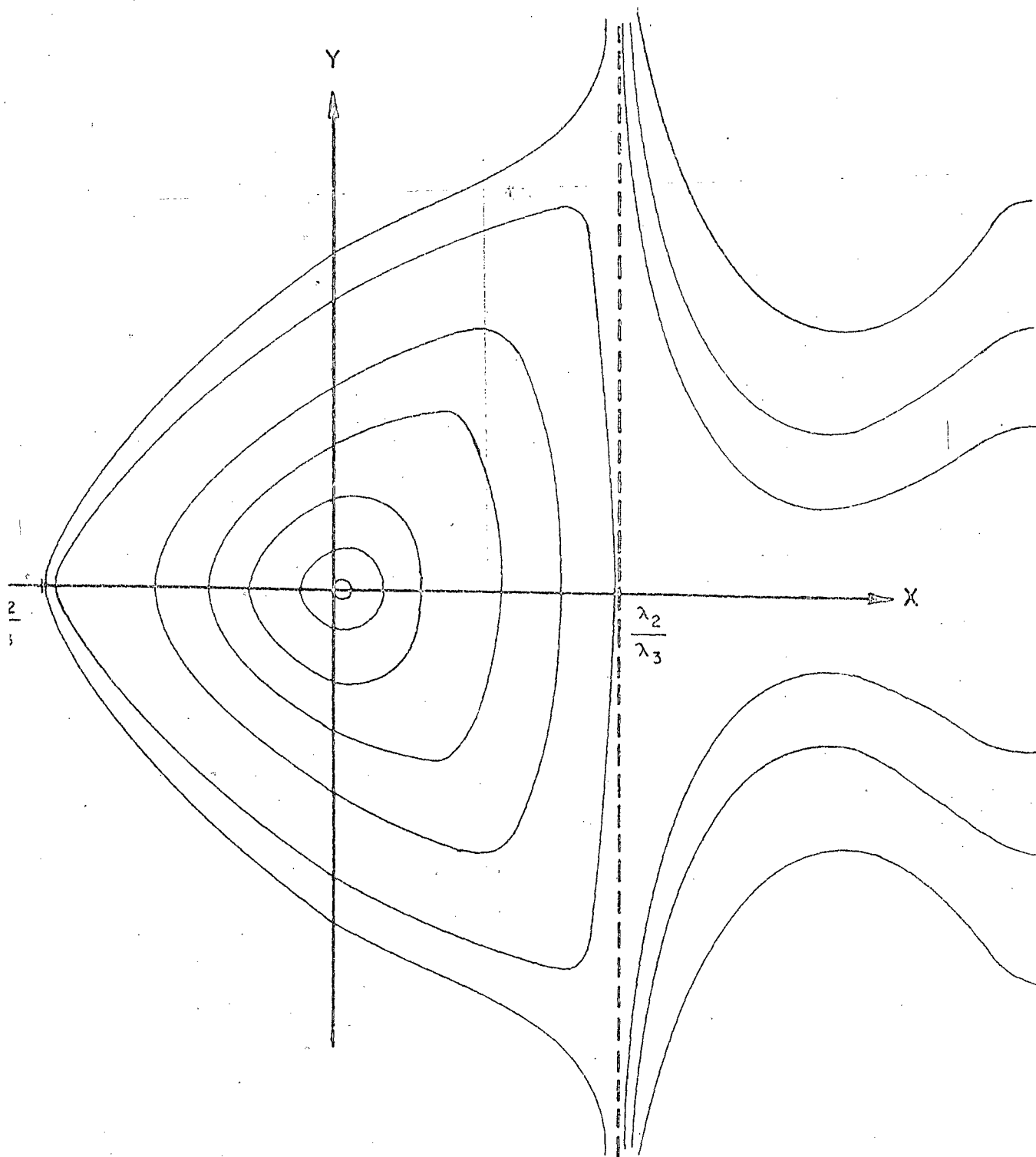


TABELA IV - ENERGIA DE ALGUNS ESTADOS PARA O SISTEMA DE BARBANIS
"ANISOTRÓPICO".

$$\text{PARÂMETROS: } h\omega_1 = 1 \times 10^{-3}, \quad \omega_1 = (0,1)^{1/2}$$

$$\omega_2 = 0,81 \omega_1, \quad \mu = 1, \quad \alpha = 0,1$$

<E> : VALORES DA ENERGIA EM PRIMEIRA APROXIMAÇÃO (DES-
PREZANDO-SE AS INTEGRAIS NAS EXPRESSÕES CORRES-
PONDENTES A ΔE).

<E>*: VALORES DA ENERGIA AVALIANDO-SE APROXIMADAMEN-
TE AS INTEGRAIS.

<E>_{Lit}: VALORES DA ENERGIA ENCONTRADOS NA REFERÊN-
CIA [48].

$n_x n_y$	$\langle E \rangle$ ($\times 10^{-3}$)	$\langle E \rangle^*$ ($\times 10^{-3}$)	$\langle E \rangle_{\text{Lit}}$ ($\times 10^{-3}$)
00	0,90336	0,89905	0,9020
01	1,71155	1,69620	1,7080
10	1,90336	1,89000	1,8840
02	2,51973		2,5130
11	2,71155	2,63529	2,6810
20	2,90336		2,8510
03	3,32792		3,3180
12	3,51973		3,4770
21	3,71155		3,6400
30	3,90336		3,8040
04	4,13611		4,1220
13	4,32792		4,2700
22	4,51973		4,4240
31	4,71155		4,5840
40	4,90336		4,7410
05	4,94430		4,9260

TABELA V - ENERGIA DE ALGUNS ESTADOS PARA O SISTEMA DE BARBANIS
"ANISOTRÓPICO".

PARÂMETROS: $\mu = h = 1$, $\omega_1 = (1,6)^{1/2}$, $\omega_2 = (0,9)^{1/2}$,
 $\alpha = 0,08$

<E> : VALORES DA ENERGIA EM PRIMEIRA APROXIMAÇÃO (DES-
PREZANDO-SE AS INTEGRAIS NAS EXPRESSÕES CORRES-
PONDENTES A ΔE).

<E>* : VALORES DA ENERGIA AVALIANDO-SE APROXIMADAMENTE
AS INTEGRAIS.

<E>_{Lit} : VALORES DA ENERGIA ENCONTRADOS NA REFERÊN-
CIA [53].

$n_x n_y$	$\langle E \rangle$	$\langle E \rangle^*$	$\langle E \rangle_{\text{Lit}}$
00	1,10633	1,10491	1,10578
01	2,05448	2,04993	2,03496
10	2,37124	2,36724	2,36715
02	3,00263		2,84546
11	3,31939	3,29918	3,28561
20	3,63615		3,44380
03	3,95077		3,63367
12	4,26753		4,16749
21	4,58430		4,27493
30	4,90106		4,57727
04	4,89892		4,89987
13	5,21568		5,13373
22	5,53245		5,24831
31	5,84921		5,51634
05	5,84707		5,85186
40	6,16597		6,08337

GRÁFICO III.5 - VARIACÃO DE $\Delta E = E_{00} - \langle E \rangle_{00}$ COM O AUMENTO DA ANISOTROPIA PARA O SISTEMA DE BARBANIS "ANISOTRÓPICO".

PARÂMETROS: $\mu = h = 1$, $\omega_1 = (1,6)^{1/2}$, $\alpha = 0,08$:

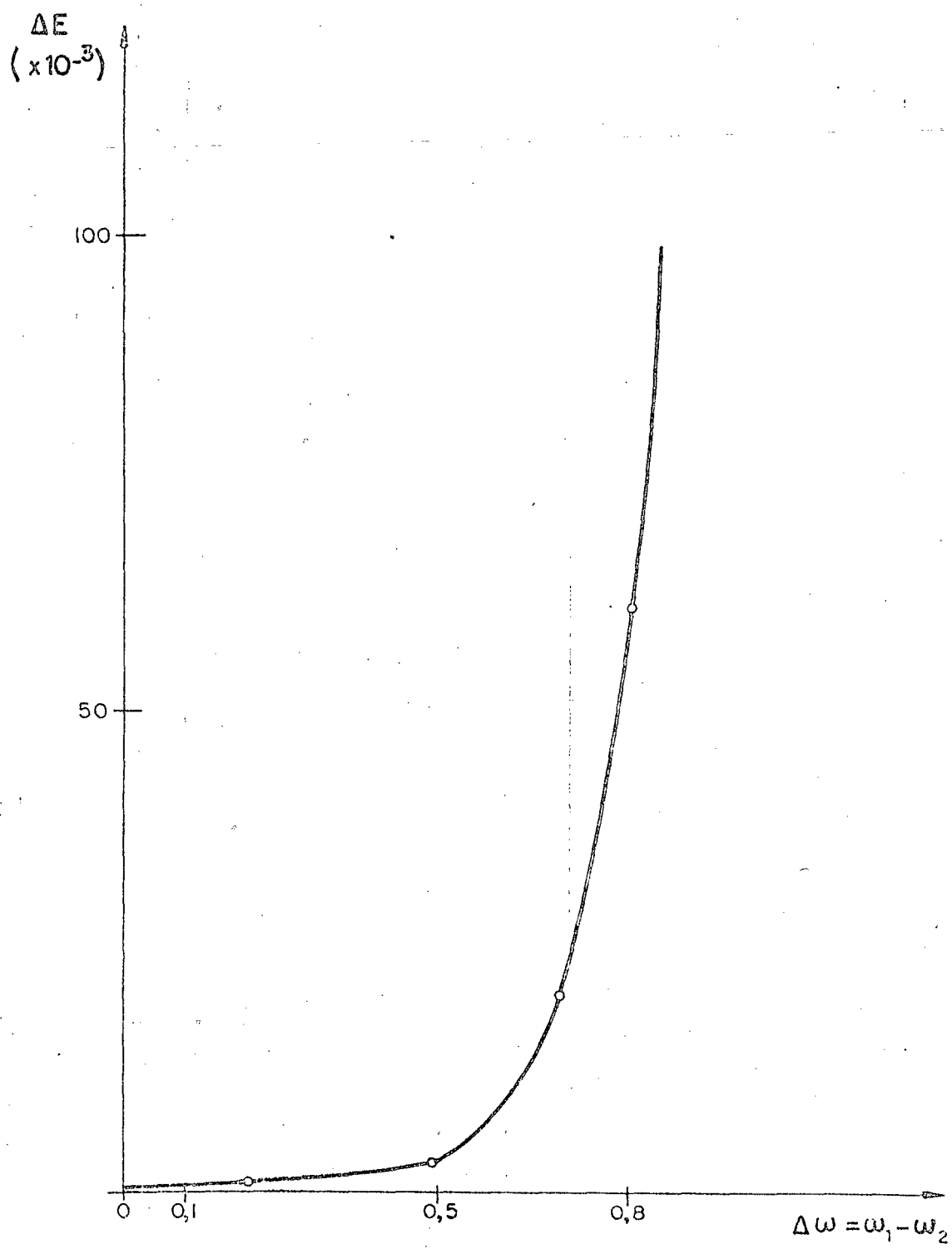


GRÁFICO III.6 - EQUIPOTENCIAIS PARA O SISTEMA DE BARBANIS "ANISO-
TRÓPICO" COMO FUNÇÃO DE $\Delta\omega$. ($\Delta\omega = \omega_1 - \omega_2$)
PARÂMETROS: $\omega_1 = (1,6)^{1/2}$, $\alpha = 0,08$,
 $\mu = 1$

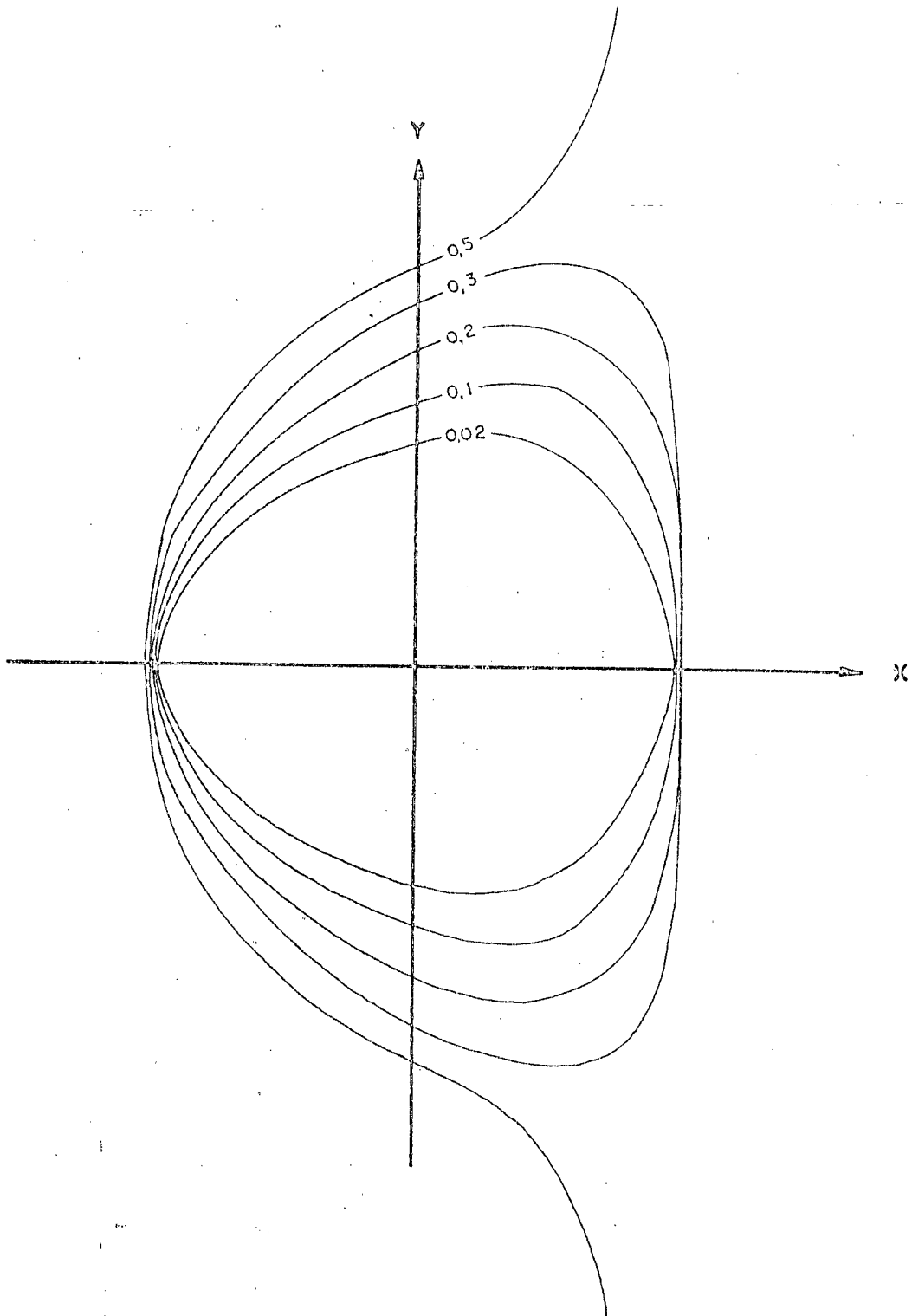


TABELA VI - ENERGIA DE ALGUNS ESTADOS PARA O OSCILADOR HARMÔNICO TRIDIMENSIONAL ACOPLADO.

PARÂMETROS: $h\omega = 1 \times 10^{-3}$, $\mu = 1$, $\omega = (0,1)^{1/2}$,
 $\alpha = 0,1$.

$\langle E \rangle$: VALORES DA ENERGIA EM PRIMEIRA APROXIMAÇÃO (DES-
PREZANDO-SE AS INTEGRAIS NAS EXPRESSÕES CORRES-
PONDENTES A ΔE).

$\langle E \rangle^*$: VALORES DA ENERGIA AVALIANDO-SE APROXIMADAMEN-
TE AS INTEGRAIS.

$\langle E \rangle_{\text{Lit}}$: VALORES DA ENERGIA ENCONTRADOS NA REFERÊN-
CIA [48].

n_x n_y n_z	$\langle E \rangle$ ($\times 10^{-3}$)	$\langle E \rangle_{\text{Lit}}$ ($\times 10^{-3}$)	$\langle E \rangle^*$ ($\times 10^{-3}$)
000	1,49460	1,495	1,49220
100	2,49166	2,487	
200	3,48869	3,457	
101	3,48926	3,480	
002	3,48983	3,489	
300	4,48573	4,429	
201	4,48629	4,454	
102	4,48686	4,481	
400	5,48276	5,371	
301	5,48332	5,413	
202	5,48389	5,427	
310	5,48573	5,474	
211	5,48629	5,481	

GRÁFICO III.7 - VARIACÃO DE $\Delta E = E_{00} - \langle E \rangle_{00}$ COM O AUMENTO DO PARÂMETRO DE ACOPLAMENTO, PARA O SISTEMA DE HENON-HEILES.

PARÂMETROS: $h\omega = 1,25 \times 10^{-2}$, $\omega = \mu = 1$

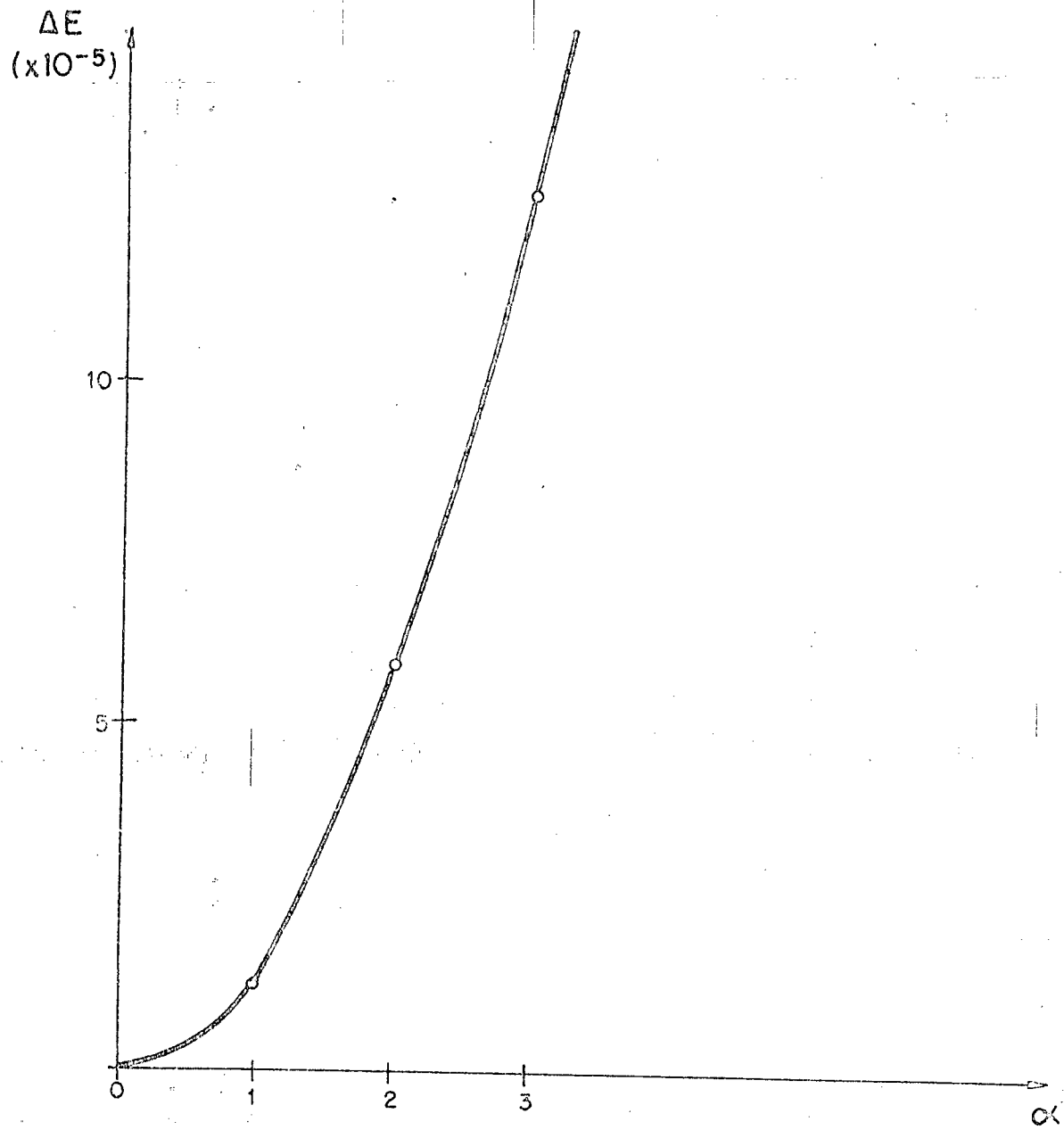


TABELA VII - ENERGIA DE ALGUNS ESTADOS PARA O SISTEMA DE HENON-
-HEILES.

PARÂMETROS: $h\omega = 1,25 \times 10^{-2}$, $\mu = \omega = 1$, $\alpha = 1$.

$\langle E \rangle$: VALORES DA ENERGIA EM PRIMEIRA APROXIMAÇÃO
(DESPREZANDO-SE AS INTEGRAIS NAS EXPRESSÕES
CORRESPONDENTES A ΔE).

$\langle E \rangle^*$: VALORES DA ENERGIA AVALIANDO-SE APROXIMADAMEN
TE AS INTEGRAIS.

$\langle E \rangle_{Lit}$: VALORES DA ENERGIA ENCONTRADOS NA REFERÊN-
CIA [48].

$n_x n_y$	$\langle E \rangle (x 10^{-2})$	$\langle E \rangle^* (x 10^{-2})$	$\langle E \rangle_{Lit} (x 10^{-2})$
00	1,24929	1,24873	1,248
01	2,49837	2,49140	2,488
10	2,49929	2,49829	2,488
02	3,74745	3,74374	3,695
11	3,74837	3,74382	3,732
20	3,74929	3,74445	3,732
03	4,99652		4,907
12	4,99745		4,907
21	4,99837		4,978
30	4,99929		4,982
04	6,24560		6,088
13	6,24652		6,123
22	6,24745		6,133
31	6,24837		6,233
40	6,24929		6,233
05	7,49468		7,272
14	7,49560		7,272
23	7,49652		7,335

GRÁFICOS III.8A E III.8B - LINHAS DE NÍVEL PARA AS COMPONENTES
DE \vec{v}_1 PARA O SISTEMA DE HENON-HEILES
NO ESTADO FUNDAMENTAL.

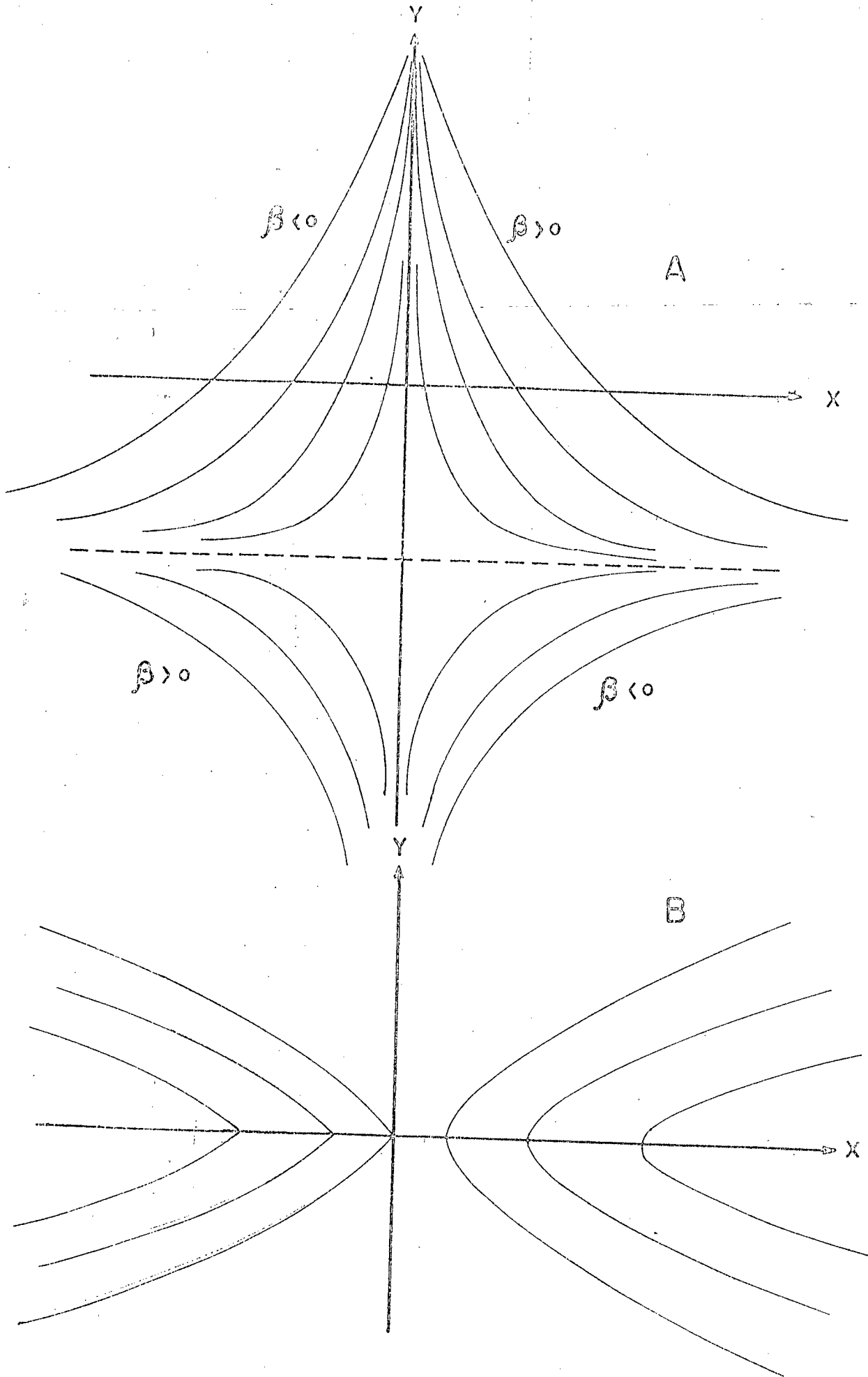


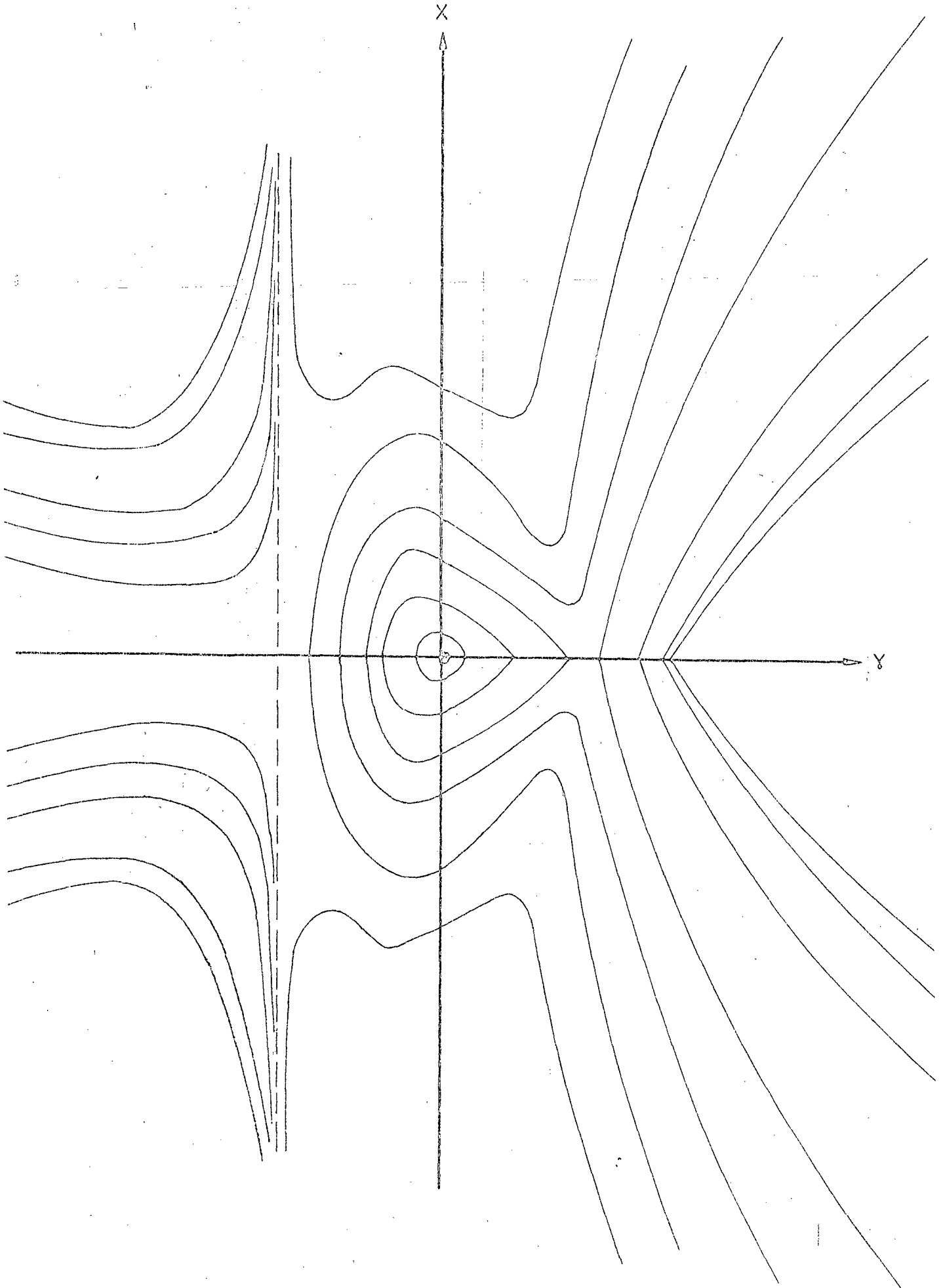
GRÁFICO III.9 - LINHAS DE NÍVEL DA FUNÇÃO DE ONDA PARA O ESTADO FUNDAMENTAL DO SISTEMA DE HENON-HEILES.

PARÂMETROS: $h\omega = 1,25 \times 10^{-2}$, $\alpha = 1$, $\omega = \mu = 1$

$$\lambda_1 = 80,030 \text{ , } \lambda_0 = 79,941 \text{ ,}$$

$$\lambda_2 = 17,910 \text{ , } \lambda_3 = - 25,136 \text{ ,}$$

$$\lambda_4 = 0,3532$$



CAPÍTULO IV.

COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES

A formulação hidrodinâmica da mecânica quântica não relativística apresentada neste trabalho, reforça a possibilidade de mais de uma abordagem do formalismo de Schrödinger, o que gera caminhos alternativos para a solução de sistemas quânticos. A descrição de sistemas quânticos a partir de equações de movimento análogas ao caso clássico foi feita com a introdução de dois parâmetros (t, t_1) , que na situação clássica transformam-se no parâmetro "tempo". Com estes parâmetros generalizou-se o princípio de Hamilton a partir do qual foram obtidas as mesmas equações de movimento, deduzidas a partir da equação de Schrödinger. As equações de movimento mantêm a forma " $\vec{F} = m\vec{a}$ ", e descrevem tanto sistemas clássicos como sistemas quânticos. A aplicação do formalismo hidrodinâmico a diversos problemas quânticos, com resultados equivalentes aos obtidos a partir do procedimento usual, reforça o aspecto já salientado por diversos autores^[25,26], da possibilidade de uma reinterpretação do formalismo de Schrödinger.

Fez-se uma tentativa (não apresentada neste trabalho) de generalizar as equações de movimento obtidas para o caso relativístico, onde partiu-se do fato de que as equações de movimento obtidas quando a função de onda tem parte espacial real ($v=0$) são invariantes frente uma transformação análoga à de Newton-Galileu envolvendo as variáveis x, v_i, t_1 mas não são invariantes frente uma transformação análoga à de Lorentz envolvendo as mesmas variáveis. Assim procurou-se uma matriz de transformação

mais geral envolvendo as variáveis x, v, v_i, t, t_i , que fornece transformações análogas à de Lorentz quando $v_i = 0$ ou $v = 0$. Generalizamos a definição de momentum dada na equação I.1 para o caso relativístico de sorte que as equações de movimento fossem invariantes frente a transformações análogas à de Lorentz. A aplicação (desta tentativa de se generalizar o formalismo hidrodinâmico ao caso relativístico) para o átomo de hidrogênio forneceu para a energia do estado fundamental o valor $-2,662.531 \times 10^{-5} \text{uc}^2$, resultado duas vezes mais preciso que o dado pela equação de Klein-Gordon. Esta aplicação ao átomo de hidrogênio aponta para a possibilidade de a mecânica quântica relativística poder ser descrita também, pelo formalismo hidrodinâmico em questão. Deve ficar claro, no entanto, que o formalismo relativístico que foi desenvolvido é apenas uma tentativa, havendo diversos problemas a abordar neste contexto, entre os quais os pertinentes a uma transformação análoga à de Lorentz para um espaço de cinco dimensões.

O formalismo hidrodinâmico foi utilizado, como aplicação, para a solução de sistemas moleculares descritos por potenciais anarmônicos bi e tridimensionais. Para a solução aproximada destes sistemas fez-se uso dos resultados exatos relativos ao oscilador harmônico bidimensional também aqui apresentado. Verificamos ademais que a aproximação adotada, dentro do formalismo hidrodinâmico, é semelhante ao uso de teoria de perturbação apresentada recentemente [54,55]. A idéia central em que está baseada a aproximação realizada, está ligado ao fato, verificado neste trabalho, de que para o oscilador harmônico bidimensional "isotrópico" o campo vetorial definido por \vec{v}_i , para o estado fundamental, é ortogonal as linhas equipotenciais e para o oscilador harmônico bi

dimensional "anisotrópico" o campo vetorial definido por \vec{v}_1 para o estado fundamental será tanto mais aproximadamente ortogonal às equipotenciais quanto menor for a diferença entre as frequências de oscilação segundo \hat{x} e \hat{y} .

Assim sendo, começamos por tratar inicialmente o potencial de Barbanis "isotrópico" considerando-o como um oscilador harmônico com uma perturbação no potencial, para pequenos valores do parâmetro de acoplamento α . No gráfico III.2 mostramos como as equipotenciais para este potencial deformam-se em relação ao caso ideal ($\alpha = 0$) cujas linhas consistem em circunferências no plano xy . Desta forma investigou-se inicialmente a validade das soluções propostas com relação a um aumento no valor do parâmetro de acoplamento α . Os resultados obtidos, apresentados na tabela I e gráfico III.1, mostram que as soluções tem estabilidade para $\alpha < 0,20$ (quando usamos $\omega = (0,1)^{1/2}$ e $\hbar\omega = 1,25 \times 10^{-3}$); para valores maiores de α os resultados mostraram que não é adequado usar a aproximação feita o que está relacionado ao fato de que as equipotenciais para valores de $\alpha > 0,11$ serem bastante deformadas em relação ao caso ideal, $\alpha = 0$ (Ver gráfico III.2). Por outro lado isto corresponde também ao fato de que não devemos fazer uso da teoria de perturbação, no formalismo usual, para valores significativos de α . Foram obtidos alguns níveis de energia para este sistema e os resultados comparados com os apresentados na literatura obtidos através do cálculo variacional ou de métodos semiclassicos, estando em concordância com os valores dados na literatura^[48,53]. São também apresentadas as linhas de nível para a função de onda (do estado fundamental) deste sistema; o fato de estas linhas não serem sempre curvas fechadas é por nós relacionado ao fato de que existe possibilidade de haver disso -

ciação da molécula quando a separação entre seus constituintes é grande (note-se que, classicamente, observamos uma energia de dissociação correspondente ao ponto sela do potencial). Devemos salientar também que nossos resultados, para estados excitados, apresentam diferenças percentuais maiores em relação aos dados na literatura, a medida que a energia do estado se aproxima do valor da energia de dissociação clássica. Isto demonstra que para estados excitados mais elevados o sistema afasta-se cada vez mais do de um oscilador harmônico invalidando portanto as aproximações utilizadas para \vec{v}_i destes estados.

Para o sistema de Barbanis "anisotrópico" foi investigada a validade da aproximação que levou às soluções com o aumento da anisotropia do sistema. Neste caso verificou-se que as soluções tem estabilidade para sistemas em que a anisotropia não é muito acentuada. Analisamos o caso correspondente a $\alpha = 0,03$, $\mu = \hbar = 1$ e $\omega_1 = (1,6)^{1/2}$ sendo que os resultados são satisfatórios para $\Delta\omega < 0,5$. Nas tabelas IV e V mostramos a energia de alguns estados para este sistema, onde podemos notar um espectro irregular e o fato de que as diferenças percentuais (em relação aos valores da literatura) aumentam para estados excitados mais elevados.

Outro sistema investigado foi o oscilador anarmônico tridimensional acoplado, onde obteve-se alguns níveis de energia e comparou-se os resultados com os da literatura. Aqui constatamos a validade de nosso procedimento quando generalizado para o caso tridimensional, ressaltando-se porém o fato de que neste caso, a obtenção de alguns níveis de energia envolve um cálculo mais laborioso, de sorte que apresentamos os resultados em primeira aproximação (desprezando-se as integrais nas expressões pa

ra a energia de cada estado). Devido ao duplo acoplamento apresentado pelo sistema em questão verificamos que as séries obtidas das integrais nas expressões para a energia convergem mais lentamente que o caso do potencial de Barbanis, o que resulta em termos que tomar um maior número de termos para a obtenção de resultados satisfatórios. (Veja-se o cálculo da energia do estado fundamental para este sistema).

O último sistema analisado foi o hamiltoniano de Henon-Heiles, que apresenta uma anarmonicidade maior do que o sistema de Barbanis. Devido a este fato começamos por investigar a estabilidade das soluções obtidas para diversos valores de α . E, como era de se esperar, devido a maior anarmonicidade do sistema, verificamos que nosso procedimento é válido para uma faixa menor de valores de α . Além disto, a obtenção dos níveis de energia exige um maior número de cálculos do que os realizados para o sistema de Barbanis, e o fato de obtermos diferenças percentuais maiores (em relação aos do de Barbanis) indica que a aproximação utilizada tem aplicabilidade restrita a sistemas nos quais a anarmonicidade não seja muito acentuada.

Observando-se a tabela VII, que fornece a energia de alguns estados para o sistema de Henon-Heiles, podemos notar que para estados excitados mais elevados as diferenças percentuais entre os valores encontrados e os dados na literatura, são maiores que as do sistema de Barbanis. Isto indica que o sistema de Henon-Heiles, para estados com energias que se aproximam da energia de dissociação, afasta-se mais do comportamento de um oscilador harmônico do que o sistema de Barbanis, fato que acarreta maior complexidade para obtenção da energia daqueles estados. Para este sistema as linhas de nível para a função de onda, do es-

tado fundamental, (gráfico III.11) também mostraram a possibilidade de dissociação, de uma molécula, descrita pelo hamiltoniano de Henon-Heiles.

Os resultados obtidos para os sistemas considerados mostraram que a adição de uma perturbação no potencial do oscilador harmônico, conduz a um espectro irregular dos níveis de energia (bem como a uma energia de dissociação correspondente ao ponto sela do potencial), o que induziu a se adotar estes modelos como potenciais que tentam descrever interações moleculares. Por outro lado, os resultados obtidos em primeira aproximação (desprezando-se as integrais nas expressões para a energia de cada estado) nos leva a um espectro regular, sendo o efeito do acoplamento o de reduzir o nível de cada estado quando comparado com o caso ideal ($\alpha = 0$). Além disto, para o potencial de Barbanis "isotrópico", o oscilador anarmônico tridimensional ou o sistema de Henon-Heiles, para os quais temos sistemas degenerados para $\alpha = 0$, apesar do espectro regular em primeira aproximação, comportam-se, para α diferente de zero, como sistemas não degenerados.

Finalmente podemos salientar agora que a obtenção de alguns níveis de energia para estes sistemas, com valores próximos aos apresentados na literatura, obtidos através de outros métodos, corrobora o fato de que o uso do formalismo hidrodinâmico leva a resultados análogos e pode ser aplicado a determinados sistemas quânticos, em muitas instâncias, com um maior grau de facilidade do que o procedimento usual. Podemos esperar também a aplicação deste formalismo para outros sistemas, como o caso de três bósons interagindo dois a dois através de potenciais tipo Morse ou Lenard-Jones, para tanto deve-se desenvolver, dentro do formalismo hidrodinâmico, o análogo ao cálculo variacional do formalismo usual.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] SCHRÖDINGER, E. Ann. Phys. (Leipz) 6(23), 1926.
- [2] HEISENBERG, W. The Physical principles of the Quantum Theory. Chicago, University of Chicago Press, 1930.
- [3] BOHR, N. Atomic Theory and the Description of Nature. Cambridge University Press, 1934.
- [4] BORN, M. Z. Phys. 38(803), 1926.
- [5] De BROGLIE, L. An Introduction to the Study of Wave Mechanics, New York, E.P. Dutton and Company Inc., 1930.
- [6] PAULI, W. Z. Phys. 31(373), 1925.
- [7] BASTIN, Ted. Quantum theory and Beyond. Cambridge University Press, 1971.
- [8] BOHM, D. A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden" Variables. I. Physical Review, 85 (166), 1952.
- [9] MADELUNG, E. Z. Phys. ³³²40(322), 1926.
- [10] ROSEN, N. J. Elischa Mitchel Sci. Soc., 61 nºs 1 e 2, 1945.
- [11] BOHM, D. A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in terms of "Hidden" Variables. II Physical Review, 85 (180), 1952.
- [12] BOHM, D. Proof That Probability Density Approaches $|\psi|^2$ in Causal Interpretation of the Quantum Theory. Physical Review, 89(458), 1953.
- [13] TAKABAYASI, T. On the Formulation of Quantum Mechanics associated with Classical Pictures. Progress of Theoretical Physics, 8(143), 1952.
- [14] TAKABAYASI, T. Remarks on the Formulation of Quantum Mechanics With Classical Pictures and on Relations between. Linear Scalar Fields and Hydrodynamical Fields. Progress of Theoretical Physics, 9(187), 1953.
- [15] EPSTEIN, Saul T. The Causal Interpretation of Quantum Mechanics. Physical Review, 91(985), 1953.

- [16] ROSEN, N. Identical Motion in Quantum and Classical Mechanics. Amer. J. Phys., 32(377), 1964.
- [17] BERKOWITZ, D.B. & SKIFF, P.D. Potential Energies of Identical Motion in Classical and Quantum Mechanics. Amer. J. Phys., 40(1625), 1972.
- [18] VIGIER, J.P. Superluminal Propagation of the Quantum Potential in the Causal Interpretation of Quantum Mechanics. Lettere Al Nuovo Cimento., 24(258), 1979.
- [19] VIGIER, J.P. Model of Quantum Statistics in Terms of a Fluid With Irregular Stochastic Fluctuations Propagating at the velocity of Light: a Derivation of Nelson's Equation. Lettere Al Nuovo Cimento., 24(265), 1979.
- [20] WONG, C.Y. On the Schrödinger Equation in Fluid Dynamical Form. Journal Math. Phys., 17(1008), 1976.
- [21] KAN, Kit-Keung & GRIFFIN, J. James Single - Particle Schrödinger Fluid. I Formulation. Physical Review C., 15(1126), 1977.
- [22] BIALYNICKI-BIRULA, I. & BIALYNICKA-BIRULA, Z. Magnetic Monopoles in the Hydrodynamic Formulation of Quantum Mechanics. Physical Review D, 3(2410), 1971.
- [23] BIALYNICKI-BIRULA, I. Relativistic Quantum Mechanics of Dyons. Exact Solution. Physical Review D, 3(2413), 1971.
- [24] DE LA PEÑA-AUERBACH, L. & GARCIA-COLIN, L.S. Possible Interpretation of Quantum Mechanics. Journal of Mathematical Physics, 9(916), 1968.
- [25] DE LA PEÑA-AUERBACH, L.; VELASCO, R.M. & CETTO, A.M. Some Comments on Stochastic Quantum Mechanics. Revista Mexicana de Física, 19(193), 1970.
- [26] HIRSCHFELDER, J.O.; CHRISTOPH, A.C. & PALKE, W.E. Quantum Mechanical Streamlines. I. Potencial Barreir. The Journal of Chemical Physics, 61(5435), 1974.
- [27] HIRSCHFELDER, J.O.; GOEBEL, C.J. & BRUCH, L.W. Quantum Vortices Around Wavefunction nodes. II. The Journal of Chemical Physics, 61(5456), 1974.

- [28] HIRSCHFELDER, J.O. & TANG, K.T. Quantum Mechanical Streamlines. III. Idealized Reactive atom-diatomic molecule collision. The Journal of Chemical Physics, 64(760), 1076.
- [29] HIRSCHFELDER, J.O. & TANG, K.T. Quantum mechanical Streamlines. IV. Collision of two spheres with square potential wells or barriers. The Journal of Chemical Physics. 65(470), 1976.
- [30] MERZBACHER, E. Quantum Mechanics. New York, John Wiley & Sons Inc., 1970.
- [31] SCHIFF, L.I. Quantum Mechanics. New York, McGraw-Hill Book Company, 1968.
- [32] LANDAU, L. Journal of Physics, 5(71), 1941.
- [33] LONDON, F. Planck's constant and low temperature Transfer. Reviews of Modern Physics, 17(310), 1945.
- [34] NELSON, E. Derivation of the Schrödinger equation on from Newtonian Mechanics. Physical Review, 150(1079), 1966.
- [35] KERSHAW, D. Theory of hidden variables. Physical Review, 136(1850), 1964.
- [36] SANTOS, E. A lagrangian formulation of the theory of Random Motion. IL Nuovo Cimento. Vol. LIXB, n.º. 1, (65), 1969.
- [37] GHIRARDI, G.C.; OMERO, C.; RIMINI, A. & WEBER, T. The Stochastic interpretation of Quantum Mechanics: A Critical Review. Revista del Nuovo Cimento. Vol. 1 (1), 1978.
- [38] LEMBRA, Y.Y. Izv. Vuz. Fiz. (USSR) 7(158), 1968.
- [39] NEWMAN, W.I. & THORSON, W. Phys. Rev. Lett. 29(1350), 1972.
- [40] NEWMAN, W.I. & THORSON, W. Com. J. Phys. 50(2997), 1972.
- [41] CABRAL, F. Aplicações da formulação hidrodinâmica da mecânica quântica. UFSC, 1979.
- [42] MACLAUGHLIN, D.W. Complex time, Contour Independent Path integrals, and Barrier Penetration. Journal of Mathematical Physics. 13(1099), 1972.
- [43] FEYNMANN, R.P. & HIBBS, A.R. Quantum Mechanics and Path integrals. New York, McGraw-Hill Book Company Inc., 1965.

- [44] CABRAL, F. & KUHNEN, C.A. Aplicações da formulação hidrodinâmica da mecânica quântica para estados ligados. Comunicação na 32^a SBPC. 1980.
- [45] CABRAL, F. Validade da equação $\vec{F} = m\vec{a}$ na mecânica quântica. UFSC, 1980.
- [46] GOLDSTEIN, H. Classical Mechanics. Addison-Wesley, Reading Mass., 1950.
- [47] TAKWALE, R.G. & PURANIK, P.S. Introduction to Classical Mechanics, TATA McGraw-Hill Publishing Company limited, 1979.
- [48] NORDHOLM, J.; STURE, K. & RICE, S.A. Quantum ergodicity and vibrational relaxation in isolated molecules. The Journal of Chemical Physics, 61(203), 2974.
- [49] STRATT, R.M.; HANDY, N.C. & MILLER, W.H. On the quantum mechanical implications of classical ergodicity. The Journal of Chemical Physics, 71(3311), 1979.
- [50] NOID, D.W.; KOSZYKOWSKI, M.L. & MARCUS, R.A. A spectral analysis method of obtaining molecular spectra from classical trajectories. The Journal of Chemical Physics, 67(404), 1977.
- [51] NOID, D.W. & MARCUS, R.A. Semiclassical calculation of bound states in a multidimensional system for nearly 1:1 degenerate systems. The Journal of Chemical Physics, 67(559), 1977.
- [52] POMPHREY, N. Numerical identification of regular and irregular spectra. The Journal of Physics B: Atomic Molecular Physics, 7(1909), 1974.
- [53] GRANDI, Bartira C.S. Utilização do método variacional linear para obtenção da energia do estado fundamental de um sistema de dois bósons interagindo através do potencial de Barbanis. Dissertação de Mestrado, UFSC, 1981.
- [54] AHARONOV, Y. & AU, C.K. Logarithmic perturbation expansions. Physical Review A, 20(2245), 1979.
- [55] AHARONOV, Y. & AU, C.K. New approach to perturbation theory. Physical Review Letters, 42(1582), 1979.