



Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Departamento de Física  
Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

José Diêgo Marques de Lima

## Confinamento de uma partícula quântica a uma hélice, catenária, helicóide ou catenoide

Dissertação de Mestrado

Recife-PE

2021

Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Departamento de Física  
Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

José Diêgo Marques de Lima

**Confinamento de uma partícula quântica a uma hélice,  
catenária, helicóide ou catenoide**

Dissertação de mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada do Departamento de Física da Universidade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de mestre em Física Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes  
Coorientador: Prof. Dr. Renato Teixeira Gomes

Recife-PE  
2021

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Sistema Integrado de Bibliotecas  
Gerada automaticamente, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

- D278c de Lima, José Diêgo Marques  
Confinamento de uma partícula quântica a uma hélice, catenária, helicóide ou catenoide / José Diêgo Marques de Lima. - 2021.  
83 f. : il.
- Orientador: Fernando Jorge Sampaio Moraes.  
Coorientador: Renato Teixeira Gomes.  
Inclui referências e apêndice(s).
- Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Rural de Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, Recife, 2021.
1. Confinamento quântico. 2. Geometria Diferencial. 3. Método variacional. 4. Função confluyente de Heun. I. Moraes, Fernando Jorge Sampaio, orient. II. Gomes, Renato Teixeira, coorient. III. Título

José Diêgo Marques de Lima

# Confinamento de uma partícula quântica a uma hélice, catenária, helicóide ou catenoide

Dissertação de mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada do Departamento de Física da Universidade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de mestre em Física Aplicada.

Aprovado em 24 de fevereiro de 2021.

## Comissão Examinadora

---

Orientador: Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes  
Departamento de Física, Universidade Federal Rural de Pernambuco

---

Coorientador: Prof. Dr. Renato Teixeira Gomes  
Departamento de Matemática, Universidade Federal Rural de Pernambuco

---

Examinador Interno: Prof. Dr. Antônio de Pádua Santos  
Departamento de Física, Universidade Federal Rural de Pernambuco

---

Examinador Externo: Dr. Luiz Carlos Barbosa da Silva  
Department of Physics of Complex Systems, Weizmann Institute Of Science

*Aos meus pais.*

# Agradecimentos

Aos meus pais, Nivaldo José de Lima e Edineide Marques da Silva, e às minhas irmãs, Amanda Marques de Lima e Bruna Gerlane Marques Florentino, por sempre me apoiarem em meus objetivos acadêmicos.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes, por todas as suas excelentes orientações e discussões durante o mestrado.

Ao meu coorientador, Prof. Dr. Renato Teixeira Gomes, pela atenciosidade e por suas valiosas contribuições a esta dissertação.

Ao Dr. Luiz Carlos Barbosa da Silva pelos seus importantes comentários e sugestões referentes a este trabalho.

A todos os professores que contribuíram de alguma forma para a minha formação nestes dois anos, especialmente aos professores Dr. Aduino José Ferreira de Souza, Dr. Ailton Fernandes de Macedo Junior, Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa, Dr. Antônio de Pádua Santos, Dr. Erms Rodrigues Pereira e Dr. Pedro Hugo de Figueirêdo.

Aos meus colegas de pesquisa, Eudes Thomas Gomes da Silva e Franklin Ferreira da Silva Filho, pela amizade e pelas importantes contribuições a este trabalho.

Aos amigos que conheci graças ao mestrado: Frankberson dos Santos Azevedo, João Chakrian Raphael Viana Duarte, Lidiane Maria de Souza, Marcos Gabriel Pessoa Nunes e Rhimon Alves de Assis Souza.

Aos meus amigos de longa data: Djardiel da Silva Gomes, Josival dos Santos, Marconi Silva Santos Júnior e Willian Oliveira Santos.

Ao Laboratório de Modelagem Molecular da Universidade Federal de Campina Grande (campus Cuité), especialmente ao Prof. Dr. Nilton Ferreira Frazão, pela disponibilidade dos computadores para obtenção de parte dos resultados numéricos deste trabalho.

À Universidade Federal Rural de Pernambuco por possibilitar a realização deste mestrado.

À Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia de Pernambuco (FACEPE) pelo apoio financeiro.

De modo geral, agradeço a todas as pessoas que possibilitaram a existência deste trabalho.

# Resumo

Uma vez que os elétrons que estão no regime balístico percebem a estrutura de um nanotubo de carbono ou de uma camada de grafeno como sendo um meio sempre contínuo, pode-se utilizar o estudo da dinâmica quântica de um único elétron confinado a uma curva ou superfície para obter uma descrição qualitativa do comportamento dos elétrons de condução. O processo de confinamento de uma partícula quântica a uma curva ou superfície leva, no chamado formalismo do potencial confinante, ao aparecimento de um potencial induzido por geometria na equação de Schrödinger efetiva. Nessa perspectiva, este trabalho tem o objetivo de estudar em detalhes as consequências do confinamento de uma partícula quântica a uma hélice, catenária, helicóide ou catenoide, explorando as relações entre tais curvas e superfícies com o auxílio da Geometria Diferencial. Desse modo, inicialmente empregou-se o método variacional para estimar a energia da partícula em seu estado fundamental e, em seguida, pôde-se obter aproximações mais satisfatórias com o uso da função confluyente de Heun através de cálculos numéricos. Assim, foi possível concluir que uma partícula quântica confinada a uma hélice infinita tem o seu momento angular quantizado devido à geometria da curva, enquanto nos casos da catenária, helicóide e catenoide a partícula pode ser encontrada em um único estado ligado ou em estados excitados que constituem uma banda de energia contínua.

**Palavras-chave:** Confinamento quântico; Geometria Diferencial; Método variacional; Função confluyente de Heun.

# Abstract

Since electrons in a ballistic regime perceive a carbon nanotube or a graphene layer structure as a continuous medium, we can use the study of the quantum dynamics of one electron constrained to a curve or surface to obtain a qualitative description of the conduction electrons' behavior. The confinement process of a quantum particle to a curve or surface leads us, in the so-called confining potential formalism, to a geometry-induced potential (GIP) in the effective Schrödinger equation. With these considerations, this work aims to study in detail the consequences of constraining a quantum particle to a helix, catenary, helicoid, or catenoid, exploring the relations between these curves and surfaces using differential geometry. Initially, we use the variational method to estimate the energy of the particle in its ground state, and thus, we obtain better approximations with the use of the confluent Heun function through numerical calculations. Thus, we conclude that a quantum particle constrained to an infinite helix has its angular momentum quantized due to the geometry of the curve, while in the cases of the catenary, helicoid, and catenoid the particle can be found either in a single bound state or in excited states which constitute a continuous energy band.

**Keywords:** Quantum confinement; Differential Geometry; Variational method; Confluent Heun function.



# Lista de Figuras

1.1	Representação de como obter geometricamente as estruturas de um fulereno (0D), de um nanotubo de carbono (1D) e do grafite (3D) através do grafeno (2D). Fonte: A. K. Geim e K. S. Novoselov, 2007 [1]. . . . .	12
2.1	Representação do triedro de Frenet em um ponto de uma curva regular parametrizada por comprimento de arco. . . . .	17
2.2	Traço da hélice circular, a qual tem curvatura e torção constantes. . . . .	18
2.3	Traço da catenária, a qual possui torção sempre nula. . . . .	19
2.4	Vetores $\mathbf{r}_{q_1}$ , $\mathbf{r}_{q_2}$ e $\mathbf{N}$ representados em um certo ponto de uma região de uma superfície regular arbitrária. É importante ressaltar que $\mathbf{r}_{q_1}$ e $\mathbf{r}_{q_2}$ não são necessariamente ortogonais. . . . .	21
2.5	Gráfico tridimensional da helicóide com $0 < \phi < 2\pi$ . Existe uma hélice contida nessa superfície para cada valor de $u$ fixo. . . . .	24
2.6	Gráfico tridimensional da catenoide, a qual é uma superfície gerada pela revolução de uma catenária. O mapa de cores é tal que, na deformação da helicóide (ver figura 2.5) para a catenoide, a cor de cada ponto correspondente é mantida. . . . .	25
3.1	Ilustração da construção geométrica do problema. A partir de uma origem $O$ , para $S$ uma superfície regular parametrizada por $\mathbf{r}(q_1, q_2)$ e cujo vetor normal é $\mathbf{N}(q_1, q_2)$ , tem-se que a vizinhança de $S$ pode ser parametrizada por $\mathbf{R}(q_1, q_2, q_3)$ , onde o módulo de $q_3$ é a distância entre os pontos $p$ e $Q$ . . . . .	30
3.2	Construção geométrica do procedimento de confinamento a uma curva parametrizada por $\mathbf{r}(q_1)$ . A parametrização da vizinhança da curva é $\mathbf{R}(q_1, q_2, q_3)$ , onde $q_2$ e $q_3$ são coordenadas cartesianas no plano normal. . . . .	37
4.1	Potencial geométrico que atua em uma partícula confinada a uma catenária considerando as constantes $\hbar = 2m = a = 1$ . . . . .	43
4.2	Potencial efetivo, $V_l(\tilde{u})$ , para $l = 0, 1/2, \pm 1, \pm 2$ . Como é notório, à medida que $ l $ aumenta, $V_l(\tilde{u})$ torna-se cada vez mais repulsivo. . . . .	47
4.3	Funções de onda Gaussianas obtidas com o método variacional para o estado fundamental considerando $l = 0$ e $l = 1/2$ . . . . .	50

4.4	Funções de onda Lorentzianas obtidas com o método variacional para o estado fundamental considerando $l = 0$ e $l = 1/2$ . . . . .	51
4.5	Funções de onda radiais (normalizadas numericamente) correspondentes aos primeiros quatro estados ao considerar $\tilde{u}_0 = 1$ e $l = 0$ . Se $\tilde{u}_0 = 1$ e $l = 1/2$ , as soluções apresentam um comportamento similar a este. . . . .	56
4.6	No gráfico (a) estão as funções de onda radiais (normalizadas numericamente) para os primeiros quatro estados quando $l = 0$ para $\tilde{u}_0 = 100$ e, no gráfico (b), o mesmo quando $l = 1/2$ . . . . .	57
4.7	No gráfico (a) estão as energias em função do tamanho da caixa, $2\tilde{u}_0$ , para $l = 0$ e, no gráfico (b), o mesmo para $l = 1/2$ . Cada linha corresponde a um nível de energia, sendo as linhas contínuas em azul associadas às soluções pares e as tracejadas em vermelho, às ímpares. . . . .	59
4.8	Comparação (próxima da origem) entre a função de onda radial obtida para HeunC e as funções Gaussiana e Lorentziana utilizadas no método variacional (a) para $l = 0$ e (b) para $l = 1/2$ . . . . .	60
4.9	Funções de onda radiais (normalizadas numericamente) correspondentes aos quatro primeiros estados (a) para $l = \pm 1$ e (b) para $l = \pm 2$ , isto é, para o potencial efetivo repulsivo, e considerando $\tilde{u}_0 = 100$ . . . . .	62
4.10	Representação em mapa de cores da densidade de probabilidade $ \psi_1 ^2$ correspondente ao estado fundamental de uma partícula confinada a uma hélice finita com $\phi_0 = 2\pi$ . Quanto mais clara (escura) a cor da região, maior (menor) a probabilidade de encontrar a partícula. . . . .	63
4.11	Representação em mapa de cores da densidade de probabilidade $ \psi ^2$ correspondente ao estado ligado de uma partícula confinada a uma catenária. Quanto mais clara (escura) a cor da região, maior (menor) a probabilidade de encontrar a partícula. . . . .	64
4.12	Representação em mapa de cores da densidade de probabilidade $ \chi_g ^2$ correspondente ao estado ligado de uma partícula confinada a uma helicóide finita com $\phi_0 = 2\pi$ . Quanto mais clara (escura) a cor da região, maior (menor) a probabilidade de encontrar a partícula. . . . .	65
4.13	Representação em mapa de cores da densidade de probabilidade $ \chi_g ^2$ correspondente ao estado ligado de uma partícula confinada a uma (a) helicóide infinita e a uma (b) catenoide. Quanto mais clara (escura) a cor da região, maior (menor) a probabilidade de encontrar a partícula. . . . .	66

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>11</b>
1.1	Curvaturas no grafeno . . . . .	11
1.2	Grafeno como um meio contínuo . . . . .	13
1.3	Confinamento a curvas e superfícies . . . . .	13
1.4	Escopo do trabalho . . . . .	14
<b>2</b>	<b>Geometria Diferencial</b>	<b>16</b>
2.1	Curvas regulares . . . . .	16
2.1.1	Hélice . . . . .	18
2.1.2	Catenária . . . . .	19
2.2	Superfícies regulares . . . . .	20
2.2.1	Helicoide . . . . .	23
2.2.2	Catenoide . . . . .	24
2.3	Equações de Weingarten e elementos de área . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Formalismo do potencial confinante</b>	<b>29</b>
3.1	Partícula confinada a uma superfície . . . . .	29
3.1.1	Construção geométrica do problema . . . . .	29
3.1.2	Equação de Schrödinger . . . . .	32
3.2	Partícula confinada a uma curva . . . . .	37
3.2.1	Construção geométrica do problema . . . . .	37
3.2.2	Equação de Schrödinger . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Partícula quântica confinada a uma hélice, catenária, helicoide ou catenoide</b>	<b>41</b>
4.1	Equação de Schrödinger para a partícula confinada . . . . .	41
4.1.1	Hélice . . . . .	41
4.1.2	Catenária . . . . .	43
4.1.3	Helicoide e catenoide . . . . .	44
4.2	Funções de onda radiais . . . . .	46
4.2.1	Método variacional . . . . .	47
4.2.2	Função confluyente de Heun . . . . .	53

4.3 Sobre o estado fundamental . . . . .	63
<b>5 Conclusões</b>	<b>67</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>69</b>
<b>A Método variacional na Mecânica Quântica</b>	<b>78</b>
<b>B Equação confluyente de Heun</b>	<b>79</b>
B.1 Soluções em série de potências . . . . .	79
B.2 Redução a um polinômio . . . . .	82

# 1 Introdução

O interesse da comunidade científica por nanomateriais que são formados exclusivamente por átomos de carbono aumentou substancialmente quando o grafeno foi isolado por K. S. Novoselov, A. K. Geim et al. no ano de 2004 [1–3]. Estruturalmente, o grafeno é constituído por uma única camada de átomos de carbono em uma rede hexagonal plana (estrutura semelhante a um favo de mel), sendo o primeiro material a ser considerado como “bidimensional” (2D), pois possui a espessura de apenas um átomo [4]. Além de sua alta resistência mecânica e de sua transparência, o grafeno também possui altas condutividades térmica e elétrica, o que possibilita aplicações nas mais diversas áreas, especialmente na eletrônica e na fotônica [5–7].

## 1.1 Curvaturas no grafeno

Em termos estruturais e geométricos<sup>1</sup>, é possível induzir curvaturas em folhas de grafeno através de defeitos topológicos, os quais consistem na substituição de alguns dos hexágonos de carbono por outros polígonos (por exemplo, pentágonos ou heptágonos), causando distorções no plano [8, 9]. Assim, a presença de anéis com menos (mais) que seis lados induz localmente curvaturas positivas (negativas) na estrutura, o que possibilita a existência de nanomateriais de carbono nos mais variados tipos de superfícies [10]. Um dos exemplos mais simples e mais conhecidos de estruturas com curvatura induzida por defeitos topológicos no grafeno é o fulereno  $C_{60}$  (buckminsterfullereno), que contém vinte hexágonos e doze pentágonos, o que provoca o seu formato esférico [11–14]. Do ponto de vista do estudo dos nanomateriais, os fulerenos são classificados como materiais de dimensão zero (0D) [1, 15].

Seguindo o mesmo raciocínio, os nanotubos de carbono são classificados como materiais unidimensionais (1D), pois tipicamente possuem diâmetro muito pequeno com relação ao comprimento [16]. A estrutura de um nanotubo de carbono é obtida ao enrolar uma “fita” de grafeno, formando um cilindro com diâmetro desprezível, que pode ser geometricamente aproximado por uma reta [17]. Ademais, também é possível induzir curvaturas em nanotubos de carbono através de defeitos topológicos, conforme discutido na referência [18].

---

<sup>1</sup>Isto é, sem entrar no âmbito experimental de como sintetizar as estruturas.

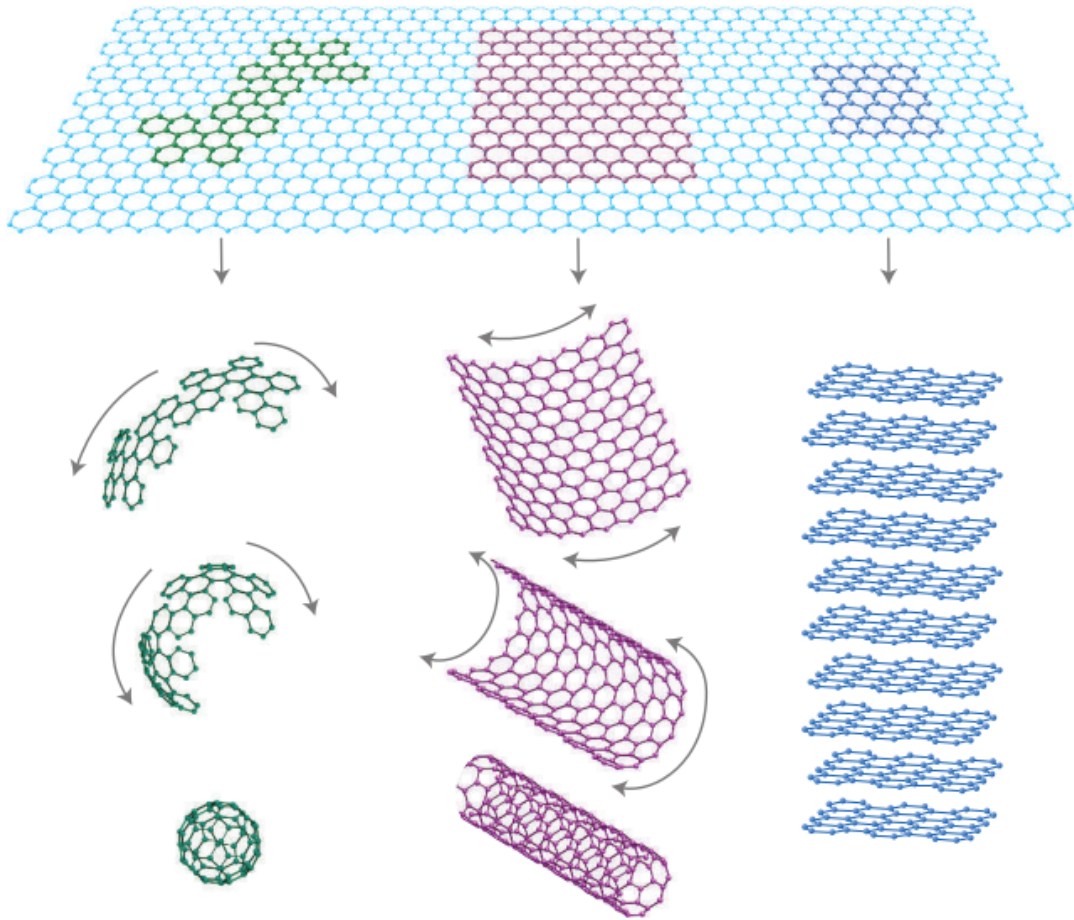


Figura 1.1 – Representação de como obter geometricamente as estruturas de um fulereno (0D), de um nanotubo de carbono (1D) e do grafite (3D) através do grafeno (2D). Fonte: A. K. Geim e K. S. Novoselov, 2007 [1].

Por outro lado, ao empilhar diversas camadas de grafeno obtém-se o bem conhecido grafite, que é, de fato, um material tridimensional (3D) [19]. Tais camadas mantêm-se unidas para formar o grafite devido à ação das forças de van der Waals [6]. Nessa perspectiva, a figura 1.1 mostra como é possível obter geometricamente as estruturas de um fulereno, de um nanotubo de carbono e do grafite ao, respectivamente, embrulhar, enrolar e empilhar o grafeno. Assim, nas palavras de A. K. Geim e K. S. Novoselov, a estrutura do grafeno pode ser interpretada como “um bloco de construção básico para materiais gráfiticos de todas as outras dimensionalidades” [1].

No âmbito de manipular propriedades eletrônicas, a versatilidade proporcionada pela possibilidade de curvar folhas de grafeno tem sido explorada de várias maneiras. Por exemplo, a criação de uma junção p-n induzida por curvatura em uma bicamada de grafeno foi proposta por Y. N. Joglekar e A. Saxena em 2009 [20]. Em 2016, F. Santos et al. estudaram os efeitos geométricos no transporte eletrônico de nanotubos deformados [21]. Um ponto importante é que muitos trabalhos, como os dois citados acima, tratam o grafeno como um meio contínuo, isto é, não consideram os átomos de carbono explicitamente. Nas seções 1.2 e 1.3 discutir-se-á como essa abordagem é usualmente considerada na literatura.

## 1.2 Grafeno como um meio contínuo

A dinâmica de um sistema quântico, em uma descrição não-relativística, é determinada pela equação de Schrödinger [22]. Dessa forma, em um sistema molecular qualquer, a função de onda depende explicitamente da posição de todos os elétrons e núcleos atômicos. Assim, a soma dos operadores de energia cinética dos elétrons e núcleos juntamente com a soma dos potenciais Coulombianos de interação elétron-elétron, elétron-núcleo e núcleo-núcleo formam o Hamiltoniano do sistema [23]. Como consequência, encontrar soluções analíticas para a equação de Schrödinger em um sistema com várias partículas é uma tarefa impraticável, sendo necessário o uso de aproximações.

Nessa perspectiva, uma das aproximações mais usadas em problemas de muitos corpos é a de Born-Oppenheimer, que considera que os núcleos atômicos estão fixos com relação aos elétrons [24]. Desse modo, como a função de onda passa a depender somente das posições eletrônicas, pode-se usar outros métodos aproximativos para obter as soluções numéricas para a equação de Schrödinger. Dois exemplos destes são o método de Hartree-Fock e a Teoria do Funcional da Densidade (conhecida por DFT, do inglês *Density Functional Theory*) [23, 25]. Evidentemente, a depender da escolha de parâmetros nas aproximações e do tamanho do sistema, esses cálculos podem ter elevado custo computacional.

Todavia, modelos mais simples podem ser empregados para estudar os elétrons de condução no grafeno. De fato, como o transporte eletrônico no grafeno é mesoscopicamente balístico, tais elétrons percebem a estrutura como sendo um meio contínuo [26, 27]. Isso implica que o estudo da dinâmica quântica de um elétron confinado a uma superfície (ou a uma curva) leva a uma descrição qualitativa do comportamento de elétrons no regime balístico em uma camada de grafeno (ou em um nanotubo de carbono) com defeitos topológicos, de modo que a geometria passa a ter um importante papel na dinâmica [21].

## 1.3 Confinamento a curvas e superfícies

Os primeiros trabalhos teóricos com interesse no confinamento de partículas quânticas a curvas e superfícies antecedem, em algumas décadas, o trabalho de K. S. Novoselov, A. K. Geim et al., no qual eles isolaram o grafeno [2]. Em 1971, H. Jensen e H. Koppe propuseram que o procedimento teórico de confinamento pode ser realizado ao considerar que a partícula é forçada a se mover entre duas superfícies paralelas separadas por uma distância infinitesimal, de modo que foi mostrado que a geometria tem um importante papel na dinâmica de partículas quânticas confinadas [28]. Em 1981, R. C. T. da Costa considerou que o procedimento de confinamento pode ser realizado através de um poço de potencial suave [29, 30]. Em ambos os casos, isso leva ao aparecimento de um potencial induzido por geometria na dinâmica quântica efetiva na curva ou superfície. Essas

abordagens serão chamadas neste trabalho de “formalismo do potencial confinante”. Verificações experimentais de efeitos geométricos devidos ao confinamento foram realizadas primeiramente em cristais topológicos fotônicos [31] e em um polímero de  $C_{60}$  com “forma de amendoim” [32].

A descrição das propriedades de curvas e superfícies regulares é muito bem estabelecida pela Geometria Diferencial. Duas das curvas regulares mais simples que se pode estudar nesse contexto são a hélice e a catenária. A superfície que é formada ao variar continuamente o raio de uma hélice é chamada de helicóide, enquanto a superfície de revolução da catenária (em torno de um eixo ortogonal ao eixo de simetria desta) recebe o nome de catenoide. Como a helicóide e a catenoide são superfícies mínimas e também localmente isométricas, suas propriedades têm sido extensivamente estudadas por diversos autores desde o desenvolvimento da Geometria Diferencial [33, 34].

O confinamento a uma hélice, catenária, helicóide ou catenoide com o formalismo do potencial confinante tem sido objeto de alguns estudos. V. Atanasov e R. Dandoloff discutiram, em 2008, os efeitos geométricos do confinamento de uma partícula quântica a um tubo com forma de hélice [35]. Em 2020, F. F. da Silva Filho resolveu numericamente a equação de Schrödinger nesse formalismo para uma partícula confinada a algumas curvas planas, dentre elas a catenária [36]. Em 2009, V. Atanasov, R. Dandoloff e A. Saxena consideraram o processo de confinamento a uma helicóide, onde eles mostraram que a partícula é sujeita a um potencial efetivo radial que pode ser atrativo ou repulsivo, dependendo do momento angular [37].

Para a catenoide, o formalismo do potencial confinante foi usado em 2010 por R. Dandoloff, A. Saxena e B. Jensen para estudar os efeitos do potencial induzido por geometria em uma seção bidimensional de um buraco de minhoca (*wormhole*) [38]. Recentemente, em 2020, J. E. G. Silva et al. consideraram o confinamento a uma catenoide para analisar as propriedades eletrônicas de uma bicamada de grafeno conectada por uma ponte<sup>2</sup> [39]. Também em 2020, M. C. R. Ribeiro Jr. et al. estudaram o problema de confinamento na helicóide considerando a presença de um potencial harmônico e a massa anisotrópica [40].

## 1.4 Escopo do trabalho

A maioria dos trabalhos que envolvem o formalismo do potencial confinante se restringem a uma discussão qualitativa da equação de Schrödinger obtida para o confinamento a uma curva ou superfície. Nessa perspectiva, este trabalho tem o objetivo de sintetizar e expandir a compreensão dos efeitos geométricos no confinamento de uma partícula quântica a uma hélice, catenária, helicóide ou catenoide. No decorrer do texto, uma combinação de métodos analíticos e numéricos foi utilizada para obter as soluções

---

<sup>2</sup>Longe da origem, a catenoide pode ser interpretada como dois planos paralelos. A “garganta” da catenoide faria, então, o papel de uma “ponte” entre as bicamadas.



das equações de Schrödinger.

A fundamentação teórica deste trabalho é apresentada nos capítulos 2 e 3. O capítulo 2 contém uma visão geral sobre alguns conceitos da Geometria Diferencial de curvas e superfícies, enquanto o capítulo 3 é dedicado ao formalismo do potencial confinante. Por conseguinte, os resultados encontrados neste trabalho são mostrados no capítulo 4. Na seção 4.1 o problema para a hélice é resolvido, enquanto os problemas para a catenária, helicóide e catenoide são introduzidos (resolvendo a parte angular para as superfícies). Na seção 4.2 a energia do estado fundamental é estimada utilizando o método variacional para os casos da catenária, helicóide e catenoide, e além disso, soluções em termos da função confluyente de Heun são apresentadas. As soluções para o estado fundamental são explicitadas na seção 4.3. O capítulo 5 é constituído pelas conclusões e perspectivas para futuros trabalhos. Por fim, o apêndice A trata do método variacional e o apêndice B, da equação confluyente de Heun.

## 2 Geometria Diferencial

Neste capítulo serão apresentados alguns conceitos da Geometria Diferencial de curvas e superfícies que são necessários para a compreensão deste trabalho. O procedimento a seguir é baseado principalmente nas referências [33, 34] e é inteiramente focado em desenvolver um suporte matemático a ser usado na discussão do formalismo do potencial confinante. Uma lista alternativa de referências úteis é [41–48].

### 2.1 Curvas regulares

De acordo com a referência [34], para um dado intervalo aberto  $T \subset \mathbb{R}$ , uma curva diferenciável parametrizada é definida como uma aplicação diferenciável  $\boldsymbol{\alpha} : T \rightarrow \mathbb{R}^3$ . De modo geral, a parametrização de uma curva diferenciável em  $\mathbb{R}^3$  é designada por  $\boldsymbol{\alpha}(t) = (x(t), y(t), z(t))$ , onde  $t \in T$  é chamado de parâmetro da curva, e  $x(t)$ ,  $y(t)$  e  $z(t)$  são funções diferenciáveis.

De um ponto de vista cinemático, o traço de uma curva pode ser interpretado como sendo a trajetória descrita por uma partícula clássica, o que corresponde ao gráfico do vetor posição  $\boldsymbol{\alpha}(t) = x(t)\mathbf{i} + y(t)\mathbf{j} + z(t)\mathbf{k}$ , onde os versores  $\mathbf{i} = (1, 0, 0)$ ,  $\mathbf{j} = (0, 1, 0)$  e  $\mathbf{k} = (0, 0, 1)$  formam a base canônica do  $\mathbb{R}^3$ , e o “parâmetro”  $t$  representa o tempo. Assim, a derivada de primeira ordem do vetor posição será  $\boldsymbol{\alpha}'(t) = x'(t)\mathbf{i} + y'(t)\mathbf{j} + z'(t)\mathbf{k}$ , a qual fornece o vetor velocidade. Por sua vez, a derivada de segunda ordem,  $\boldsymbol{\alpha}''(t) = x''(t)\mathbf{i} + y''(t)\mathbf{j} + z''(t)\mathbf{k}$ , corresponde ao seu vetor aceleração [49, 50].

Se  $\boldsymbol{\alpha}'(t) \neq (0, 0, 0)$ , para todo  $t \in T$ , uma curva  $\boldsymbol{\alpha}(t)$  é dita regular. Nesse caso, dado um certo  $t_0 \in T$ , a função comprimento de arco é definida por

$$s(t) = \int_{t_0}^t |\boldsymbol{\alpha}'(\tilde{t})| d\tilde{t}, \quad (2.1)$$

onde  $|\boldsymbol{\alpha}'(t)| = \sqrt{\boldsymbol{\alpha}'(t) \cdot \boldsymbol{\alpha}'(t)}$  é o módulo do vetor velocidade. Quando é possível obter  $s(t)$  e a sua inversa,  $s^{-1}(t)$ , pode-se encontrar uma parametrização por comprimento de arco fazendo  $\boldsymbol{\gamma}(s) = \boldsymbol{\alpha} \circ s^{-1}$ , o que é conveniente, pois o vetor velocidade torna-se unitário, isto é,  $|\boldsymbol{\gamma}'(s)| = 1$ , para todo  $s$ .

Para uma curva parametrizada por comprimento de arco, o módulo do vetor aceleração,  $\kappa(s) = |\boldsymbol{\gamma}''(s)|$ , é chamado de função curvatura de  $\boldsymbol{\gamma}(s)$ . Nos pontos em que

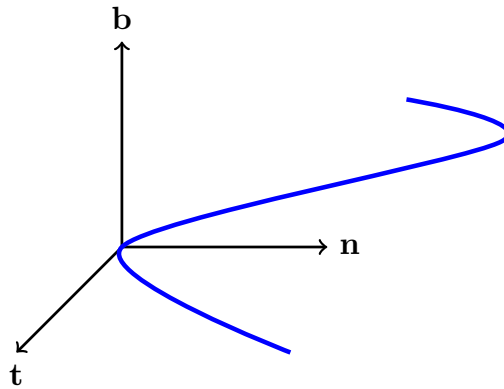


Figura 2.1 – Representação do triedro de Frenet em um ponto de uma curva regular parametrizada por comprimento de arco.

$\kappa \neq 0$ , pode-se definir um vetor unitário normal à curva  $\gamma(s)$  como sendo  $\mathbf{n}(s) = \frac{\gamma''(s)}{|\gamma''(s)|}$ , o qual aponta na mesma direção do vetor aceleração e é normal ao vetor velocidade. Ademais, é usual na literatura da Geometria Diferencial escrever  $\mathbf{t}(s) = \gamma'(s)$ , que recebe o nome de vetor tangente. O cálculo de sua derivada resulta em  $\mathbf{t}'(s) = \gamma''(s) = |\gamma''(s)|\mathbf{n}(s)$ , de forma que se obtém a importante relação:

$$\mathbf{t}' = \kappa\mathbf{n}. \quad (2.2)$$

Os vetores  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{n}$  formam o chamado plano osculador. O vetor  $\mathbf{b}(s) = \mathbf{t}(s) \times \mathbf{n}(s)$  é normal ao plano osculador e recebe o nome de vetor binormal. Dessa maneira,  $\mathbf{t}$ ,  $\mathbf{n}$  e  $\mathbf{b}$  formam uma base ortonormal em  $\gamma(s)$  que é denominada triedro de Frenet, variando ponto a ponto na curva (ver figura 2.1). Além disso, os vetores  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{b}$  formam o plano retificante, bem como  $\mathbf{n}$  e  $\mathbf{b}$  formam o plano normal.

Pode-se observar que a derivada do vetor  $\mathbf{b}$  é dada por  $\mathbf{b}' = \mathbf{t}' \times \mathbf{n} + \mathbf{t} \times \mathbf{n}'$ . A partir da equação (2.2), conclui-se que  $\mathbf{t}' \times \mathbf{n} = 0$  e, então,  $\mathbf{b}' = \mathbf{t} \times \mathbf{n}'$ , de modo que  $\mathbf{b}'$  é normal a  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{b}$ , sendo paralelo a  $\mathbf{n}$ . Ou seja, é possível escrever  $\mathbf{b}'$  como  $\mathbf{n}$  multiplicado por uma função escalar,

$$\mathbf{b}' = -\tau\mathbf{n}, \quad (2.3)$$

onde  $\tau(s) = -\mathbf{b}'(s) \cdot \mathbf{n}(s)$  é chamada de torção da curva<sup>1</sup>.

De maneira semelhante, como o vetor normal pode ser escrito como  $\mathbf{n} = \mathbf{b} \times \mathbf{t}$ , sua derivada será  $\mathbf{n}' = \mathbf{b}' \times \mathbf{t} + \mathbf{b} \times \mathbf{t}'$ . Disso, a partir das equações (2.2) e (2.3), tem-se que  $\mathbf{n}' = -\tau\mathbf{n} \times \mathbf{t} + \kappa\mathbf{b} \times \mathbf{n}$ , portanto,

$$\mathbf{n}' = -\kappa\mathbf{t} + \tau\mathbf{b}. \quad (2.4)$$

As equações (2.2), (2.3) e (2.4) são conhecidas como as fórmulas de Frenet. A seguir será

<sup>1</sup>O sinal negativo é apenas uma convenção usual.

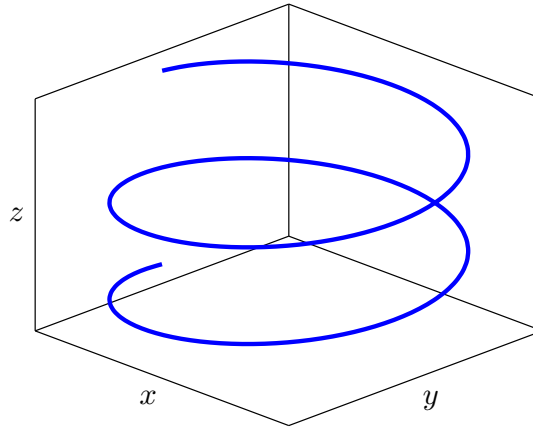


Figura 2.2 – Traço da hélice circular, a qual tem curvatura e torção constantes.

mostrada a aplicação desses resultados no estudo da hélice e da catenária, que são as curvas de maior interesse neste trabalho.

### 2.1.1 Hélice

Uma hélice (circular) de raio  $b > 0$  e com passo (distância vertical entre cada volta completa)  $2\pi|a|$ , para<sup>2</sup>  $a \in \mathbb{R}$ , é uma curva regular cuja parametrização é

$$\boldsymbol{\alpha}(\phi) = (b \cos(\phi), b \sin(\phi), a\phi), \quad (2.5)$$

onde  $\phi \in \mathbb{R}$  é o parâmetro da curva (ver figura 2.2). Então, o seu vetor velocidade é dado por  $\boldsymbol{\alpha}'(\phi) = (-b \sin(\phi), b \cos(\phi), a)$ , cujo módulo é  $|\boldsymbol{\alpha}'(\phi)| = (a^2 + b^2)^{1/2}$ . Realizando a integração em (2.1), obtém-se que  $s = (a^2 + b^2)^{1/2}\phi$ , de modo que a parametrização por comprimento de arco é

$$\boldsymbol{\gamma}(s) = (b \cos(\zeta s), b \sin(\zeta s), a\zeta s), \quad (2.6)$$

para  $\zeta = (a^2 + b^2)^{-1/2}$ .

Calculando  $\mathbf{t}$ ,  $\mathbf{n}$  e  $\mathbf{b}$  para a hélice, obtêm-se

$$\begin{aligned} \mathbf{t}(s) &= (-b\zeta \sin(\zeta s), b\zeta \cos(\zeta s), a\zeta), \\ \mathbf{n}(s) &= -(\cos(\zeta s), \sin(\zeta s), 0), \\ \mathbf{b}(s) &= (a\zeta \sin(\zeta s), -a\zeta \cos(\zeta s), b\zeta). \end{aligned}$$

Além disso, é possível observar que a sua curvatura,

$$\kappa(s) = \frac{b}{a^2 + b^2}, \quad (2.7)$$

<sup>2</sup>Diz-se que a hélice é destra se  $a > 0$  e canhota se  $a < 0$ . No caso em que  $a = 0$ , a equação (2.5) torna-se a parametrização de um círculo.

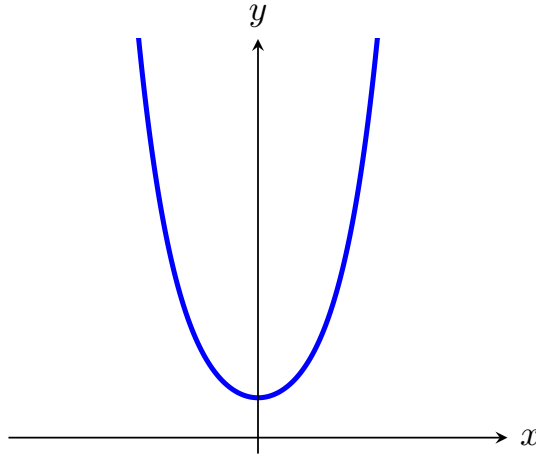


Figura 2.3 – Traço da catenária, a qual possui torção sempre nula.

e a sua torção,

$$\tau(s) = \frac{a}{a^2 + b^2}, \quad (2.8)$$

são constantes.

### 2.1.2 Catenária

A catenária (ver figura 2.3) é uma curva plana cuja parametrização é

$$\boldsymbol{\alpha}(v) = (v, a \cosh(v/a)), \quad (2.9)$$

com a constante  $a > 0$  associada à sua abertura, e o parâmetro  $v \in \mathbb{R}$ . A partir de (2.9), o seu vetor velocidade é tal que  $\boldsymbol{\alpha}'(v) = (1, \sinh(v/a))$ , cujo módulo é dado por  $|\boldsymbol{\alpha}'(v)| = \cosh(v/a)$ . Ao calcular a função comprimento de arco, obtém-se  $s = a \sinh(v/a)$ , portanto, a parametrização por comprimento de arco é

$$\boldsymbol{\gamma}(s) = \left( a \operatorname{arcsinh}(s/a), \sqrt{a^2 + s^2} \right). \quad (2.10)$$

Assim, tomando a derivada de (2.10), encontra-se o vetor tangente,

$$\mathbf{t}(s) = \left( a(a^2 + s^2)^{-1/2}, s(a^2 + s^2)^{-1/2} \right),$$

cujas respectivas derivadas retornam o vetor aceleração,

$$\boldsymbol{\gamma}''(s) = \left( -as(a^2 + s^2)^{-3/2}, a^2(a^2 + s^2)^{-3/2} \right).$$

Ao calcular o módulo de  $\boldsymbol{\gamma}''(s)$ , obtém-se a curvatura

$$\kappa(s) = \frac{a}{a^2 + s^2}. \quad (2.11)$$

Por fim, como a catenária é uma curva bidimensional, o plano em que ela está contida coincide com o plano osculador, portanto, sua torção é nula.

## 2.2 Superfícies regulares

De acordo com a definição da referência [34], um subconjunto  $S \subset \mathbb{R}^3$  é uma superfície regular se, para cada ponto pertencente a  $S$ , existe uma vizinhança  $V$  em  $\mathbb{R}^3$  e uma aplicação  $\mathbf{r} : U \rightarrow V \cap S$  de um conjunto aberto  $U \subset \mathbb{R}^2$  para  $V \cap S \subset \mathbb{R}^3$  tal que:

- $\mathbf{r}$  é diferenciável. Isto é, ao considerar  $\mathbf{r}(q_1, q_2) = (x(q_1, q_2), y(q_1, q_2), z(q_1, q_2))$ , com  $(q_1, q_2) \in U$ , segue que as funções  $x(q_1, q_2)$ ,  $y(q_1, q_2)$  e  $z(q_1, q_2)$  possuem derivadas parciais contínuas de todas as ordens.
- $\mathbf{r}$  é um homeomorfismo. Ou seja,  $\mathbf{r}$  possui uma inversa  $\mathbf{r}^{-1} : V \cap S \rightarrow U$  que é contínua.
- os vetores<sup>3</sup>  $\mathbf{r}_{q_1} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1}$  e  $\mathbf{r}_{q_2} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2}$  são linearmente independentes (LI) ou, equivalentemente, deve-se ter  $\mathbf{r}_{q_1} \times \mathbf{r}_{q_2} \neq 0$  em todos os pontos de  $S$ .

Se  $q_1 = q_1(t)$  e  $q_2 = q_2(t)$  são funções diferenciáveis, onde  $t$  pertence a um subconjunto  $T$  em  $\mathbb{R}$ , então uma curva regular  $\boldsymbol{\alpha}(t) = \mathbf{r}(q_1(t), q_2(t))$  possui seu traço contido na superfície cuja parametrização é  $\mathbf{r}(q_1, q_2)$ . Assim, o vetor que é tangente à curva na superfície será

$$\boldsymbol{\alpha}'(t) = \mathbf{t} = q_1' \mathbf{r}_{q_1} + q_2' \mathbf{r}_{q_2}. \quad (2.12)$$

Os vetores  $\mathbf{r}_{q_1}$  e  $\mathbf{r}_{q_2}$  geram o chamado plano tangente, de tal maneira que todos os vetores que tangenciam alguma curva da superfície, em um determinado ponto, estão contidos nesse plano. Por conseguinte, o vetor normal à superfície (ver figura 2.4) é definido como um versor perpendicular ao plano tangente,  $\mathbf{N} = \frac{\mathbf{r}_{q_1} \times \mathbf{r}_{q_2}}{|\mathbf{r}_{q_1} \times \mathbf{r}_{q_2}|}$ .

De maneira análoga ao que foi visto na subseção 2.1, o comprimento de arco  $s(t)$  de uma curva regular  $\boldsymbol{\alpha}(t)$  que está contida em  $S$  é tal que  $s'(t) = \sqrt{\boldsymbol{\alpha}'(t) \cdot \boldsymbol{\alpha}'(t)}$ . Dessa forma, com o auxílio de (2.12), ter-se-á

$$(s')^2 = (q_1')^2 \mathbf{r}_{q_1} \cdot \mathbf{r}_{q_1} + 2q_1' q_2' \mathbf{r}_{q_1} \cdot \mathbf{r}_{q_2} + (q_2')^2 \mathbf{r}_{q_2} \cdot \mathbf{r}_{q_2}. \quad (2.13)$$

A equação (2.13) possui termos com produtos escalares que envolvem os vetores  $\mathbf{r}_{q_1}$  e  $\mathbf{r}_{q_2}$ , o que motiva a definição dos coeficientes  $g_{ij} = \mathbf{r}_{q_i} \cdot \mathbf{r}_{q_j}$ , onde os índices  $i$  e  $j$  podem assumir os valores de 1 ou de 2 (compactamente,  $i, j = 1, 2$ ). Nessa perspectiva, fazendo  $I = (s')^2$ , segue de (2.13) que

$$I = g_{11}(q_1')^2 + 2g_{12}q_1'q_2' + g_{22}(q_2')^2, \quad (2.14)$$

---

<sup>3</sup>Para as derivadas dos vetores  $\mathbf{r}(q_1, q_2)$ , considerar-se-á a notação  $\mathbf{r}_{q_i} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i}$ , bem como  $\mathbf{r}_{q_i q_j} = \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_i \partial q_j}$ .

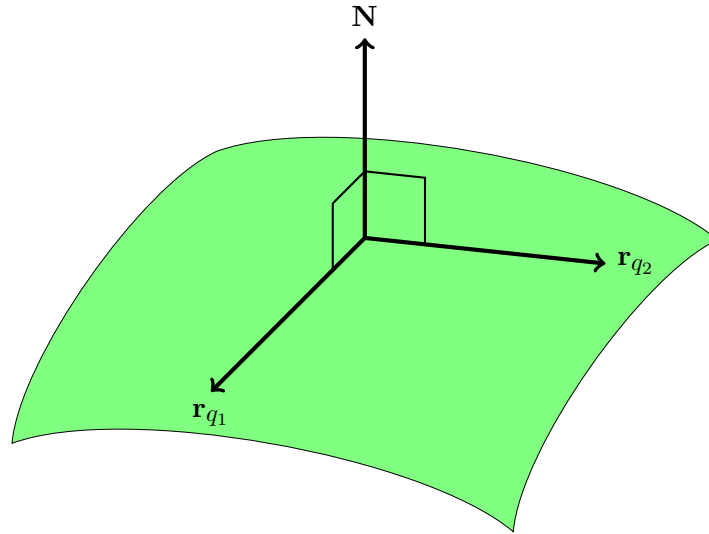


Figura 2.4 – Vetores  $\mathbf{r}_{q_1}$ ,  $\mathbf{r}_{q_2}$  e  $\mathbf{N}$  representados em um certo ponto de uma região de uma superfície regular arbitrária. É importante ressaltar que  $\mathbf{r}_{q_1}$  e  $\mathbf{r}_{q_2}$  não são necessariamente ortogonais.

a qual é uma forma quadrática denominada na literatura por “primeira forma fundamental”. Em alguns casos é útil calcular a diferencial ao quadrado do comprimento de arco,  $ds^2 = (ds)^2$ , a qual é dada por

$$ds^2 = g_{11}dq_1^2 + 2g_{12}dq_1dq_2 + g_{22}dq_2^2 = \sum_{i,j=1}^2 g_{ij}dq_idq_j, \quad (2.15)$$

onde  $ds$  recebe o nome de elemento de linha.

Quanto aos coeficientes de (2.14), é possível observar que  $g_{12} = g_{21}$ , além de que  $g_{11} > 0$  e  $g_{22} > 0$ , pois  $\mathbf{r}_{q_1}$  e  $\mathbf{r}_{q_2}$  são vetores não-nulos. Podem-se agrupar tais coeficientes em uma matriz simétrica  $2 \times 2$ ,

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

a qual é conhecida como tensor métrico. A partir de (2.16), designam-se os elementos da matriz inversa de  $\mathbf{g}$  por  $g^{ij}$ , de modo que se tem

$$\mathbf{g}^{-1} = \begin{pmatrix} g^{11} & g^{12} \\ g^{21} & g^{22} \end{pmatrix} = \frac{1}{g} \begin{pmatrix} g_{22} & -g_{12} \\ -g_{21} & g_{11} \end{pmatrix},$$

onde  $g = \det(\mathbf{g})$  é o determinante do tensor métrico. Uma importante aplicação dessa notação matricial segue da identidade de Lagrange:

$$|\mathbf{r}_{q_1} \times \mathbf{r}_{q_2}|^2 = (\mathbf{r}_{q_1} \cdot \mathbf{r}_{q_1})(\mathbf{r}_{q_2} \cdot \mathbf{r}_{q_2}) - (\mathbf{r}_{q_1} \cdot \mathbf{r}_{q_2})^2 = g_{11}g_{22} - g_{12}^2 = g, \quad (2.17)$$

implicando que  $g$  é sempre uma quantidade positiva. Como consequência, o vetor normal

à superfície pode ser reescrito como

$$\mathbf{N} = \frac{\mathbf{r}_{q_1} \times \mathbf{r}_{q_2}}{\sqrt{g}}, \quad (2.18)$$

o que permite associar de maneira mais direta  $\mathbf{N}$  com os coeficientes da primeira forma fundamental,  $g_{ij}$ .

Definindo  $\gamma(s)$  como uma curva parametrizada por comprimento de arco em uma superfície cuja parametrização é dada por  $\mathbf{r}(q_1, q_2)$ , observa-se que o vetor aceleração é

$$\gamma''(s) = q_1'' \mathbf{r}_{q_1} + q_2'' \mathbf{r}_{q_2} + (q_1')^2 \mathbf{r}_{q_1 q_1} + 2q_1' q_2' \mathbf{r}_{q_1 q_2} + (q_2')^2 \mathbf{r}_{q_2 q_2}. \quad (2.19)$$

Lembrando que  $\mathbf{N} \cdot \mathbf{r}_{q_i} = 0$ , segue da equação (2.19) que

$$\mathbf{N} \cdot \gamma''(s) = h_{11} (q_1')^2 + 2h_{12} q_1' q_2' + h_{22} (q_2')^2, \quad (2.20)$$

onde definem-se  $h_{ij} = \mathbf{N} \cdot \mathbf{r}_{q_i q_j}$ , com  $i, j = 1, 2$ . Chamando de  $II$  o lado direito da equação (2.20), obtém-se a equação

$$II = h_{11} (q_1')^2 + 2h_{12} q_1' q_2' + h_{22} (q_2')^2 \quad (2.21)$$

que é denominada de “segunda forma fundamental” da superfície. Além disso, de forma completamente análoga ao feito para a primeira forma fundamental, também é possível construir uma matriz,  $\mathbf{h}$ , constituída pelos coeficientes  $h_{ij}$  e cujo determinante é  $h = \det(\mathbf{h})$ .

A partir da fórmula de Frenet dada na equação (2.2), pode-se escrever  $\gamma''(s) = \kappa \mathbf{n}$ , onde  $\kappa$  é a curvatura da curva e  $\mathbf{n}$  é o seu vetor normal. Assim, na superfície,  $\gamma''(s)$  pode ser decomposto em duas componentes,

$$\gamma''(s) = \kappa \mathbf{n} = \kappa_N \mathbf{N} + \kappa_g \mathbf{n}_g, \quad (2.22)$$

onde  $\kappa_N$  e  $\kappa_g$  são respectivamente chamadas de curvatura normal e curvatura geodésica, enquanto  $\mathbf{n}_g = \mathbf{N} \times \mathbf{t}$  é o vetor normal geodésico. Como  $\mathbf{t}$ ,  $\mathbf{N}$  e  $\mathbf{n}_g$  formam uma base ortonormal (triedro de Darboux), tem-se  $\kappa_N = \mathbf{N} \cdot \gamma''(s)$ .

Com o uso da equação (2.20) e, de maneira geral, introduzindo um novo parâmetro arbitrário  $t$  no lugar de  $s$ , segue que

$$\kappa_N(q_1', q_2') = \frac{h_{11}(q_1')^2 + 2h_{12}q_1'q_2' + h_{22}(q_2')^2}{g_{11}(q_1')^2 + 2g_{12}q_1'q_2' + g_{22}(q_2')^2}, \quad (2.23)$$

onde as derivadas são tomadas com relação a  $t$ . Assim, a curvatura normal possui um valor de máximo,  $k_1$ , e outro de mínimo,  $k_2$ . Tais extremos são encontrados calculando as derivadas da equação (2.23) com relação a  $q_1'$  e  $q_2'$ . Disso, igualando as derivadas a zero,



obtêm-se as respectivas equações:

$$\begin{aligned}(h_{11} - \kappa_N g_{11}) q'_1 + (h_{12} - \kappa_N g_{12}) q'_2 &= 0, \\ (h_{12} - \kappa_N g_{12}) q'_1 + (h_{22} - \kappa_N g_{22}) q'_2 &= 0,\end{aligned}$$

que são obtidas após algumas manipulações algébricas. Consequentemente, os valores extremos de  $\kappa_N$  são as raízes de

$$\det \begin{pmatrix} h_{11} - \kappa_N g_{11} & h_{12} - \kappa_N g_{12} \\ h_{12} - \kappa_N g_{12} & h_{22} - \kappa_N g_{22} \end{pmatrix} = 0, \quad (2.24)$$

que é chamada de equação secular.

Assim, ao desenvolver os cálculos do determinante em (2.24), encontra-se que  $\kappa_N^2 - 2M\kappa_N + K = 0$ , onde definem-se os coeficientes

$$M = \frac{1}{2} \frac{g_{11}h_{22} - 2g_{12}h_{12} + g_{22}h_{11}}{g_{11}g_{22} - g_{12}^2} = \frac{k_1 + k_2}{2}, \quad (2.25)$$

$$K = \frac{h_{11}h_{22} - h_{12}^2}{g_{11}g_{22} - g_{12}^2} = k_1k_2. \quad (2.26)$$

A quantidade  $M$  é chamada de curvatura média, enquanto  $K$  é a curvatura Gaussiana da superfície. Os extremos  $k_1$  e  $k_2$  recebem o nome de curvaturas principais, cujas direções correspondentes são as direções principais.

### 2.2.1 Helicoide

Por conveniência, considerar-se-á  $q_1 = \phi$  e  $q_2 = u$ , tais que  $\phi \in \mathbb{R}$  e  $u \in \mathbb{R}$  são as coordenadas da superfície, além de uma constante real,  $a$ . A helicoide (cujo gráfico está na figura 2.5) é uma superfície parametrizada por

$$\mathbf{r}(\phi, u) = (u \cos(\phi), u \sin(\phi), a\phi), \quad (2.27)$$

de maneira que existe uma hélice contida nessa superfície para cada valor de  $u$  mantido fixo. Consequentemente, os coeficientes da primeira forma fundamental<sup>4</sup> são  $g_{11} = a^2 + u^2$ ,  $g_{12} = g_{21} = 0$  e  $g_{22} = 1$ , o que retorna o elemento de linha

$$ds^2 = (a^2 + u^2) d\phi^2 + du^2. \quad (2.28)$$

Como  $g_{12}$  é nulo, então  $\phi$  e  $u$  são coordenadas ortogonais na superfície.

Utilizando (2.18) e os coeficientes da primeira forma fundamental, nota-se que o

---

<sup>4</sup>Como  $q_1 = \phi$  e  $q_2 = u$ , é também usual a notação  $g_{11} = g_{\phi\phi}$ ,  $g_{12} = g_{\phi u}$  e  $g_{22} = g_{uu}$ , e analogamente para  $h_{ij}$ .

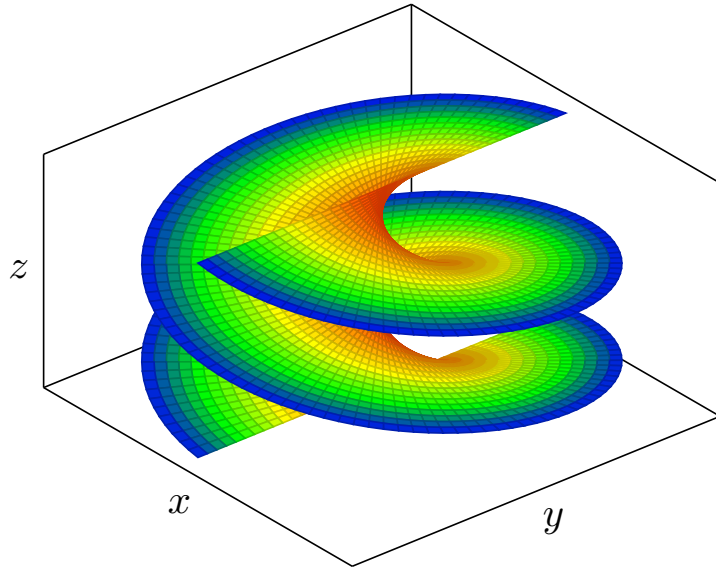


Figura 2.5 – Gráfico tridimensional da helicóide com  $0 < \phi < 2\pi$ . Existe uma hélice contida nessa superfície para cada valor de  $u$  fixo.

vetor normal à helicóide é dado por

$$\mathbf{N} = \frac{1}{\sqrt{a^2 + u^2}} (-a \sin(\phi), a \cos(\phi), -u),$$

de modo que os coeficientes da segunda forma fundamental são  $h_{11} = 0$ ,  $h_{12} = h_{21} = \frac{a}{\sqrt{a^2 + u^2}}$  e  $h_{22} = 0$ . Da equação (2.25), que define a curvatura média, é notório que  $M = 0$  para a helicóide, o que a caracteriza como uma superfície mínima. Por outro lado, de (2.26), a sua curvatura Gaussiana é dada por

$$K = -\frac{a^2}{(a^2 + u^2)^2}, \quad (2.29)$$

sendo essa uma quantidade sempre negativa para tal superfície.

### 2.2.2 Catenóide

Mostrada na figura 2.6, a catenóide é uma superfície obtida através da revolução de uma catenária, sendo usualmente designada pela parametrização

$$\tilde{\mathbf{r}}(\phi, v) = (a \cosh(v/a) \cos(\phi), a \cosh(v/a) \sin(\phi), v), \quad (2.30)$$

na qual  $q_1 = \phi$  e  $q_2 = v$  são parâmetros tais que  $\phi \in (0, 2\pi)$  e  $v \in \mathbb{R}$ . A constante  $a > 0$  é chamada de “raio da garganta” por alguns autores, pois corresponde ao raio do círculo que é formado quando  $v = 0$ . Todavia, é conveniente introduzir um novo parâmetro  $u = a \sinh(v/a)$  (comprimento de arco da catenária), de modo que se obtém uma nova

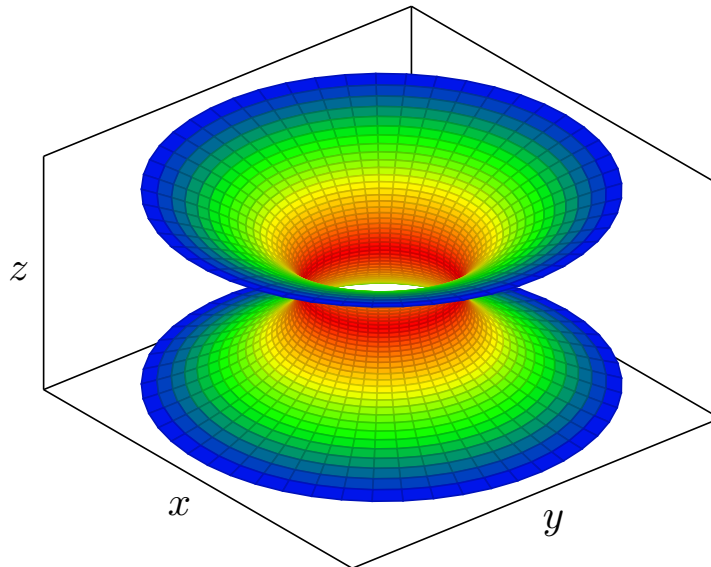


Figura 2.6 – Gráfico tridimensional da catenoide, a qual é uma superfície gerada pela revolução de uma catenária. O mapa de cores é tal que, na deformação da helicoides para a catenoide, a cor de cada ponto correspondente é mantida.

parametrização

$$\mathbf{r}(\phi, u) = \left( \sqrt{a^2 + u^2} \cos(\phi), \sqrt{a^2 + u^2} \sin(\phi), a \operatorname{arcsinh}(u/a) \right), \quad (2.31)$$

onde manipulações algébricas com a identidade  $\cosh^2(v/a) - \sinh^2(v/a) = 1$  foram utilizadas.

Dessa maneira, os coeficientes da primeira forma fundamental da catenoide são  $g_{11} = a^2 + u^2$ ,  $g_{12} = g_{21} = 0$  e  $g_{22} = 1$ , enquanto os coeficientes da segunda forma fundamental são  $h_{11} = -a$ ,  $h_{12} = h_{21} = 0$  e  $h_{22} = \frac{a}{a^2 + u^2}$ . Como nessas parametrizações a helicoides e a catenoide possuem os mesmos coeficientes da primeira forma fundamental, elas são localmente isométricas, o que implica que elas são intrinsecamente indistinguíveis para  $0 < \phi < 2\pi$ . Em outras palavras, é possível deformar uma catenoide em uma helicoides com  $0 < \phi < 2\pi$ , mantendo a métrica. Segue do Teorema Egrégio de Gauss que elas possuem a mesma curvatura Gaussiana, dada pela equação (2.29). Além disso, resulta da equação (2.25) que a catenoide também é uma superfície mínima, pois a sua curvatura média é  $M = 0$ . As regiões com a mesma cor nas figuras 2.5 e 2.6 indicam as regiões correspondentes nas respectivas superfícies.

## 2.3 Equações de Weingarten e elementos de área

Como mostrado na subseção 2.2, o produto escalar entre o vetor  $\mathbf{N}$  e o vetor  $\mathbf{r}_{q_k}$  (com  $k = 1, 2$ ) é sempre nulo em uma superfície regular. Assim, a derivada de  $\mathbf{N} \cdot \mathbf{r}_{q_k}$  com

relação a  $q_i$  é, portanto,

$$\frac{\partial}{\partial q_i} (\mathbf{N} \cdot \mathbf{r}_{q_k}) = \mathbf{N}_{q_i} \cdot \mathbf{r}_{q_k} + \mathbf{N} \cdot \mathbf{r}_{q_k q_i} = 0,$$

para o índice  $i = 1, 2$ . Desse modo, é notório que

$$h_{ki} = \mathbf{N} \cdot \mathbf{r}_{q_k q_i} = -\mathbf{N}_{q_i} \cdot \mathbf{r}_{q_k}, \quad (2.32)$$

onde a equação (2.32) é uma maneira alternativa de encontrar os coeficientes da segunda forma fundamental. Devido ao fato de que os  $\mathbf{N}_{q_i}$  estão contidos no plano tangente, é possível escrevê-los como uma combinação linear dos vetores  $\mathbf{r}_{q_j}$ , isto é,

$$\mathbf{N}_{q_i} = \alpha_{i1} \mathbf{r}_{q_1} + \alpha_{i2} \mathbf{r}_{q_2} = \sum_{j=1}^2 \alpha_{ij} \mathbf{r}_{q_j}, \quad (2.33)$$

sendo os  $\alpha_{ij}$  coeficientes a determinar.

Com o auxílio de (2.32) e (2.33), ao realizar o produto escalar entre  $\mathbf{N}_{q_i}$  e  $\mathbf{r}_{q_k}$ , obtém-se a relação

$$h_{ki} = - \sum_{j=1}^2 \alpha_{ij} g_{jk},$$

o que é correspondente a escrever

$$\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} g_{11} & g_{21} \\ g_{12} & g_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

sendo, assim, equivalente a um sistema linear formado por quatro equações. A partir de (2.34) é possível notar que

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} g_{11} & g_{21} \\ g_{12} & g_{22} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix},$$

da qual, ao utilizar que  $g_{12} = g_{21}$  e  $h_{12} = h_{21}$ , segue que

$$\begin{aligned} \alpha_{11} &= \frac{1}{g} (g_{12} h_{12} - g_{22} h_{11}), \\ \alpha_{12} &= \frac{1}{g} (g_{12} h_{11} - g_{11} h_{12}), \\ \alpha_{21} &= \frac{1}{g} (g_{12} h_{22} - g_{22} h_{12}), \\ \alpha_{22} &= \frac{1}{g} (g_{12} h_{12} - g_{11} h_{22}). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Em (2.35) estão as chamadas de equações de Weingarten, as quais determinam os  $\alpha_{ij}$  de

(2.33) em termos dos coeficientes da primeira e da segunda formas fundamentais.

Os coeficientes  $\alpha_{ij}$  podem também ser organizados em uma matriz designada por<sup>5</sup>

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

Assim, das equações (2.34) e (2.36), segue que

$$\mathbf{h} = -\mathbf{g}^T \boldsymbol{\alpha}^T = -(\boldsymbol{\alpha} \mathbf{g})^T,$$

onde o sobrescrito  $T$  indica a operação de transposição. Como a matriz constituída pelos coeficientes da segunda forma fundamental é simétrica, tem-se que  $\mathbf{h} = \mathbf{h}^T$ , de tal modo que se encontra a importante relação

$$\boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{h} \mathbf{g}^{-1}, \quad (2.37)$$

de onde decorre diretamente que  $\det(\boldsymbol{\alpha}) = \det(-\boldsymbol{\alpha}) = h/g$ , para os determinantes  $g = \det(\mathbf{g})$  e  $h = \det(\mathbf{h})$ .

Tais resultados permitem reescrever a curvatura média, que foi previamente definida na equação (2.25), como sendo

$$M = \frac{1}{2g} (g_{11}h_{22} - 2g_{12}h_{12} + g_{22}h_{11}) = -\frac{1}{2} \text{Tr}(\boldsymbol{\alpha}), \quad (2.38)$$

onde  $\text{Tr}(\boldsymbol{\alpha})$  é o traço da matriz apresentada em (2.36) e  $g$  é o determinante do tensor métrico. Semelhantemente, a partir de (2.26), tem-se que a curvatura Gaussiana pode ser expressa como

$$K = \frac{h}{g} = \det(\boldsymbol{\alpha}), \quad (2.39)$$

como consequência da equação (2.37).

Além disso, em muitas aplicações de Geometria Diferencial torna-se necessário o cálculo da área  $A$  de uma determinada região  $A_0$  pertencente a uma superfície regular  $S$ , cuja parametrização depende das coordenadas  $q_1$  e  $q_2$ . Por definição, tal quantidade é dada por

$$A = \iint_{A_0} \sqrt{g} dq_1 dq_2,$$

de maneira que o elemento de área correspondente é expresso como

$$dA = \sqrt{g} dq_1 dq_2, \quad (2.40)$$

onde também é possível escrever  $\sqrt{g} = |\mathbf{r}_{q_1} \times \mathbf{r}_{q_2}|$ .

<sup>5</sup>Não confundir com a parametrização  $\boldsymbol{\alpha}(t)$  utilizada anteriormente para designar uma curva regular.

Portanto, neste capítulo tratou-se de apresentar as propriedades de interesse das curvas e superfícies regulares pelo ponto de vista da Geometria Diferencial. Por conseguinte, no capítulo 3 a construção geométrica do problema físico em questão e as consequências do confinamento da partícula de acordo com a Mecânica Quântica serão discutidas considerando o formalismo do potencial confinante.

## 3 Formalismo do potencial confinante

Para que haja o confinamento a uma superfície  $S$ , é proposto no formalismo do potencial confinante que a partícula fique sempre sujeita à ação de forças que são ortogonais a  $S$  em todos os seus pontos, de modo que o “espalhamento” da função de onda na direção transversal à superfície seja “achatado”. Isso é necessário porque a dinâmica quântica deve obedecer às relações de incerteza [51]. Portanto, a proposta consiste em considerar um potencial que é sempre constante em  $S$ , mas que aumenta bruscamente na direção normal, de tal forma que o confinamento ocorre no limite em que um potencial infinito mantém a partícula ligada a  $S$  [28–30]. Um procedimento análogo é realizado para curvas. Então, como consequência do confinamento, um potencial induzido por geometria aparece na equação de Schrödinger efetiva de uma partícula confinada a uma curva ou a uma superfície.

### 3.1 Partícula confinada a uma superfície

#### 3.1.1 Construção geométrica do problema

Antes de estudar a equação de Schrödinger, é necessário realizar a construção geométrica do problema, o que consiste em descrever as vizinhanças da superfície de confinamento. Para  $S$  uma superfície regular imersa em  $\mathbb{R}^3$  e parametrizada por  $\mathbf{r}(q_1, q_2)$ , tem-se que a vizinhança próxima a  $S$  pode ser parametrizada como

$$\mathbf{R}(q_1, q_2, q_3) = \mathbf{r}(q_1, q_2) + q_3 \mathbf{N}(q_1, q_2), \quad (3.1)$$

onde  $\mathbf{N}$  é o vetor normal a  $S$ . Aqui,  $q_3$  é um parâmetro cujo módulo é a distância entre um ponto  $p = (q_1, q_2, 0)$  em  $S$  e outro ponto  $Q = (q_1, q_2, q_3)$ , nas coordenadas da vizinhança, de modo que  $S$  é localizada em  $q_3 = 0$ , como mostra a figura 3.1.

Seguindo as discussões da subseção 2.2, tem-se que  $g_{ij}$  e  $h_{ij}$  são os coeficientes da primeira e segunda formas fundamentais de  $S$ , respectivamente. De modo análogo, definem-se os elementos do tensor métrico da vizinhança de  $S$  como sendo  $G_{ij} = \mathbf{R}_{q_i} \cdot \mathbf{R}_{q_j}$ , para  $i, j = 1, 2, 3$ . Consequentemente, torna-se necessário conhecer as derivadas do vetor  $\mathbf{R}$  com relação aos parâmetros  $q_1$ ,  $q_2$  e  $q_3$  [52, 53].

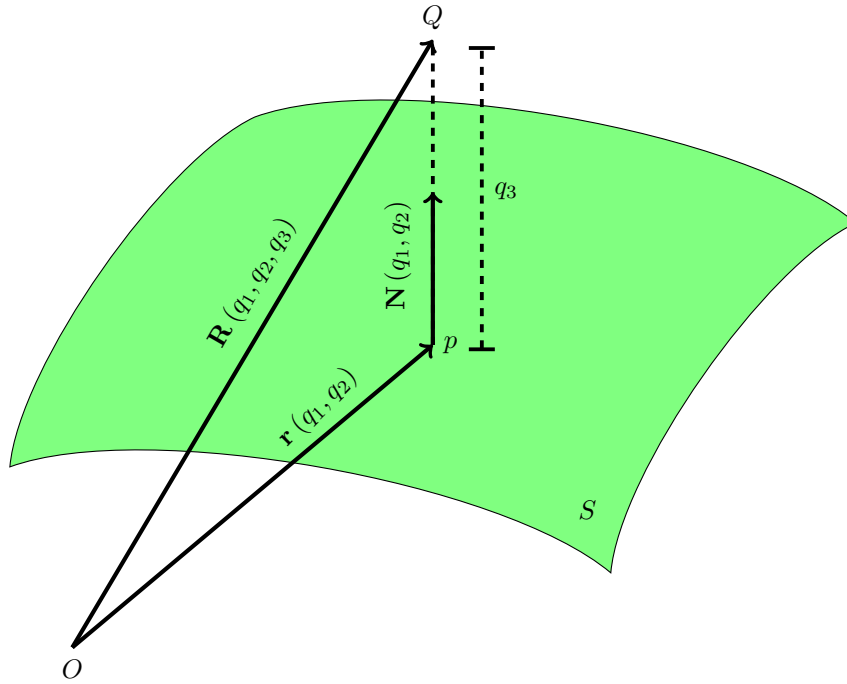


Figura 3.1 – Ilustração da construção geométrica do problema. A partir de uma origem  $O$ , para  $S$  uma superfície regular parametrizada por  $\mathbf{r}(q_1, q_2)$  e cujo vetor normal é  $\mathbf{N}(q_1, q_2)$ , tem-se que a vizinhança de  $S$  pode ser parametrizada por  $\mathbf{R}(q_1, q_2, q_3)$ , onde o módulo de  $q_3$  é a distância entre os pontos  $p$  e  $Q$ .

Da equação (3.1), segue que a derivada de  $\mathbf{R}$  com relação a  $q_3$  é simplesmente

$$\mathbf{R}_{q_3} = \mathbf{N}, \quad (3.2)$$

que é o próprio vetor normal à superfície. Por outro lado, com o auxílio de (2.33), tem-se que as derivadas de  $\mathbf{R}$  com relação a  $q_1$  e a  $q_2$  são dadas por

$$\mathbf{R}_{q_i} = \mathbf{r}_{q_i} + q_3 \mathbf{N}_{q_i} = \mathbf{r}_{q_i} + q_3 \sum_{j=1}^2 \alpha_{ij} \mathbf{r}_{q_j},$$

para  $i = 1, 2$ . Tal expressão pode ser reescrita mais apropriadamente como

$$\mathbf{R}_{q_i} = \sum_{j=1}^2 (\delta_{ij} + q_3 \alpha_{ij}) \mathbf{r}_{q_j}, \quad (3.3)$$

onde  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker [29, 54].

Os elementos  $G_{13}$ ,  $G_{23}$ ,  $G_{31}$ ,  $G_{32}$  e  $G_{33}$  podem ser encontrados facilmente como consequência direta das equações (3.2) e (3.3). De fato, o uso da equação (3.2) torna notório que

$$G_{33} = \mathbf{R}_{q_3} \cdot \mathbf{R}_{q_3} = \mathbf{N} \cdot \mathbf{N},$$

ou seja, obtém-se  $G_{33} = 1$ , pois o vetor normal é unitário. De forma semelhante, para



$i = 1, 2$  tem-se que os elementos  $G_{i3}$  são dados por

$$G_{i3} = \mathbf{R}_{q_i} \cdot \mathbf{R}_{q_3} = \sum_{j=1}^2 (\delta_{ij} + q_3 \alpha_{ij}) (\mathbf{r}_{q_j} \cdot \mathbf{N}),$$

da qual decorre que  $G_{i3} = G_{3i} = 0$ , porque o produto escalar entre  $\mathbf{r}_{q_j}$  e  $\mathbf{N}$  é sempre nulo [52].

Por outro lado, a partir da utilização de (3.3), segue que os demais elementos  $G_{ij}$  são dados por

$$G_{ij} = \left( \sum_{k=1}^2 (\delta_{ik} + q_3 \alpha_{ik}) \mathbf{r}_{q_k} \right) \cdot \left( \sum_{l=1}^2 (\delta_{jl} + q_3 \alpha_{jl}) \mathbf{r}_{q_l} \right), \quad (3.4)$$

para  $i, j = 1, 2$ . Após realizar o produto escalar e algumas manipulações algébricas em (3.4), encontra-se a equação

$$G_{ij} = g_{ij} + q_3 \left( \sum_{k=1}^2 \alpha_{ik} g_{kj} + \sum_{l=1}^2 \alpha_{jl} g_{li} \right) + q_3^2 \sum_{k,l=1}^2 \alpha_{ik} g_{kl} \alpha_{jl}, \quad (3.5)$$

de onde é possível, por meio de uma análise direta, observar que os respectivos somatórios podem ser expressos<sup>1</sup> como

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^2 \alpha_{ik} g_{kj} &= [\mathbf{a}\mathbf{g}]_{ij}, \\ \sum_{l=1}^2 \alpha_{jl} g_{li} &= [(\mathbf{a}\mathbf{g})^T]_{ij}, \\ \sum_{k,l=1}^2 \alpha_{ik} g_{kl} \alpha_{jl} &= [\mathbf{a}\mathbf{g}\mathbf{a}^T]_{ij}. \end{aligned}$$

Desse modo, a equação (3.5) é reescrita de maneira mais conveniente como sendo

$$G_{ij} = g_{ij} + q_3 [\mathbf{a}\mathbf{g} + (\mathbf{a}\mathbf{g})^T]_{ij} + q_3^2 [\mathbf{a}\mathbf{g}\mathbf{a}^T]_{ij}, \quad (3.6)$$

onde se têm os índices  $i, j = 1, 2$ .

Por meio dos  $G_{ij}$ , obtém-se o tensor métrico nas vizinhanças de  $S$ ,

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & 0 \\ G_{21} & G_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

<sup>1</sup>A notação  $[\mathbf{B}]_{ij}$  significa que este elemento está na  $i$ -ésima linha e na  $j$ -ésima coluna da matriz  $\mathbf{B}$ .

onde os coeficientes  $G_{11}$ ,  $G_{12}$ ,  $G_{21}$  e  $G_{22}$  são encontrados através do uso da equação (3.6). Definindo os elementos da matriz inversa de  $\mathbf{G}$  como sendo  $G^{ij}$ , tem-se que

$$\mathbf{G}^{-1} = \begin{pmatrix} G^{11} & G^{12} & G^{13} \\ G^{21} & G^{22} & G^{23} \\ G^{31} & G^{32} & G^{33} \end{pmatrix} = \frac{1}{G} \begin{pmatrix} G_{22} & -G_{12} & 0 \\ -G_{21} & G_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

para  $G = \det(\mathbf{G}) = G_{11}G_{22} - G_{12}^2$ , o determinante de  $\mathbf{G}$ .

Pela identidade de Lagrange, de forma completamente análoga ao que foi feito na equação (2.17), é possível mostrar que  $\sqrt{G} = |\mathbf{R}_{q_1} \times \mathbf{R}_{q_2}|$ . Por outro lado, ao utilizar a equação (3.3), tem-se que o produto vetorial entre os vetores  $\mathbf{R}_{q_1}$  e  $\mathbf{R}_{q_2}$  é dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{q_1} \times \mathbf{R}_{q_2} &= (\mathbf{r}_{q_1} + q_3\alpha_{11}\mathbf{r}_{q_1} + q_3\alpha_{12}\mathbf{r}_{q_2}) \times (\mathbf{r}_{q_2} + q_3\alpha_{21}\mathbf{r}_{q_1} + q_3\alpha_{22}\mathbf{r}_{q_2}) \\ &= [1 + q_3(\alpha_{11} + \alpha_{22}) + q_3^2(\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21})] (\mathbf{r}_{q_1} \times \mathbf{r}_{q_2}) \\ &= [1 + q_3 \text{Tr}(\boldsymbol{\alpha}) + q_3^2 \det(\boldsymbol{\alpha})] \sqrt{g}\mathbf{N}, \end{aligned}$$

visto que  $\mathbf{r}_{q_1} \times \mathbf{r}_{q_2} = \sqrt{g}\mathbf{N}$ , como mostra a equação (2.18). Definindo a função

$$f(q_1, q_2, q_3) = 1 + q_3 \text{Tr}(\boldsymbol{\alpha}) + q_3^2 \det(\boldsymbol{\alpha}), \quad (3.9)$$

segue que  $\mathbf{R}_{q_1} \times \mathbf{R}_{q_2} = f\sqrt{g}\mathbf{N}$ , de modo que se obtém a relação entre o determinante do tensor métrico da superfície e o determinante do tensor métrico na sua vizinhança:

$$\sqrt{G} = f\sqrt{g}.$$

Torna-se notável que o elemento de volume, denotado por  $d\mathcal{V}$ , na região de interesse é

$$d\mathcal{V} = \sqrt{G}dq_1dq_2dq_3 = f(q_1, q_2, q_3) dAdq_3, \quad (3.10)$$

onde  $dA = \sqrt{g}dq_1dq_2$  é um elemento de área de  $S$  [41, 55].

### 3.1.2 Equação de Schrödinger

Para uma partícula quântica de massa  $m$ , tem-se a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad (3.11)$$

onde  $\hbar$  é a constante reduzida de Planck,  $\nabla^2$  é o operador Laplaciano,  $V$  é o potencial no qual a partícula está sujeita e  $\Psi = \Psi(q_1, q_2, q_3, t)$  é a função de onda dependente do tempo,  $t$  [56]. Conforme dito no início desta seção, propõe-se que a partícula esteja sujeita a um potencial  $V = V_\lambda(q_3)$  constante na superfície de confinamento, mas que aumenta

bruscamente em sua direção normal. Dessa forma, o confinamento ocorre ao tomar o limite em que  $\lambda \rightarrow \infty$ , de modo que

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} V_\lambda(q_3) = \begin{cases} 0, & \text{se } q_3 = 0, \\ \infty, & \text{se } q_3 \neq 0, \end{cases}$$

com  $\lambda$  funcionando como um parâmetro de achatamento da função de onda [29].

Uma vez que o potencial não depende do tempo, pode-se usar na equação (3.11) o *Ansatz*  $\Psi(q_1, q_2, q_3, t) = \exp(-iEt/\hbar) \psi(q_1, q_2, q_3)$ , de onde se encontra a equação de Schrödinger independente do tempo<sup>2</sup>

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V_\lambda(q_3) \psi = E\psi, \quad (3.12)$$

para  $E$  a energia da partícula [22]. Como, de modo geral, o Laplaciano deve ser considerado em coordenadas curvilíneas, segue que

$$\nabla^2 \psi = \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left( \sqrt{G} G^{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right), \quad (3.13)$$

sendo  $G^{ij}$  os elementos da matriz inversa de  $\mathbf{G}$ , que podem ser obtidos em (3.8), e  $G = \det(\mathbf{G})$  [57].

Recordando que  $G^{13} = G^{23} = G^{31} = G^{32} = 0$  e que  $G^{33} = 1$ , segue de (3.13) que

$$\begin{aligned} \nabla^2 \psi &= \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left( \sqrt{G} G^{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right) + \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_3} \left( \sqrt{G} \frac{\partial \psi}{\partial q_3} \right) \\ &= \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left( \sqrt{G} G^{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_3^2} + \frac{\partial}{\partial q_3} \left( \ln \sqrt{G} \right) \frac{\partial \psi}{\partial q_3}. \end{aligned}$$

Notoriamente, os termos com as derivadas com relação a  $q_3$  estão associados à região vizinha a  $S$  e, por outro lado, o somatório é a parte relacionada a  $S$ , pois contém as derivadas com relação a  $q_1$  e a  $q_2$ . Por conseguinte, escrevendo a parte da superfície como

$$\mathcal{D}(q_1, q_2, q_3) \psi = \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left( \sqrt{G} G^{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right), \quad (3.14)$$

tem-se diretamente que

$$\nabla^2 \psi = \mathcal{D}(q_1, q_2, q_3) \psi + \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_3^2} + \frac{\partial}{\partial q_3} \left( \ln \sqrt{G} \right) \frac{\partial \psi}{\partial q_3}. \quad (3.15)$$

<sup>2</sup>Em seu artigo, da Costa considera a equação de Schrödinger dependente do tempo. Todavia, como pode-se escrever  $\Psi = \exp(-iEt/\hbar) \psi$ , foi considerado neste trabalho apenas a equação independente do tempo.

Substituindo a equação (3.15) em (3.12), obtém-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\mathcal{D}(q_1, q_2, q_3)\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial q_3^2} + \frac{\partial}{\partial q_3}\left(\ln\sqrt{G}\right)\frac{\partial\psi}{\partial q_3}\right) + V_\lambda(q_3)\psi = E\psi, \quad (3.16)$$

que é a equação de Schrödinger a ser desenvolvida [55].

Alguns comentários sobre a função de onda são necessários. Tem-se através de (3.10) que a probabilidade de encontrar a partícula em um certo volume é expressa como

$$\begin{aligned} P_V &= \iiint |\psi(q_1, q_2, q_3)|^2 d\mathcal{V} \\ &= \iiint |\psi(q_1, q_2, q_3)|^2 f(q_1, q_2, q_3) dAdq_3 \\ &= \iiint |\chi(q_1, q_2, q_3)|^2 dAdq_3, \end{aligned}$$

onde definiu-se uma nova função de onda:

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = [f(q_1, q_2, q_3)]^{1/2} \psi(q_1, q_2, q_3). \quad (3.17)$$

Levando em consideração tudo o que foi discutido anteriormente, é natural propor uma separação de variáveis do tipo

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = \chi_T(q_1, q_2) \chi_N(q_3), \quad (3.18)$$

para  $\chi_T(q_1, q_2)$  uma função que depende das coordenadas tangenciais à superfície e  $\chi_N(q_3)$  uma função que depende da coordenada normal. Assim, pode-se escrever

$$P_V = \iint |\chi_T(q_1, q_2)|^2 \left( \int |\chi_N(q_3)|^2 dq_3 \right) dA,$$

de tal maneira que  $|\chi_T(q_1, q_2)|^2 \int |\chi_N(q_3)|^2 dq_3$  é interpretada como uma densidade de probabilidade superficial.

Dessa forma, a próxima etapa do procedimento consiste em fazer  $\psi = \chi/\sqrt{f}$  na equação (3.16) e calcular as correspondentes derivadas. Disso, é necessário observar que

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi}{\partial q_3} &= \frac{\partial}{\partial q_3} \left( \frac{\chi}{\sqrt{f}} \right) = \frac{1}{\sqrt{f}} \frac{\partial\chi}{\partial q_3} - \frac{1}{2} \frac{\chi}{f\sqrt{f}} \frac{\partial f}{\partial q_3}, \\ \frac{\partial^2\psi}{\partial q_3^2} &= \frac{1}{\sqrt{f}} \frac{\partial^2\chi}{\partial q_3^2} - \frac{1}{f\sqrt{f}} \frac{\partial f}{\partial q_3} \frac{\partial\chi}{\partial q_3} + \frac{3}{4} \frac{\chi}{f^2\sqrt{f}} \left( \frac{\partial f}{\partial q_3} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{\chi}{f\sqrt{f}} \frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2}, \end{aligned}$$

além de que

$$\frac{\partial}{\partial q_3} \left( \ln\sqrt{G} \right) = \frac{\partial}{\partial q_3} \left( \ln(f\sqrt{g}) \right) = \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial q_3},$$

visto que  $\sqrt{g}$  não depende de  $q_3$ . Após algumas manipulações algébricas, encontra-se

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial q_3^2} + \frac{\partial}{\partial q_3} \left( \ln \sqrt{G} \right) \frac{\partial \psi}{\partial q_3} = \frac{1}{\sqrt{f}} \left[ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + \frac{1}{4f^2} \left( \left( \frac{\partial f}{\partial q_3} \right)^2 - 2f \frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2} \right) \chi \right],$$

de modo que a equação de Schrödinger (3.16) torna-se

$$-\frac{\hbar^2 \sqrt{f}}{2m} \mathcal{D} \left( \frac{\chi}{\sqrt{f}} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + \frac{1}{4f^2} \left( \left( \frac{\partial f}{\partial q_3} \right)^2 - 2f \frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2} \right) \chi \right] + V_\lambda(q_3) \chi = E \chi, \quad (3.19)$$

onde ambos os lados da equação foram multiplicados por  $\sqrt{f}$ .

Utilizando a equação (3.9), observa-se que

$$\left( \frac{\partial f}{\partial q_3} \right)^2 - 2f \frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2} = [\text{Tr}(\boldsymbol{\alpha})]^2 + 4q_3 \text{Tr}(\boldsymbol{\alpha}) \det(\boldsymbol{\alpha}) + 4q_3^2 [\det(\boldsymbol{\alpha})]^2 - 4f \det(\boldsymbol{\alpha}), \quad (3.20)$$

pois os elementos da matriz  $\boldsymbol{\alpha}$  não dependem de  $q_3$ . Pode-se, agora, considerar o efeito do potencial de confinamento,  $V_\lambda(q_3)$ , quando  $\lambda \rightarrow \infty$ . Nesse limite a partícula sente uma abrupta barreira de potencial em cada um dos dois lados da superfície, de modo que  $\psi$  só será significativamente não-nula em um pequeno intervalo ao redor de  $q_3 = 0$ , isto é, nas proximidades imediatas da superfície. Logo, isso é equivalente a tomar  $q_3 \rightarrow 0$  em (3.19), exceto em  $V_\lambda(q_3)$ , visto que o potencial torna-se bruscamente diferente de zero fora de  $S$ .

Obviamente  $\lim_{q_3 \rightarrow 0} f = 1$ , de modo que nesse limite obtém-se de (3.20) que

$$\frac{1}{4f^2} \left( \left( \frac{\partial f}{\partial q_3} \right)^2 - 2f \frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2} \right) \rightarrow \left[ \frac{1}{2} \text{Tr}(\boldsymbol{\alpha}) \right]^2 - \det(\boldsymbol{\alpha}).$$

Além disso, decorre que os coeficientes  $G_{ij} \rightarrow g_{ij}$  e  $G^{ij} \rightarrow g^{ij}$  (para  $i, j = 1, 2$ ), bem como o determinante  $G \rightarrow g$ . Então, ao recorrer à equação (3.14), segue que

$$\sqrt{f} \mathcal{D} \left( \frac{\chi}{\sqrt{f}} \right) \rightarrow \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left( \sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \chi}{\partial q_j} \right) = \Delta_g \chi, \quad (3.21)$$

onde  $\Delta_g$  é operador de Laplace-Beltrami nas coordenadas de  $S$  [51, 52, 57]. Por conseguinte, substituindo esses resultados em (3.19), tem-se que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_g \chi - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \left[ \frac{1}{2} \text{Tr}(\boldsymbol{\alpha}) \right]^2 - \det(\boldsymbol{\alpha}) \right) \chi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi = E \chi,$$

ou ainda mais compactamente,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_g \chi - \frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K) \chi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi = E \chi. \quad (3.22)$$

Empregando em (3.22) a separação de variáveis proposta em (3.18), tem-se pelo procedimento usual que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\chi_N} \frac{\partial^2 \chi_N}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\chi_T} \Delta_g \chi_T + \frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K) + E = E_N,$$

onde  $E_N$  é a constante de separação e possui unidade de energia. Desse modo, obtêm-se duas equações:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi_N}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi_N = E_N \chi_N, \quad (3.23)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_g \chi_T - \frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K) \chi_T = E_T \chi_T, \quad (3.24)$$

para a constante  $E_T = E - E_N$ .

Notoriamente, a equação (3.23) equivale a uma equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula com energia  $E_N$  que está sujeita ao potencial  $V_\lambda(q_3)$  [55, 58]. Por outro lado, (3.24) é equivalente a uma equação de Schrödinger bidimensional (nas coordenadas da superfície) para uma partícula com energia dada por  $E_T$  e que está sujeita ao potencial induzido por geometria

$$V_S(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K). \quad (3.25)$$

Vale ressaltar aqui que superfícies isométricas possuem a mesma curvatura Gaussiana [33, 34], mas suas respectivas curvaturas médias diferem, exceto quando ambas são também superfícies mínimas ( $M = 0$ ). Esse é o caso da helicóide e da catenoide, que são objeto de estudo deste trabalho, de modo que o potencial (3.25) é o mesmo para ambas.

Com as soluções de (3.23) e (3.24), encontra-se a função de onda,  $\chi(q_1, q_2, q_3) = \chi_T(q_1, q_2) \chi_N(q_3)$ , e a energia total da partícula,  $E = E_T + E_N$ . A função de onda sempre terá, portanto, um caráter tridimensional, por menor que seja o intervalo em  $q_3$  no qual ela é consideravelmente diferente de zero. Todavia, devido ao processo de separação das variáveis e ao fato de que o interesse está na superfície em si, a equação (3.23) pode ser devidamente negligenciada [29].

Em suma, o formalismo do potencial confinante mostra que uma partícula de massa  $m$ , confinada a uma superfície  $S$ , sente a ação de um potencial efetivo induzido por geometria,  $V_S$ , de tal forma que se tem, em  $S$ , a equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_g \chi_T + V_S(q_1, q_2) \chi_T = E_T \chi_T, \quad (3.26)$$

que não depende do potencial de confinamento,  $V_\lambda$ . A seguir, um procedimento semelhante será realizado para estudar o confinamento de uma partícula a uma curva.

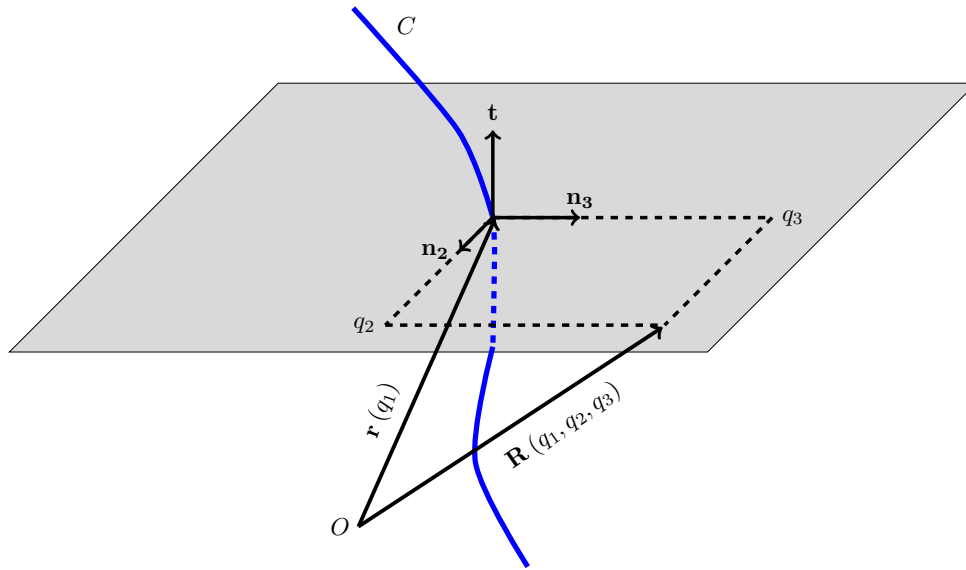


Figura 3.2 – Construção geométrica do procedimento de confinamento a uma curva parametrizada por  $\mathbf{r}(q_1)$ . A parametrização da vizinhança da curva é  $\mathbf{R}(q_1, q_2, q_3)$ , onde  $q_2$  e  $q_3$  são coordenadas cartesianas no plano normal.

## 3.2 Partícula confinada a uma curva

### 3.2.1 Construção geométrica do problema

Considerar-se-á uma curva regular (imersa em  $\mathbb{R}^3$ ) que é parametrizada por  $\mathbf{r}(q_1)$ , onde  $q_1 = s$  é o seu comprimento de arco. Para cada ponto dessa curva, cujo traço será chamado de  $C$ , a parametrização de sua vizinhança pode ser construída através de dois versores ortogonais,  $\mathbf{n}_2(q_1)$  e  $\mathbf{n}_3(q_1)$ , que estão contidos no plano normal. Desse modo, a parametrização da vizinhança será

$$\mathbf{R}(q_1, q_2, q_3) = \mathbf{r}(q_1) + q_2 \mathbf{n}_2(q_1) + q_3 \mathbf{n}_3(q_1), \quad (3.27)$$

onde  $q_2$  e  $q_3$  são as correspondentes coordenadas cartesianas no plano normal, conforme está ilustrado na figura 3.2.

Em termos dos vetores normal e binormal,  $\mathbf{n}$  e  $\mathbf{b}$ , podem-se escrever  $\mathbf{n}_2(q_1)$  e  $\mathbf{n}_3(q_1)$  em coordenadas curvilíneas no plano normal:

$$\mathbf{n}_2(q_1) = \cos(\theta) \mathbf{n}(q_1) - \sin(\theta) \mathbf{b}(q_1), \quad (3.28)$$

$$\mathbf{n}_3(q_1) = \sin(\theta) \mathbf{n}(q_1) + \cos(\theta) \mathbf{b}(q_1), \quad (3.29)$$

para o ângulo polar  $\theta = \theta(q_1)$ . Ao isolar  $\mathbf{n}(q_1)$  e  $\mathbf{b}(q_1)$  de (3.28) e (3.29), obtêm-se

$$\mathbf{n}(q_1) = \cos(\theta) \mathbf{n}_2(q_1) + \sin(\theta) \mathbf{n}_3(q_1),$$

$$\mathbf{b}(q_1) = -\sin(\theta) \mathbf{n}_2(q_1) + \cos(\theta) \mathbf{n}_3(q_1),$$

de onde decorre diretamente que  $\tau(q_1) = -\mathbf{b}'(q_1) \cdot \mathbf{n}(q_1) = \frac{d\theta}{dq_1}$  é a torção da referida curva [29, 54].

Com as fórmulas de Frenet (2.3) e (2.4), encontram-se das equações (3.28) e (3.29) que  $\mathbf{n}_2'(q_1) = -\kappa(q_1) \cos(\theta) \mathbf{t}(q_1)$  e  $\mathbf{n}_3'(q_1) = -\kappa(q_1) \sin(\theta) \mathbf{t}(q_1)$ , onde  $\mathbf{r}_{q_1} = \mathbf{t}(q_1)$  é o vetor tangente e  $\kappa(q_1)$  é a curvatura. Com isso, ao derivar (3.27) com relação a  $q_1$  obtém-se que

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{q_1} &= \mathbf{t}(q_1) - q_2 \kappa(q_1) \cos(\theta) \mathbf{t}(q_1) - q_3 \kappa(q_1) \sin(\theta) \mathbf{t}(q_1) \\ &= [1 - \kappa(q_1) (q_2 \cos(\theta) + q_3 \sin(\theta))] \mathbf{t}(q_1). \end{aligned}$$

Definindo por conveniência a função

$$f(q_1, q_2, q_3) = q_2 \cos(\theta) + q_3 \sin(\theta), \quad (3.30)$$

tem-se que

$$\mathbf{R}_{q_1} = [1 - \kappa(q_1) f(q_1, q_2, q_3)] \mathbf{t}(q_1). \quad (3.31)$$

Por outro lado, as derivadas da equação (3.27) com relação aos parâmetros  $q_2$  e  $q_3$  são dadas por

$$\mathbf{R}_{q_i} = \mathbf{n}_i(q_1), \quad (3.32)$$

para  $i = 2, 3$ .

Utilizando as equações (3.31) e (3.32), encontram-se que  $G_{11} = (1 - \kappa f)^2$ ,  $G_{22} = G_{33} = 1$  e que os demais  $G_{ij}$  são nulos. Assim, o tensor métrico da vizinhança é

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} (1 - \kappa f)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

cujo determinante é  $G = (1 - \kappa f)^2$ . Com isso, os elementos de  $\mathbf{G}^{-1}$  são  $G^{11} = \frac{1}{(1 - \kappa f)^2}$ ,  $G^{22} = G^{33} = 1$ , enquanto os demais  $G^{ij}$  são nulos.

### 3.2.2 Equação de Schrödinger

Similarmente ao caso das superfícies, para que uma partícula quântica de massa  $m$  fique confinada a uma curva, considerar-se-á um potencial de confinamento,  $V_\lambda(q_2, q_3)$ , tal que

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} V_\lambda(q_2, q_3) = \begin{cases} 0, & \text{se } q_2^2 + q_3^2 = 0, \\ \infty, & \text{se } q_2^2 + q_3^2 \neq 0. \end{cases} \quad (3.34)$$



Ao substituir os resultados provenientes da equação (3.33) no Laplaciano em coordenadas curvilíneas, o qual é dado por (3.13), encontra-se que

$$\begin{aligned}\nabla^2\psi &= \frac{1}{1-\kappa f} \frac{\partial}{\partial q_1} \left( \frac{1}{1-\kappa f} \frac{\partial\psi}{\partial q_1} \right) + \sum_{j=2}^3 \frac{1}{1-\kappa f} \frac{\partial}{\partial q_j} \left( (1-\kappa f) \frac{\partial\psi}{\partial q_j} \right) \\ &= \frac{1}{1-\kappa f} \frac{\partial}{\partial q_1} \left( \frac{1}{1-\kappa f} \frac{\partial\psi}{\partial q_1} \right) + \sum_{j=2}^3 \left( \frac{\partial^2\psi}{\partial q_j^2} + \frac{\partial}{\partial q_j} (\ln(1-\kappa f)) \frac{\partial\psi}{\partial q_j} \right),\end{aligned}$$

de modo que obtém-se a equação de Schrödinger independente do tempo

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{1-\kappa f} \frac{\partial}{\partial q_1} \left( \frac{1}{1-\kappa f} \frac{\partial\psi}{\partial q_1} \right) + \sum_{j=2}^3 \left( \frac{\partial^2\psi}{\partial q_j^2} + \frac{\partial}{\partial q_j} (\ln(1-\kappa f)) \frac{\partial\psi}{\partial q_j} \right) \right] \\ + V_\lambda(q_2, q_3) \psi = E\psi,\end{aligned}\tag{3.35}$$

onde  $E$  é a energia da partícula.

Por conseguinte, seguindo um procedimento também análogo ao que foi realizado para o confinamento a uma superfície, e devido ao fato de que, nas vizinhanças da curva, o elemento de volume é dado pela expressão

$$d\mathcal{V} = \sqrt{G} dq_1 dq_2 dq_3 = (1-\kappa f) dq_1 dq_2 dq_3,$$

pode-se propor uma nova função de onda

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = (1-\kappa f)^{1/2} \psi(q_1, q_2, q_3).\tag{3.36}$$

Com a equação (3.36) observa-se que

$$\begin{aligned}\sum_{j=2}^3 \left( \frac{\partial^2\psi}{\partial q_j^2} + \frac{\partial}{\partial q_j} (\ln(1-\kappa f)) \frac{\partial\psi}{\partial q_j} \right) &= \sum_{j=2}^3 \left( \frac{1}{4} \frac{\kappa^2}{(1-\kappa f)^{5/2}} \left( \frac{\partial f}{\partial q_j} \right)^2 \chi + \frac{1}{(1-\kappa f)^{1/2}} \frac{\partial^2\chi}{\partial q_j^2} \right) \\ &= \frac{1}{(1-\kappa f)^{1/2}} \left( \frac{1}{4} \frac{\kappa^2}{(1-\kappa f)^2} \chi + \frac{\partial^2\chi}{\partial q_2^2} + \frac{\partial^2\chi}{\partial q_3^2} \right),\end{aligned}$$

de modo que a equação (3.35) torna-se

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(1-\kappa f)^{1/2}} \frac{\partial}{\partial q_1} \left( \frac{1}{1-\kappa f} \frac{\partial}{\partial q_1} \left( \frac{\chi}{(1-\kappa f)^{1/2}} \right) \right) - \frac{\hbar^2}{8m} \frac{\kappa^2}{(1-\kappa f)^2} \chi \\ - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2\chi}{\partial q_2^2} + \frac{\partial^2\chi}{\partial q_3^2} \right) + V_\lambda(q_2, q_3) \chi = E\chi.\end{aligned}\tag{3.37}$$

De forma análoga ao realizado para o confinamento a uma superfície, é notório de (3.34) que considerar  $\lambda \rightarrow \infty$  é equivalente a fazer  $(q_2, q_3) \rightarrow (0, 0)$  na equação de

Schrödinger, de tal forma que segue de (3.30) que  $f \rightarrow 0$  neste limite de confinamento. Nesse caso, obtêm-se de (3.37) que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_1^2} - \frac{\hbar^2}{8m} \kappa^2 \chi - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_2^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} \right) + V_\lambda(q_2, q_3) \chi = E \chi. \quad (3.38)$$

Finalmente, ao utilizar a separação de variáveis usual  $\chi(q_1, q_2, q_3) = \chi_T(q_1) \chi_N(q_2, q_3)$  em (3.38), obtêm-se as equações

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi_T}{\partial q_1^2} - \frac{\hbar^2}{8m} \kappa^2 \chi_T = E_T \chi_T, \quad (3.39)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \chi_N}{\partial q_2^2} + \frac{\partial^2 \chi_N}{\partial q_3^2} \right) + V_\lambda(q_2, q_3) \chi_N = E_N \chi_N, \quad (3.40)$$

de modo que  $E = E_T + E_N$  é a energia da partícula.

Assim como na equação (3.23), a equação (3.40) pode ser negligenciada, visto que o interesse está em estudar a partícula na curva. Por outro lado, (3.39) é uma equação de Schrödinger unidimensional (na coordenada correspondente ao comprimento de arco) de uma partícula sujeita ao potencial

$$V_C(q_1) = -\frac{\hbar^2}{8m} \kappa^2, \quad (3.41)$$

o qual é induzido pela geometria da curva. Em suma, o formalismo do potencial confinante mostra que, para uma partícula de massa  $m$  confinada a uma curva, tem-se a equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi_T}{\partial q_1^2} + V_C(q_1) \chi_T = E_T \chi_T, \quad (3.42)$$

semelhantemente ao que ocorre para o confinamento a uma superfície [29, 51, 59].

Com a introdução do potencial de confinamento,  $V_\lambda(q_2, q_3)$ , a presente abordagem para curvas reduz a equação de Schrödinger tridimensional em uma equação de Schrödinger efetiva unidimensional, a qual é dada por (3.42). Assim, o aparecimento do potencial induzido por geometria<sup>3</sup>,  $V_C(q_1)$ , é uma consequência da restrição do movimento da partícula. Um ponto importante é que, neste procedimento,  $V_C(q_1)$  independe da torção da curva. Todavia, em alguns trabalhos observou-se que a torção tem um importante papel no confinamento ao tratar-se de curvas fechadas [60], ao considerar outros tipos de forças [61–63], a depender do formato das equipotenciais de  $V_\lambda(q_2, q_3)$  [63, 64] e para o caso em que  $V_\lambda$  não é uniforme [65]. Como neste trabalho o interesse está apenas no processo de confinamento, os efeitos associados à torção podem ser desprezados.

---

<sup>3</sup>Esses potenciais também são chamados de potenciais geométricos.

## 4 Partícula quântica confinada a uma hélice, catenária, helicóide ou catenoide

Uma vez apresentado o formalismo do potencial confinante, neste capítulo aplicar-se-á a equação (3.26) para a helicóide e a catenoide, e a equação (3.42) para a hélice e a catenária. Além disso, introduzir-se-á as respectivas condições de contorno para a função de onda em cada caso, de modo que pretende-se aqui compreender as particularidades do problema de confinamento em cada uma delas.

### 4.1 Equação de Schrödinger para a partícula confinada

Como as equações (3.23) e (3.40) podem ser negligenciadas para os interesses deste capítulo, é conveniente manter uma notação mais simples ao fazer  $\chi_T(q_1, q_2) = \chi(q_1, q_2)$  na equação (3.26),  $\chi_T(q_1) = \psi(s)$  com  $q_1 = s$  na equação (3.42), além de  $E_T = E$  em ambas. Assim têm-se as equações de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_g\chi + V_s(q_1, q_2)\chi = E\chi \quad \text{e} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{ds^2} + V_c(s)\psi = E\psi$$

para uma partícula que está confinada a uma superfície e a uma curva, respectivamente.

#### 4.1.1 Hélice

Na subseção 2.1 foi mostrado que a hélice circular possui curvatura dada por  $\kappa(s) = \frac{b}{a^2 + b^2}$ , onde  $a$  e  $b$  são constantes. Assim, com a utilização da equação (3.41), observa-se que uma partícula quântica de massa  $m$ , confinada a tal curva, estará sujeita ao potencial induzido por geometria

$$V_c(s) = -\frac{\hbar^2}{8m} \frac{b^2}{(a^2 + b^2)^2},$$

de modo que se obtém a equação de Schrödinger unidimensional

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{ds^2} - \frac{\hbar^2}{8m} \frac{b^2}{(a^2 + b^2)^2}\psi = E\psi. \quad (4.1)$$

Recordando que o comprimento de arco é dado por  $s = (a^2 + b^2)^{1/2} \phi$ , a equação (4.1) pode ser reescrita como sendo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{a^2 + b^2} \frac{d^2\psi}{d\phi^2} - \frac{\hbar^2}{8m} \frac{b^2}{(a^2 + b^2)^2} \psi = E\psi,$$

ou mais convenientemente

$$\frac{d^2\psi}{d\phi^2} + l^2\psi = 0, \quad (4.2)$$

para a constante  $l$  tal que  $l^2 = \frac{b^2}{4(a^2 + b^2)} + \frac{2m(a^2 + b^2)}{\hbar^2} E$ .

No que se segue, é importante discutir as condições de contorno para a equação (4.2) para o caso da hélice infinita ( $\phi \in \mathbb{R}$ ). Seja  $p$  um ponto arbitrário na hélice e seja  $B(p) \subset \mathbb{R}^3$  uma bola de raio  $\varepsilon_B$  centrada em  $p$ . Dentro dessa bola, a partícula percebe o ambiente ao seu redor da mesma maneira em qualquer ponto da hélice, porque  $B$  é *flat*, e a hélice possui curvatura e torção constantes. Então, a função de onda é distribuída da mesma forma nas vizinhanças de  $\alpha(\phi)$  e de  $\alpha(\phi + 2\pi)$ . Portanto, tem-se que a condição de contorno apropriada é  $\psi(\phi) = \psi(\phi + 2\pi)$ . Isso imediatamente leva à quantização do momento angular  $\hat{L}_\phi = -i\hbar \frac{d}{d\phi}$ , conforme discutido nas referências [37, 66]. Em outras palavras, se  $\psi$  é autofunção de  $\hat{L}_\phi$ , então tem-se os autovalores  $l\hbar$ , para  $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  o número quântico de momento angular, de tal forma que a equação (4.2) é reobtida em termos de  $\hat{L}_\phi^2$ . Então, as possíveis energias são

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l^2}{(a^2 + b^2)} - \frac{\hbar^2}{8m} \frac{b^2}{(a^2 + b^2)^2}, \quad (4.3)$$

e a função de onda normalizada é dada por

$$\psi_l(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi}. \quad (4.4)$$

No caso de uma hélice finita em  $0 < \phi < \phi_0$ , para  $\phi_0$  o “tamanho angular da caixa”, têm-se as condições de contorno  $\psi(0) = \psi(\phi_0) = 0$ , de modo que se obtém  $l = \frac{j\pi}{\phi_0}$ . Portanto, as soluções da equação (4.2) são

$$\psi_j(\phi) = \sqrt{\frac{2}{\phi_0}} \sin\left(\frac{j\pi}{\phi_0} \phi\right), \quad (4.5)$$

para  $j = 1, 2, 3, \dots$  o número quântico. Consequentemente, as energias possíveis nesse caso são dadas por

$$E_j = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{j^2\pi^2}{(a^2 + b^2)\phi_0^2} - \frac{\hbar^2}{8m} \frac{b^2}{(a^2 + b^2)^2}, \quad (4.6)$$

que são similares às energias obtidas para uma partícula em um poço de potencial infinito,

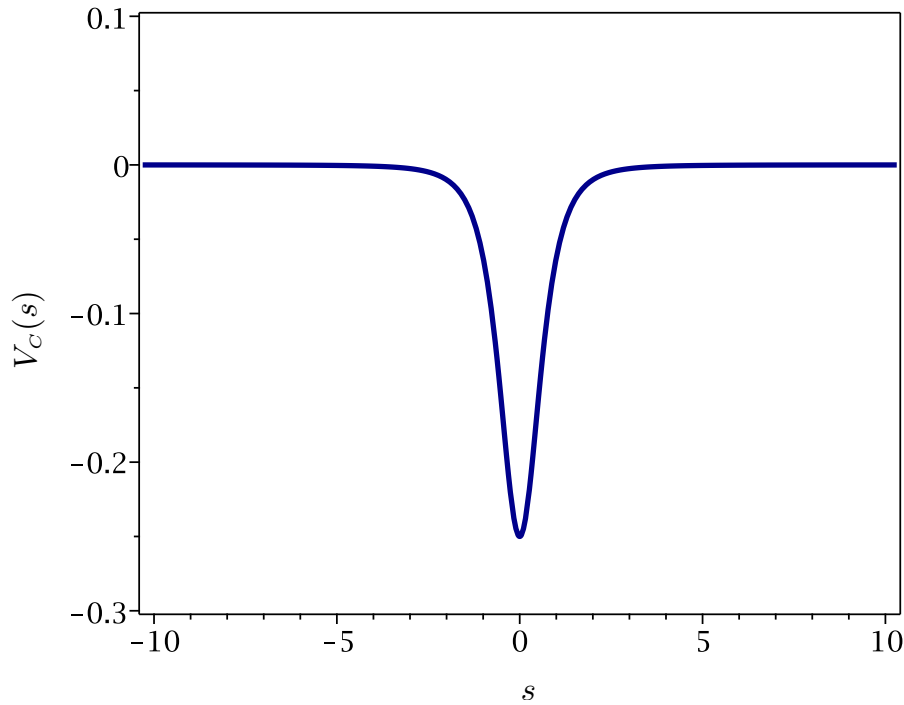


Figura 4.1 – Potencial geométrico que atua em uma partícula confinada a uma catenária considerando as constantes  $\hbar = 2m = a = 1$ .

mas com a contribuição do potencial induzido por geometria [22, 56, 67].

### 4.1.2 Catenária

Por sua vez, conforme já mostrado anteriormente, a curvatura da catenária é dada por  $\kappa(s) = \frac{a}{a^2 + s^2}$ , para  $a$  uma constante positiva. Com o uso da equação (3.41) encontra-se o potencial geométrico

$$V_C(s) = -\frac{\hbar^2}{8m} \frac{a^2}{(a^2 + s^2)^2}, \quad (4.7)$$

o qual possui um valor de mínimo em  $s = 0$  e tende a zero quando o comprimento de arco,  $s$ , tende ao infinito (ver figura 4.1).

Disso, obtém-se a equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{ds^2} - \frac{\hbar^2}{8m} \frac{a^2}{(a^2 + s^2)^2} \psi = E\psi, \quad (4.8)$$

cujas soluções obedecem à condição de contorno  $\lim_{s \rightarrow \pm\infty} \psi = 0$  para estados ligados [56, 68]. Devido à presença do potencial induzido por geometria, encontrar as autofunções e os autovalores da equação (4.8) não é uma tarefa simples. Por enquanto, é mais conveniente introduzir o formalismo do potencial confinante para a helicóide e a catenoide, de maneira que o problema do confinamento à catenária será futuramente retomado na seção 4.2.

### 4.1.3 Helicoide e catenoide

Conforme mostrado na subseção 2.2, a helicoide e a catenoide são superfícies com curvatura Gaussiana  $K = -\frac{a^2}{(a^2 + u^2)^2}$  e curvatura média  $M = 0$ . O fato de estas serem superfícies mínimas e isométricas é um caso bastante especial que implica que o potencial induzido por geometria é o mesmo para ambas:

$$V_s(u) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{a^2}{(a^2 + u^2)^2}. \quad (4.9)$$

Como pode-se observar em (4.9),  $V_s$  independe da coordenada angular  $\phi$ , além disso, o seu gráfico possui o mesmo comportamento que o potencial da figura 4.1 (exceto pelo fator multiplicativo  $1/4$ ).

Nas parametrizações de (2.27) e (2.31), os elementos da matriz inversa de  $\mathbf{g}$  são  $g^{11} = \frac{1}{a^2 + u^2}$ ,  $g^{12} = g^{21} = 0$  e  $g^{22} = 1$ , além de que  $g = a^2 + u^2$  é o determinante do tensor métrico. Com isso, o operador de Laplace-Beltrami é tal que

$$\Delta_g \chi = \frac{1}{a^2 + u^2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2} + \frac{u}{a^2 + u^2} \frac{\partial \chi}{\partial u}, \quad (4.10)$$

para a função de onda  $\chi = \chi(\phi, u)$ . Segue das equações (4.9) e (4.10) que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{a^2 + u^2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2} + \frac{u}{a^2 + u^2} \frac{\partial \chi}{\partial u} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{a^2}{(a^2 + u^2)^2} \chi = E \chi \quad (4.11)$$

é a equação de Schrödinger a ser resolvida.

Em Mecânica Quântica, a probabilidade de encontrar a partícula em uma dada área da superfície é

$$\begin{aligned} P_A &= \iint |\chi(\phi, u)|^2 dA \\ &= \iint |\chi(\phi, u)|^2 (a^2 + u^2)^{1/2} d\phi du, \end{aligned} \quad (4.12)$$

o que sugere que uma nova função de onda  $\chi_g(\phi, u) = (a^2 + u^2)^{1/4} \chi(\phi, u)$  seja introduzida [37, 39, 69, 70]. Dessa forma, a referida probabilidade pode ser reescrita de uma maneira mais conveniente:

$$P_A = \iint |\chi_g(\phi, u)|^2 d\phi du.$$

Por conseguinte, ao substituir  $\chi = (a^2 + u^2)^{-1/4} \chi_g$  na equação (4.11), obtém-se a nova equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{a^2 + u^2} \frac{\partial^2 \chi_g}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 \chi_g}{\partial u^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a^2}{4(a^2 + u^2)^2} + \frac{1}{4(a^2 + u^2)} \right) \chi_g = E \chi_g. \quad (4.13)$$

Após realizar algumas manipulações algébricas, a equação (4.13) pode ser reescrita como sendo

$$\frac{\partial^2 \chi_g}{\partial \phi^2} + (a^2 + u^2) \frac{\partial^2 \chi_g}{\partial u^2} + \left( \frac{a^2}{4(a^2 + u^2)} + \frac{1}{4} + \frac{2mE}{\hbar^2} (a^2 + u^2) \right) \chi_g = 0,$$

o que imediatamente sugere a usual separação de variáveis  $\chi_g(\phi, u) = \Phi(\phi) \psi(u)$ , de modo que encontra-se

$$\frac{a^2 + u^2}{\psi} \frac{d^2 \psi}{du^2} + \frac{a^2}{4(a^2 + u^2)} + \frac{1}{4} + \frac{2mE}{\hbar^2} (a^2 + u^2) = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = l^2, \quad (4.14)$$

onde  $l^2$  é a constante de separação [54, 71]. Notoriamente, a equação (4.14) pode ser decomposta em uma equação angular,

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + l^2 \Phi = 0, \quad (4.15)$$

e em uma equação radial,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{du^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a^2}{4(a^2 + u^2)^2} + \frac{1 - 4l^2}{4(a^2 + u^2)} \right) \psi = E\psi. \quad (4.16)$$

Antes de procurar as soluções para a equação radial (4.16), é necessário discutir as condições de contorno que deverão ser aplicadas na equação (4.15) tanto para a helicóide quanto para a catenoide.

Como se pode observar, a equação diferencial (4.15) admite soluções normalizadas do tipo

$$\Phi_l(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi} \quad (4.17)$$

para a catenoide. É notório que a parametrização da catenoide é periódica em  $\phi$ , pois tem-se que  $\mathbf{r}(\phi + 2\pi, u) = \mathbf{r}(\phi, u)$ , de modo que, nesse caso, a função de onda angular também deve ter periodicidade  $2\pi$ , isto é,  $\Phi_l(\phi + 2\pi) = \Phi_l(\phi)$ . Portanto, isso implica que o número quântico de momento angular  $l$  assume apenas valores inteiros ( $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ).

As funções de onda angulares no caso da helicóide têm comportamento análogo às soluções encontradas no caso da hélice. Devido à periodicidade da helicóide infinita (isto é, com  $\phi \in \mathbb{R}$ ), obtém-se a equação (4.17) com  $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , exatamente como no caso da catenoide. Por outro lado, quando se tem uma helicóide finita em  $0 < \phi < \phi_0$ , encontram-se as funções de onda

$$\Phi_j(\phi) = \sqrt{\frac{2}{\phi_0}} \sin\left(\frac{j\pi}{\phi_0} \phi\right), \quad (4.18)$$

para  $l = \frac{j\pi}{\phi_0}$ , onde  $j = 1, 2, 3, \dots$  é o número quântico. Assim, apesar de a catenoide ser

isométrica a uma helicóide finita com  $0 < \phi < 2\pi$ , as respectivas funções de onda diferem nesse caso devido às condições de contorno empregadas. Procurar-se-á na seção 4.2 as soluções da equação radial (4.16) para estados ligados, isto é, para a condição de contorno de que  $\lim_{u \rightarrow \pm\infty} \psi = 0$ .

## 4.2 Funções de onda radiais

Por sua vez, a equação (4.16) pode ser reescrita mais convenientemente como

$$-\frac{d^2\psi}{d\tilde{u}^2} - \left( \frac{1}{4(1+\tilde{u}^2)^2} + \frac{1-4l^2}{4(1+\tilde{u}^2)} \right) \psi = \epsilon\psi, \quad (4.19)$$

onde  $\tilde{u} = u/a$  é a variável radial e  $\epsilon = 2ma^2E/\hbar^2$  é a energia, ambas em unidades adimensionais<sup>1</sup> [38]. Dessa forma, (4.19) é uma equação de Schrödinger unidimensional com um potencial efetivo (também adimensional) dado por

$$V_l(\tilde{u}) = -\frac{1}{4(1+\tilde{u}^2)^2} - \frac{1-4l^2}{4(1+\tilde{u}^2)}, \quad (4.20)$$

o qual é sempre atrativo (menor que zero) apenas nos casos em que  $|l| \leq 1/2$ . Potenciais efetivos equivalentes ao da equação (4.20) foram previamente encontrados nas referências [37–39, 51].

Primeiramente, pode-se observar que equação (4.16) torna-se exatamente a (4.8) ao considerar  $l = 1/2$  e o comprimento de arco  $s = u$ . Como  $l$  está associado ao momento angular, ele obviamente não aparece no formalismo do potencial confinante para uma partícula confinada a uma catenária, mas pode-se utilizar  $l = 1/2$  como um mero artifício matemático para que as soluções da equação de Schrödinger para a catenária possam ser obtidas através da equação (4.16).

Por outro lado, para a helicóide finita tem-se que  $l = \frac{j\pi}{\phi_0}$ , de modo que o potencial efetivo em (4.20) é sempre atrativo para  $j \leq \frac{\phi_0}{2\pi}$ . Dessa forma, se  $\phi_0$  é um múltiplo de  $2\pi$ , o valor máximo de  $j$  para o qual  $V_l(\tilde{u})$  é sempre atrativo é justamente o número de voltas completas que a helicóide possui. Devido à isometria local entre a catenoide e a helicóide, neste trabalho discutir-se-á apenas o caso em que  $\phi_0 = 2\pi$ , o que implica em  $V_l(\tilde{u})$  atrativo somente para  $j = 1$ , isto é, para  $l = 1/2$ . Finalmente, para a helicóide infinita e para a catenoide tem-se que  $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , então nesse caso o potencial efetivo é sempre atrativo apenas se  $l = 0$ , isto é, se a partícula tiver momento angular nulo. Em suma, para encontrar os possíveis estados ligados devidos ao potencial efetivo considerar-se-á na

<sup>1</sup>Essas quantidades são introduzidas apenas por simplicidade, isto é, para que  $\hbar$ ,  $m$  e  $a$  desapareçam da equação (4.16). As quantidades dimensionais podem ser reobtidas através de  $u = a\tilde{u}$  e  $E = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\epsilon$ .



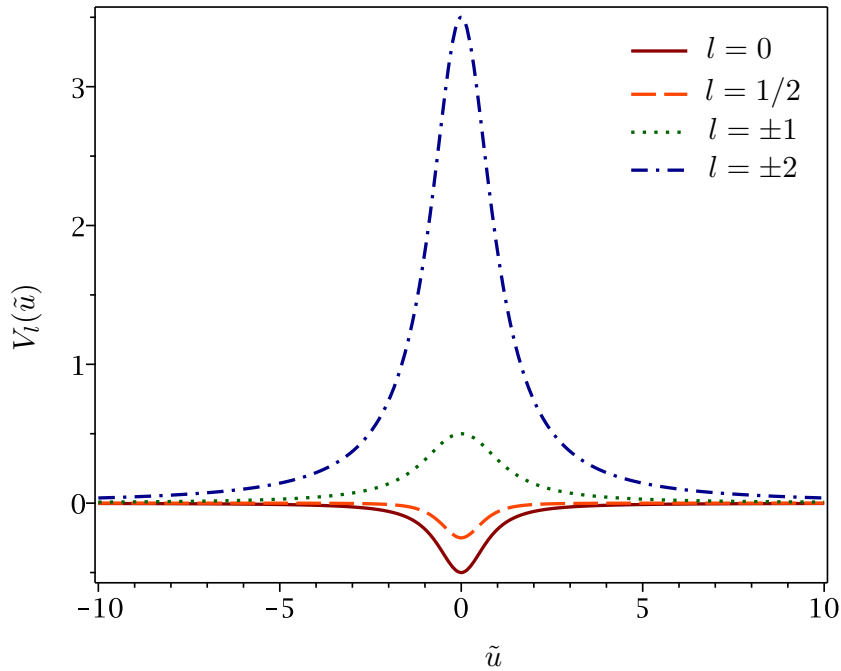


Figura 4.2 – Potencial efetivo,  $V_l(\tilde{u})$ , para  $l = 0, 1/2, \pm 1, \pm 2$ . Como é notório, à medida que  $|l|$  aumenta,  $V_l(\tilde{u})$  torna-se cada vez mais repulsivo.

equação (4.20) que

$$l = \begin{cases} 1/2 & \text{para a catenária,} \\ 1/2 & \text{para a helicóide finita } (\phi_0 = 2\pi), \\ 0 & \text{para a catenoide,} \\ 0 & \text{para a helicóide infinita } (\phi \in \mathbb{R}). \end{cases} \quad (4.21)$$

Assim, a figura 4.2 mostra os gráficos de  $V_l(\tilde{u})$  para alguns valores atribuídos para  $l$ .

O segundo termo no potencial efetivo, o qual diferencia a dinâmica quântica radial nos casos estudados, pode ser separado em uma parte repulsiva,  $\frac{l^2}{1 + \tilde{u}^2}$ , e em outra que é sempre atrativa,  $-\frac{1}{4(1 + \tilde{u}^2)}$ . A parte repulsiva, que naturalmente desaparece para  $l = 0$ , corresponde a um termo centrífugo habitual em Mecânica Quântica. Por outro lado, a parte atrativa surge devido ao confinamento da partícula e está relacionada à mudança realizada em (4.12), estando assim associado à chamada “força anticentrífuga quântica”, conforme discutido nas referências [72, 73].

### 4.2.1 Método variacional

Considerando o Hamiltoniano na equação (4.19),

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{d^2}{d\tilde{u}^2} - \left( \frac{1}{4(1 + \tilde{u}^2)^2} + \frac{1 - 4l^2}{4(1 + \tilde{u}^2)} \right), \quad (4.22)$$

pode-se utilizar o método variacional (também conhecido como método de Rayleigh–Ritz) para obter aproximações para a energia. Para uma dada função de onda tentativa,  $\psi_{n,l} = \psi_{n,l}(\tilde{u})$ , que está normalizada, o valor esperado do operador Hamiltoniano é dado pela expressão

$$\epsilon_{n,l} = - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n,l}^* \frac{d^2 \psi_{n,l}}{d\tilde{u}^2} d\tilde{u} - \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi_{n,l}^* \psi_{n,l}}{(1 + \tilde{u}^2)^2} d\tilde{u} - \frac{1 - 4l^2}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi_{n,l}^* \psi_{n,l}}{1 + \tilde{u}^2} d\tilde{u}, \quad (4.23)$$

onde  $n = 1, 2, 3, \dots$  é o número quântico associado aos níveis de energia do sistema de interesse.

Tal método consiste em propor intuitivamente uma função de onda tentativa  $\psi_{n,l}$  que depende de um parâmetro  $\beta_l$  ajustado de modo a minimizar a energia  $\epsilon_{n,l}(\beta_l)$  na equação (4.23). Esse método retorna um limite superior para a energia exata do sistema [22, 56, 68, 74]. Evidentemente, os resultados obtidos serão melhores quanto mais próxima a função de onda tentativa for da função de onda exata. Mais detalhes sobre isso podem ser encontrados no apêndice A.

### Função Gaussiana

Para potenciais como o dado na equação (4.20) espera-se que a função de onda do estado fundamental seja uma função que possui um “formato de sino” [75, 76]. Assim, inicialmente, propor-se-á para o estado fundamental (isto é, quando  $n = 1$ ) dos sistemas de interesse a função de onda Gaussiana

$$\psi_{1,l}(\tilde{u}) = \left( \frac{\beta_l}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\beta_l \tilde{u}^2 / 2}, \quad (4.24)$$

onde  $\beta_l > 0$  é um parâmetro a ser ajustado para obter um valor de mínimo para a energia da partícula [75]. Como a equação (4.24) tem a mesma forma que a função de onda do estado fundamental do oscilador harmônico quântico, ela é uma das funções de onda teste mais simples que se pode supor no método variacional para o estado fundamental de um sistema [56, 74].

Dessa maneira, ao substituir a equação (4.24) na equação (4.23) e calcular as derivadas da função de onda, pode-se observar que o valor esperado do Hamiltoniano do sistema para o estado fundamental é dado por

$$\epsilon_{1,l} = - \sqrt{\frac{\beta_l}{\pi}} \left[ \beta_l \int_{-\infty}^{+\infty} (\beta_l \tilde{u}^2 - 1) e^{-\beta_l \tilde{u}^2} d\tilde{u} + \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\beta_l \tilde{u}^2}}{(1 + \tilde{u}^2)^2} d\tilde{u} + \frac{1 - 4l^2}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\beta_l \tilde{u}^2}}{1 + \tilde{u}^2} d\tilde{u} \right]. \quad (4.25)$$

As soluções das integrais na equação (4.25) são

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} (\beta_l \tilde{u}^2 - 1) e^{-\beta_l \tilde{u}^2} d\tilde{u} &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta_l}}, \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\beta_l \tilde{u}^2}}{(1 + \tilde{u}^2)^2} d\tilde{u} &= \sqrt{\pi \beta_l} + \pi e^{\beta_l} \left( \frac{1}{2} - \beta_l \right) \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \sqrt{\beta_l} \right) \right], \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\beta_l \tilde{u}^2}}{1 + \tilde{u}^2} d\tilde{u} &= \pi e^{\beta_l} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \sqrt{\beta_l} \right) \right], \end{aligned}$$

onde erf representa a função erro [54, 77, 78]. Portanto, de (4.25) encontra-se a energia em termos do parâmetro  $\beta_l$ :

$$\epsilon_{1,l} = \frac{1}{4} \beta_l + \frac{1}{4} \sqrt{\pi \beta_l} e^{\beta_l} \left( \beta_l + 4l^2 - \frac{3}{2} \right) \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \sqrt{\beta_l} \right) \right]. \quad (4.26)$$

Para minimizar a energia com relação ao parâmetro  $\beta_l$  faz-se

$$\frac{d\epsilon_{1,l}}{d\beta_l} = \frac{5}{8} - l^2 - \frac{\beta_l}{4} + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\beta_l}} e^{\beta_l} \left[ \beta_l^2 + 2l^2 (2\beta_l + 1) - \frac{3}{4} \right] \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \sqrt{\beta_l} \right) \right] = 0. \quad (4.27)$$

Considerando a equação (4.21), o próximo passo é atribuir os respectivos valores de  $l$  e resolver (4.27) numericamente para ambos os casos. Para a helicoides infinita e para a catenoide tem-se que  $l = 0$ , de modo que a equação (4.27) torna-se

$$\frac{5}{8} - \frac{\beta_0}{4} + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\beta_0}} e^{\beta_0} \left( \beta_0^2 - \frac{3}{4} \right) \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \sqrt{\beta_0} \right) \right] = 0,$$

cuja solução aproximada é  $\beta_0 \approx 0.14133$ , portanto, obtém-se em (4.26) a energia  $\epsilon_{1,0} \approx -0.11977$ . Por outro lado, tem-se que  $l = 1/2$  nos casos da helicoides finita ( $\phi_0 = 2\pi$ ) e da catenária, de forma que encontra-se

$$\frac{3}{8} - \frac{\beta_{1/2}}{4} + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\beta_{1/2}}} e^{\beta_{1/2}} \left( \beta_{1/2}^2 + \beta_{1/2} - \frac{1}{4} \right) \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \sqrt{\beta_{1/2}} \right) \right] = 0,$$

e assim  $\beta_{1/2} \approx 0.04120$  para o mínimo  $\epsilon_{1,1/2} \approx -0.02299$ . Na figura 4.3 encontram-se os gráficos das correspondentes funções de onda obtidas através do método variacional com a função Gaussiana (4.24).

### Função Lorentziana

Também para o estado fundamental, pode-se utilizar (para fins de comparação) a função de onda Lorentziana

$$\psi_{1,l}(\tilde{u}) = \left( \frac{2\beta_l^3}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{\beta_l^2 + \tilde{u}^2}, \quad (4.28)$$

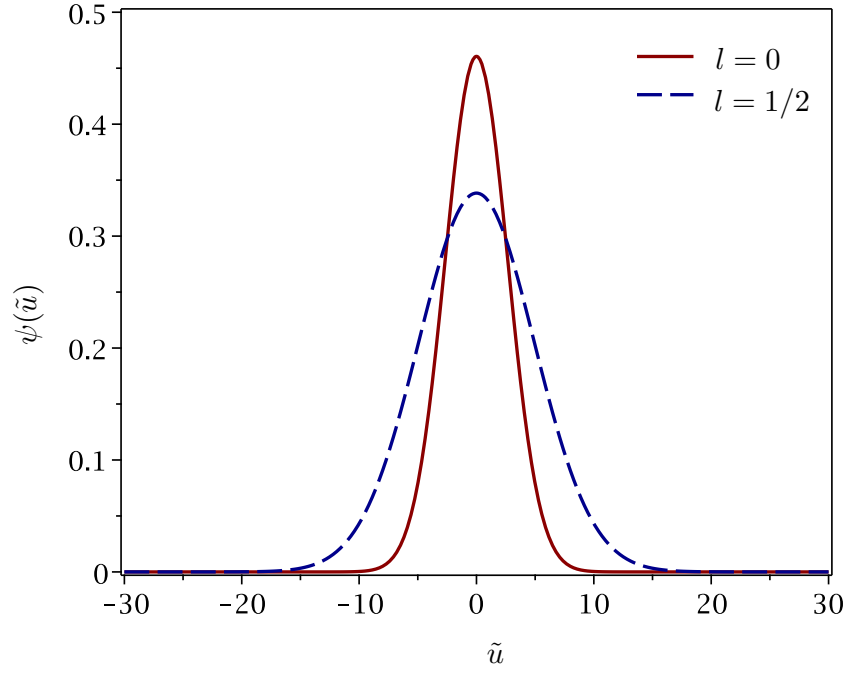


Figura 4.3 – Funções de onda Gaussianas obtidas com o método variacional para o estado fundamental considerando  $l = 0$  e  $l = 1/2$ .

sendo o parâmetro  $\beta_l$  definido aqui, por conveniência, como sendo real e positivo. Ao substituir a equação (4.28) em (4.23), calcular as derivadas e realizar algumas manipulações algébricas simples, obtém-se que

$$\begin{aligned} \epsilon_{1,l} = -\frac{2\beta_l^3}{\pi} \left[ 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{3\tilde{u}^2 - \beta_l^2}{(\beta_l^2 + \tilde{u}^2)^4} d\tilde{u} + \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(1 + \tilde{u}^2)^2 (\beta_l^2 + \tilde{u}^2)^2} d\tilde{u} \right. \\ \left. + \frac{1 - 4l^2}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(1 + \tilde{u}^2) (\beta_l^2 + \tilde{u}^2)^2} d\tilde{u} \right]. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Os resultados das integrais na equação (4.29) são

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{3\tilde{u}^2 - \beta_l^2}{(\beta_l^2 + \tilde{u}^2)^4} d\tilde{u} &= -\frac{\pi}{8\beta_l^5}, \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(1 + \tilde{u}^2)^2 (\beta_l^2 + \tilde{u}^2)^2} d\tilde{u} &= \frac{\pi}{2\beta_l^3} \frac{\beta_l^2 + 3\beta_l + 1}{(\beta_l + 1)^3}, \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(1 + \tilde{u}^2) (\beta_l^2 + \tilde{u}^2)^2} d\tilde{u} &= \frac{\pi}{2\beta_l^3} \frac{2\beta_l + 1}{(\beta_l + 1)^2}. \end{aligned}$$

Conseqüentemente, encontra-se de (4.29) que

$$\epsilon_{1,l} = \frac{1}{2\beta_l^2} - \frac{\beta_l^2 + 3\beta_l + 1}{4(\beta_l + 1)^3} + \frac{4l^2 - 1}{4} \frac{2\beta_l + 1}{(\beta_l + 1)^2},$$

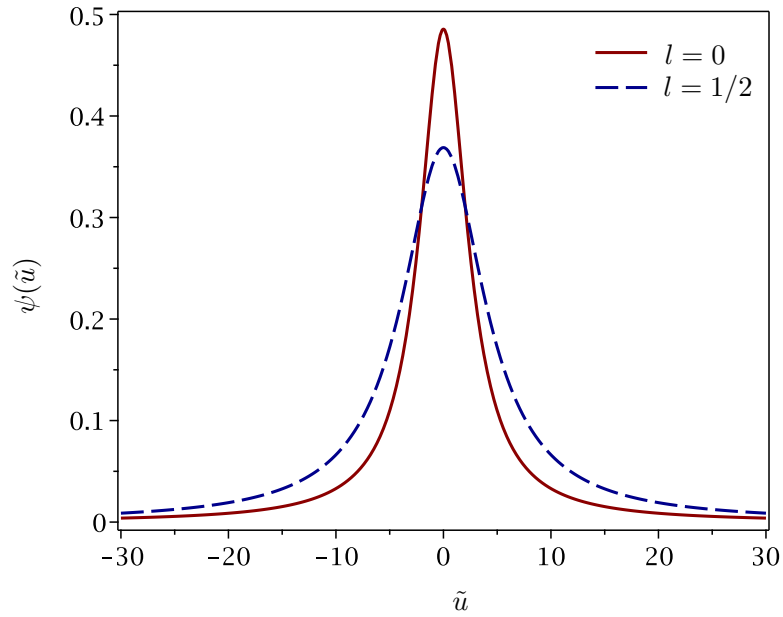


Figura 4.4 – Funções de onda Lorentzianas obtidas com o método variacional para o estado fundamental considerando  $l = 0$  e  $l = 1/2$ .

cuja minimização resulta em

$$\frac{d\epsilon_{1,l}}{d\beta_l} = \frac{(3 - 8l^2)\beta_l^5 + (2 - 8l^2)\beta_l^4 - 16\beta_l^3 - 24\beta_l^2 - 16\beta_l - 4}{4\beta_l^3(\beta_l + 1)^4} = 0,$$

isto é,

$$(3 - 8l^2)\beta_l^5 + (2 - 8l^2)\beta_l^4 - 16\beta_l^3 - 24\beta_l^2 - 16\beta_l - 4 = 0. \quad (4.30)$$

Ao fazer  $l = 0$  na equação (4.30) para os casos da helicóide infinita e da catenoide, encontra-se que

$$3\beta_0^5 + 2\beta_0^4 - 16\beta_0^3 - 24\beta_0^2 - 16\beta_0 - 4 = 0,$$

cuja solução real e positiva é dada por aproximadamente  $\beta_0 \approx 2.70072$  e, a partir disso, obtém-se a energia  $\epsilon_{1,0} \approx -0.12918$ . Da mesma forma, tem-se que  $l = 1/2$  nos casos da helicóide finita ( $\phi_0 = 2\pi$ ) e da catenária, então

$$\beta_{1/2}^5 - 16\beta_{1/2}^3 - 24\beta_{1/2}^2 - 16\beta_{1/2} - 4 = 0,$$

portanto  $\beta_{1/2} \approx 4.67957$  e  $\epsilon_{1,1/2} \approx -0.02757$ . A figura 4.4 apresenta os gráficos das funções de onda obtidas com os respectivos  $\beta_l$ .

Como pode-se observar com a Gaussiana e a Lorentziana, a função de onda é mais concentrada na origem para  $l = 0$  do que para  $l = 1/2$ . Isso já era esperado, pois o segundo termo do potencial na equação (4.20) se anula para  $l = 1/2$ , mas é negativo para  $l = 0$ , fazendo com que a partícula na helicóide infinita ou na catenoide sinta um potencial efetivo mais atrativo (ver figura 4.2). Ademais, em ambos os casos, as respectivas energias

encontradas com a Gaussiana são maiores que as encontradas com a Lorentziana, o que indica que a equação (4.28) apresenta-se como uma melhor aproximação para a função de onda, visto que o método variacional sempre fornece um limite superior para a energia exata da partícula [22].

### Estados excitados

A função de onda tentativa para o primeiro estado excitado deve necessariamente ser escolhida como sendo ortogonal à função de onda tentativa para o estado fundamental. Como um exemplo, caso suponha-se que a função de onda para um possível primeiro estado excitado é dada por

$$\psi_{2,l}(\tilde{u}) = \left( \frac{4\beta_l^3}{\pi} \right)^{1/4} \tilde{u} e^{-\beta_l \tilde{u}^2/2},$$

onde o parâmetro  $\beta_l$  mais uma vez definido como sendo positivo, obtém-se com o uso da equação (4.23) que

$$\begin{aligned} \epsilon_{2,l} = -2\sqrt{\frac{\beta_l^3}{\pi}} \left[ \beta_l \int_{-\infty}^{+\infty} (\beta_l \tilde{u}^4 - 3\tilde{u}^2) e^{-\beta_l \tilde{u}^2} d\tilde{u} \right. \\ \left. + \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{u}^2 e^{-\beta_l \tilde{u}^2}}{(1 + \tilde{u}^2)^2} d\tilde{u} + \frac{1 - 4l^2}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{u}^2 e^{-\beta_l \tilde{u}^2}}{1 + \tilde{u}^2} d\tilde{u} \right]. \end{aligned} \quad (4.31)$$

As soluções das integrais na equação (4.31) são

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} (\beta_l \tilde{u}^4 - 3\tilde{u}^2) e^{-\beta_l \tilde{u}^2} d\tilde{u} &= -\frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\beta_l^3}}, \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{u}^2 e^{-\beta_l \tilde{u}^2}}{(1 + \tilde{u}^2)^2} d\tilde{u} &= \pi e^{\beta_l} \left( \frac{1}{2} + \beta_l \right) \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \sqrt{\beta_l} \right) \right] - \sqrt{\pi \beta_l}, \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{u}^2 e^{-\beta_l \tilde{u}^2}}{1 + \tilde{u}^2} d\tilde{u} &= \sqrt{\frac{\pi}{\beta_l}} - \pi e^{\beta_l} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \sqrt{\beta_l} \right) \right]. \end{aligned}$$

Com isso, após algumas manipulações algébricas, a equação (4.31) pode ser reescrita como

$$\epsilon_{2,l} = \frac{\beta_l^2}{2} + (2l^2 + 1)\beta_l + \sqrt{\pi \beta_l^3} e^{\beta_l} \left( \frac{1}{4} - 2l^2 - \frac{\beta_l}{2} \right) \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \sqrt{\beta_l} \right) \right]. \quad (4.32)$$

Todavia, na equação (4.32), a energia  $\epsilon_{2,l}(\beta_l)$  não possui pontos de mínimo tanto para  $l = 0$  quanto para  $l = 1/2$ , assim o método variacional não retorna nenhum resultado para esses casos.

De fato, o método variacional fornece aproximações razoáveis para o estado fundamental dos problemas em questão, mas não necessariamente funciona bem na procura de possíveis estados excitados. Isso, é claro, não é exatamente uma garantia de que não

existam outros estados ligados. Conseqüentemente, deve-se voltar a atenção novamente para a equação radial,

$$\frac{d^2\psi}{d\tilde{u}^2} + \left( \frac{1}{4(1+\tilde{u}^2)^2} + \frac{1-4l^2}{4(1+\tilde{u}^2)} + \epsilon \right) \psi = 0, \quad (4.33)$$

com o intuito de encontrar soluções exatas ou melhores aproximações.

### 4.2.2 Função conflüente de Heun

Introduzindo uma nova variável  $\xi = -\tilde{u}^2$ , de modo que  $\xi \in (-\infty, 0]$ , encontra-se da equação (4.33) que

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \frac{1}{2\xi} \frac{d\psi}{d\xi} - \frac{4\epsilon\xi^2 + (4l^2 - 8\epsilon - 1)\xi + 4\epsilon - 4l^2 + 2}{16\xi(1-\xi)^2} \psi = 0. \quad (4.34)$$

Considerando mudanças semelhantes às que foram utilizadas nas referências [79–81], usa-se o *Ansatz*  $\psi(\xi) = (1-\xi)^{(\tilde{\gamma}+1)/2} H(\xi)$ , onde  $\tilde{\gamma} > 0$  é um parâmetro a ser convenientemente ajustado. Ao observar que

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{d\xi} &= (1-\xi)^{(\tilde{\gamma}+1)/2} \left[ \frac{dH}{d\xi} - \frac{\tilde{\gamma}+1}{2(1-\xi)} H \right], \\ \frac{d^2\psi}{d\xi^2} &= (1-\xi)^{(\tilde{\gamma}+1)/2} \left[ \frac{d^2H}{d\xi^2} - \frac{\tilde{\gamma}+1}{1-\xi} \frac{dH}{d\xi} + \frac{\tilde{\gamma}^2-1}{4(1-\xi)^2} H \right], \end{aligned}$$

a equação (4.34) pode ser reescrita como

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} + \left[ \frac{1}{2\xi} - \frac{\tilde{\gamma}+1}{1-\xi} \right] \frac{dH}{d\xi} + \frac{\mathcal{A}(\xi)}{16\xi(1-\xi)^2} H = 0, \quad (4.35)$$

onde tem-se a função

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\xi) &= -4\epsilon\xi^2 + (4\tilde{\gamma}^2 + 4\tilde{\gamma} - 4l^2 + 8\epsilon + 1)\xi + 4l^2 - 4\tilde{\gamma} - 4\epsilon - 6 \\ &= (1-\xi) [4l^2 - 4\tilde{\gamma}(\tilde{\gamma}+1) - 1 - 4\epsilon(1-\xi)] + 4\tilde{\gamma}^2 - 5. \end{aligned}$$

Como  $\tilde{\gamma}$  é “arbitrário”, pode-se considerá-lo de maneira que a equação (4.35) torne-se a mais simples possível. Evidentemente, a escolha de um  $\tilde{\gamma}$  tal que  $4\tilde{\gamma}^2 - 5 = 0$  é a mais conveniente aqui, pois são justamente esses termos que não estão sendo multiplicados por  $(1-\xi)$  em  $\mathcal{A}(\xi)$ . Por conseguinte, tem-se o parâmetro  $\tilde{\gamma} = \sqrt{5}/2$  e, então, segue da equação (4.35) que

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} + \left[ \frac{1/2}{\xi} + \frac{\sqrt{5}/2 + 1}{\xi - 1} \right] \frac{dH}{d\xi} + \left[ \frac{(2l^2 - \sqrt{5} - 3 - 2\epsilon)/8}{\xi} + \frac{(\sqrt{5} + 3 - 2l^2)/8}{\xi - 1} \right] H = 0.$$

Definindo  $\tilde{\alpha} = 0$ ,  $\tilde{\beta} = -1/2$ ,  $\tilde{\mu} = (2l^2 - \sqrt{5} - 3 - 2\epsilon) / 8$  e  $\tilde{\nu} = (\sqrt{5} + 3 - 2l^2) / 8$ , obtém-se disso que

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} + \left[ \tilde{\alpha} + \frac{\tilde{\beta} + 1}{\xi} + \frac{\tilde{\gamma} + 1}{\xi - 1} \right] \frac{dH}{d\xi} + \left[ \frac{\tilde{\mu}}{\xi} + \frac{\tilde{\nu}}{\xi - 1} \right] H = 0, \quad (4.36)$$

a qual é conhecida como a equação confluyente de Heun [81–86].

Em torno do ponto singular regular  $\xi = 0$ , a solução em série de potências da equação (4.36) converge no interior de um disco de raio unitário<sup>2</sup>,  $|\xi| < 1$ , e é chamada de função confluyente de Heun<sup>3</sup>:

$$\text{HeunC}(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} v_n(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}) \xi^n, \quad (4.37)$$

com os parâmetros

$$\begin{aligned} \tilde{\delta} &= \tilde{\mu} + \tilde{\nu} - \frac{\tilde{\alpha}}{2} (\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} + 2) = -\frac{\epsilon}{4}, \\ \tilde{\eta} &= \frac{\tilde{\alpha}}{2} (\tilde{\beta} + 1) - \tilde{\mu} - \frac{1}{2} (\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} + \tilde{\beta}\tilde{\gamma}) = \frac{1}{8} (2\epsilon - 2l^2 + 5), \end{aligned}$$

e onde  $v_n$  são os coeficientes da expansão (ver apêndice B) [82, 87]. Como  $\tilde{\beta}$  é não-inteiro, uma segunda solução para (4.36) pode ser escrita como  $\xi^{-\tilde{\beta}} \text{HeunC}(\tilde{\alpha}, -\tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}, \xi)$  [78, 88, 89]. Consequentemente, as soluções da equação (4.33) são separáveis em funções pares e ímpares:

$$\psi_{\text{par}}(\tilde{u}) = C_0 (1 + \tilde{u}^2)^{\frac{\sqrt{5}+1}{4}} \text{HeunC}(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}, -\tilde{u}^2), \quad (4.38)$$

$$\psi_{\text{ímpar}}(\tilde{u}) = C_1 (1 + \tilde{u}^2)^{\frac{\sqrt{5}+1}{4}} \tilde{u} \text{HeunC}(\tilde{\alpha}, -\tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}, -\tilde{u}^2), \quad (4.39)$$

sendo  $C_0$  e  $C_1$  constantes de normalização.

Agora que as soluções analíticas da equação radial (4.33) foram obtidas, o próximo passo consiste em aplicar as condições de contorno  $\lim_{\tilde{u} \rightarrow \pm\infty} \psi = 0$ . Todavia, não é possível utilizar a abordagem de reduzir HeunC em um polinômio, porque as soluções não obedeceriam às condições de contorno. De fato, de acordo com as referências [83, 87, 90] e com o apêndice B, uma das condições necessárias para reduzir HeunC a um polinômio de grau  $N$  é

$$\tilde{\delta} = - \left( \frac{\tilde{\beta} + \tilde{\gamma}}{2} + N + 1 \right) \tilde{\alpha}. \quad (4.40)$$

Como  $\tilde{\alpha} = 0$  no problema de interesse, decorre da equação (4.40) que  $\tilde{\delta} = 0$ , ou seja,

<sup>2</sup>Apesar de a convergência ser garantida para  $|\xi| < 1$ , em muitos casos é possível utilizar métodos numéricos de extrapolação (como os implementados no Maple) para obter aproximações de  $H(\xi)$  quando  $|\xi| \geq 1$ , a depender dos parâmetros  $\tilde{\alpha}$ ,  $\tilde{\beta}$ ,  $\tilde{\gamma}$ ,  $\tilde{\delta}$  e  $\tilde{\eta}$ .

<sup>3</sup>Geralmente os parâmetros  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$  e  $\eta$  são utilizados na literatura. Todavia, para evitar confusão com as outras partes deste trabalho, o til foi adicionado.



obtém-se trivialmente o autovalor  $\epsilon = 0$  e, conseqüentemente, as possíveis energias da partícula não podem ser obtidos com tal abordagem. Adversidades que são semelhantes a essas foram previamente relatadas em alguns trabalhos recentes, por exemplo, nas referências [91–94].

Uma alternativa seria escrever uma solução para a equação (4.36) em torno do ponto singular regular  $\xi = 1$  e utilizar o chamado método do Wronskiano para obter os autovalores [79, 88, 95]. Contudo, nesse caso tem-se a variável  $\xi = -\tilde{u}^2$ , o que implica que  $\xi = 1$  não faz parte do domínio das soluções de (4.36) no problema de interesse, portanto, o método do Wronskiano também não se aplica aqui.

Para contornar as adversidades relatadas acima, neste trabalho propõe-se que a partícula quântica esteja inicialmente em um sistema que é finito na variável radial  $\tilde{u}$ , isto é, sujeita a um potencial do tipo

$$V(\tilde{u}) = \begin{cases} +\infty & \text{para } \tilde{u} \leq -\tilde{u}_0 \text{ ou } \tilde{u} \geq \tilde{u}_0, \\ V_l(\tilde{u}) & \text{para } -\tilde{u}_0 < \tilde{u} < \tilde{u}_0, \end{cases}$$

onde  $V_l(\tilde{u})$  é o potencial efetivo em (4.20) e  $\pm\tilde{u}_0$  correspondem às bordas da caixa unidimensional, de modo que a largura desta seja  $2\tilde{u}_0$ . Assim, no caso em que se têm catenárias, helicoides ou catenoides finitas em  $\tilde{u}$ , as equações

$$\lim_{\tilde{u} \rightarrow \pm\tilde{u}_0} \text{HeunC}(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}, -\tilde{u}^2) = 0 \quad \text{e} \quad \lim_{\tilde{u} \rightarrow \pm\tilde{u}_0} \text{HeunC}(\tilde{\alpha}, -\tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}, -\tilde{u}^2) = 0 \quad (4.41)$$

podem ser utilizadas para obter as energias  $\epsilon_{n,l}$  (para  $n = 1, 2, 3, \dots$ ) que fazem com que as funções de onda tendam a zero em  $\pm\tilde{u}_0$  [96]. Ao atribuir valores para  $\tilde{u}_0$ , as soluções de (4.41) podem ser encontradas utilizando o comando *fsolve* do Maple e seus métodos numéricos para  $|\xi| \geq 1$  [97]. A seguir será realizado um estudo de como as energias e as funções de onda se comportam à medida que o tamanho da caixa aumenta. No que se segue, isso será chamado de “método da caixa”.

### Potencial efetivo atrativo

Com o uso do “método da caixa”, nesta parte apenas casos em que o potencial efetivo em (4.20) é atrativo serão discutidos, isto é, quando se faz  $l = 0$  nos casos da helicoides infinita e da catenoide, bem como  $l = 1/2$  nos casos da helicoides finita ( $\phi_0 = 2\pi$ ) e da catenária, conforme a equação (4.21). Com isso, é possível observar que quando  $\tilde{u}_0$  é uma quantidade com valores em torno de 1, os efeitos do potencial efetivo não se mostram tão relevantes. Por exemplo, ao considerar que  $\tilde{u}_0 = 1$ , as energias dos quatro primeiros estados ( $n = 1, 2, 3, 4$ ) quando se tem  $l = 0$  ( $l = 1/2$ ) são aproximadamente dadas por 2.03806 (2.26282), 9.50983 (9.70867), 21.84675 (22.04447) e 39.11990 (39.31700). Nesse caso, as funções de onda radiais para  $l = 1/2$  têm comportamento similar ao das

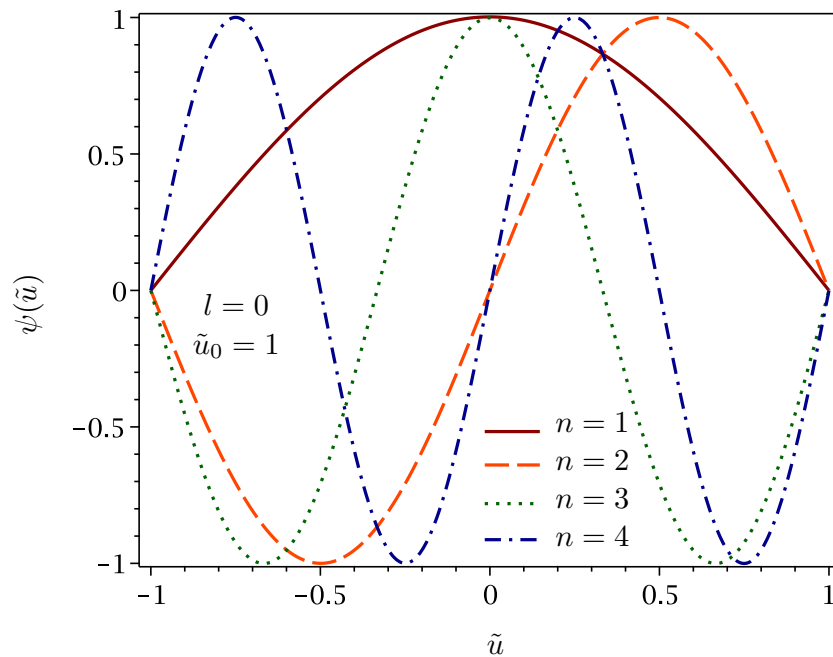


Figura 4.5 – Funções de onda radiais (normalizadas numericamente) correspondentes aos primeiros quatro estados ao considerar  $\tilde{u}_0 = 1$  e  $l = 0$ . Se  $\tilde{u}_0 = 1$  e  $l = 1/2$ , as soluções apresentam um comportamento similar a este.

correspondentes funções de onda para  $l = 0$  (ver figura 4.5).

Quando  $u_0$  é aumentado, a energia associada a cada um dos níveis passa a diminuir. Assim, a partícula terá a energia do estado fundamental,  $\epsilon_{1,l}$ , nula para  $l = 0$  ( $l = 1/2$ ) quando se tem  $\tilde{u}_0 \approx 3.00420$  ( $\tilde{u}_0 \approx 5.97477$ ), de modo que se o respectivo  $\tilde{u}_0$  for maior que isso,  $\epsilon_{1,l}$  será negativa. Então, caso se tenha  $\tilde{u}_0 = 100$ , as energias aproximadas dos primeiros quatro estados para  $l = 0$  ( $l = 1/2$ ) são  $-0.13051$  ( $-0.02892$ ),  $0.00071$  ( $0.00098$ ),  $0.00087$  ( $0.00111$ ),  $0.00338$  ( $0.00393$ ), de modo que diferenças mais consideráveis entre as respectivas funções de onda para  $l = 0$  e  $l = 1/2$  surgem, como mostra a figura 4.6. Ademais, em ambos os gráficos na figura 4.6 é notório que o módulo ao quadrado das respectivas funções de onda é praticamente o mesmo para  $n = 2$  e  $n = 3$ ; isso passa a ocorrer para  $n = 4$  e  $n = 5$  para maiores valores de  $\tilde{u}_0$ , e assim sucessivamente.

De fato, quando o tamanho da caixa aumenta, os efeitos do potencial efetivo nas funções de onda vão se tornando cada vez mais aparentes, enquanto os efeitos devidos à caixa começam a se tornar menos relevantes. Nessa perspectiva, a tabela 4.1 mostra as energias obtidas para alguns valores de  $\tilde{u}_0$ . Para  $l = 0$  ( $l = 1/2$ ), a energia do estado fundamental  $\epsilon_{1,0}$  ( $\epsilon_{1,1/2}$ ) passa a convergir para aproximadamente  $-0.13051$  ( $-0.02892$ ) à medida que o tamanho da caixa é aumentado. Como é possível observar em ambos os casos, as respectivas energias dos três estados seguintes passam a diminuir quando  $\tilde{u}_0$  aumenta, de tal forma que elas se tornam praticamente indistinguíveis entre si. Esses resultados mostram que, para ambos os valores de  $l$ , existirá um único estado com energia negativa a partir de um certo valor de  $\tilde{u}_0$ , portanto, isso ocorre unicamente devido a  $V_l(\tilde{u})$ .

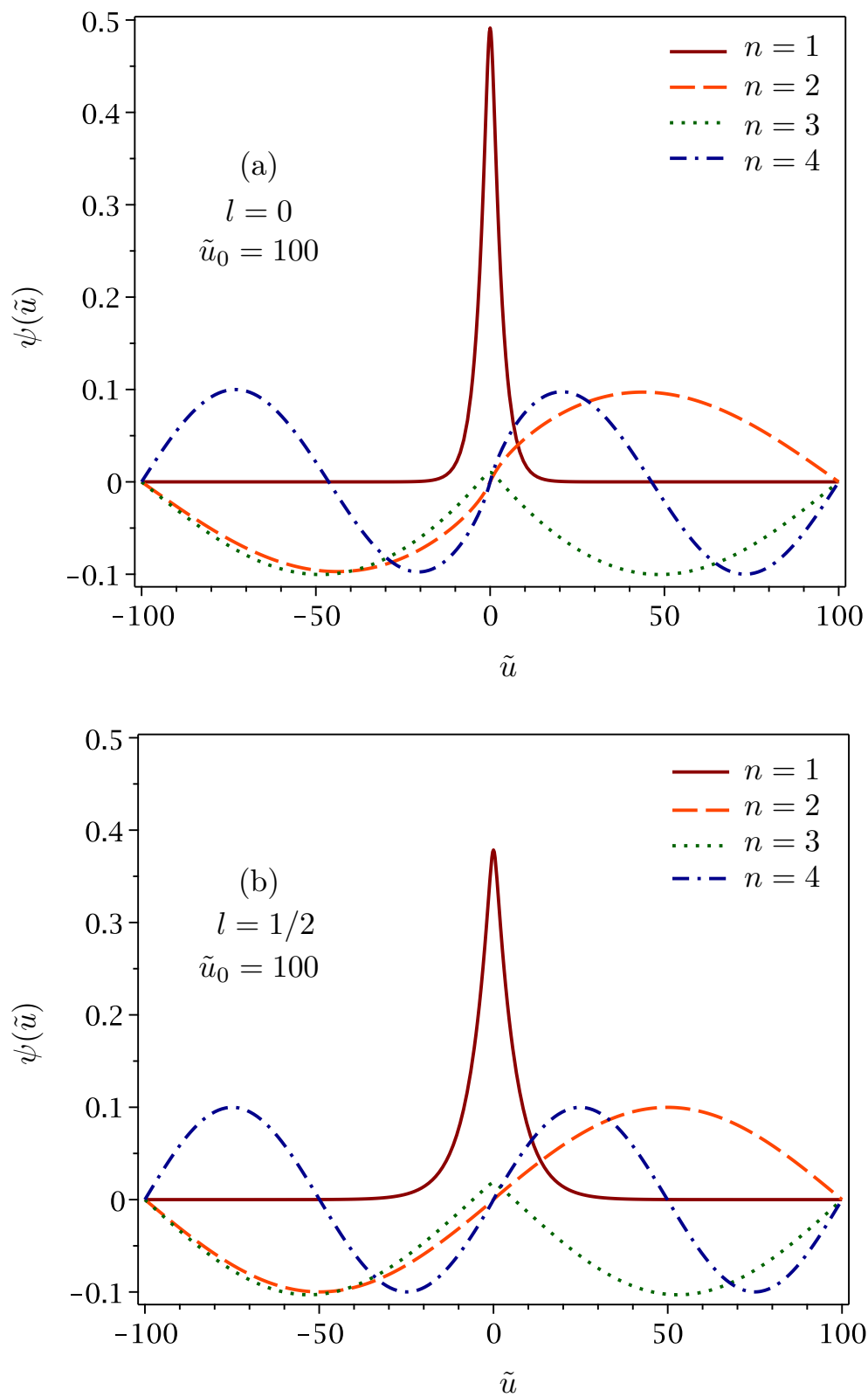


Figura 4.6 – No gráfico (a) estão as funções de onda radiais (normalizadas numericamente) para os primeiros quatro estados quando  $l = 0$  para  $\tilde{u}_0 = 100$  e, no gráfico (b), o mesmo quando  $l = 1/2$ .

Tabela 4.1 – Energias  $\epsilon_{n,l}$  dos primeiros quatro estados ( $n = 1, 2, 3, 4$ ) para  $l = 0$  e para  $l = 1/2$ , ao considerar alguns valores crescentes do tamanho da caixa,  $2\tilde{u}_0$ .

$\tilde{u}_0$	$\epsilon_{1,0}$	$\epsilon_{2,0}$	$\epsilon_{3,0}$	$\epsilon_{4,0}$
1	2.03806	9.50983	21.84675	39.11990
3.00420	0.00000	0.96307	2.27982	4.21282
10	-0.12999	0.07853	0.15781	0.36069
50	-0.13051	0.00289	0.00388	0.01370
100	-0.13051	0.00071	0.00087	0.00338
500	-0.13051	0.00003	0.00003	0.00013
1000	-0.13051	0.00001	0.00001	0.00001

$\tilde{u}_0$	$\epsilon_{1,1/2}$	$\epsilon_{2,1/2}$	$\epsilon_{3,1/2}$	$\epsilon_{4,1/2}$
1	2.26282	9.70867	22.04447	39.31700
5.97477	0.00000	0.26695	0.57495	1.08526
10	-0.02401	0.09601	0.19112	0.38755
50	-0.02892	0.00392	0.00502	0.01568
100	-0.02892	0.00098	0.00111	0.00393
500	-0.02892	0.00004	0.00004	0.00016
1000	-0.02892	0.00001	0.00001	0.00004

Para ilustrar melhor esses resultados, a figura 4.7 mostra como acontece a variação da energia da partícula em função do tamanho da caixa,  $2\tilde{u}_0$ , onde as linhas contínuas em azul representam os estados com função de onda par e as tracejadas em vermelho, os estados com função de onda ímpar. Assim, a energia do estado fundamental com  $l = 0$  ( $l = 1/2$ ) tende a aproximadamente  $-0.13051$  ( $-0.02892$ ) à medida que o tamanho da caixa aumenta, enquanto as energias dos estados excitados passam a formar um espectro contínuo<sup>4</sup>. Consequentemente, isso leva à inferência de que existe apenas um único estado ligado para o potencial efetivo apresentado na equação (4.20) para a catenoide, helicóide ou catenária de tamanho infinito na variável radial,  $\tilde{u}$ .

Como a energia do estado fundamental foi obtida de forma aproximada com o “método da caixa para  $\tilde{u}_0 \gg 1$ ”, mas a função de onda em (4.38) é a autofunção exata da equação (4.19), a solução obtida neste trabalho é na verdade “semi-exata” [93]. A figura 4.8 compara essas soluções com as funções de onda encontradas por meio do método variacional tanto para  $l = 0$  quanto para  $l = 1/2$ . Como pode-se observar, a solução com HeunC tende a zero mais rapidamente que a Lorentziana, mas mais lentamente que a Gaussiana. Para ambos os valores de  $l$ , a respectiva energia encontrada com o método da caixa é consideravelmente próxima das obtidas com o método variacional, especialmente para a Lorentziana (ver a tabela 4.2).

<sup>4</sup>Isso só ocorre de fato no limite em que  $\tilde{u}_0 \rightarrow \infty$ , isto é, quando se tem uma catenoide, helicóide ou catenária infinita em  $\tilde{u}$ .

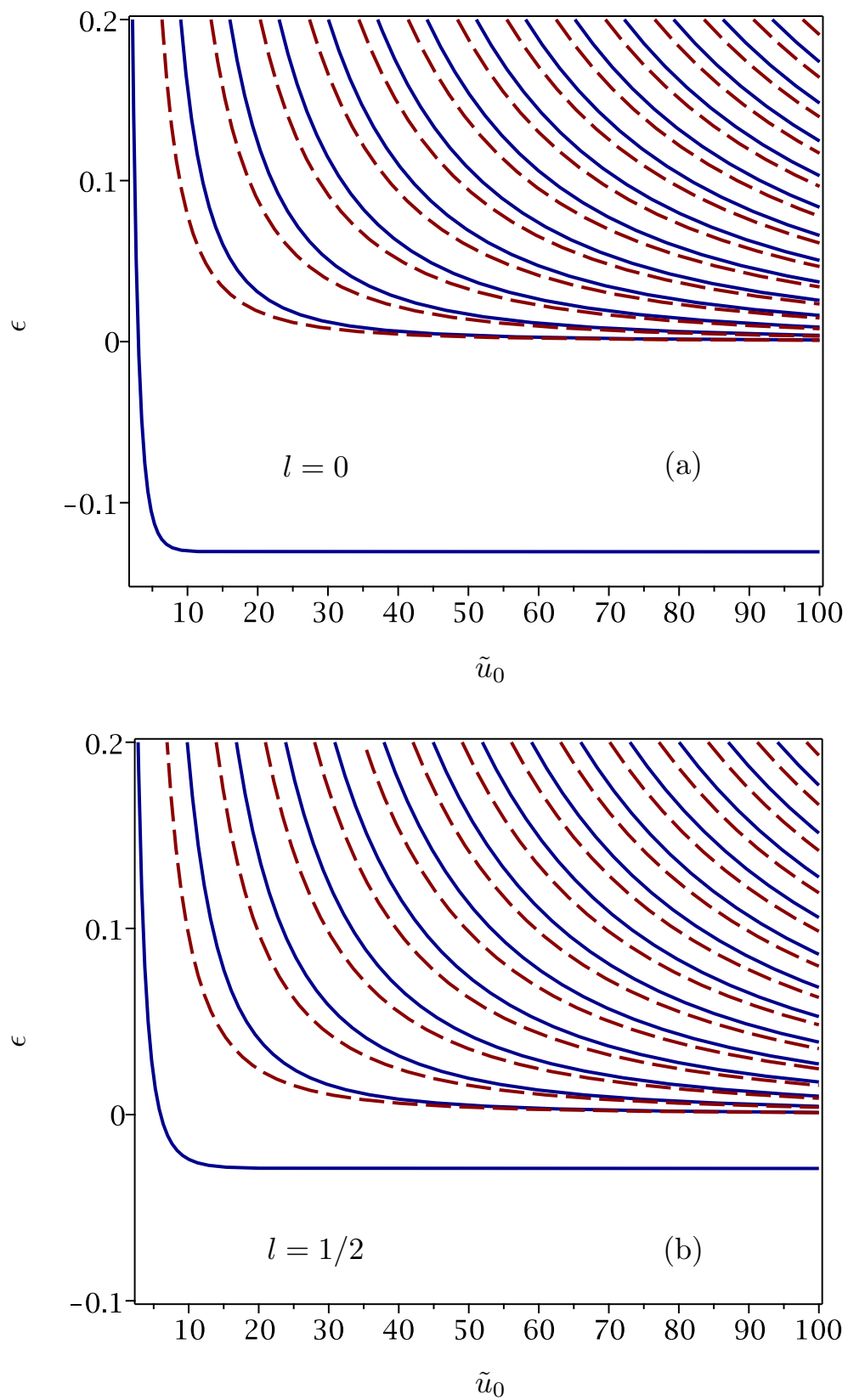


Figura 4.7 – No gráfico (a) estão as energias em função do tamanho da caixa,  $2\tilde{u}_0$ , para  $l = 0$  e, no gráfico (b), o mesmo para  $l = 1/2$ . Cada linha corresponde a um nível de energia, sendo as linhas contínuas em azul associadas às soluções pares e as tracejadas em vermelho, às ímpares.

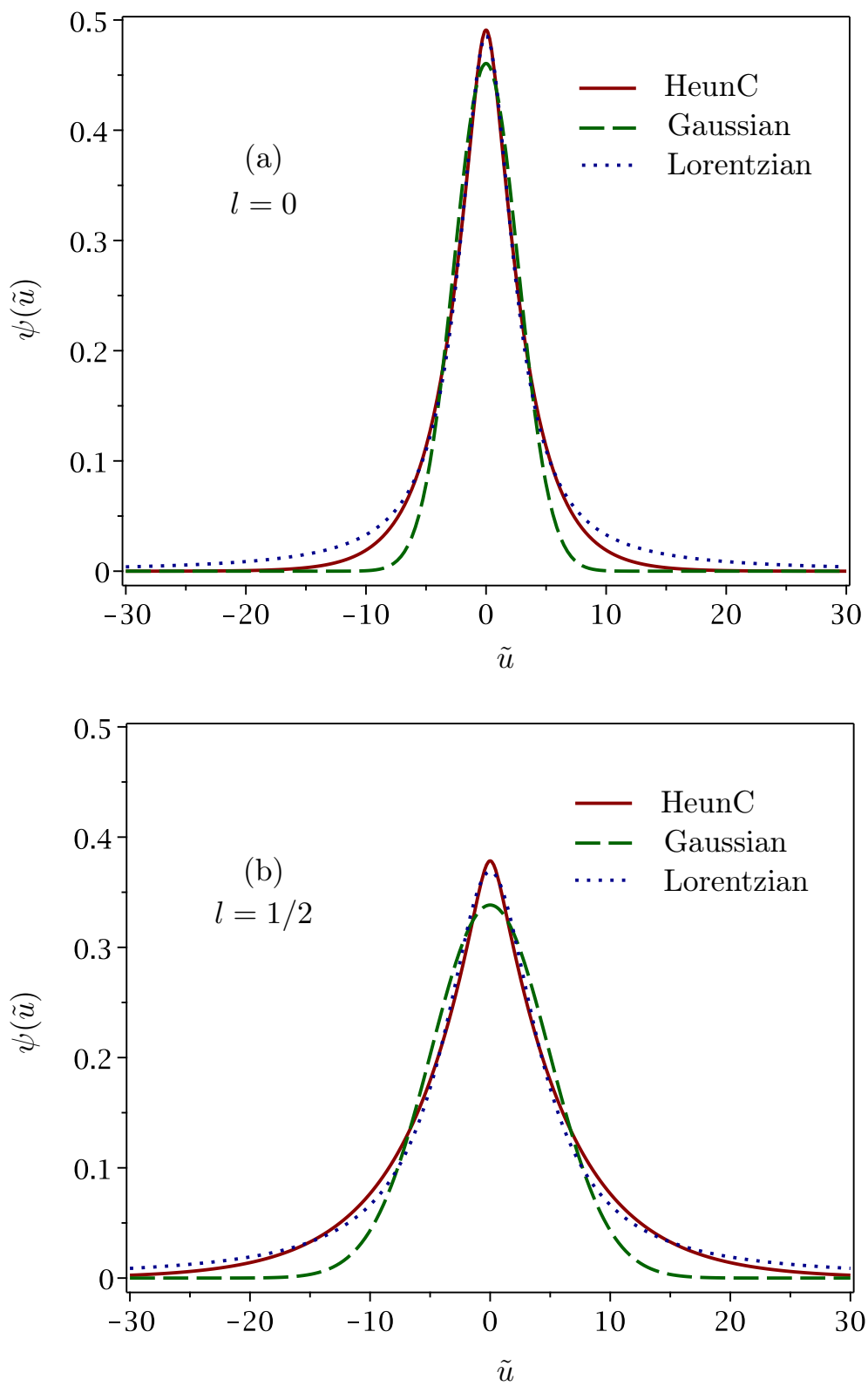


Figura 4.8 – Comparação (próxima da origem) entre a função de onda radial obtida para HeunC e as funções Gaussiana e Lorentziana utilizadas no método variacional (a) para  $l = 0$  e (b) para  $l = 1/2$ .

Tabela 4.2 – Comparação entre as energias obtidas para o estado fundamental com o método variacional e com o método da caixa quando  $l = 0$  e  $l = 1/2$ .

Função	$\epsilon_{1,0}$	$\epsilon_{1,1/2}$
Gaussiana	-0.11977	-0.02299
Lorentziana	-0.12918	-0.02757
HeunC	-0.13051	-0.02892

### Potencial efetivo repulsivo

A ideia de empregar o método da caixa surgiu como uma alternativa com a finalidade de contornar a impossibilidade de obter analiticamente os valores das energias através da função confluyente de Heun quando  $V_l(\tilde{u})$  era atrativo, mas essa mesma abordagem pode ser utilizada também quando  $V_l(\tilde{u})$  é repulsivo, isto é, para  $|l| > 1/2$ . Dessa maneira, para uma helicóide finita com  $\phi_0 = 2\pi$  isso ocorre se o número quântico  $j > 1$ , ou seja, quando  $l = 1, 3/2, 2, 5/2, \dots$ , enquanto acontece para  $l = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$  nos casos da helicóide infinita e da catenoide. Obviamente, aqui todos os estados ligados possuirão energia positiva e serão devidos unicamente à caixa, de modo que no limite em que  $\tilde{u}_0 \rightarrow \infty$  não haverá nenhum estado ligado nesses sistemas. Como exemplos, serão discutidos a seguir os casos em que  $l = \pm 1$  e  $l = \pm 2$  para  $\tilde{u}_0 = 1$  e  $\tilde{u}_0 = 100$ . Para os valores semi-inteiros  $l = 3/2, 5/2, \dots$ , os resultados são completamente análogos.

Quando  $\tilde{u}_0 = 1$ , as energias dos quatro primeiros estados para  $l = \pm 1$  ( $l = \pm 2$ ) são dadas aproximadamente por 2.93669 (5.62598), 10.30488 (12.68535), 22.63779 (25.01384) e 39.90841 (42.27562), cujas respectivas funções de onda são também muito semelhantes às apresentadas na figura 4.5. Nesses casos, isso também sugere que, para valores de  $\tilde{u}_0$  próximos de 1, os efeitos da caixa têm mais influência nas autofunções do que a presença do potencial efetivo em si. Todavia, à medida que os valores de  $|l|$  aumentam,  $V_l(\tilde{u})$  fica cada vez mais repulsivo, tendendo a “afastar” a densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  para mais longe da origem, mesmo para valores de  $\tilde{u}_0$  relativamente pequenos, isto é, próximos de 1.

Já quando se escolhe que  $\tilde{u}_0 = 100$ , as energias dos quatro primeiros estados para  $l = \pm 1$  ( $l = \pm 2$ ) são dadas aproximadamente por 0.00146 (0.00264), 0.00147 (0.00264), 0.00490 (0.00708) e 0.00491 (0.00708). A partir desses resultados, a figura 4.9 mostra as correspondentes funções de onda, onde é possível observar em ambos os casos que as densidades de probabilidade  $|\psi|^2$  são muito semelhantes para os estados em que  $n = 1$  e  $n = 2$ , bem como para  $n = 3$  e  $n = 4$ , e assim sucessivamente. Ademais, os efeitos de o potencial  $V_l(\tilde{u})$  ser repulsivo tornam-se evidentes aqui, uma vez que a densidade de probabilidade perto da origem é praticamente nula em todos os estados estudados. Novamente, tudo isso indica que as possíveis energias da partícula passam a formar um espectro contínuo para o potencial efetivo repulsivo quando os valores de  $\tilde{u}_0$  são suficientemente grandes (semelhantemente aos gráficos que são mostrados na figura 4.7, mas sem a linha que é associada ao estado ligado).

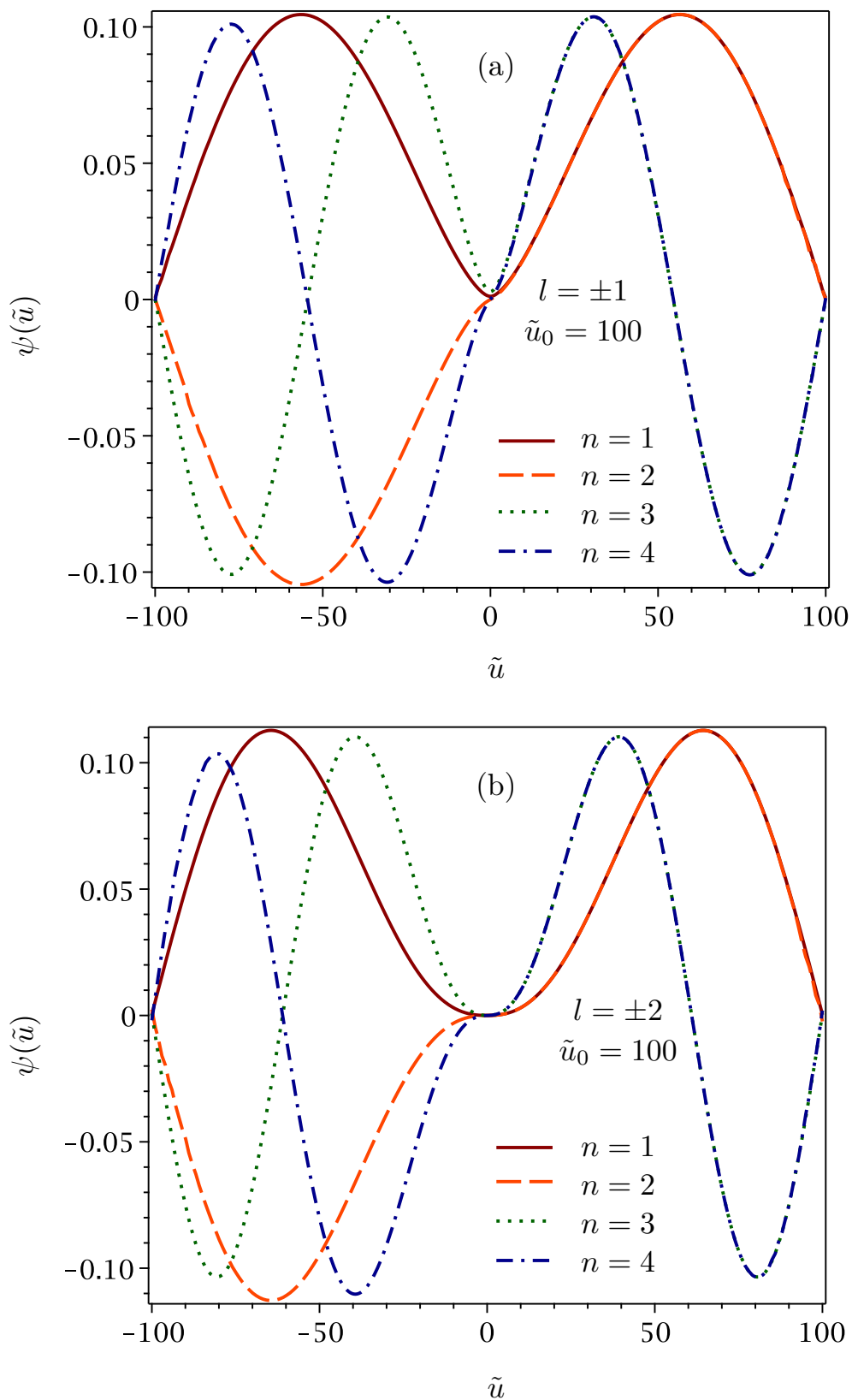


Figura 4.9 – Funções de onda radiais (normalizadas numericamente) correspondentes aos quatro primeiros estados (a) para  $l = \pm 1$  e (b) para  $l = \pm 2$ , isto é, para o potencial efetivo repulsivo, e considerando  $\tilde{u}_0 = 100$ .



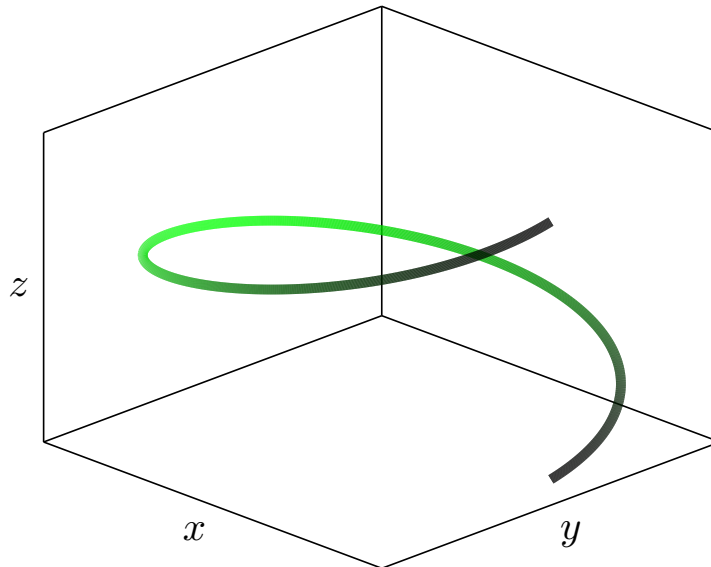


Figura 4.10 – Representação em mapa de cores da densidade de probabilidade  $|\psi_1|^2$  correspondente ao estado fundamental de uma partícula confinada a uma hélice finita com  $\phi_0 = 2\pi$ . Quanto mais clara (escura) a cor da região, maior (menor) a probabilidade de encontrar a partícula.

### 4.3 Sobre o estado fundamental

Nesta seção discutir-se-ão os resultados deste trabalho para o estado fundamental dos sistemas de interesse. Primeiramente, é importante lembrar que o momento angular de uma partícula confinada a uma hélice infinita é quantizado, de modo que a densidade de probabilidade é sempre uniforme, pois  $|\psi_l(\phi)|^2 = \frac{1}{2\pi}$ , para todo  $l$  inteiro. Por outro lado, se a hélice é finita em  $0 < \phi < \phi_0$ , então as funções de onda  $\psi_j(\phi)$  e as energias  $E_j$  são análogas às do problema do poço de potencial infinito unidimensional, como pode-se observar nas equações (4.5) e (4.6). Nesse caso, a figura 4.10 mostra a densidade de probabilidade do estado fundamental,  $|\psi_1|^2$ , plotada sobre uma hélice finita com  $\phi_0 = 2\pi$ .

Além disso, mostrou-se na seção 4.2 que uma partícula confinada a uma catenária pode ser encontrada em um estado ligado devido ao potencial induzido por geometria. Nesse caso, ao fazer  $l = 1/2$  e  $\tilde{u} = u/a$  na equação (4.38), obtém-se disso a correspondente função de onda<sup>5</sup>,

$$\psi(u) = \frac{C_0}{\sqrt{a}} \left(1 + \frac{u^2}{a^2}\right)^{\frac{\sqrt{5}+1}{4}} \text{HeunC} \left(0, -\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{5}}{2}, -\frac{\epsilon}{4}, \frac{9}{16} + \frac{\epsilon}{4}, -\frac{u^2}{a^2}\right), \quad (4.42)$$

onde  $C_0 \approx 0.37842$  e  $\epsilon \approx -0.02892$ , de acordo com o método da caixa. Desse modo, a

<sup>5</sup>Vale ressaltar que como a probabilidade  $P$  de encontrar a partícula em um determinado intervalo é dada por  $P = \int |\psi(\tilde{u})|^2 d\tilde{u} = \int \frac{1}{a} |\psi(u)|^2 du$ , pode-se reescalar  $\psi \rightarrow \psi/\sqrt{a}$ , de modo que se escreve mais convenientemente a probabilidade como  $P = \int |\psi(u)|^2 du$ , o que justifica o aparecimento do fator  $1/\sqrt{a}$  na equação (4.42).

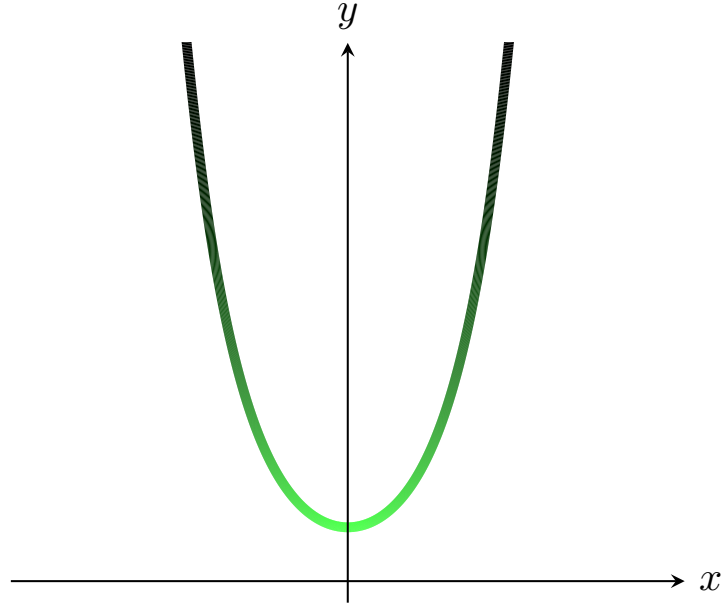


Figura 4.11 – Representação em mapa de cores da densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  correspondente ao estado ligado de uma partícula confinada a uma catenária. Quanto mais clara (escura) a cor da região, maior (menor) a probabilidade de encontrar a partícula.

energia da partícula no estado ligado é  $E \approx -0.02892 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ . Com o uso de (4.42), a densidade de probabilidade plotada sobre a catenária é apresentada na figura 4.11.

Para uma helicóide finita em  $\phi$ , com  $\phi_0 = 2\pi$ , obtém-se da equação (4.18) a função de onda angular,

$$\Phi_j(\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin\left(\frac{j\phi}{2}\right),$$

de onde decorre que  $j = 1, 2, 3, \dots$  e  $l = j/2$ . Recordando que o potencial efetivo em (4.20) é atrativo apenas se  $|l| \leq 1/2$ , então, para a helicóide em questão isso implica que é possível haver estados ligados apenas se  $j = 1$ . Por conseguinte, a função de onda radial nesse caso também é dada pela equação (4.42), de modo que a função de onda total do único estado ligado é dada por<sup>6</sup>

$$\chi_g(\phi, u) = \frac{C_0 \sin\left(\frac{\phi}{2}\right)}{\sqrt{\pi a}} \left(1 + \frac{u^2}{a^2}\right)^{\frac{\sqrt{5}+1}{4}} \text{HeunC}\left(0, -\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{5}}{2}, -\frac{\epsilon}{4}, \frac{9}{16} + \frac{\epsilon}{4}, -\frac{u^2}{a^2}\right), \quad (4.43)$$

onde  $C_0 \approx 0.37842$  e  $\epsilon \approx -0.02892$ . Ou seja, a energia da partícula no estado ligado é  $E \approx -0.02892 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ , exatamente como no caso da catenária. Através do uso da equação (4.43), a densidade de probabilidade plotada sobre a helicóide finita é apresentada na figura 4.12.

<sup>6</sup>Nos casos da helicóide e da catenóide, a probabilidade  $P_A$  de encontrar a partícula em uma certa área é  $P_A = \iint |\chi_g(\phi, \tilde{u})|^2 d\phi d\tilde{u} = \iint \frac{1}{a} |\chi_g(\phi, u)|^2 d\phi du$ , logo, ao reescalar  $\chi_g \rightarrow \chi_g/\sqrt{a}$ , segue que  $P_A = \iint |\chi_g(\phi, u)|^2 d\phi du$ , semelhantemente ao que foi feito no caso da catenária.

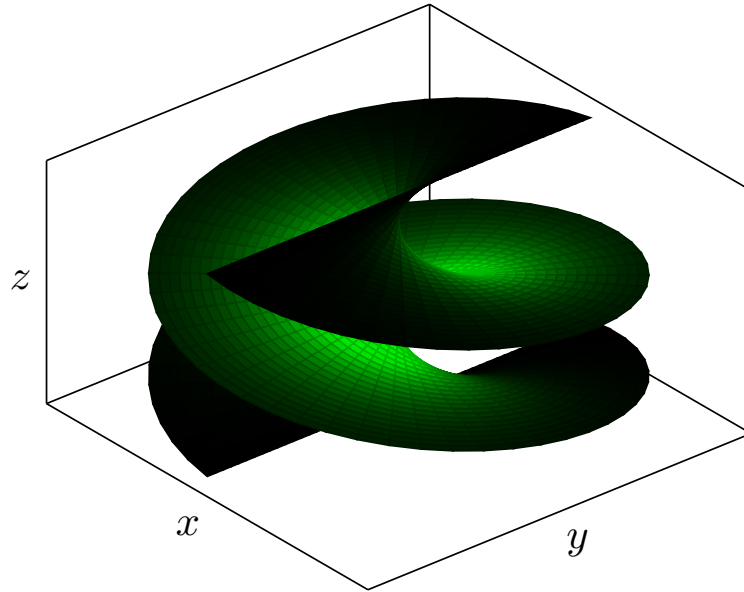


Figura 4.12 – Representação em mapa de cores da densidade de probabilidade  $|\chi_g|^2$  correspondente ao estado ligado de uma partícula confinada a uma helicoide finita com  $\phi_0 = 2\pi$ . Quanto mais clara (escura) a cor da região, maior (menor) a probabilidade de encontrar a partícula.

Por fim, como a função de onda angular para os casos da helicoide infinita e da catenoide é dada por  $\Phi_l(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi}$ , e o potencial efetivo é atrativo apenas se  $l = 0$ , então, para que haja estados ligados, ter-se-á simplesmente  $\Phi_0(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ . A partir da função de onda radial (4.38), a função de onda total para o único estado ligado desses sistemas é

$$\chi_g(\phi, u) = \frac{C_0}{\sqrt{2\pi a}} \left(1 + \frac{u^2}{a^2}\right)^{\frac{\sqrt{5}+1}{4}} \text{HeunC}\left(0, -\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{5}}{2}, -\frac{\epsilon}{4}, \frac{5}{8} + \frac{\epsilon}{4}, -\frac{u^2}{a^2}\right), \quad (4.44)$$

sendo  $C_0 = 0.49087$  e  $\epsilon = -0.13051$ , conforme foi encontrado com o método da caixa. Assim, a energia da partícula é dada por  $E \approx -0.13051 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ . A figura 4.13 apresenta, com o uso da equação (4.44), a densidade de probabilidade plotada sobre a helicoide infinita e sobre a catenoide. É possível observar que a relação entre a densidade de probabilidade do estado fundamental para a helicoide e para a catenoide estão intimamente relacionados pela isometria, isto é, o comportamento concorda com o mapeamento dos pontos da helicoide nos correspondentes pontos da catenoide, como mostram as figuras 2.5 e 2.6.

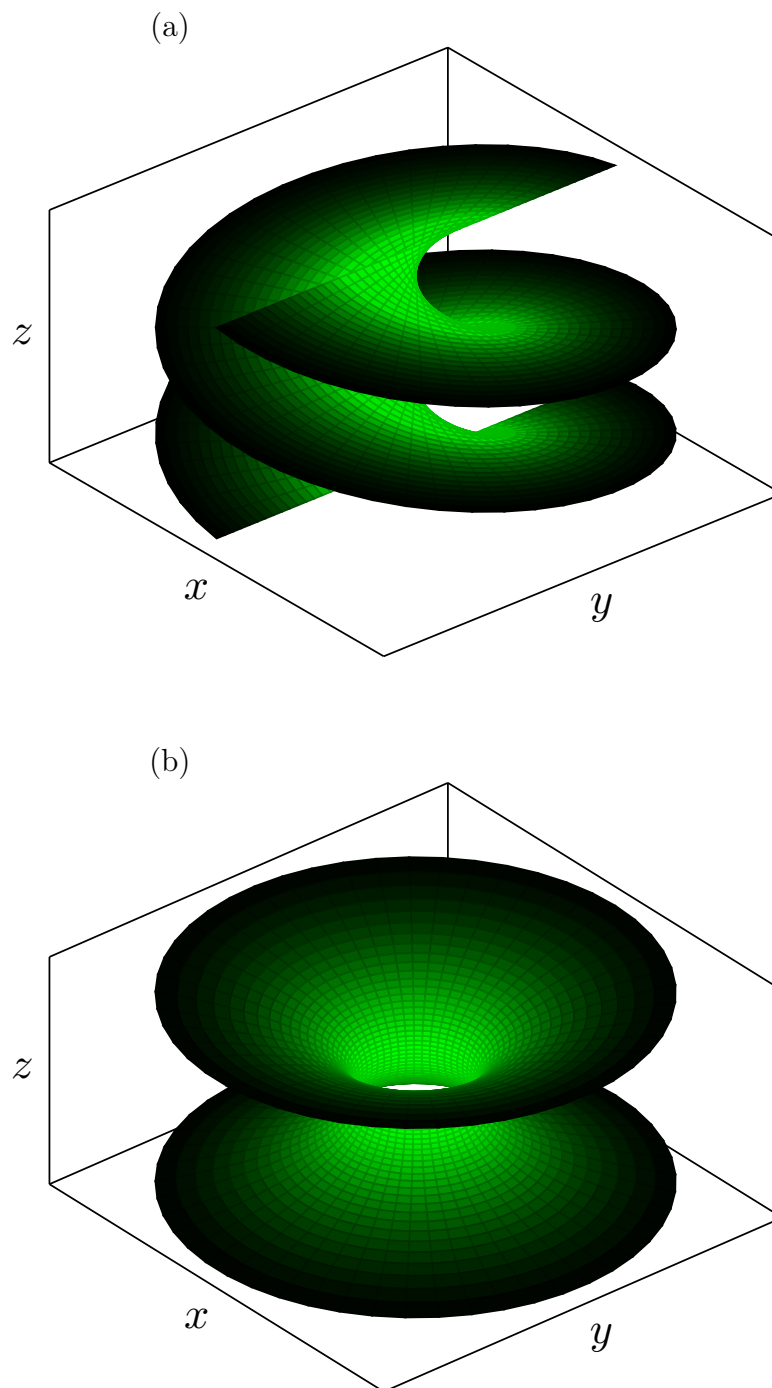


Figura 4.13 – Representação em mapa de cores da densidade de probabilidade  $|\chi_g|^2$  correspondente ao estado ligado de uma partícula confinada a uma (a) helicoides infinita e a uma (b) catenoide. Quanto mais clara (escura) a cor da região, maior (menor) a probabilidade de encontrar a partícula.

## 5 Conclusões

Neste trabalho estudou-se o confinamento de uma partícula quântica a uma hélice, catenária, helicóide ou catenoide através do formalismo do potencial confinante para curvas e superfícies. Primeiramente mostrou-se que uma partícula confinada a uma hélice infinita tem o seu momento angular quantizado devido à periodicidade de curva. Por outro lado, para o confinamento a uma hélice finita, o problema torna-se semelhante ao de uma partícula quântica em um poço de potencial unidimensional.

Em seguida, a isometria local entre a helicóide e a catenoide foi explorada, de modo que mostrou-se que a dinâmica quântica nas superfícies é regida pela mesma equação de Schrödinger. Disso, obteve-se uma equação de Schrödinger efetiva, na variável radial  $\tilde{u}$ , com um potencial efetivo  $V_l(\tilde{u})$  que é atrativo apenas se  $|l| \leq 1/2$ . Nos casos da helicóide infinita e da catenoide, só é possível ter estados ligados para  $l = 0$ , enquanto no caso de uma helicóide finita em  $0 < \phi < 2\pi$  isso ocorre apenas para  $l = 1/2$ . Além disso, observou-se que, ao fazer  $l = 1/2$  na equação radial para a helicóide e a catenoide, obtém-se a mesma equação de Schrödinger do caso da catenária.

A utilização do método variacional (com a função Gaussiana e a função Lorentziana) permitiu concluir que há um estado ligado nos casos da catenária, da helicóide (finita e infinita em  $\phi$ ) e da catenoide. Em seguida, mostrou-se que a equação Schrödinger radial possui soluções exatas que são escritas em termos da função confluyente de Heun, todavia, os autovalores não podem ser obtidos analiticamente, de modo que é necessário o uso de métodos numéricos para estimá-los. De fato, ambos os métodos mostraram-se concordantes entre si, e foi possível inferir que, nesses três casos, a partícula pode ser encontrada em um único estado ligado, o qual é devido ao potencial induzido por geometria que advém do formalismo do potencial confinante.

Como perspectivas para futuros trabalhos pretende-se estudar o confinamento de uma partícula quântica com spin na helicóide e na catenoide, bem como estudar o confinamento de partículas idênticas nessas condições. Outra abordagem interessante é a proposta recentemente na referência [98], que contém um campo magnético efetivo induzido por geometria na helicóide. Naturalmente, também pretende-se utilizar os métodos empregados neste trabalho para o problema de confinamento em outros tipos de curvas e superfícies regulares.

Ademais, o caso da catenoide é de especial relevância devido à sua relação com

buracos de minhoca [38]. Em coautoria com F. S. Azevedo, A. P. Santos e F. Moraes, estudamos no nosso trabalho intitulado “*Optical wormhole from hollow disclinations*” (Buraco de minhoca óptico de disclinações ocas) a propagação da luz em uma catenoide com duas configurações de cristais líquidos nemáticos [99]. Esse trabalho foi publicado na revista *Physical Review A* em fevereiro de 2021. Assim, para futuros trabalhos, é de nosso interesse considerar agora um potencial análogo ao encontrado no formalismo do potencial confinante para a equação de Helmholtz na catenoide [100], o que leva a um problema similar ao da equação de Schrödinger estudada nesta dissertação.

## Referências Bibliográficas

- [1] GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. The rise of graphene. *Nature Materials*, London, v. 6, n. 3, p. 183–191, 2007.
- [2] NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, Washington, D.C., v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.
- [3] VIEIRA SEGUNDO, J.; VILAR, E. O. Grafeno: Uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos. *Revista Eletrônica de Materiais e Processos*, Campina Grande, v. 11, n. 2, 2016.
- [4] KHAN, K.; TAREEN, A. K.; ASLAM, M.; WANG, R.; ZHANG, Y.; MAHMOOD, A.; OUYANG, Z.; ZHANG, H.; GUO, Z. Recent developments in emerging two-dimensional materials and their applications. *Journal of Materials Chemistry C*, Cambridge, v. 8, n. 2, p. 387–440, 2020.
- [5] COOPER, D. R.; D’ANJOU, B.; GHATTAMANENI, N.; HARACK, B.; HILKE, M.; HORTH, A.; MAJLIS, N.; MASSICOTTE, M.; VANDSBURGER, L.; WHITEWAY, E. et al. Experimental review of graphene. *ISRN Condensed Matter Physics*, London, v. 2012, 2012.
- [6] CHOI, W.; LAHIRI, I.; SEELABOYINA, R.; KANG, Y. S. Synthesis of graphene and its applications: a review. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, New York, v. 35, n. 1, p. 52–71, 2010.
- [7] AOKI, H.; DRESSELHAUS, M. S. *Physics of graphene*. Berlin: Springer Science & Business Media, 2013.
- [8] SITENKO, Y. A.; VLASII, N. Electronic properties of graphene with a topological defect. *Nuclear Physics B*, Amsterdam, v. 787, n. 3, p. 241–259, 2007.
- [9] TERRONES, H.; TERRONES, M. Curved nanostructured materials. *New Journal of Physics*, Bristol, UK, v. 5, n. 1, p. 126, 2003.

- [10] CORTIJO, A.; VOZMEDIANO, M. A. Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene. *Nuclear Physics B*, Amsterdam, v. 763, n. 3, p. 293–308, 2007.
- [11] SANTOS, L. J. D.; ROCHA, G. P.; ALVES, R. B.; FREITAS, R. P. D. Fulereo [C<sub>60</sub>]: Química e aplicações. *Química Nova*, São Paulo, v. 33, n. 3, p. 680–693, 2010.
- [12] KROTO, H. W.; HEATH, J. R.; O'BRIEN, S. C.; CURL, R. F.; SMALLEY, R. E. C<sub>60</sub>: Buckminsterfullerene. *Nature*, Berlin, v. 318, n. 6042, p. 162–163, 1985.
- [13] KROTO, H. W.; ALLAF, A.; BALM, S. P. C<sub>60</sub>: Buckminsterfullerene. *Chemical Reviews*, New York, v. 91, n. 6, p. 1213–1235, 1991.
- [14] LIMA, J. D. M.; GOMES, D. S.; FRAZÃO, N. F.; SOARES, D. J. B.; SARMENTO, R. G. Glyphosate adsorption on C<sub>60</sub> fullerene in aqueous medium for water reservoir depollution. *Journal of Molecular Modeling*, Berlin, v. 26, n. 5, p. 1–8, 2020.
- [15] TIWARI, J. N.; TIWARI, R. N.; KIM, K. S. Zero-dimensional, one-dimensional, two-dimensional and three-dimensional nanostructured materials for advanced electrochemical energy devices. *Progress in Materials Science*, Amsterdam, v. 57, n. 4, p. 724–803, 2012.
- [16] DRESSELHAUS, M. S.; DRESSELHAUS, G.; EKLUND, P. C.; RAO, A. M. Carbon nanotubes. In: *The physics of fullerene-based and fullerene-related materials*. Berlin: Springer, 2000. p. 331–379.
- [17] AVOURIS, P. Carbon nanotube electronics and photonics. *Physics Today*, New York, v. 62, n. 1, p. 34–40, 2009.
- [18] LIU, L.; LIU, F.; ZHAO, J. Curved carbon nanotubes: From unique geometries to novel properties and peculiar applications. *Nano Research*, Berlin, v. 7, n. 5, p. 626–657, 2014.
- [19] PARTOENS, B.; PEETERS, F. M. From graphene to graphite: Electronic structure around the k point. *Physical Review B*, New York, v. 74, n. 7, p. 075404, 2006.
- [20] JOGLEKAR, Y. N.; SAXENA, A. Curvature-induced p- n junctions in bent or folded bilayer graphene sheets. *Physical Review B*, New York, v. 80, n. 15, p. 153405, 2009.
- [21] SANTOS, F.; FUMERON, S.; BERCHE, B.; MORAES, F. Geometric effects in the electronic transport of deformed nanotubes. *Nanotechnology*, Bristol, UK, v. 27, n. 13, p. 135302, 2016.



- [22] SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. *Modern quantum mechanics*. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.
- [23] MARTIN, R. M. *Electronic structure: Basic theory and practical methods*. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- [24] JECKO, T. On the mathematical treatment of the Born-Oppenheimer approximation. *Journal of Mathematical Physics*, Woodbury, v. 55, n. 5, p. 053504, 2014.
- [25] DREIZLER, R. M.; GROSS, E. K. *Density functional theory: an approach to the quantum many-body problem*. Berlin: Springer Science & Business Media, 2012.
- [26] DATTA, S. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge: Cambridge university press, 1997.
- [27] ZHANG, T.; LI, X.; GAO, H. Defects controlled wrinkling and topological design in graphene. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Amsterdam, v. 67, p. 2–13, 2014.
- [28] JENSEN, H.; KOPPE, H. Quantum mechanics with constraints. *Annals of Physics*, Amsterdam, v. 63, n. 2, p. 586–591, 1971.
- [29] DA COSTA, R. C. T. Quantum mechanics of a constrained particle. *Physical Review A*, New York, v. 23, n. 4, p. 1982–1987, 1981.
- [30] DA COSTA, R. C. T. Constraints in quantum mechanics. *Physical Review A*, New York, v. 25, n. 6, p. 2893–2900, 1982.
- [31] SZAMEIT, A.; DREISOW, F.; HEINRICH, M.; KEIL, R.; NOLTE, S.; TÜNNERMANN, A.; LONGHI, S. Geometric potential and transport in photonic topological crystals. *Physical Review Letters*, New York, v. 104, n. 15, p. 150403, 2010.
- [32] ONOE, J.; ITO, T.; SHIMA, H.; YOSHIOKA, H.; KIMURA, S. I. Observation of Riemannian geometric effects on electronic states. *EPL (Europhysics Letters)*, Bristol, UK, v. 98, n. 2, p. 27001, 2012.
- [33] STOKER, J. J. *Differential geometry*. New York: Wiley Classics Library, 1989.
- [34] DO CARMO, M. P. *Differential geometry of curves and surfaces: Revised and updated second edition*. New York: Courier Dover Publications, 2016.
- [35] ATANASOV, V.; DANDOLOFF, R. Curvature-induced quantum behaviour on a helical nanotube. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 372, n. 40, p. 6141–6144, 2008.

- [36] DA SILVA FILHO, F. F. *Confinamento quântico em curvas planas*. Recife-PE: Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) – Universidade Federal Rural de Pernambuco, 2020.
- [37] ATANASOV, V.; DANDOLOFF, R.; SAXENA, A. Geometry-induced charge separation on a helicoidal ribbon. *Physical Review B*, New York, v. 79, n. 3, p. 033404, 2009.
- [38] DANDOLOFF, R.; SAXENA, A.; JENSEN, B. Geometry-induced potential on a two-dimensional section of a wormhole: Catenoid. *Physical Review A*, Woodbury, v. 81, n. 1, p. 014102, 2010.
- [39] SILVA, J. E. G.; FURTADO, J.; SANTIAGO, T. M.; RAMOS, A. C. A.; DA COSTA, D. R. Electronic properties of bilayer graphene catenoid bridge. *Physics Letters A*, Amsterdam, p. 126458, 2020.
- [40] RIBEIRO JR., M. C. R.; CUNHA, M. M.; FILGUEIRAS, C.; SILVA, E. O. Quantum particle motion on the surface of a helicoid in the presence of an harmonic oscillator. *Physics Open*, Amsterdam, v. 5, n. July, p. 100045, 2020.
- [41] STRUIK, D. J. *Lectures on classical differential geometry*. New York: Dover, 1988.
- [42] PIRES, A. S. T. *Geometria diferencial para físicos*. São Paulo: Livraria da Física, 2015.
- [43] KREYSZIG, E. *Differential geometry*. New York: Dover Publications, 1991.
- [44] GALLIER, J. *Geometric methods and applications: For computer science and engineering*. New York: Springer Science & Business Media, 2011. v. 38.
- [45] TENENBLAT, K. *Introdução à geometria diferencial*. 2. ed. São Paulo: Blucher, 2008.
- [46] ABBENA, E.; SALAMON, S.; GRAY, A. *Modern differential geometry of curves and surfaces with Mathematica*. Boca Raton, FL: Chapman and Hall/CRC, 2017.
- [47] DILLEN, F. J. E.; VERSTRAELEN, L. C. A. *Handbook of differential geometry*. Amsterdam: Elsevier, 2000. v. 1.
- [48] WALKER, S. W. *The shape of things: A practical guide to differential geometry and the shape derivative*. Philadelphia, PA: SIAM, 2015. v. 28.
- [49] THORNTON, S. T.; MARION, J. B. *Classical dynamics of particles and systems*. Belmont, CA: Brooks/Cole, 2004.

- [50] SYMON, K. R. *Mechanics*. Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, 1971.
- [51] DA SILVA, L. C. B.; BASTOS, C. C.; RIBEIRO, F. G. Quantum mechanics of a constrained particle and the problem of prescribed geometry-induced potential. *Annals of Physics*, New York, v. 379, p. 13–33, 2017.
- [52] BERNARD, B. *On the quantization problem in curved space*. Dayton, OH: Thesis (Master of Science) – Wright State University, 2012.
- [53] TEIXEIRA, R.; LEANDRO, E. S. G.; DA SILVA, L. C. B.; MORAES, F. Schrödinger formalism for a particle constrained to a surface in  $\mathbb{R}_1^3$ . *Journal of Mathematical Physics*, Woodbury, v. 60, n. 2, p. 023502, 2019.
- [54] ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. *Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física*. São Paulo: Editora Campus/Elsevier, 2007.
- [55] GOMES, R. T. *Mecânica quântica em superfícies no espaço de Minkowski*. Recife-PE: Tese (Doutorado em Matemática) – Universidade Federal de Pernambuco, 2018.
- [56] ZETTILI, N. *Quantum mechanics: Concepts and applications*. 2. ed. West Sussex, UK: John Wiley & Sons, 2009.
- [57] BERNARD, B. J.; VOON, L. C. L. Y. Notes on the quantum mechanics of particles constrained to curved surfaces. *European Journal of Physics*, Bristol, v. 34, n. 5, p. 1235–1241, jul 2013.
- [58] SERAFIM, F. A. C. *Efeitos da massa efetiva variável, e do campo magnético no transporte eletrônico em nanotubos deformados*. Recife-PE: Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) – Universidade Federal Rural de Pernambuco, 2018.
- [59] BASTOS, C. C.; PAVÃO, A. C.; LEANDRO, E. S. G. On the quantum mechanics of a particle constrained to generalized cylinders with application to möbius strips. *Journal of Mathematical Chemistry*, Berlin, v. 54, n. 9, p. 1822–1834, 2016.
- [60] TAKAGI, S.; TANZAWA, T. Quantum mechanics of a particle confined to a twisted ring. *Progress of Theoretical Physics*, Oxford, v. 87, n. 3, p. 561–568, 1992.
- [61] ORTIX, C. Quantum mechanics of a spin-orbit coupled electron constrained to a space curve. *Physical Review B*, New York, v. 91, n. 24, p. 245412, 2015.
- [62] BRANDT, F.; SÁNCHEZ-MONROY, J. Induced magnetic moment for a spinless charged particle in the thin-layer approach. *EPL (Europhysics Letters)*, Bristol, UK, v. 111, n. 6, p. 67004, 2015.

- [63] WANG, Y. L.; JIANG, H.; ZONG, H. S. Geometric influences of a particle confined to a curved surface embedded in three-dimensional euclidean space. *Physical Review A*, New York, v. 96, n. 2, p. 022116, 2017.
- [64] WANG, Y. L.; LAI, M. Y.; WANG, F.; ZONG, H. S.; CHEN, Y. F. Erratum: Geometric effects resulting from square and circular confinements for a particle constrained to a space curve [Phys. Rev. A 97, 042108 (2018)]. *Physical Review A*, New York, v. 97, n. 6, p. 069904, 2018.
- [65] STOCKHOFE, J.; SCHMELCHER, P. Nonadiabatic couplings and gauge-theoretical structure of curved quantum waveguides. *Physical Review A*, New York, v. 89, n. 3, p. 033630, 2014.
- [66] JENSEN, B. Electronic states on the helicoidal surface. *Physical Review A*, New York, v. 80, n. 2, p. 022101, 2009.
- [67] ATKINS, P. W.; DE PAULA, J.; KEELER, J. *Atkins' physical chemistry*. 11. ed. Oxford, UK: Oxford University Press, 2018.
- [68] GREINER, W. *Quantum Mechanics*. 4. ed. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2001.
- [69] THALLER, B. *Advanced visual quantum mechanics*. New York: Springer Science & Business Media, 2005.
- [70] KAR, S.; SAHDEV, D.; BHAWAL, B. Scalar waves in a wormhole geometry. *Physical Review D*, New York, v. 49, n. 2, p. 853, 1994.
- [71] HASSANI, S. *Mathematical physics: A modern introduction to its foundations*. 1. ed. New York: Springer Science & Business Media, 1999.
- [72] CIRONE, M. A.; RZAZEWSKI, K.; SCHLEICH, W. P.; STRAUB, F.; WHEELER, J. Quantum anticentrifugal force. *Physical Review A*, New York, v. 65, n. 2, p. 022101, 2001.
- [73] ATANASOV, V.; DANDOLOFF, R. Curvature induced quantum potential on deformed surfaces. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 371, n. 1-2, p. 118–123, 2007.
- [74] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.
- [75] SOMMERFELD, T. Lorentz trial function for the hydrogen atom: a simple, elegant exercise. *Journal of Chemical Education*, New York, v. 88, n. 11, p. 1521–1524, 2011.

- [76] ZAMASTIL, J.; BENDA, J. *Quantum mechanics and electrodynamics*. Cham, Switzerland: Springer, 2017.
- [77] GRADSHTEYN, I. S.; RYZHIK, I. M. *Table of integrals, series, and products*. Burlington, MA: Elsevier, 2007.
- [78] OLVER, F. W. J.; LOZIER, D. W.; BOISVERT, R. F.; CLARK, C. W. *NIST handbook of mathematical functions*. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
- [79] HARTMANN, R. R. Bound states in a hyperbolic asymmetric double-well. *Journal of Mathematical Physics*, New York, v. 55, n. 1, p. 012105, 2014.
- [80] HARTMANN, R. R.; PORTNOI, M. E. Two-dimensional Dirac particles in a Pöschl-Teller waveguide. *Scientific Reports*, London, v. 7, n. 1, p. 1–10, 2017.
- [81] ISHKHANYAN, A. M. Schrödinger potentials solvable in terms of the confluent Heun functions. *Theoretical and Mathematical Physics*, Berlin, v. 188, n. 1, p. 980–993, 2016.
- [82] KARAYER, H.; DEMIRHAN, D.; BÜYÜKKILIÇ, F. Extension of Nikiforov-Uvarov method for the solution of Heun equation. *Journal of Mathematical Physics*, New York, v. 56, n. 6, p. 063504, 2015.
- [83] RONVEAUX, A. (Ed.). *Heun's differential equations*. Oxford: Oxford University Press, 1995.
- [84] HEUN, K. Zur Theorie der Riemann'schen Functionen zweiter Ordnung mit vier Verzweigungspunkten. *Mathematische Annalen*, München, v. 33, n. 2, p. 161–179, 1888.
- [85] KRISTENSSON, G. *Second order differential equations: Special functions and their classification*. New York: Springer Science & Business Media, 2010.
- [86] ISHKHANYAN, A. Schrödinger potentials solvable in terms of the general Heun functions. *Annals of Physics*, Amsterdam, v. 388, p. 456–471, 2018.
- [87] DOWNING, C. A. On a solution of the Schrödinger equation with a hyperbolic double-well potential. *Journal of Mathematical Physics*, New York, v. 54, n. 7, p. 072101, 2013.
- [88] BOYACK, R.; LEKNER, J. Confluent Heun functions and separation of variables in spheroidal coordinates. *Journal of Mathematical Physics*, New York, v. 52, n. 7, p. 073517, 2011.

- [89] STAICOVA, D. *Analytical and numerical methods for studying astrophysical objects*. Sofia: Thesis (Ph.D. in Physics) – Sofia University, 2012.
- [90] FIZIEV, P. P. Novel relations and new properties of confluent Heun's functions and their derivatives of arbitrary order. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, Bristol, UK, v. 43, n. 3, p. 035203, 2009.
- [91] DONG, S.; FANG, Q.; FALAYE, B. J.; SUN, G. H.; YÁÑEZ MÁRQUEZ, C.; DONG, S. H. Exact solutions to solitonic profile mass Schrödinger problem with a modified Pöschl–Teller potential. *Modern Physics Letters A*, Singapore, v. 31, n. 04, p. 1650017, 2016.
- [92] DONG, S.; SUN, G. H.; FALAYE, B. J.; DONG, S. H. Semi-exact solutions to position-dependent mass Schrödinger problem with a class of hyperbolic potential  $V_0 \tanh(ax)$ . *The European Physical Journal Plus*, Berlin, v. 131, n. 5, p. 1–7, 2016.
- [93] DONG, Q.; SERRANO, F. A.; SUN, G. H.; JING, J.; DONG, S. H. Semiexact solutions of the Razavy potential. *Advances in High Energy Physics*, London, v. 2018, 2018.
- [94] DONG, Q.; ARENAS, A. J. T.; SUN, G. H.; CAMACHO NIETO, O.; FEMMAM, S.; DONG, S. H. Exact solutions of the sine hyperbolic type potential. *Journal of Mathematical Chemistry*, Berlin, v. 57, n. 8, p. 1924–1931, 2019.
- [95] FERNÁNDEZ, F. M. Wronskian method for bound states. *European journal of physics*, Bristol, UK, v. 32, n. 3, p. 723, 2011.
- [96] SITNITSKY, A. E. Exactly solvable Schrödinger equation with double-well potential for hydrogen bond. *Chemical Physics Letters*, Amsterdam, v. 676, p. 169–173, 2017.
- [97] MAPLE 2017. Maplesoft, a division of Waterloo Maple Inc. *Waterloo*, Ontario, 2017.
- [98] WANG, Y.-L.; ZONG, H.-S.; LIU, H.; CHEN, Y.-F. Geometry-induced quantum hall effect and hall viscosity. *Physical Review B*, New York, v. 102, n. 15, p. 155153, 2020.
- [99] AZEVEDO, F. D. S.; LIMA, J. D. M.; SANTOS, A. P.; MORAES, F. Optical wormhole from hollow disclinations. *Physical Review A*, New York, v. 103, n. 2, p. 023516, 2021.
- [100] SCHULTHEISS, V. H.; BATZ, S.; SZAMEIT, A.; DREISOW, F.; NOLTE, S.; TÜNNERMANN, A.; LONGHI, S.; PESCHEL, U. Optics in curved space. *Physical Review Letters*, New York, v. 105, n. 14, p. 143901, 2010.

- 
- [101] KREYSZIG, E. *Advanced engineering mathematics*. 10. ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2011.
- [102] ELAYDI, S. *An introduction to difference equations*. New York: Springer Science & Business Media, 2005.
- [103] KELLEY, W. G.; PETERSON, A. C. *Difference equations: an introduction with applications*. 2. ed. San Diego, CA: Academic Press, 2001.

## Apêndice A

### Método variacional na Mecânica Quântica

Utilizando a notação de Dirac, a energia exata de um sistema quântico é calculada pelo valor esperado do operador Hamiltoniano,

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle},$$

que pode ser entendido como um funcional da autofunção  $\psi$ . Como a energia  $E_0$  do estado fundamental é sempre menor ou igual à energia dos demais estados (isto é,  $E_0 \leq E$ ), a ideia do método variacional é obter uma função de onda que minimiza  $E$  para um determinado estado [22, 68].

A primeira etapa do método consiste em propor uma função de onda “tentativa”,  $\chi \approx \psi$ , de modo que quanto mais próxima  $\chi$  for da solução exata,  $\psi$ , melhor será a aproximação. Assim, escreve-se que  $\chi = \chi(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ , sendo os  $\alpha_i$  parâmetros a determinar. Disso, a energia exata poderá ser aproximada pelo funcional:

$$E[\psi] \approx \tilde{E}[\chi] = \frac{\langle \chi | \hat{\mathcal{H}} | \chi \rangle}{\langle \chi | \chi \rangle}. \quad (\text{A.1})$$

Por conseguinte, ao minimizar a equação (A.1) com relação aos  $\alpha_i$ , torna-se possível encontrar uma estimativa plausível para a energia do estado fundamental, de acordo com a função de tentativa que foi previamente escolhida. Matematicamente, para minimizar  $\tilde{E}[\chi]$  basta realizar as derivadas com relação a cada parâmetro,  $\alpha_i$ , e igualá-las a zero:

$$\frac{\partial \tilde{E}[\chi]}{\partial \alpha_i} = 0,$$

obtendo-se assim um sistema de equações cujas soluções determinam os  $\alpha_i$  que minimizam a energia. O valor exato da energia é sempre menor ou igual ao valor de  $\tilde{E}$  encontrado [56, 75, 76].



## Apêndice B

### Equação confluyente de Heun

Nos últimos anos, as funções de Heun têm aparecido como soluções de diversos problemas em várias áreas da Física<sup>1</sup> [89,90]. Em particular, este apêndice tem o objetivo de tratar da equação confluyente de Heun (ECH), que é obtida através da equação geral de Heun por meio de um processo de confluência (mais detalhes podem ser encontrados na seção 8.5 da referência [85]). As soluções das equações diferenciais de Heun são implementadas no *software* Maple e, mais recentemente, também foram incluídas<sup>2</sup> na linguagem Wolfram (Mathematica).

Conforme visto na subseção 4.2.2, a ECH é uma equação diferencial de segunda ordem dada por

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} + \left[ \tilde{\alpha} + \frac{\tilde{\beta} + 1}{\xi} + \frac{\tilde{\gamma} + 1}{\xi - 1} \right] \frac{dH}{d\xi} + \left[ \frac{\tilde{\mu}}{\xi} + \frac{\tilde{\nu}}{\xi - 1} \right] H = 0,$$

a qual é convenientemente reescrita como

$$(\xi^2 - \xi) \frac{d^2 H}{d\xi^2} + \left[ \tilde{\alpha} \xi^2 + (\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha} + 2) \xi - (\tilde{\beta} + 1) \right] \frac{dH}{d\xi} + [(\tilde{\mu} + \tilde{\nu})\xi - \tilde{\mu}] H = 0, \quad (\text{B.1})$$

onde  $\tilde{\alpha}$ ,  $\tilde{\beta}$ ,  $\tilde{\gamma}$ ,  $\tilde{\mu}$  e  $\tilde{\nu}$  são parâmetros e  $H = H(\xi)$  [83,84]. Ademais, a ECH possui um ponto singular irregular em  $\xi = \infty$  e pontos singulares regulares em  $\xi = 0$  e  $\xi = 1$  [90].

#### B.1 Soluções em série de potências

Pode-se propor para (B.1) uma solução em série de potências (método de Frobenius) em torno de  $\xi = 0$ , isto é,

$$H = \sum_{n=0}^{\infty} v_n \xi^{n+k}, \quad (\text{B.2})$$

<sup>1</sup>Uma extensa lista de referências de trabalhos envolvendo as funções de Heun é mantida pelo *The Heun Project* no endereço <https://theheunproject.org/bibliography.html>.

<sup>2</sup>Para mais detalhes, ver a documentação *online* dos respectivos *softwares* em <https://www.maplesoft.com/support/help/Maple/view.aspx?path=Heun> e em <https://reference.wolfram.com/language/guide/HeunAndRelatedFunctions.html>.

onde os  $v_n$  são os coeficientes da expansão e  $k$  é um expoente a determinar [101]. Consequentemente, a partir da equação (B.2), obtêm-se as derivadas de primeira e de segunda ordem como sendo:

$$\begin{aligned}\frac{dH}{d\xi} &= \sum_{n=0}^{\infty} (n+k)v_n \xi^{n+k-1}, \\ \frac{d^2H}{d\xi^2} &= \sum_{n=0}^{\infty} (n+k)(n+k-1)v_n \xi^{n+k-2}.\end{aligned}$$

Com isso, a equação (B.1) torna-se

$$\begin{aligned}(\xi^2 - \xi) \sum_{n=0}^{\infty} (n+k)(n+k-1)v_n \xi^{n+k-2} + [(\tilde{\mu} + \tilde{\nu})\xi - \tilde{\mu}] \sum_{n=0}^{\infty} v_n \xi^{n+k} \\ + \left[ \tilde{\alpha}\xi^2 + (\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha} + 2)\xi - (\tilde{\beta} + 1) \right] \sum_{n=0}^{\infty} (n+k)v_n \xi^{n+k-1} = 0,\end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty} [\tilde{\alpha}(n+k) + \tilde{\mu} + \tilde{\nu}] v_n \xi^{n+k+1} - \sum_{n=0}^{\infty} (n+k) \left( n+k + \tilde{\beta} \right) v_n \xi^{n+k-1} \\ + \sum_{n=0}^{\infty} \left[ (n+k) \left( n+k + \tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha} + 1 \right) - \tilde{\mu} \right] v_n \xi^{n+k} = 0.\end{aligned}\tag{B.3}$$

Seguindo o procedimento usual para obter uma relação de recorrência, ao iterar  $n = 0$  e  $n = 1$  no segundo somatório e  $n = 0$  no terceiro somatório, decorre da equação (B.3) que

$$\begin{aligned}-k \left( k + \tilde{\beta} \right) v_0 \xi^{k-1} + \left\{ \left[ k \left( k + \tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha} + 1 \right) - \tilde{\mu} \right] v_0 - (k+1) \left( k + \tilde{\beta} + 1 \right) v_1 \right\} \xi^k \\ + \sum_{n=0}^{\infty} [\tilde{\alpha}(n+k) + \tilde{\mu} + \tilde{\nu}] v_n \xi^{n+k+1} - \sum_{n=2}^{\infty} (n+k) \left( n+k + \tilde{\beta} \right) v_n \xi^{n+k-1} \\ + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ (n+k) \left( n+k + \tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha} + 1 \right) - \tilde{\mu} \right] v_n \xi^{n+k} = 0.\end{aligned}$$

Ao fazer  $n = m - 2$ ,  $n = m$  e  $n = m - 1$  no primeiro, segundo e terceiro somatórios respectivamente, encontra-se

$$\begin{aligned}-k \left( k + \tilde{\beta} \right) v_0 \xi^{k-1} + \left\{ \left[ k \left( k + \tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha} + 1 \right) - \tilde{\mu} \right] v_0 - (k+1) \left( k + \tilde{\beta} + 1 \right) v_1 \right\} \xi^k \\ + \sum_{m=2}^{\infty} \left\{ [\tilde{\alpha}(m+k-2) + \tilde{\mu} + \tilde{\nu}] v_{m-2} - (m+k) \left( m+k + \tilde{\beta} \right) v_m \right. \\ \left. + \left[ (m+k-1) \left( m+k + \tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha} \right) - \tilde{\mu} \right] v_{m-1} \right\} \xi^{m+k-1} = 0.\end{aligned}$$

Consequentemente, para  $v_0 \neq 0$ , obtém-se as equações

$$k(k + \tilde{\beta}) = 0, \quad (\text{B.4})$$

$$\left[ k(k + \tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha} + 1) - \tilde{\mu} \right] v_0 - (k + 1)(k + \tilde{\beta} + 1) v_1 = 0, \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} & \left[ \tilde{\alpha}(m + k - 2) + \tilde{\mu} + \tilde{\nu} \right] v_{m-2} - (m + k)(m + k + \tilde{\beta}) v_m \\ & + \left[ (m + k - 1)(m + k + \tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha}) - \tilde{\mu} \right] v_{m-1} = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

É possível observar que a equação (B.5) pode ser obtida de (B.6) fazendo  $m = 1$  e  $v_{-1} = 0$ .

É conveniente definir dois novos parâmetros:

$$\begin{aligned} \tilde{\delta} &= \tilde{\mu} + \tilde{\nu} - \frac{\tilde{\alpha}}{2}(\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} + 2), \\ \tilde{\eta} &= \frac{\tilde{\alpha}}{2}(\tilde{\beta} + 1) - \tilde{\mu} - \frac{1}{2}(\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} + \tilde{\beta}\tilde{\gamma}), \end{aligned}$$

os quais são empregados na notação utilizada pelo Maple [87, 90, 97]. Com isso, torna-se possível escrever

$$\begin{aligned} \tilde{\mu} + \tilde{\nu} &= \tilde{\delta} + \frac{\tilde{\alpha}}{2}(\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} + 2), \\ \tilde{\mu} &= \frac{\tilde{\alpha}}{2}(\tilde{\beta} + 1) - \tilde{\eta} - \frac{1}{2}(\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} + \tilde{\beta}\tilde{\gamma}) \end{aligned}$$

e, então, da equação (B.6) segue que

$$\begin{aligned} & \left[ (m + k - 1)(m + k + \tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha}) - \frac{\tilde{\alpha}}{2}(\tilde{\beta} + 1) + \tilde{\eta} + \frac{1}{2}(\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} + \tilde{\beta}\tilde{\gamma}) \right] v_{m-1} \\ & + \left[ \tilde{\alpha}(m + k - 2) + \tilde{\delta} + \frac{\tilde{\alpha}}{2}(\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} + 2) \right] v_{m-2} - (m + k)(m + k + \tilde{\beta}) v_m = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Como se pode observar, a equação indicial escrita em (B.4) tem soluções dadas por  $k = 0$  e  $k = -\tilde{\beta}$ . No caso do expoente  $k = 0$ , obtém-se da equação (B.2) a chamada função confluyente de Heun:

$$\text{HeunC}(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}, \xi) = \sum_{m=0}^{\infty} v_m(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}) \xi^m. \quad (\text{B.8})$$

Para obter os  $v_m = v_m(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta})$  faz-se  $k = 0$  na equação (B.7), de modo que

$$\begin{aligned} & \left[ m^2 + m(\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha} - 1) + \tilde{\eta} + \frac{1}{2}(\tilde{\alpha} - \tilde{\beta} - \tilde{\gamma}) + \frac{1}{2}(\tilde{\beta}\tilde{\gamma} - \tilde{\alpha}\tilde{\beta}) \right] v_{m-1} \\ & + \left[ \tilde{\delta} + \tilde{\alpha} \left( \frac{\tilde{\beta} + \tilde{\gamma}}{2} + m - 1 \right) \right] v_{m-2} - (m^2 + m\tilde{\beta}) v_m = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Dividindo ambos os lados da equação (B.9) por  $m^2$  e definindo os coeficientes

$$\begin{aligned} A_m &= 1 + \frac{\tilde{\beta}}{m}, \\ B_m &= 1 + \frac{\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha} - 1}{m} + \frac{2\tilde{\eta} + \tilde{\alpha} - \tilde{\beta} - \tilde{\gamma} + \tilde{\beta}\tilde{\gamma} - \tilde{\alpha}\tilde{\beta}}{2m^2}, \\ C_m &= \frac{\tilde{\delta}}{m^2} + \frac{\tilde{\alpha}}{m^2} \left( \frac{\tilde{\beta} + \tilde{\gamma}}{2} + m - 1 \right), \end{aligned}$$

encontra-se para  $m = 1, 2, 3, \dots$  uma relação de recorrência de três termos,

$$A_m v_m = B_m v_{m-1} + C_m v_{m-2}, \quad (\text{B.10})$$

para a qual se tem as duas condições iniciais:  $v_{-1} = 0$  e  $v_0 = 1$ . A condição  $v_0 = 1$  é utilizada puramente por convenção e resulta na “normalização” de que  $\text{HeunC}(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}, 0) = 1$  para a equação (B.8) [87, 90].

Para o expoente  $k = -\tilde{\beta}$ , segue da equação (B.7) que

$$\begin{aligned} &\left[ m^2 + m(-\tilde{\beta} + \tilde{\gamma} - \tilde{\alpha} - 1) + \tilde{\eta} + \frac{1}{2}(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\gamma}) + \frac{1}{2}(-\tilde{\beta}\tilde{\gamma} + \tilde{\alpha}\tilde{\beta}) \right] v_{m-1} \\ &\quad + \left[ \tilde{\delta} + \tilde{\alpha} \left( \frac{-\tilde{\beta} + \tilde{\gamma}}{2} + m - 1 \right) \right] v_{m-2} - (m^2 - m\tilde{\beta}) v_m = 0, \end{aligned}$$

o que é claramente equivalente a fazer a mudança  $\tilde{\beta} \rightarrow -\tilde{\beta}$  na equação (B.9). Desse modo, quando  $\tilde{\beta}$  não é um número inteiro, uma segunda solução linearmente independente à solução em (B.8) pode ser escrita como sendo

$$\xi^{-\tilde{\beta}} \text{HeunC}(\tilde{\alpha}, -\tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}, \xi) = \xi^{-\tilde{\beta}} \sum_{m=0}^{\infty} v_m(\tilde{\alpha}, -\tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}, \tilde{\eta}) \xi^m, \quad (\text{B.11})$$

como uma consequência direta da equação (B.2) [78, 88]. Todavia, as somas dadas nas equações (B.8) e (B.11) usualmente convergem apenas dentro de um disco de raio unitário  $|\xi| < 1$ , de modo que para  $|\xi| \geq 1$  torna-se necessário utilizar métodos de numéricos, como os implementados no Maple [83, 89].

## B.2 Redução a um polinômio

A função confluyente de Heun pode ser reduzida a um polinômio de grau  $N$  se  $C_{N+2} = 0$  e se  $v_{N+1} = 0$ , o que resulta de (B.10) que  $v_{N+2}$  também será nulo. Uma vez que  $v_{N+1} = v_{N+2} = 0$ , todos os  $v_n$  consecutivos serão nulos e a soma em (B.8) torna-se finita, isto é, um polinômio [83, 87]. A condição  $C_{N+2} = 0$  é chamada de “condição  $\delta_N$ ” e

implica que

$$\tilde{\delta} = - \left( \frac{\tilde{\beta} + \tilde{\gamma}}{2} + N + 1 \right) \tilde{\alpha}. \quad (\text{B.12})$$

Por sua vez, a condição  $v_{N+1} = 0$  recebe o nome de “condição  $\Delta_{N+1}$ ”, da qual decorre que o determinante tridiagonal

$$\begin{vmatrix} \tilde{\mu} - q_1 & 1(1 + \tilde{\beta}) & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ N\tilde{\alpha} & \tilde{\mu} - q_2 + 1\tilde{\alpha} & 2(2 + \tilde{\beta}) & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (N-1)\tilde{\alpha} & \tilde{\mu} - q_3 + 2\tilde{\alpha} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \tilde{\mu} - q_{N-1} + (N-2)\tilde{\alpha} & (N-1)(N-1 + \tilde{\beta}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2\tilde{\alpha} & \tilde{\mu} - q_N + (N-1)\tilde{\alpha} & N(N + \tilde{\beta}) \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1\tilde{\alpha} & \tilde{\mu} - q_{N+1} + N\tilde{\alpha} \end{vmatrix} = 0,$$

para  $q_n = (n-1)(n + \tilde{\beta} + \tilde{\gamma})$  [82, 89, 90]. Para mais detalhes sobre relações de recorrência ver o apêndice B da referência [85] e as referências [102, 103].