

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

PROBLEMAS DE CONTORNO-EQUAÇÃO  
DE SCHRÖDINGER E EQUAÇÃO DE  
DIFUSÃO

JACKES MARTINS

ORIENTADOR: PROF. DR. ERVIN KAMINSKI LENZI

Maringá, 21 de novembro de 2011

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

PROBLEMAS DE CONTORNO-EQUAÇÃO  
DE SCHRÖDINGER E EQUAÇÃO DE  
DIFUSÃO

JACKES MARTINS

Trabalho de conclusão de curso submetido ao Departamento de Física da Universidade Estadual de Maringá, como parte dos requisitos para obtenção do título de Bacharel em Física.

ORIENTADOR: PROF. DR. ERVIN KAMINSKI LENZI

Maringá, 21 de novembro de 2011

SI SCAMPA COSI  
DEGERE VITAM, VITA DEFUNGI  
MAN MUB SUCHEN, DURCHZUKOMMEN  
ER WIRD SCHON DURCH DIE WELT KOMMEN

*"A felicidade não é coisa fácil: é muito difícil encontrá-la em nós, e impossível encontrá-la alhures."*

(Nicolas de Chamfort)

*"I shall be telling this with a sigh  
Somewhere ages and ages hence:  
Two roads diverged in a wood, and I-  
I took the one less traveled by,  
And that has made all the difference."*

(Extraído do poema *The Road Not Taken*, de Robert Frost)

*"Às vezes converso com os homens do mesmo modo como as crianças conversam com seus bonecos: embora ele saiba que o boneco não a compreende, usando uma visão agradável e consciente, consegue divertir-se com a comunicação."*

(Arthur Schopenhauer)

*"Esta aqui também é boa, muito boa - disse. - Veja só esta frase: "O homem devia orgulhar-se da dor; toda dor é uma manifestação de nossa elevada estirpe." Magnífico! Oitenta anos antes de Nietzsche! Mas não é esta a passagem que eu pensava mostrar-lhe... Espere, aqui está. Ouça: "A maioria dos homens não quer nadar antes que o possa fazer." Não é engraçado? Naturalmente, não querem nadar. Nasceram para andar na terra e não para a água. E, naturalmente, não querem pensar: foram criados para viver e não para pensar! Isto mesmo! E quem pensa, quem faz do pensamento sua principal atividade, pode chegar muito longe com isso, mas, sem dúvida estará confundindo a terra com a água e um dia morrerá afogado."*

(Extraído do livro *Lobo da Estepe*, de Hermann Hess)

# Resumo

Neste trabalho estudamos algumas soluções típicas para a equação de Schrödinger e para a equação de difusão. Entretanto, adicionamos a estas equações o operador diferencial de índice fracionário e o operador espacial fracionário, a fim de induzir um comportamento anômalo às soluções. Para isto, primeiramente introduzimos o formalismo das funções de Green, método que foi utilizado no decorrer do trabalho. Na sequência abordamos a equação de Schrödinger e a equação de difusão. Em seguida, aplicamos os operadores supracitados às equações e, através das funções de Green, encontramos suas respectivas soluções. Por fim, analisamos os resultados obtidos.

# Agradecimentos

Certamente este espaço é muito pequeno para agradecer às pessoas que me apoiaram, não somente para o desenvolvimento deste trabalho, mas em toda a trajetória deste curso. De antemão, peço desculpas se minha memória falhar nesse momento.

Primeiramente agradeço ao meu pai (in memoriam), Adão Martins. Homem de tal prudência ética que se eu praticasse uma pequena parte do seu comportamento, ainda seria conhecido por essa virtude. Agradeço também a minha mãe, Lenir Oliveira, pelo apoio e financiamento da minha graduação. Agradeço à minha irmã, Eliane Bettega, pelo apoio desde quando eu decidi abandonar o curso de Administração e mudar-me para Maringá. A meus irmãos Ederson e Esdras Martins pelo apoio e presença nesse período.

A toda minha família em Cascavel que sempre me apoiou, e continuará sendo sempre meu porto seguro. Em especial a minha tia Vanda, pelo carinho sempre demonstrado.

A todos meus amigos pelo companheirismo e pelos momentos de descontração, permitindo distrair-me dos problemas que surgiram nesse percurso. Em especial a Pablo, Leandro, Vinícius e Giuliana, cuja amizade permaneceu desde os tempos de SENAI e Wilson Jofre. Aos amigos que fiz durante a graduação e pretendo manter indefinidamente: Aline, Débora, Diego, Rafael e Allan. Em especial aos "brothers": Fernando, Mateus e Murilo, pelas noites estudando, e, muitas vezes, conversando ou discutindo. Também ao Rodrigo e a Edenize, pela ajuda quando tive dúvidas referente ao Latex.

Ao meu orientador, professor Ervin Lenzi, pela sua dedicação, tolerância e paciência comigo desde que pedi sua orientação.

Ao professor Marcos Danhoni, pela tutoria e pela oportunidade de trabalhar no PET-Física. Ao grupo PET-Física que muito enriqueceu a minha formação.

Ao professor Antônio Medina, pelo exemplo de profissional que eu pretendo seguir durante minha carreira.

Ao professor Cesar Canesin, pela minha melhor, e infelizmente, única aula de Mecânica Clássica que eu o vi ministrar.

Aos meus colegas de trabalho da Prefeitura Municipal de Maringá, cujo tempo curto que passamos juntos muito me influenciou.

A todos os professores, técnicos e servidores da Universidade Estadual de Maringá, que de alguma forma me ajudaram a concluir o curso.

Muito obrigado!

# Sumário

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introdução</b>  | <b>4</b>  |
| <b>2</b> | <b>Funções de Green</b>  | <b>6</b>  |
| 2.1      | Desenvolvimento histórico . . . . .  | 6         |
| 2.2      | Teoria geral: a função de Green do operador de Sturm-Liouville . . . . .   | 7         |
| 2.3      | Desenvolvimento da função de Green em autofunções . . . . .  | 12        |
| 2.4      | A função de Green para o caso de um espectro contínuo . . . . .  | 13        |
| 2.5      | A função de Green da equação de difusão . . . . .  | 15        |
| <b>3</b> | <b>Equação de Schrödinger</b>  | <b>20</b> |
| 3.1      | Equação de onda . . . . .  | 20        |
| 3.2      | Interpretação da função de onda . . . . .  | 24        |
| 3.3      | Operador de derivada espacial fracionário e derivada temporal com índices fracionários aplicados a equação de Schrödinger. . . . . | 24        |
| 3.4      | Soluções para equação de Schrödinger . . . . .   | 25        |
| 3.4.1    | Partícula livre . . . . .  | 25        |
| 3.4.2    | Oscilador harmônico de dimensão $\alpha$ . . . . .   | 28        |
| 3.4.3    | Potencial coulombiano . . . . .  | 30        |
| <b>4</b> | <b>Equação de difusão</b>  | <b>32</b> |
| 4.1      | Desenvolvimento histórico . . . . .  | 32        |
| 4.2      | Movimento Browniano . . . . .  | 34        |
| 4.3      | Difusão anômala . . . . .  | 36        |
| 4.4      | Soluções para equação de difusão . . . . .   | 36        |
| 4.4.1    | Partícula livre . . . . .  | 37        |
| 4.4.2    | Força linear . . . . .   | 38        |
| 4.4.3    | Força coulombiana . . . . .  | 39        |
| <b>5</b> | <b>Conclusão</b>   | <b>41</b> |

# Capítulo 1

## Introdução

Processos difusivos são encontrados em diversos contextos, tais como filtros para purificação de gases, hemodiálise, dopagem de semicondutores, e muitos outros. Um processo difusivo típico tem como principal característica o desvio quadrado médio linearmente dependente com o tempo [1]. Entretanto, essa dependência não é encontrada em diversos fenômenos, por exemplo, difusão em uma rede fractal [2], difusão atômica em substratos porosos [3], difusão em superfícies sólidas [4], em flutuações no preço de ações de sistemas financeiros [5], em transporte de fluidos [6], e em muitas outras situações de interesse. Nesse ensejo, surge a necessidade de uma abordagem que contemple esses comportamentos difusivos, chamados de anômalos, que a equação de difusão padrão não descreve adequadamente. A abordagem através de derivadas fracionárias, espaciais e temporais, tem sido satisfatoriamente utilizada na descrição de tais fenômenos [7].

Em outra instância, a variação contínua no número de dimensões  $N$  surge como um conceito útil em várias áreas da Física. Aparentemente introduzida para descrever fenômenos críticos apresentados por um fluido binário de "moléculas Gaussianas" [8,9], atualmente tem sido utilizada em diversos ramos, incluindo física da matéria condensada [10], sistemas Hamiltonianos fracionários [11], eletromagnetismo [12], física das partículas [13], entre outros.

Isto exposto, neste trabalho nos propomos a encontrar soluções para equação de difusão fracionária, neste caso com índices não inteiros somente na derivada temporal, para espaços com dimensões não inteiras, isto é, espaços com dimensões  $N$ , não necessariamente inteiros positivos. E, devido à semelhança matemática da equação de Schrödinger com a equação de difusão, também encontraremos soluções para espalhamentos anômalos induzidos por esse tipo de abordagem.

A fim de obter soluções exatas para a equação, escolhemos a abordagem pelo método da função de Green com o objetivo de obter o propagador da equação. E comparamos o comportamento usual com o comportamento anômalo de algumas curvas de espalhamento.

Assim, no segundo capítulo apresentamos o formalismo das funções de Green e exemplificamos o método através da solução para equação de difusão usual. Já no terceiro capítulo abordamos a equação de Schrödinger e encontramos a solução para três casos típicos: partícula livre, oscilador harmônico de dimensão  $\alpha$ , e potencial coulombiano. No quarto capítulo, delineamos o desenvolvimento da equação de difusão e encontramos a

solução da equação para três casos: partículas livres, força linear, e força coulombiana. Finalmente, no quinto e último capítulo apresentamos nossas conclusões.

# Capítulo 2

## Funções de Green

Nesta seção abordaremos o formalismo das funções de Green, também conhecidas como propagadores, que utilizaremos no decorrer deste trabalho. Iniciaremos revisitando a motivação que levou George Green a criar o método supracitado e, por conseguinte, encontraremos a solução geral para uma equação diferencial não homogênea com condições de contorno definidas. Em seguida, discutiremos a função de Green do operador de Sturm-Liouville, seu desenvolvimento em autofunções, e sua representação para o espectro contínuo. Por fim, esboçaremos o método através da resolução da equação de difusão usual, primeiramente para uma região confinada e, posteriormente, para todo o espaço.

### 2.1 Desenvolvimento histórico

George Green em *An Essay on the Application of the Mathematical Analysis to the Theories of Electricity and Magnetism* [14], datado em 1828, buscou a solução para o seguinte problema: determinar o potencial elétrico dentro de uma região limitada por condutores com potenciais definidos e na presença de vácuo. Utilizando a notação atual, ele propôs solucionar a equação

$$\nabla^2 u = -f \quad (2.1)$$

dentro de um volume  $V$  e que satisfaça as condições de borda ao longo da superfície  $S$  [15].

Seguindo o mesmo caminho de Green, vamos primeiramente utilizar uma identidade já conhecida [16],

$$\nabla \cdot (\varphi \nabla \chi) = \nabla \varphi \cdot \nabla \chi + \varphi \nabla \cdot (\nabla \chi). \quad (2.2)$$

Integrando a Eq.(2.2) em relação ao volume  $V$ , e aplicando o teorema da divergência, obteremos a chamada *Primeira fórmula de Green*

$$\iint_S (\varphi \nabla \chi) \cdot \mathbf{n} \, dS = \iiint_V (\nabla \varphi \cdot \nabla \chi) \, dV + \iiint_V \varphi \nabla^2 \chi \, dV. \quad (2.3)$$

Na qual  $\mathbf{n}$  é o vetor normal à superfície  $S$ , e  $\varphi$  e  $\chi$  são funções com derivadas limitadas.

Agora, trocando as posições relativas de  $\varphi$  e  $\chi$  da Eq.(2.3), e subtraindo a equação resultante da Eq.(2.3), temos a chamada *Segunda fórmula de Green*

$$\iint_S (\varphi \nabla \chi - \chi \nabla \varphi) \cdot \mathbf{n} \, dS = \iiint_V (\varphi \nabla^2 \chi - \chi \nabla^2 \varphi) \, dV. \quad (2.4)$$

Utilizando-se também da equação abaixo, que descreve o potencial de uma carga pontual localizada em  $\mathbf{r}'$ ,

$$\nabla^2 g = -4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.5)$$

na qual  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  é a função delta de Dirac. Assim, introduzindo uma pequena esfera ao redor da singularidade em  $\mathbf{r}'$ , haja vista que a Eq.(2.4) não pode ser aplicada nesse ponto. Fazendo também  $\varphi = g$  e  $\chi = u$ , obtemos

$$\iint_S (g \nabla u - u \nabla g) \cdot \mathbf{n} \, dS - 4\pi u(\mathbf{r}') = \iiint_V (g \nabla^2 u - u \nabla^2 g) \, dV. \quad (2.6)$$

Levando em consideração que a integral de superfície da esfera é  $4\pi u(\mathbf{r}')$  quando  $\mathbf{r}' \rightarrow 0$  [15]. Uma vez que  $\nabla^2 g = 0$ , pois nós deixamos de fora o ponto  $\mathbf{r}'$ , rearranjamos os termos da Eq.(2.6) para obtermos

$$u(\mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \iiint_V g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') f(\mathbf{r}) \, dV + \frac{1}{4\pi} \iint_S (u(\mathbf{r}) \nabla g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla u(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{n} \, dS. \quad (2.7)$$

Esta equação, primeiramente encontrada por Green, ilustra que a função  $u(\mathbf{r}')$ , que é contínua em um espaço dentro de uma superfície  $S$ , é definida pelo ponto arbitrário  $\mathbf{r}'$ . Isso se  $\nabla^2 u$  e os valores de  $u(\mathbf{r}')$ , e de  $\nabla u(\mathbf{r}')$ , sobre o contorno forem conhecidos. É importante observar que ainda não definimos completamente as funções de Green, pois as condições de contorno não foram determinadas. Estas condições são escolhidas de acordo com o problema apresentado.

## 2.2 Teoria geral: a função de Green do operador de Sturm-Liouville

Inicialmente, desejamos encontrar a solução da equação diferencial não homogênea

$$\frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] - q(x)u(x) = f(x) \quad (2.8)$$

no intervalo  $a \leq x \leq b$ , com condições de borda definidas em  $x = a$  e  $x = b$ . Na qual,

$$L \equiv \frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{d}{dx} \right] - q(x) \quad (2.9)$$

é o operador de Sturm-Liouville auto-adjunto.

Devemos observar que qualquer equação diferencial linear não homogênea de segunda ordem pode ser posta sob a forma da Eq.(2.8), desde que previamente seja multiplicada por um fator adequado [16]. No entanto, podemos observar que a Eq.(2.8) não contém o termo  $\lambda r(x)u(x)$  presente na equação de Sturm-Liouville [16]. Porém, geralmente podemos fazer a seguinte substituição

$$q(x) = q_0(x) - \lambda r(x), \quad (2.10)$$

na qual  $\lambda$  é um autovalor determinado pelas condições de borda, e  $r(x)$  é a função peso. Portanto, não há perda de generalidade ao apresentarmos a Eq.(2.8) nesse formato, e, através da Eq.(2.10), mostramos que a equação está concatenada ao problema de autovalores de Sturm-Liouville.

Retornando à nossa busca pela solução da Eq.(2.8), introduzimos a função de Green  $G(x, x')$ , que é solução da equação para uma fonte em  $x'$

$$LG(x, x') = \delta(x - x'), \quad (2.11)$$

na qual  $\delta(x - x')$  é a conhecida função delta de Dirac[16]. Agora usemos que

$$Lu(x) \equiv \frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] - q(x)u(x) \quad (2.12)$$

e

$$LG(x, x') \equiv \frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{dG(x, x')}{dx} \right] - q(x)G(x, x'). \quad (2.13)$$

Multiplicando a Eq.(2.12) por  $G(x, x')$ , e a Eq.(2.13) por  $u(x)$ . Em seguida, subtraímos as equações resultantes e integramos no intervalo para obtermos

$$\begin{aligned} & \int_a^b dx [G(x, x')Lu(x) - u(x)LG(x, x')] = \\ & = \left\{ p(x) \left[ G(x, x') \frac{du(x)}{dx} - u(x) \frac{dG(x, x')}{dx} \right] \right\}_{x=a}^b. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Usando a Eq.(2.8) e a Eq.(2.11), e as propriedades da função delta de Dirac, temos que

$$\int_a^b dx [G(x, x')Lu(x) - u(x)LG(x, x')] = \int_a^b dx G(x, x')f(x) - u(x'). \quad (2.15)$$

Finalmente, substituindo a Eq.(2.15) na Eq.(2.14), e rearranjando os termos, temos a solução geral para o operador de Sturm-Liouville

$$\begin{aligned} u(x) &= \int_a^b dx' G(x', x)f(x') - \\ &- \left\{ p(x') \left[ G(x', x) \frac{du(x')}{dx'} - u(x') \frac{dG(x', x)}{dx'} \right] \right\}_{x'=a}^b. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Na qual trocamos  $x \rightarrow x'$ , pois  $x'$  é uma variável muda. Mais adiante mostraremos a simetria da função de Green em relação ao seu argumento, i.e.,  $G(x, x') = G(x', x)$ . Neste ponto, vamos considerar algumas condições de borda para  $u(x)$  em  $x = a$  e  $x = b$ :

- $u(x)$  em  $x = a$  e  $x = b$  são conhecidos. Neste caso escolhemos as condições de borda para  $G(x', x)$  da seguinte forma:

$$G(a, x) = G(b, x) = 0. \quad (2.17)$$

Desta maneira eliminamos as quantidades desconhecidas de  $\frac{du(x')}{dx'}$  em  $x = a$  e  $x = b$  da Eq.(2.16). De fato, a solução fica da forma

$$u(x) = \int_a^b dx' G(x', x) f(x') + \left[ p(x') u(x') \frac{dG(x', x)}{dx'} \right]_{x'=a}^b. \quad (2.18)$$

- $u(x)$  em  $x = a$  e  $\frac{du(x')}{dx'}$  em  $x = b$  são conhecidos. Novamente, escolhemos as condições de borda para  $G(x', x)$  de tal forma que elimine as quantidades desconhecidas. Tomamos então

$$G(a, x) = 0 \text{ e } \left. \frac{dG(x', x)}{dx'} \right|_{x'=b} = 0 \quad (2.19)$$

para obtermos a seguinte solução

$$u(x) = \int_a^b dx' G(x', x) f(x') - p(a) u(a) \left. \frac{dG(x', x)}{dx'} \right|_{x'=a} - p(b) G(b, x) \left. \frac{du(x')}{dx'} \right|_{x'=b}. \quad (2.20)$$

- $Au(x) + B \frac{du(x)}{dx} = X$  em  $x = a$  e  $Cu(x) + D \frac{du(x)}{dx} = Y$  em  $x = b$  são conhecidos. Desta vez escolhemos as condições de contorno para  $G(x', x)$  da forma

$$AG(a, x) + B \left. \frac{dG(x', x)}{dx'} \right|_{x'=a} = 0, \quad (2.21)$$

$$CG(b, x) + D \left. \frac{dG(x', x)}{dx'} \right|_{x'=b} = 0. \quad (2.22)$$

Deste modo, poderemos eliminar os valores desconhecidos da Eq.(2.16) fazendo a seguinte manipulação algébrica.

Sabemos que

$$G(a, x) \frac{du(x')}{dx'} \Big|_{x=a} - u(a) \frac{dG(x', x)}{dx'} \Big|_{x=a} \quad (2.23)$$

são os valores que precisamos em  $x' = a$  para acharmos a solução da Eq.(2.16). Utilizando a Eq.(2.21) na Eq.(2.23), temos

$$\begin{aligned} & G(a, x) \frac{du(x')}{dx'} \Big|_{x=a} + u(a) \frac{A}{B} G(a, x) = \\ &= \frac{G(a, x)}{B} \left[ Au(a) + B \frac{du(x')}{dx'} \Big|_{x=a} \right] \\ &= \frac{G(a, x)}{B} X \\ &= -\frac{1}{A} \frac{dG(x', x)}{dx'} \Big|_{x=a} X, \end{aligned} \quad (2.24)$$

que são valores conhecidos. Uma manipulação similar pode expressar os valores em  $x' = b$  em função da quantidade Y dada.

Em todos os casos, escolhamos as condições de borda de  $G(x', x)$  adequadas para eliminarmos as quantidades desconhecidas de  $u(x)$  e  $\frac{du(x)}{dx}$  no contorno. Desta maneira, obtemos a solução da equação diferencial homogênea, desde que seja possível encontrar a função de Green  $G(x', x)$ .

Daqui até o fim desta seção vamos abordar algumas propriedades das funções de Green. Começaremos pela simetria concernente a seus argumentos, já citada anteriormente. Tomando a Eq.(2.14) e substituindo  $u(x)$  por  $G(x, x'')$ , obteremos

$$\begin{aligned} & \int_a^b dx [G(x, x') LG(x, x'') - G(x, x'') LG(x, x')] = \\ &= \left\{ p(x) \left[ G(x, x') \frac{dG(x, x'')}{dx} - G(x, x'') \frac{dG(x, x')}{dx} \right] \right\}_{x=a}^b. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Novamente utilizando-se das propriedades da função delta de Dirac, temos

$$\begin{aligned} & G(x'', x') - G(x', x'') = \\ &= \left\{ p(x) \left[ G(x, x') \frac{dG(x, x'')}{dx} - G(x, x'') \frac{dG(x, x')}{dx} \right] \right\}_{x=a}^b. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Como um caso mais geral, tomamos as condições de borda do tipo (2.21) e (2.22) para as duas funções, pois contemplam as condições de contorno de Neumann, de Dirichlet,

e de outras intermediárias. Logo, o lado direito da Eq.(2.26) desaparece, e obtemos a propriedade de simetria da função de Green.

$$G(x'', x') = G(x', x''). \quad (2.27)$$

Entretanto, essa propriedade só é válida porque escolhemos condições de contorno apropriadas. Existem condições de contorno que não permitem essa simetria.

Retornando à Eq.(2.13) para  $G(x, x')$ , temos

$$\frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{dG(x, x')}{dx} \right] - q(x)G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (2.28)$$

Para  $x \neq x'$  a Eq.(2.28) se reduz a uma equação diferencial homogênea. Podemos resolver a equação para as duas regiões,  $x < x'$  e  $x > x'$ , através de qualquer método apropriado. Já no ponto  $x = x'$ , nós devemos relacionar as duas soluções obtidas.

A função delta de Dirac conduz a uma descontinuidade em  $\left. \frac{dG(x, x')}{dx} \right|_{x=x'}$ . Demonstraremos essa propriedade através da seguinte operação: integrando a Eq.(2.28) no intervalo  $x' - \epsilon \leq x \leq x' + \epsilon$ , na qual  $\epsilon$  é um número infinitesimal positivo, temos

$$\int_{x'-\epsilon}^{x'+\epsilon} dx \left\{ \frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{dG(x, x')}{dx} \right] - q(x)G(x, x') \right\} = \int_{x'-\epsilon}^{x'+\epsilon} dx \delta(x - x'). \quad (2.29)$$

O segundo termo do lado esquerdo desaparece, i.e.,

$$\int_{x'-\epsilon}^{x'+\epsilon} dx q(x)G(x, x') \longrightarrow 0 \quad (2.30)$$

quando  $\epsilon \rightarrow 0$ , assumindo que  $q(x)$  e  $G(x, x')$  são contínuas no intervalo. O termo do lado direito é igual a uma unidade, isto devido às propriedades da função delta de Dirac. Integrando o termo remanescente, obtemos

$$\left[ p(x) \frac{dG(x, x')}{dx} \right]_{x=x'-\epsilon}^{x'+\epsilon} \quad (2.31)$$

e daí

$$\frac{dG(x, x')}{dx} \Big|_{x=x'-\epsilon}^{x'+\epsilon} = \frac{1}{p(x')}, \quad (2.32)$$

desde que  $p(x)$  seja contínua em  $x = x'$ . Agora voltando à nossa afirmação de que  $G(x, x')$  é contínua em  $x = x'$ , é fácil de se observar que, se isso não fosse verdadeiro, a primeira derivada de  $G(x, x')$  seria proporcional à  $\delta(x - x')$ , e sua segunda derivada proporcional  $\frac{d\delta(x-x')}{dx}$ , diferentemente do que é exposto na Eq.(2.28) [15]. Logo, podemos afirmar que

$$G(x' - \epsilon, x') = G(x' + \epsilon, x'). \quad (2.33)$$

Finalmente, as equações homogêneas nas duas regiões,  $x < x'$  e  $x > x'$ , as condições (2.32) e (2.33), e as condições de borda em  $x = a$  e  $x = b$ , determinam completamente a função de Green para o operador de Sturm-Liouville.

## 2.3 Desenvolvimento da função de Green em autofunções

Já mencionado anteriormente, vamos considerar agora o problema de Sturm-Liouville

$$Lu_n(x) = \frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{du_n(x)}{dx} \right] - q_0(x)u_n(x) = -\lambda_n r(x)u_n(x). \quad (2.34)$$

Seja  $u_n(x)$ ,  $n \in I$ , o sistema ortonormal completo das autofunções correspondentes aos autovalores de  $\lambda_n$ . Podemos desenvolver a função de Green em autofunções do problema de Sturm-Liouville pelo seguinte método.

Tentaremos encontrar novamente a solução de uma equação diferencial não homogênea, representada abaixo por

$$Lu(x) + \lambda r(x)u(x) = f(x), \quad (2.35)$$

na qual  $L$  é o já apresentado operador de Sturm-Liouville. Expandindo  $u(x)$  e  $\frac{f(x)}{r(x)}$  nas autofunções da Eq.(2.34), com condições de borda do tipo (2.21) e (2.22), temos

$$u(x) = \sum_{n \in I} a_n u_n(x) \quad (2.36)$$

e

$$f(x) = r(x) \sum_{n \in I} b_n u_n(x). \quad (2.37)$$

Substituindo as equações acima na Eq.(2.35) obteremos

$$\sum_{n \in I} a_n Lu_n(x) + \lambda r(x) \sum_{n \in I} a_n u_n(x) = r(x) \sum_{n \in I} b_n u_n(x), \quad (2.38)$$

pois definimos que as condições de contorno são homogêneas, então podemos introduzir o operador dentro do somatório. Agora, utilizando a Eq.(2.35), i.e., que

$$Lu_n(x) = -\lambda_n r(x)u_n(x), \quad (2.39)$$

e rearranjando os termos, podemos obter a constante  $a_n$  em função de  $b_n$  da seguinte forma

$$r(x) \sum_{n \in I} (\lambda - \lambda_n) a_n u_n(x) = r(x) \sum_{n \in I} b_n u_n(x)$$

$$(\lambda - \lambda_n) a_n u_n(x) = b_n u_n(x)$$

$$a_n = \frac{b_n}{\lambda - \lambda_n} \quad (2.40)$$

Para encontrarmos a constante  $b_n$ , multiplicamos a Eq.(2.37) por  $u_m(x)$ , e integrando no período obtemos

$$\int_a^b dx' f(x') u_m(x') = \sum_{n \in I} b_n \int_a^b dx' r(x') u_n(x') u_m(x'). \quad (2.41)$$

Sabendo que  $u_m(x)$  e  $u_n(x)$  são funções ortonormais, e deste modo obedecem a propriedade[16]

$$\int_a^b dx' r(x') u_n(x') u_m(x') = \begin{cases} 0 & (n \neq m) \\ 1 & (n = m). \end{cases} \quad (2.42)$$

Utilizando esse resultado na Eq.(2.41), encontramos o valor da constante  $b_n$  que segue

$$b_n = \int_a^b dx' f(x') u_n(x'). \quad (2.43)$$

Por fim, substituindo os resultados até aqui obtidos na Eq.(2.36), podemos determinar a função  $u(x)$  pela equação

$$u(x) = \int_a^b dx' G(x, x') f(x'), \quad (2.44)$$

na qual

$$G(x, x') = \sum_{n \in I} \frac{u_n(x) u_n(x')}{\lambda - \lambda_n} \quad (2.45)$$

é a função de Green em sua forma aberta.

## 2.4 A função de Green para o caso de um espectro contínuo

Como último tópico teórico a ser considerado antes de ilustrarmos o método das funções de Green, vamos analisar o caso do espectro contínuo. Começamos apresentando a equação diferencial

$$DG(x, x') = \delta(x - x'), \quad (2.46)$$

na qual  $D$  é um operador diferencial com coeficientes constantes. Podemos mostrar que duas funções de Green dessa equação diferem por uma solução da equação homogênea. Isto se deve ao fato de que a função de Green pode ser decomposta em

$$G(x, x') = G_1(x, x') + h(x', x), \quad (2.47)$$

na qual  $h(x, x')$  é solução da equação homogênea, i.e.,

$$Dh(x, x') = 0. \quad (2.48)$$

A função  $G_1(x, x')$  pode depender somente da diferença entre  $x$  e  $x'$ , isto porque os coeficientes do operador diferencial  $D$  são constantes. Portanto, a fim de encontrar a solução da equação, podemos buscar a solução particular

$$DG_1(x) = \delta(x). \quad (2.49)$$

Devido a já citada dependência de  $G_1$ , podemos escolher  $x' = 0$ . E através da transformada de Fourier, podemos encontrar a solução da Eq.(2.49) em todo espaço  $\mathbb{R}^n$ , convertendo-a em uma equação algébrica da forma

$$P(k)\bar{G}_1(k) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}}. \quad (2.50)$$

As propriedades que  $G_1(x)$  deve possuir para obtermos sua transformada são as mesmas propriedades da transformada de Fourier clássica [17].

A função  $\bar{G}_1(k)$  é a transformada de Fourier n-dimensional da função  $G_1(x)$ , de forma explícita

$$\bar{G}_1(k) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} dx e^{-i\{x,k\}} G_1(x), \quad (2.51)$$

na qual  $dx = dx_1 \dots dx_n$ ,  $\{x, k\} = x_1 k_1 + \dots + x_n k_n$ , e  $k = (k_1, \dots, k_n)$ .

O termo da direita da Eq.(2.50) é a transformada de Fourier da função delta de Dirac, dada por

$$\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} dx e^{-i\{x,k\}} \delta(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}}, \quad (2.52)$$

devido às propriedades da função delta.

A função  $P(k)$  é um polinômio definido pelo operador  $D$ , se o polinômio não tiver raízes reais, a solução da Eq.(2.50) será

$$\bar{G}_1(k) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n P(k)}}, \quad (2.53)$$

e a transformada inversa de Fourier da Eq.(2.53) nos dará a função de Green  $G_1(x)$ , ou seja,

$$G_1(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} dk e^{i\{x,k\}} \bar{G}_1(k). \quad (2.54)$$

Se o polinômio  $P(k)$  tiver raízes reais, a transformada inversa de Fourier apresentada na Eq.(2.54) será divergente. Porém, em alguns casos, uma interpretação poderá ser dada à equação, de acordo com certas convenções a ser consideradas a partir do problema dado.

## 2.5 A função de Green da equação de difusão

Como última seção deste capítulo, vamos buscar a solução da equação de difusão não homogênea usual. Então, consideremos a equação

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\chi} \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -4\pi\rho(\mathbf{r}, t) \quad (2.55)$$

dentro de um volume  $V$ , com condições de borda

$$\psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.56)$$

ou

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial n}, \quad (2.57)$$

para  $\mathbf{r}$  sobre a superfície  $S$ , conhecidas. E a condição inicial

$$\psi(\mathbf{r}, \tau), \quad (2.58)$$

dada em um tempo inicial  $\tau$ .

Para encontrarmos a solução da equação, introduzimos a função de Green que é dada por

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') - \frac{1}{\chi} \frac{\partial G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')}{\partial t} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t'), \quad (2.59)$$

com as condições de borda, respectivas às condições (2.56) e (2.57),

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0 \quad (2.60)$$

ou

$$\frac{\partial G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')}{\partial n} = 0, \quad (2.61)$$

para  $\mathbf{r}$  sobre a superfície  $S$ . E a condição inicial

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0 \quad (2.62)$$

para  $t < t'$ .

Primeiramente, vamos estabelecer a propriedade de simetria da função de Green. Para isso, vamos fazer as substituições  $t \rightarrow -t$ ,  $t' \rightarrow -t''$ , e  $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}''$  para obtermos a equação

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}, -t; \mathbf{r}'', -t'') + \frac{1}{\chi} \frac{\partial G(\mathbf{r}, -t; \mathbf{r}'', -t'')}{\partial t} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')\delta(t - t''). \quad (2.63)$$

Agora, multiplicamos a Eq.(2.59) por  $G(\mathbf{r}, -t; \mathbf{r}'', -t'')$  e a Eq.(2.63) por  $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ . Logo após, subtraímos as equações resultantes e integramos para obter

$$\begin{aligned} & G(\mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}', t') - G(\mathbf{r}', -t'; \mathbf{r}'', -t'') = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_V d^3x \{ G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \nabla^2 G(\mathbf{r}, -t; \mathbf{r}'', -t'') - \\ & - G(\mathbf{r}, -t; \mathbf{r}'', -t'') \nabla^2 G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') + \\ & + \frac{1}{\chi} \frac{\partial}{\partial t} [G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') G(\mathbf{r}, -t; \mathbf{r}'', -t'')] \}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Utilizando a segunda fórmula de Green, Eq.(2.4), no lado direito da equação acima, e calculando a integral no tempo, temos

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_S dA [G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \nabla G(\mathbf{r}, -t; \mathbf{r}'', -t'') - \\ & - G(\mathbf{r}, -t; \mathbf{r}'', -t'') \nabla G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')] + \\ & + \frac{1}{\chi} \int_V d^3x G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') G(\mathbf{r}, -t; \mathbf{r}'', -t'') \Big|_{-\infty}^{\infty}. \end{aligned} \quad (2.65)$$

A primeira integral da Eq.(2.65) desaparece devido as condições de borda, (2.60) e (2.61). Já a segunda integral desaparece devido à condição inicial (2.62). Então, encontramos a seguinte propriedade de simetria da função de Green

$$G(\mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}', t') = G(\mathbf{r}', -t'; \mathbf{r}'', -t''). \quad (2.66)$$

Vamos buscar agora a solução da equação de difusão. Para isso, primeiramente vamos fazer as substituições  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ ,  $t \rightarrow -t'$ , e  $t' \rightarrow -t$ , e utilizando a propriedade de simetria, Eq.(2.66), obtemos

$$\nabla'^2 G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') + \frac{1}{\chi} \frac{\partial G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')}{\partial t'} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (2.67)$$

Tomando agora a Eq.(2.55), e fazendo as substituições  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$  e  $t \rightarrow t'$ , obtemos

$$\nabla'^2 \psi(\mathbf{r}', t') - \frac{1}{\chi} \frac{\partial \psi(\mathbf{r}', t')}{\partial t'} = -4\pi \rho(\mathbf{r}', t'). \quad (2.68)$$

Multiplicamos a Eq.(2.67) por  $\psi(\mathbf{r}', t')$ , e a Eq.(2.68) por  $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ . Subtraímos as equações resultantes e integramos para obter

$$\begin{aligned} & - \left[ 4\pi \int_{\tau}^{\infty} dt' \int_V d^3x' G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \rho(\mathbf{r}', t') + \psi(\mathbf{r}, t) \right] = \\ & = \int_{\tau}^{\infty} dt \int_V d^3x \left\{ G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \nabla'^2 \psi(\mathbf{r}', t') - \psi(\mathbf{r}', t') \nabla'^2 G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') - \right. \\ & \left. - \frac{1}{\chi} \frac{\partial}{\partial t'} [G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \psi(\mathbf{r}', t')] \right\}. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Finalmente, calculando integral da derivada no tempo, assim, usando a condição inicial da Eq.(2.62) para descartar as contribuições de  $t' > t$ , e rearranjando os termos da equação, encontramos a solução da equação de difusão sob a forma

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) = & -4\pi \int_{\tau}^{\infty} dt' \int_V d^3x' G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \rho(\mathbf{r}', t') - \\ & - \int_{\tau}^{\infty} dt \int_S dA' [G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \nabla' \psi(\mathbf{r}', t') - \psi(\mathbf{r}', t') \nabla' G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')] - \\ & - \frac{1}{\chi} \int_V d^3x' G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', \tau) \psi(\mathbf{r}', \tau). \end{aligned} \quad (2.70)$$

Na qual utilizamos a segunda fórmula de Green, para que a segunda integral seja determinada pelas condições de contorno das equações (2.56), (2.57), (2.60) e (2.61). Dessa forma, o termo central representa o efeito da superfície sobre a evolução da condição inicial e, conseqüentemente, sobre a presença de uma solução estacionária.

Por último, vamos analisar o caso da equação de difusão para todo espaço, i.e., quando  $S \rightarrow \infty$ . Como já demonstrado na seção precedente, para o espectro contínuo a função de Green da Eq.(2.55) dependerá somente das diferenças  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$  e  $t - t'$ . Por isso, sem perda de generalidade, podemos utilizar a Eq.(2.59) na forma

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\chi} \frac{\partial G(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \delta(\mathbf{r})\delta(t). \quad (2.71)$$

A condição inicial (2.62) agora toma a forma

$$G(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.72)$$

para  $t < 0$ .

Aplicando a transformada de Fourier na Eq.(2.71), obtemos

$$-k^2 \bar{G}(\mathbf{k}, t) - \frac{1}{\chi} \frac{\partial \bar{G}(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = \delta(t). \quad (2.73)$$

Para  $t < 0$ , a condição inicial nos dá a solução da equação acima. Já para  $t > 0$ , a solução da equação será

$$\bar{G}(\mathbf{k}, t) = Ae^{-\chi k^2 t}. \quad (2.74)$$

Agora, integrando a Eq.(2.73) no intervalo  $0 - \epsilon \leq t \leq 0 + \epsilon$ , temos

$$\bar{G}(\mathbf{k}, 0 + \epsilon) - \bar{G}(\mathbf{k}, 0 - \epsilon) = -\chi, \quad (2.75)$$

que mostra que a função  $\delta(t)$  na Eq.(2.73) é devido a essa descontinuidade. E usando a Eq.(2.72) e Eq.(2.74), encontramos que  $A = -\chi$ .

Substituindo os resultados obtidos, e fazendo a transformada inversa de Fourier sobre a Eq.(2.74), temos

$$G(\mathbf{r}, t) = -\frac{\chi}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - \chi k^2 t} = -\frac{\chi}{(4\pi\chi t)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r^2}{4\chi t}}. \quad (2.76)$$

Portanto, podemos concluir que a função de Green da Eq.(2.71) será

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \begin{cases} 0 & (t < t') \\ -\frac{\chi}{[4\pi\chi(t-t')]^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}{4\chi(t-t')}} & (t > t'). \end{cases} \quad (2.77)$$

A função de Green encontrada descreve o modo que a perturbação de uma delta de Dirac, em  $t = t'$ , se difunde no meio em tempos posteriores. Por fim, nós podemos substituir a Eq.(2.77) na Eq.(2.70). A integral de superfície pode ser desprezada, pois a função de Green decresce rapidamente quando  $\mathbf{r}' \rightarrow \infty$ . Logo, a solução da Eq.(2.55) para todo o espaço será

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi\chi}} \int_{\tau}^t dt' \int_V d^3x' \frac{e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}{4\chi(t-t')}}}{(t-t')^{\frac{3}{2}}} \rho(\mathbf{r}', t') + \\
&+ \frac{1}{[4\pi\chi(t-\tau)]^{\frac{3}{2}}} \int_V d^3x' e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}{4\chi(t-\tau)}} \psi(\mathbf{r}', \tau).
\end{aligned} \tag{2.78}$$

# Capítulo 3

## Equação de Schrödinger

Seguindo nosso trabalho, apresentaremos nesse capítulo um breve estudo sobre a equação de Schrödinger. Em seguida, abordaremos o operador de derivada espacial fracionário e o operador de derivada temporal com índices fracionários, que serão aplicados à equação supracitada. E, finalmente, utilizando o método apresentado no segundo capítulo deste trabalho, encontraremos a solução da equação de Schrödinger para os seguintes casos: partícula livre, oscilador harmônico de dimensão  $\alpha$  e potencial coulombiano.

### 3.1 Equação de onda

Considerando um movimento não relativístico, a equação de Schrödinger fornece a descrição quantitativa do movimento de uma partícula em um campo de força que pode ser representado por uma energia potencial. Essa descrição é desenvolvida em termos de uma equação diferencial, suas condições de contorno, e condição inicial. Tomando a mesma inspiração utilizada por Erwin Schrödinger, utilizaremos de conceitos da teoria ondulatória para chegarmos a equação proposta.

Sabemos que, para uma onda harmônica viajando em um espaço contínuo, o comprimento de onda e o momento são relacionados por[18]:

$$p = \hbar k, \tag{3.1}$$

com

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}. \tag{3.2}$$

E a energia e a frequência podem ser relacionadas por:

$$E = \hbar\omega, \tag{3.3}$$

com

$$\omega = 2\pi\nu. \quad (3.4)$$

Podemos supor que a função de onda  $\psi(x, t)$ , que representa uma partícula viajando no sentido positivo do eixo das abscissas com momento  $p$  e energia cinética  $E$ , terá a forma

$$\cos(kx - \omega t), \sin(kx - \omega t), e^{i(kx - \omega t)}, e^{-i(kx - \omega t)}, \quad (3.5)$$

ou uma combinação linear delas. Isto vem do experimento de difração de elétrons por cristais realizado por Davisson and Germer, em 1927, e Thomson, em 1928. Também surge da necessidade que o pacote de onda, de número de onda  $k$  e frequência angular  $\omega$ , tenha velocidade de grupo igual à partícula livre clássica, de momento  $p$  e energia  $E$ .

Entretanto, devemos fazer as seguintes considerações para a equação. Primeiramente ela deve ser linear, afim de que as soluções possam ser sobrepostas e, por efeito de interferência, permitir a construção de pacotes de onda. E os coeficientes da equação devem envolver constantes tais como  $\hbar$ , massa e carga da partícula, e não parâmetros de um tipo particular de movimento, como energia, número de onda, momento e frequência. Isso se deve ao fato que queremos deixar em aberto a possibilidade de sobrepor soluções que possuem valores diferentes concernentes a esses parâmetros. Uma vez que uma equação diferencial pode satisfazer essas condições, e também porque é de fácil manipulação, tentaremos a solução por esse caminho.

Levando em conta as considerações acima, primeiramente tentaremos a solução através de uma equação de onda unidimensional mais familiar, que descreve o movimento de uma onda transversa em uma corda [16], ou seja,

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \gamma \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (3.6)$$

Substituindo as formas da Eq.(3.5) na Eq.(3.6), obtemos que cada uma das soluções, e suas combinações lineares, satisfazem a equação, e daí surge

$$\gamma = \frac{\omega^2}{k^2} = \frac{E^2}{p^2} = \frac{p^2}{4m^2}. \quad (3.7)$$

Na qual  $m$  é a massa da partícula que é descrita pela Eq.(3.6). Da Eq.(3.7) concluímos que o coeficiente  $\gamma$  que aparece na Eq.(3.6) envolve parâmetros de movimento  $E$  ou  $p$ , e, portanto, devido a nossas considerações anteriores, descartamos essa equação diferencial.

Ainda na nossa busca, notamos das últimas operações que a diferenciação em relação a  $x$  tem o efeito de multiplicar a equação por  $k$ , e a diferenciação em relação a  $t$  tem o efeito de multiplicar a equação por  $\omega$ . Sabendo da relação  $E = \frac{p^2}{2m}$ , que é equivalente à  $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ , podemos sugerir que estamos procurando por uma equação com a primeira derivada em relação ao tempo, e a segunda derivada em relação ao espaço, isto é,

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (3.8)$$

Substituindo novamente as funções harmônicas da Eq.(3.5) na Eq.(3.8), obtemos que as duas primeiras funções não são soluções dessa equação, porém as duas últimas são soluções. Embora a combinação linear das duas últimas funções também não seja solução. Escolhendo em particular a função  $e^{i(kx-wt)}$ , somos conduzidos à

$$\gamma = \frac{i\omega}{k^2} = \frac{i\hbar E}{p^2} = \frac{i\hbar}{2m}. \quad (3.9)$$

Então, temos que os valores dos parâmetros de  $\gamma$  envolvem somente constantes adequadas as nossas considerações. Daí somos conduzidos a equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula livre de massa  $m$ , que é obtida através da combinação da Eq.(3.8) e Eq.(3.9) na forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (3.10)$$

Esse resultado é significativo na medida que a função  $e^{i(kx-wt)}$  faz com que o lado esquerdo da equação fique  $E\psi$ , e o lado direito  $\frac{p^2}{2m}\psi$ . Não devemos nos ater ao fato da função ser complexa, pois todos os resultados previstos são passíveis de ser expressos de números reais através de uma interpretação adequada que será explicitada adiante.

A equação de Schrödinger unidimensional é facilmente estendida para três dimensões. Reescrevendo a Eq.(3.1), temos que

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad (3.11)$$

com

$$k = |\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (3.12)$$

Logo, a função  $e^{i(kx-wt)}$  fica da forma

$$e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-wt)}, \quad (3.13)$$

na qual  $\mathbf{k}$  é chamado de vetor de onda e  $\mathbf{r}$  é vetor posição da partícula. Então, considerando nossos avanços, podemos afirmar que a equação de Schrödinger tridimensional para uma partícula livre, representada através função  $\psi(\mathbf{r}, t)$ , que pode ser escrita como

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi. \quad (3.14)$$

Uma simples comparação entre a Eq.(3.11) e a Eq.(3.14), e a definição clássica da energia

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (3.15)$$

nos sugere que, para partícula livre, a energia e o momento podem ser representados por operadores diferenciais que atuam sobre a partícula:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (3.16)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla. \quad (3.17)$$

Agora devemos incluir o efeito de forças externas que podem atuar sobre a partícula. Para isso, devemos assumir que essas forças são de tal natureza que podem ser combinadas em uma única força resultante  $\mathbf{F}$ , que é derivada de uma energia potencial  $V$ , isto é,

$$\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r}, t). \quad (3.18)$$

Usando do mesmo argumento utilizado acima que relaciona classicamente a energia e o momento, podemos esperar também que a relação clássica inclua forças externas. Isto é expressado através da energia potencial, ou seja,

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t). \quad (3.19)$$

Na qual  $E$  é a energia total, o primeiro termo do lado direito é a energia cinética, e o segundo termo é a energia potencial. Por fim, as equações (3.16), (3.17) e (3.19) sugerem que a Eq.(3.14) pode ser generalizada, i.e.,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}, t)\psi. \quad (3.20)$$

A Eq.(3.20) é a equação de Schrödinger que descreve o movimento em três dimensões de uma partícula de massa  $m$  em um campo de força dado pela Eq.(3.18). A equação é derivada de uma série de considerações, porém a concordância de suas soluções com dados experimentais demonstram a validade e a utilidade da mesma.

## 3.2 Interpretação da função de onda

Podemos imaginar um número muito grande de idênticas regiões do espaço, independentes, e não sobrepostas. Cada qual grande o suficiente para conter características fisicamente significativas do movimento. Em cada região a partícula com energia potencial  $V(\mathbf{r}, t)$  é descrita pela mesma função de onda  $\psi(\mathbf{r}, t)$ , na qual  $\mathbf{r}$  é a distância até a origem da partícula. Assumimos então que o resultado numérico das medições em um tempo  $t$ , de uma medida física significativa, tal como posição, momento, ou energia, não será a mesma para todas as regiões. Em suma, haverá uma distribuição desses números que pode ser descrita como uma distribuição de probabilidades.

Como exemplo, podemos considerar  $\psi$  como a medida de probabilidade de encontrar a partícula em uma posição particular relativa à origem dessa partícula. Entretanto, a probabilidade deve ser real e não negativa, enquanto que  $\psi$  é uma função complexa. É possível, então, que a função densidade de probabilidade da posição é a função  $\psi$  multiplicada pelo seu complexo conjugado, isto é,

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (3.21)$$

Isto nos diz que  $P(\mathbf{r}, t)d^3x$  nos dá a probabilidade de encontrar a partícula em um elemento de volume  $d^3x$  sobre a posição  $\mathbf{r}$  e tempo  $t$ , quando um número grande de medidas da posição são feitas sobre partículas independentes, cada uma com a mesma função de onda  $\psi(\mathbf{r}, t)$ .

## 3.3 Operador de derivada espacial fracionário e derivada temporal com índices fracionários aplicados a equação de Schrödinger.

A equação de Schrödinger, discutida anteriormente, é representada na forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}, t)\psi. \quad (3.22)$$

Podemos generalizar esta equação para uma espaço de dimensão  $\alpha$  através da utilização do operador de derivada espacial fracionário [19],

$$\begin{aligned} \tilde{\nabla}^2 \Psi(\mathbf{r}, t) &\equiv \frac{1}{r^{\alpha-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^{\alpha-1} \frac{\partial}{\partial r} \Psi(\mathbf{r}, t) \right) \\ &+ \frac{1}{r^2 \sin^{\alpha-2} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin^{\alpha-2} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \Psi(\mathbf{r}, t) \right), \end{aligned} \quad (3.23)$$

na qual  $\alpha$  representa a dimensão, que pode ser não inteira.

Agora podemos também aplicar à equação de Schrödinger o operador de derivada fracionária de índices não inteiros. Utilizaremos a derivada de ordem  $\gamma$  no sentido de Caputo definida da seguinte maneira [20],

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(n-\gamma)} \int_a^t \frac{\Psi^{(n)}(\mathbf{r}, \tau)}{(t-\tau)^{\gamma+1-n}} d\tau, & n-1 < \gamma < n \\ \Psi^{(n)}(\mathbf{r}, t) & \gamma \equiv n \in \mathbb{N}. \end{cases} \quad (3.24)$$

Finalmente, aplicando os dois últimos operadores apresentados à Eq.(3.22), obtemos a seguinte equação

$$i\hbar \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_\gamma} \tilde{\nabla}^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.25)$$

na qual  $\mathbf{r} = (r, \theta)$ , e  $m_\gamma$  tem dimensão  $[M][T]^{\gamma-1}$ . Para  $\gamma = 1$  temos a dimensão usual.

O efeito dos operadores aplicados à função  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  serão discutidos mais adiante. Na próxima seção vamos nos ater a encontrar algumas soluções para potenciais típicos associados à equação.

## 3.4 Soluções para equação de Schrödinger

Agora encontraremos as soluções de três potenciais típicos relacionados à equação de Schrödinger, todos com a condição de contorno  $\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} \Psi(\mathbf{r}, t) = 0$ , são eles: partícula livre, oscilador harmônico de dimensão  $\alpha$ , e potencial coulombiano.

### 3.4.1 Partícula livre

Para uma partícula livre o potencial é da forma  $V(\mathbf{r}, t) = 0$ , portanto a Eq.(3.25) se torna

$$i\hbar \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_\gamma} \tilde{\nabla}^2 \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.26)$$

A fim de solucionar a equação e encontrar seu propagador, começamos aplicando a transformada de Laplace à última equação, isto é,

$$\frac{\hbar}{2m_\gamma i} \tilde{\nabla}^2 \Psi(\mathbf{r}, s) + s^\gamma \Psi(\mathbf{r}, s) = s^{\gamma-1} \Psi(\mathbf{r}, 0), \quad (3.27)$$

na qual o último termo representa uma condição inicial arbitrária que pode ser normalizada.

A função de Green correspondente à Eq.(3.27) é dada por

$$\frac{\hbar}{2m_\gamma i} \tilde{\nabla}^2 \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; s) + s^\gamma \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; s) = \frac{1}{r^{\alpha-1} \sin^{\alpha-2} \theta} \delta(r - r') \delta(\theta - \theta'). \quad (3.28)$$

E utilizando esse propagador podemos encontrar a solução da Eq.(3.27) através da operação

$$\Psi(\mathbf{r}, s) = s^{\gamma-1} \int_0^\infty dr r^{\alpha-1} \int_0^\pi d\theta \sin^{\alpha-2} \theta \Psi(\mathbf{r}', 0) \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; s). \quad (3.29)$$

O propagador que pretendemos encontrar possui dependência radial e angular. Antes de abordarmos o problema de forma genérica, isto é, considerando as variáveis  $r$  e  $\theta$ , vamos considerar a situação em que o sistema possui simetria radial. Tal fato, por exemplo, ocorre quando a condição inicial depende somente da variável  $r$ . Logo, para o caso que a equação só dependa do parâmetro  $r$ , podemos utilizar as autofunções relacionadas ao problema de Sturm-Liouville  $\tilde{\nabla}^2 \varphi = -p^2 \varphi$ , o último já apresentado anteriormente. Para isso utilizamos a transformada de Hankel que pode ser representada através da equação

$$\mathcal{G}(r, r'; s) = \int_0^\infty dp p \varphi(r, p) \bar{\mathcal{G}}(p, r'; s), \quad (3.30)$$

e sua inversa é dada por

$$\bar{\mathcal{G}}(p, r'; s) = \int_0^\infty dr r^{\alpha-1} \varphi(r, p) \mathcal{G}(r, r'; s). \quad (3.31)$$

Na qual  $\varphi(r, p) = r^{1-\alpha/2} J_\nu(pr)$ ,  $\nu = \alpha/2 - 1$ , e  $J_\nu(x)$  é a função de Bessel.

Aplicando a transformada de Hankel à Eq.(3.28), obtemos

$$\bar{\mathcal{G}}(p, r'; s) = \frac{\varphi(r', p)}{s^\gamma + i\hbar p^2 / (2m_\gamma)}. \quad (3.32)$$

E aplicando a transformada inversa de Laplace à última equação nos conduz à

$$\bar{\mathcal{G}}(p, r'; t) = t^{\gamma-1} \varphi(r', p) E_{\gamma, \gamma} \left( \frac{\hbar}{2m_\gamma i} p^2 t^\gamma \right). \quad (3.33)$$

Na qual  $E_{\gamma, \gamma}(x)$  é a função de Mittag-Leffler generalizada [21], que é definida por

$$E_{\alpha, \beta}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(\beta + \alpha n)}. \quad (3.34)$$

Nota-se que a função de Mittag-Leffler é um resultado previsível, pois a generalização da derivada para índices  $\gamma$  conduz à generalização do decaimento exponencial em relação

ao tempo, isto é, quando  $\gamma = 1$ , e de fato podemos obter a função exponencial de um caso particular da função de Mittag-Leffler [20].

Agora, utilizando a transformada dada pela Eq.(3.30), podemos encontrar o propagador da Eq.(3.28), que é dado por

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = t^{\gamma-1} \int_0^\infty dp p \varphi(r', p) \varphi(r, p) E_{\gamma, \gamma} \left( \frac{\hbar p^2}{2m_\gamma i} t^\gamma \right). \quad (3.35)$$

Utilizando também a função de Fox generalizada, que é expressa por

$$\mathbb{H}_{E, [A:C], F, [B:D]}^{L, M, M_1, N, N_1} \left[ \begin{array}{c} x \\ y \end{array} \middle| \begin{array}{c} (\varepsilon_1, \omega_1), \dots, (\varepsilon_E, \omega_E) \\ (a_1, \alpha_1), \dots, (a_A, \alpha_A); (c_1, \gamma_1), \dots, (c_C, \gamma_C) \\ (\xi_1, \varpi_1), \dots, (\xi_F, \varpi_F) \\ (b_1, \beta_1), \dots, (b_B, \beta_B); (d_1, \delta_1), \dots, (d_C, \delta_D) \end{array} \right], \quad (3.36)$$

para representar a função de Bessel e a função de Mittag-Leffler [22], e calculando a integral [22], podemos escrever a Eq.(3.35) na forma

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = 2t^{\gamma-1} (rr')^{1-\alpha/2} \cdot \mathbb{H}_{2, [0:1], 0, [0:2]}^{1, 0, 1, 1, 1} \left[ \begin{array}{c} (r'/r)^2 \\ 2i\hbar t^\gamma / (m_\gamma r^2) \end{array} \middle| \begin{array}{c} (\frac{2-\nu}{2}, 1); (\frac{2+\nu}{2}, 1) \\ -; (0, 1) \\ (-\frac{\nu}{2}, 1); (\frac{\nu}{2}, 1); (0, 1), (1-\gamma, \gamma) \end{array} \right]. \quad (3.37)$$

Tomando um caso particular,  $\gamma = 1$ , a Eq.(3.37) é reduzida para

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = \frac{m}{i\hbar t} (rr')^{1-\alpha/2} e^{-\frac{mi}{2\hbar t}(r^2+r'^2)} \mathbf{I}_\nu \left( \frac{m}{i\hbar t} rr' \right). \quad (3.38)$$

Por último, introduzindo a variável angular nos cálculos anteriores, a Eq.(3.35) se torna

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = t^{\gamma-1} \sum_{l=0}^{\infty} \int_0^\infty dp p \Theta_l(\theta) \Theta_l(\theta') \cdot \varphi_l(r', p) \varphi_l(r, p) E_{\gamma, \gamma} \left( \frac{\hbar p^2}{2m_\gamma i} t^\gamma \right), \quad (3.39)$$

com

$$\Theta_l(\theta) = \mathcal{N}_l C_l^{\alpha/2-1}(\cos \theta), \quad (3.40)$$

na qual  $C_l^{\tilde{\alpha}}(\cos \theta)$  são os polinômios de Gegenbauer [23], e

$$\mathcal{N}_l^2 = \frac{l! \left(l + \frac{\alpha}{2} - 1\right)}{2^{3-\alpha} \pi \Gamma(l + \alpha - 2)} \left[ \Gamma\left(\frac{\alpha}{2} - 1\right) \right]^2. \quad (3.41)$$

As autofunções são definidas com anteriormente, ou seja,  $\varphi_l(r, p) = r^{1-\alpha/2} J_\nu(pr)$ , porém, devido a variável angular, o valor do subíndice da função de Bessel agora se torna  $\nu = \alpha/2 + l - 1$ .

Por fim, usando a transformada de Hankel e transformada inversa de Laplace, a Eq.(3.29) pode ser expressa através da função de Green como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t \frac{d\bar{t}}{(t-\bar{t})^\gamma} \int_0^\infty dr' r'^{\alpha-1} \int_0^\pi d\theta' \sin^{\alpha-2} \theta' \Psi(\mathbf{r}', 0) \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \bar{t}). \quad (3.42)$$

### 3.4.2 Oscilador harmônico de dimensão $\alpha$

Para um oscilador harmônico de dimensão  $\alpha$  o potencial é da forma  $V(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{r}^2$ , logo a Eq.(3.25) toma a forma

$$i\hbar \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_\gamma} \tilde{\nabla}^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} m_\gamma \omega_\gamma^2 \mathbf{r}^2 \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.43)$$

Para encontrarmos a solução da última equação, faremos o mesmo procedimento utilizado anteriormente. Primeiro encontraremos a solução para a coordenada radial, e depois incorporaremos a variável angular à solução. Para isso utilizamos o método de separação de variáveis, isto é, tomamos  $\Psi(r, t) = \psi_1(r)\psi_2(t)$  e substituímos na Eq.(3.43), e assim obtemos para componente radial

$$\frac{d^2 \psi_1(r)}{dr^2} + \frac{\alpha-1}{r} \frac{d\psi_1(r)}{dr} + \left( 2\lambda - \frac{m_\gamma^2 \omega_\gamma^2}{\hbar^2} r^2 \right) \psi_1(r) = 0. \quad (3.44)$$

Fazendo a substituição  $\psi_1(r) = \bar{\psi}_1\left(\frac{m_\gamma \omega_\gamma r^2}{\hbar}\right) \exp\left[\frac{-m_\gamma \omega_\gamma r^2}{2\hbar}\right]$  e  $x = \frac{m_\gamma \omega_\gamma r^2}{\hbar}$ , obtemos

$$x \frac{d^2 \bar{\psi}_1(x)}{dx^2} + \left(\frac{\alpha}{2} - x\right) \frac{d\bar{\psi}_1(x)}{dx} + \left(\frac{2\lambda}{4\hbar m_\gamma} - \frac{\alpha}{4}\right) \bar{\psi}_1(x) = 0, \quad (3.45)$$

que é facilmente reconhecida como a equação diferencial de Laguerre associada[23], e tem por solução os polinômios associados de Laguerre. Logo, as autofunções da componente radial na Eq.(3.44) é obtido como segue

$$\psi_1(r) = e^{-\frac{m_\gamma \omega_\gamma r^2}{2\hbar}} \varphi_n(r). \quad (3.46)$$

com

$$\varphi_n(r) = \overline{\mathcal{N}}_n \mathbb{L}_n^{(\overline{\alpha})} \left( \frac{m_\gamma \omega_\gamma r^2}{\hbar} \right), \quad (3.47)$$

e

$$\overline{\mathcal{N}}_n^2 = \frac{2\Gamma(1+n)}{\Gamma(n+\alpha/2)} \left( \frac{m_\gamma \omega_\gamma}{\hbar} \right)^{\frac{\alpha}{2}}. \quad (3.48)$$

Na qual  $n = \frac{2\lambda_n}{4m_\gamma \hbar} - \frac{\alpha}{4}$  e  $\overline{\alpha} = \frac{\alpha}{2} - 1$ .

Seguindo, para componente temporal devemos procurar a solução da equação

$$\frac{d^\gamma \psi_2(t)}{dt^\gamma} = -i \frac{\lambda_n}{\hbar} \psi_2(t). \quad (3.49)$$

Aplicando a transformada de Laplace à equação acima, obtemos

$$s^\gamma \bar{\psi}_2(s) - s^{\gamma-1} \psi_2(0) = -i \lambda_n \bar{\psi}_2(s). \quad (3.50)$$

Por fim, rearranjando os termos e encontrando a função de Green para equação, através da transformada inversa de Laplace temos a seguinte solução

$$\psi_2(t) = t^{\gamma-1} \mathbb{E}_{\gamma,\gamma} \left( -i \frac{\lambda_n}{\hbar} t^\gamma \right). \quad (3.51)$$

Então, a função de Green para coordenada radial será

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = t^{\gamma-1} e^{-\frac{m_\gamma \omega_\gamma}{2\hbar}(r^2 - r'^2)} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(r') \varphi_n(r) \mathbb{E}_{\gamma,\gamma} \left( -i \frac{\lambda_n}{\hbar} t^\gamma \right). \quad (3.52)$$

Repetindo o procedimento anterior, incorporamos a componente angular à equação e obtemos a seguinte solução para o propagador

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) &= t^{\gamma-1} e^{-\frac{m_\gamma \omega_\gamma}{2\hbar}(r^2 - r'^2)} \times \\ &\times \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \Theta_l(\theta') \Theta_l(\theta) \varphi_{n,l}(r') \varphi_{n,l}(r) \mathbb{E}_{\gamma,\gamma} \left( -i \frac{\lambda_{n,l}}{\hbar} t^\gamma \right), \end{aligned} \quad (3.53)$$

com

$$\varphi_{n,l}(r) = \overline{\mathcal{N}}_{n,l} r^l \mathbb{L}_n^{(\overline{\alpha})} \left( \frac{m_\gamma \omega_\gamma}{\hbar} r^2 \right), \quad (3.54)$$

$$\overline{\mathcal{N}}_{n,l}^2 = \frac{2\Gamma(1+n)}{\Gamma(n+\alpha/2+l)} \left( \frac{m_\gamma \omega_\gamma}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}(\alpha+2l)}. \quad (3.55)$$

Porém agora temos que  $\lambda_{n,l} = \omega_\gamma \hbar (2n + l + \alpha/2)$  e  $\overline{\alpha} = \alpha/2 + l - 1$ , devido à coordenada angular.

### 3.4.3 Potencial coulombiano

O último potencial que buscaremos a solução para equação de Schrödinger é o potencial coulombiano. Ele é definido por  $V(\mathbf{r}, t) = \frac{K}{r}$ , na qual  $K$  é uma constante, então a Eq.(3.25) ficará da forma

$$i\hbar \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_\gamma} \tilde{\nabla}^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + \frac{K}{r} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.56)$$

Usando novamente o método de separação de variáveis,  $\Psi(r, t) = \psi_1(r)\psi_2(t)$ , somos conduzidos a equação para a componente radial

$$r \frac{d^2 \psi_1(r)}{dr^2} + (\alpha - 1) \frac{d\psi_1(r)}{dr} + \frac{2m_\gamma}{\hbar^2} (\lambda r - K) \psi_1(r) = 0. \quad (3.57)$$

Agora, fazemos a substituição  $\psi_1(r) = \bar{\psi}_1 \left( \frac{2m_\gamma \lambda r}{\hbar^2} \right) \exp \left[ \left( -\frac{2m_\gamma \lambda r^2}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right]$  e  $x = \left[ \frac{8m_\gamma \lambda r^2}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}}$ , e encontramos

$$x \frac{d^2 \bar{\psi}_1(x)}{dx^2} + (\alpha - 1 - x) \frac{d\bar{\psi}_1(x)}{dx} + \left( \frac{\alpha}{2} - \frac{K}{2} \left[ \frac{2m_\gamma \lambda}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \right) \bar{\psi}_1(x) = 0. \quad (3.58)$$

A solução da equação novamente é em termos dos polinômios de Laguerre, como segue

$$\psi_1(r) = \exp \left[ \left( -\frac{2m_\gamma \lambda_n r^2}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \varphi_n(r), \quad (3.59)$$

com

$$\varphi_n(r) = \bar{\mathcal{N}}_n L_n^{(\bar{\alpha})} \left( \left[ \frac{8m_\gamma \lambda_n r^2}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} \right) \quad (3.60)$$

e

$$\bar{\mathcal{N}}_n^2 = \frac{2\Gamma(1+n)}{\Gamma(n+\alpha-1)} \left( \frac{2m_\gamma \lambda_n}{\hbar^2} \right)^{\frac{\alpha}{2}}. \quad (3.61)$$

Na qual  $n = \left( \frac{K}{2} \left[ \frac{2m_\gamma \lambda_n}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \right)$  e  $\bar{\alpha} = \alpha - 2$ .

A solução para a parte temporal é semelhante aos cálculos feitos anteriormente, portanto, sem perda de informações, podemos expressá-la como segue

$$\psi_2(t) = t^{\gamma-1} E_{\gamma,\gamma} \left( -i \frac{\lambda_n}{\hbar} t^\gamma \right). \quad (3.62)$$

Então, a função de Green para a componente radial será dada por

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = t^{\gamma-1} \exp\left(\left[\frac{2m_\gamma \lambda (r-r')^2}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(r') \varphi_n(r) \mathbf{E}_{\gamma, \gamma}\left(-i \frac{\lambda_n}{\hbar} t^\gamma\right). \quad (3.63)$$

Repetindo agora os mesmos procedimentos anteriores, mas desta vez incorporando a componente angular, encontramos o propagador para a Eq.(3.56), que toma a forma

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) &= t^{\gamma-1} \exp\left(\left[\frac{2m_\gamma \lambda_{n,l} (r-r')^2}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}\right) \times \\ &\times \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \Theta_l(\theta') \Theta_l(\theta) \varphi_{n,l}(r') \varphi_{n,l}(r) \mathbf{E}_{\gamma, \gamma}\left(-i \frac{\lambda_{n,l}}{\hbar} t^\gamma\right), \end{aligned} \quad (3.64)$$

com

$$\varphi_{n,l}(r) = \bar{\mathcal{N}}_{n,l} r^l \mathbf{L}_n^{(\bar{\alpha})}\left(\left[\frac{8m_\gamma \lambda_{n,l} r^2}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}\right), \quad (3.65)$$

$$\bar{\mathcal{N}}_{n,l}^2 = \frac{2\Gamma(1+n)}{\Gamma(n+\alpha-1+l)} \left(\frac{2m_\gamma \lambda_{n,l}}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}(\alpha+2l)}. \quad (3.66)$$

Entretanto, temos agora que  $\lambda_{n,l} = \left(\frac{2n+1}{K}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m_\gamma}$  e  $\bar{\alpha} = \alpha + l - 2$ , devido à coordenada angular.

A solução obtida está incompleta, pois analisamos somente a equação para o espectro discreto. Para obter uma solução geral, devemos encontrar a solução do espectro contínuo e somá-la à solução encontrada. Porém, esse procedimento não foi incluso no escopo desse trabalho.

# Capítulo 4

## Equação de difusão

Neste capítulo abordaremos brevemente o desenvolvimento do conceito de difusão. Começaremos pela lei encontrada por Fick, seguindo seu desenvolvimento até a derivação da equação de difusão por Einstein. Abordaremos também o movimento browniano, fundamental para a análise do comportamento molecular de um processo difusivo. Em seguida definiremos o comportamento difusivo anômalo, e, por fim, encontraremos algumas soluções para a equação de difusão.

### 4.1 Desenvolvimento histórico

A difusão é um dos fenômenos mais ubíquos da natureza. Apesar do conhecimento empírico, o primeiro a estudar sistematicamente o comportamento difusivo foi o químico Thomas Graham (1805-1869). Através de estudos experimentais, ele postulou a lei de Graham. Esta afirma que, quando dois gases são colocados em contato, os volumes das trocas gasosas são inversamente proporcionais à raiz quadrada de sua massas.

Graham realizou o primeiro experimento quantitativo relacionado à difusão, além disso, seus dados experimentais foram os primeiros a determinarem, com confiabilidade, o coeficiente de difusão. O último ainda não havia sido determinado, feito creditado à Adolf Fick anos depois, mas Maxwell utilizou suas medidas e calculou o coeficiente de difusão do  $CO_2$  com uma precisão de  $\pm 5\%$ .

Adolf Fick, em torno de 1855, publicou seus famosos artigos sobre a difusão [24], nos quais ele estabeleceu a equação de difusão clássica. Baseado nos resultados de Graham, Fick intuiu que o comportamento difusivo obedecia uma lei análoga à condução de calor em corpos rígidos. É importante mencionar que anteriormente Fick havia realizado um estudo nessa área.

Através da analogia citada, ele assumiu que o fluxo da matéria é proporcional ao seu gradiente de concentração com a constante de proporcionalidade  $k$ , que ele sugeriu ser dependente da natureza das substâncias. E modelando em termos de uma equação diferencial, ele derivou

$$\frac{\partial y}{\partial t} = k \left( \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + \frac{1}{Q} \frac{dQ}{dx} \frac{\partial y}{\partial x} \right). \quad (4.1)$$

Na qual  $y$  é a concentração do material que sofre a difusão,  $x$  é a posição onde o material está concentrado, e  $Q$  é a área através da qual a difusão ocorre.

A área  $Q$  é dependente do comprimento  $x$ , se a seção de difusão for constante, temos que

$$\frac{\partial y}{\partial t} = k \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}. \quad (4.2)$$

Entretanto Fick teve muitos problemas para validar essa equação. Ele realizou vários experimentos com o mesmo material a ser difundido (sal de cozinha), e variou as condições geométricas. O termo à direita da Eq.(4.2) que contém a segunda derivada não é fácil de medir. Por isso, Fick só considerou casos estacionários.

Fick obteve a solução para dois casos correspondentes a seus experimentos. No primeiro caso ele utilizou-se de uma geometria cilíndrica, e obteve a solução  $y = ax + b$ . Já no segundo caso ele utilizou-se de uma geometria cônica, e obteve a solução  $y + a = (-c/x)$ . Por fim, suas medidas experimentais corroboraram a validade de sua equação.

Apesar dos poucos dados coletados, Fick confiou na validade da Eq.(4.2), e então decidiu encontrar a difusibilidade  $k$  do sal na água. Utilizando-se de três tubos cilíndricos de comprimentos diferentes, calculou a quantidade de sal em uma determinada seção ( $M$ ). Esta quantidade deve ser inversamente proporcional ao comprimento do tubo. Agora multiplicando  $M$  pelo comprimento do respectivo tubo, e dividindo pelo tempo, devemos obter o mesmo valor para os três cilindros. Considerando o caso estacionário, Fick obteve

$$\frac{ML}{t} = JL = kC_S. \quad (4.3)$$

Na qual  $C_S$  é a concentração total de sal, e  $J$  a "densidade de corrente" do sal.

Fick realizou este experimento a diferentes temperaturas, e apontou que  $k$  aumenta com o aumento da temperatura, como já esperado dos experimentos de Graham. Apesar da utilidade da equação, ela foi recebida com muitas críticas. Uma das quais permanece até hoje é a suposição implícita de que  $k$  não depende da concentração e do seu gradiente. E também os experimentos de Graham e Fick se limitaram a fluidos, pois as medidas eram possíveis à temperatura ambiente.

No final do século XIX, William Chandler Roberts-Austen realizou uma série de experimentos de difusão com metais líquidos e sólidos [25]. Roberts-Austen utilizou a equação de Fick para analisar suas medidas, baseado na aparente possibilidade de que a equação de difusão para sais também seria válida para metais [26]. Ele utilizou a Eq.(4.2) com  $k$  expresso em  $cm^2/s$ .

Roberts-Austen calculou  $k$  através dos perfis de difusão, isto é, concentração por distância, utilizando as tabelas produzidas por Joseph Stefan. Stefan encontrou a solução para a equação da difusão de duas formas: através de uma série trigonométrica e uma função erro complementar  $\operatorname{erfc}(h/2(kt)^{\frac{1}{2}})$ . Através desses resultados ele obteve uma tabela numérica dos perfis de concentração para tubos, utilizando o parâmetro  $(h/2(kt)^{\frac{1}{2}})$ , na qual  $h$  é a espessura das camadas através das zonas de difusão. Os resultados para sistemas sólidos obtidos por Roberts-Austen são comparáveis a medidas modernas [25].

## 4.2 Movimento Browniano

O movimento de partículas suspensas em um fluido foi descoberto pelo botânico Robert Brown (1773-1858). Ele observou o movimento de pequenas partículas, extraídas de grãos de pólen, em fluidos [27]. Outros experimentos de Brown com partículas orgânicas e inorgânicas revelaram o aspecto genérico do movimento browniano da matéria.

Um estudo mais profundo do movimento browniano foi realizado posteriormente por Georges Gouy [24]. Ele utilizou diferentes partículas em diversos fluidos, e pode constatar que este movimento é independente de forças externas. Também percebeu que o movimento é mais intenso em líquidos menos viscosos.

A representação matemática do movimento browniano foi derivada por Albert Einstein. Ele foi o primeiro a compreender que a trajetória das partículas são tais que a quantidade básica do movimento não era a velocidade [28], mas sim o desvio quadrado médio, i.e.,  $\langle r^2(t) \rangle$ .

Einstein tomou o movimento browniano como um testemunho visível da teoria cinética molecular do calor[29]. Ele estudou as flutuações de sistemas termodinâmicos, que baseado na relação de Boltzmann para entropia, poderia determinar experimentalmente a constante de Boltzmann  $k_b$ , e por conseguinte, a constante de Avogadro. Tomando o movimento browniano como a representação dos movimentos moleculares, Einstein sugeriu que as leis aplicadas às moléculas de soluto também fossem aplicadas às partículas suspensas em um líquido. Um modelo não muito rigoroso, pois ele considerou que a força de arraste devido à viscosidade do fluido era balanceada pela pressão osmótica devido aos fluidos. Nesse estado estável, a relação para a difusividade para as moléculas de soluto, e por extensão, para as partículas suspensas no fluido é

$$D = \frac{RT}{N} \frac{1}{6\pi\eta\rho} \quad (4.4)$$

Na qual  $R$ ,  $N$ ,  $\eta$ ,  $\rho$ , são respectivamente a constante de um gás ideal, constante de Avogadro, viscosidade do solvente, e raio da partícula.

Einstein descreveu o movimento das partículas como independentes uma das outras, em posições sucessivas de intervalo  $\tau$ . O intervalo de tempo  $\tau$  é tão pequeno que o movimento de uma determinada partícula nesse intervalo é considerado mutuamente independente. E assumindo que o deslocamento  $\Delta$  da partícula, em um determinado tempo e em uma determinada direção, obedece a distribuição  $f(\Delta)$ , Einstein derivou uma equação para a distribuição das partículas no espaço como segue.

Considerando que  $dn$  seja o número de partículas que sofrem deslocamento  $\Delta_i$  no eixo das abscissas ( $x_i$ ) em um intervalo de tempo  $\tau$ . Então o número de partículas que sofrem um deslocamento  $\Delta + d\Delta$  pode ser expresso pela equação

$$dn = n f(\Delta) d\Delta, \quad (4.5)$$

com  $f(\Delta)$  normalizado como abaixo

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\Delta)d\Delta = 1. \quad (4.6)$$

Agora, tomando  $p(x, t)$  como o número de partículas por unidade de volume na posição  $x$  e no tempo  $t$ , e levando em conta as considerações anteriores, temos que

$$p(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x + \Delta, t)f(\Delta)d\Delta. \quad (4.7)$$

Expandindo o lado direito da equação acima em potências de  $\tau$ , e o lado esquerdo em potências de  $\Delta$ , obtemos

$$p(x, t) + \tau \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = p(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} f(\Delta)d\Delta + \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta f(\Delta)d\Delta + \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2!} f(\Delta)d\Delta \dots \quad (4.8)$$

Por último, condicionando  $f(\Delta)$  a ter paridade na sua simetria, i.e.,  $f(\Delta) = f(-\Delta)$ , os termos com derivadas de índice impar desaparecem, e também utilizando a Eq.(4.6), obtemos

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}, \quad (4.9)$$

com  $D$  definido por

$$D = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2} f(\Delta)d\Delta. \quad (4.10)$$

Podemos reconhecer facilmente que a equação acima é a mesma equação de difusão encontrada por Fick, sendo  $D$  o coeficiente de difusão.

Posteriormente, e por outros métodos, Marian Smoluchowsky e Paul Langevin [30,31], o primeiro independentemente, também conseguiram explicar o fenômeno, chegando a mesma equação que Einstein. Também dignos de nota são os experimentos realizados por Jean Perrin e seus alunos, que checaram a equação encontrada [24].

Com condições de bordas adequadas, Einstein chegou a uma solução gaussiana para a equação de difusão. Calculou também o desvio quadrado médio para a distribuição, e encontrou que ele variava linearmente com o tempo, isto é,  $\langle r^2(t) \rangle \approx t$ .

### 4.3 Difusão anômala

Na última seção vimos que Einstein calculou desvio quadrado médio de uma solução gaussiana e encontrou que  $\langle r^2(t) \rangle \approx t$ . Realmente, isso é uma característica inerente ao movimento browniano e, portanto, da equação de difusão usual. Entretanto, o comportamento de materiais difundidos no qual o desvio quadrado médio não dependa linearmente do tempo é denominado de anômalo.

A difusão anômala tem seu marco com o tratado sobre a difusão turbulenta realizado por Richardson, em 1926 [33]. Desde então, diversos pesquisadores, tanto teóricos quanto experimentais, realizaram estudos nessa área devido ao aspecto ubíquo deste fenômeno.

Podemos definir agora o comportamento difusivo através do desvio quadrado médio da seguinte forma

$$\langle r^2(t) \rangle \approx t^v. \quad (4.11)$$

Quando  $v < 1$  denominamos o processo de subdifusivo, para  $v > 1$ , superdifusivo, e escolhendo  $v = 1$  recuperamos a difusão usual.

As características dos sistemas que dão origem à difusão diferem em cada sistema. Por exemplo, difusão em meios não homogêneos e geometria fractal do sistema podem induzir este fenômeno. Essas características podem alterar apenas os coeficientes de transporte, ou alterar o comportamento do movimento browniano. No último efeito concentra-se a difusão anômala.

A forma usual do teorema do limite central pode falhar para processos difusivos anômalos. Isso vem do fato de que o movimento browniano está vinculado ao teorema. Um exemplo é a distribuição de Lévy, que pode divergir o primeiro e o segundo momento, e se apóia no teorema do limite central generalizado de Lévy-Gnedenko.

Existem diversas ferramentas que podem representar matematicamente o comportamento difusivo anômalo. Para uma distribuição de Lévy, por exemplo, podemos utilizar derivadas fracionárias na equação de difusão usual para obtermos esse efeito. E nesse sentido, restringimos agora nossa atenção a busca de soluções para equação de difusão.

### 4.4 Soluções para equação de difusão

Agora encontraremos algumas soluções para a equação de difusão aplicando-se os operadores (3.23) e (3.24) já apresentados anteriormente, que podemos definir na forma

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(\mathbf{r}, t) = D \tilde{\nabla}^2 \rho(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{r^{\alpha-1}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{\alpha-1} F(r) \rho(\mathbf{r}, t)), \quad (4.12)$$

na qual  $D$  é a constante de difusão, que nos casos analisados consideramos sem nenhuma dependência, e o último termo do lado direito representa a adição de uma força radial externa.

O três casos a serem analisados são: equação de difusão para partículas livres, na presença de uma força linear (potencial harmônico), e na presença de uma força coulombiana (potencial coulombiano).

### 4.4.1 Partícula livre

No caso de partículas livres, a força resultante aplicada no processo será nula, i.e.,  $F(r) = 0$ . Logo a Eq(4.12) tomará a forma

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(\mathbf{r}, t) = D \tilde{\nabla}^2 \rho(\mathbf{r}, t). \quad (4.13)$$

Para obtermos o propagador da equação acima, primeiramente aplicaremos a transformada de Laplace à equação, e assim obtemos

$$s^\gamma \rho(\mathbf{r}, s) - D \tilde{\nabla}^2 \rho(\mathbf{r}, s) = -s^{\gamma-1} \rho(\mathbf{r}, 0), \quad (4.14)$$

na qual o último termo representa a condição inicial arbitrária que pode ser normalizada.

Para evitar cálculos repetitivos, agora consideraremos somente a coordenada radial para todos os casos abordados, pois a incorporação da coordenada angular é iterativa, e já foi explicitada nos cálculos do capítulo anterior. Então, a função de Green para a última equação será

$$s^\gamma \mathcal{G}(r, r'; s) - D \tilde{\nabla}^2 \mathcal{G}(r, r'; s) = \frac{\delta(r - r')}{r^{\alpha-1}}. \quad (4.15)$$

E utilizando o propagador encontrado, podemos encontrar a solução da Eq.(4.14) através da operação

$$\rho(r, s) = s^{\gamma-1} \int_0^\infty dr r^{\alpha-1} \rho(r', 0) \mathcal{G}(r, r'; s). \quad (4.16)$$

Usando o mesmo procedimento da seção 3.4.1, através das autofunções relacionadas ao problema de Sturm-Liouville, utilizamos a transformada de Hankel que é dada pelas equações (3.30) e (3.31). Aplicando a transformada à Eq.(4.15), obtemos

$$\bar{\mathcal{G}}(p, r'; s) = \frac{\varphi(r', p)}{s^\gamma + D p^2}. \quad (4.17)$$

na qual  $\varphi(r, p) = r^{1-\alpha/2} J_\nu(pr)$ ,  $\nu = \alpha/2 - 1$ , e  $J_\nu(x)$  é a função de Bessel. E aplicando a transformada inversa de Laplace à última equação somos conduzidos à

$$\bar{\mathcal{G}}(p, r'; t) = t^{\gamma-1} \varphi(r', p) E_{\gamma, \gamma}(D p^2 t^\gamma), \quad (4.18)$$

na qual  $E_{\gamma, \gamma}(x)$  é a função de Mittag-Leffler generalizada definida pela Eq.(3.34).

A solução novamente se comporta de modo diferente da equação usual, e a tempos longos também decairá com uma lei de potência. De fato, no limite assintótico  $x \rightarrow \infty$  temos que  $E_{\bar{\alpha}, \beta}(x) \sim -1/(\Gamma(\beta - \bar{\alpha})x)$ .

Agora, utilizando a transformada dada pela Eq.(3.30), encontramos o propagador da Eq.(4.15), que é dado por

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = t^{\gamma-1} \int_0^\infty dp p \varphi(r', p) \varphi(r, p) E_{\gamma, \gamma}(Dt^\gamma). \quad (4.19)$$

E utilizando a função de Fox, dada pela Eq(3.36), para representar a função de Bessel e a função de Mittag-Leffler, e calculando a integral [22], escrevemos a Eq.(4.19) na seguinte forma

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(r, r'; t) &= 2t^{\gamma-1} (rr')^{1-\alpha/2} \cdot \\ &\cdot H_{2, [0:1], 0, [0:2]}^{1, 0, 1, 1, 1} \left[ \begin{array}{c} (r'/r)^2 \\ 4Dt^\gamma/r^2 \end{array} \left| \begin{array}{c} (\frac{2-\nu}{2}, 1); (\frac{2+\nu}{2}, 1) \\ -; (0, 1) \\ (-\frac{\nu}{2}, 1); (\frac{\nu}{2}, 1); (0, 1), (1-\gamma, \gamma) \end{array} \right. \right]. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Finalmente, utilizando a transformada inversa de Laplace, a solução da Eq(4.16) pode ser dada através da função de Green como segue,

$$\rho(r, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t \frac{d\bar{t}}{(t-\bar{t})^\gamma} \int_0^\infty dr r^{\alpha-1} \rho(r', 0) \mathcal{G}(r, r'; t). \quad (4.21)$$

#### 4.4.2 Força linear

Para o caso de uma força externa linear aplicada à equação, temos que  $F(r) = -kr$ . Portanto a Eq.(4.12) fica na forma

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(\mathbf{r}, t) = D \tilde{\nabla}^2 \rho(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{r^{\alpha-1}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{\alpha-1} kr \rho(\mathbf{r}, t)). \quad (4.22)$$

Utilizando novamente o método de separação de variáveis, obtemos para a componente radial

$$r \frac{\partial^2 \rho_1(r)}{\partial r^2} + \left( \alpha - 1 + \frac{kr^2}{D} \right) \frac{\partial \rho_1(r)}{\partial r} + \left( \frac{k\alpha - \lambda}{D} \right) \rho_1(r) = 0. \quad (4.23)$$

Agora, fazendo a substituição  $\rho_1(r) = e^{-\frac{kr^2}{2D}} \bar{\rho}_1(\frac{kr^2}{2D})$ , e  $x = \frac{kr^2}{2D}$ , obtemos

$$x \frac{\partial^2 \rho_1(r)}{\partial r^2} + \left( \frac{\alpha - 1}{2} + \frac{k^2}{2D^2} - x \right) \frac{\partial \rho_1(r)}{\partial r} + \left( \frac{k\alpha + \lambda}{2k} - \frac{\alpha - 1}{2} - \frac{k^2}{2D^2} \right) \rho_1(r) = 0, \quad (4.24)$$

que é facilmente reconhecida como a já mencionada equação diferencial de Laguerre associada. Portanto, as autofunções para a componente radial é dada por

$$\rho_1(r) = \varphi_n(r) , \quad (4.25)$$

com

$$\varphi_n(r) = e^{-\frac{kr^2}{2D}} L_n^{(\bar{\alpha})} \left( \frac{Kr^2}{2D} \right) \quad (4.26)$$

e

$$\bar{\mathcal{N}}_n^2 = \frac{\Gamma(1+n)}{\Gamma(n+\bar{\alpha}+1)} \left( \frac{2D}{k} \right)^{\frac{\alpha}{2}} . \quad (4.27)$$

Na qual  $n = \frac{k\alpha + \lambda_n}{2k} - \bar{\alpha} + 1$  e  $\bar{\alpha} = \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} + \frac{k^2}{2D^2}$ .

Para a componente temporal, a solução será dada pela equação

$$\frac{\partial^\gamma \psi_2(t)}{\partial t^\gamma} = \lambda_n \psi_2(t). \quad (4.28)$$

Aplicando a transformada de Laplace à última equação, e levando em conta os cálculos similares realizados no capítulo precedente, obtemos

$$\psi_2(t) = t^{\gamma-1} E_{\gamma,\gamma}(\lambda_n t^\gamma). \quad (4.29)$$

E portanto, a função de Green para a coordenada radial será

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = t^{\gamma-1} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(r') \varphi_n(r) E_{\gamma,\gamma}(\lambda_n t^\gamma) . \quad (4.30)$$

### 4.4.3 Força coulombiana

Para uma força externa coulombiana aplicada à equação, temos que  $F(r) = -\frac{K}{r}$ . Logo, a Eq.(4.12), toma a forma

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(\mathbf{r}, t) = D \tilde{\nabla}^2 \rho(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{r^{\alpha-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^{\alpha-1} \frac{K}{r} \rho(\mathbf{r}, t) \right). \quad (4.31)$$

Separando as variáveis, em um procedimento análogo ao anterior, chegamos à solução para a parte radial dada por

$$\rho_1(r) = \varphi_n(r) , \quad (4.32)$$

com

$$\varphi_n(r) = \overline{\mathcal{N}}_n r^{\frac{1}{2}(2-\frac{K}{D}-\alpha)} J_\nu \left( r \lambda_n^{\frac{1}{2}} \right), \quad (4.33)$$

e

$$\overline{\mathcal{N}}_n^2 = 2^{\frac{K}{D}+\frac{3}{2}-\frac{\alpha}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{\frac{K}{D}+\frac{3}{2}-\frac{\alpha}{2}}{2}\right) \Gamma\left(\frac{2\nu+\frac{K}{D}+\frac{3}{2}-\frac{\alpha}{2}}{2}\right)}{\lambda_n^{\frac{K}{D}-\frac{1}{2}-\frac{\alpha}{2}} \Gamma(\lambda_n) \Gamma\left(\frac{2\nu-\frac{K}{D}+\frac{1}{2}+\frac{\alpha}{2}}{2}\right)}. \quad (4.34)$$

Na qual  $\nu = \frac{1}{2}(\alpha - 2 - \frac{K}{D})$ .

Para coordenada temporal a solução é a mesma encontrada na Eq.(4.29). Logo, a função de Green da coordenada radial, para a equação de difusão com uma força externa coulombiana, será

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = t^{\gamma-1} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(r') \varphi_n(r) E_{\gamma, \gamma}(\lambda_n t^\gamma), \quad (4.35)$$

com os parâmetros definidos anteriormente.

# Capítulo 5

## Conclusão

Procurando solucionar as equações diferenciais não homogêneas que surgiram devido a modelagem dos fenômenos estudados, primeiramente apresentamos o formalismo das funções de Green, que mostrou-se útil para o escopo de nosso trabalho. Utilizando-se dessa ferramenta, encontramos as soluções para as equações consideradas. A abordagem através do método das funções de Green das equações não homogêneas adequou-se aos estudos realizados, pois, além da solução obtida, através do propagador podemos analisar a evolução da condição inicial.

Na sequência, abordamos brevemente a origem da equação de Schrödinger e, através do método apresentado, encontramos a solução para três tipos de potenciais: partícula livre, potencial harmônico, e potencial coulombiano.

Em seguida, delineamos o desenvolvimento da equação de difusão e definimos o comportamento anômalo. Por fim, encontramos a solução da equação de difusão para uma força nula, força linear, e força coulombiana atuando sobre as partículas.

Do ponto de vista matemático, conseguimos correlacionar o comportamento anômalo ao incorporarmos as derivadas fracionárias e o operador espacial de dimensão fracionária às equações propostas. Através dessa modelagem, encontramos um relaxamento anômalo governado por uma lei de potência e não por uma exponencial, que é um aspecto da função de Mittag-Leffler, cuja solução é típica do operador de derivada de índice fracionário no tempo.

As aplicações desses resultados a fenômenos naturais, assim como a incorporação de novos operadores, ou termos, às equações apresentadas, com o intuito de induzir o comportamento anômalo às equações, ficam como oportunidade para os desenvolvimentos que podem ser realizados *a posteriori*.

# Referências

- [1] CRANK, J. *The Mathematics of Diffusion*. 2 ed. Londres: Oxford University Press, 1975. 414 p.
- [2] HUH, D.; LEE, J.; LEE, S. Fractional Diffusion Equation Approach to the Anomalous Diffusion on Fractal Lattices. *Bulletin of the Korean Chemical Society*, v. 26, p. 1723-1727, 2005.
- [3] BRAULT, P. et al. Anomalous diffusion mediated by atom deposition into a porous substrate. *Physical Review Letters*, v. 102, n. 4, p. 045901, 2009.
- [4] LUEDTKE, W. D.; LANDMAN, U. Slip Diffusion and Lévy Flights of an Adsorbed Gold Nanocluster. *Physical Review Letters*, v. 82, n. 19, p. 3835-3838, 1999.
- [5] MANTEGNA, R.N.; STANLEY, H.E. Physics Investigation of Financial Markets. *The Physics of Complex Systems* [Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi" Course CXXXIV], v.134, p. 473-489, 1997.
- [6] WEEKS, E. R.; URBACH, J. S.; SWINNEY, H. L. Anomalous diffusion in asymmetric random walks with a quasi-geostrophic flow example. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, V. 97, n. 1-3, p. 291-310, 1996.
- [7] METZLER, R. et al. Fractional Model Equation for Anomalous Diffusion. *Physica A*, v. 211, n. 1, p. 13-24, 1994.
- [8] STILLINGER, F. H. Axiomatic basis for spaces with non integer dimension. *Journal of Mathematical Physics*, v. 18, n. 6, p. 1224-1234, 1977.
- [9] HELFAND, E.; STILLINGER, F. H. Critical Solution Behavior in a Binary Mixture of Gaussian Molecules. II. *Journal of Chemical Physics*, v. 49, n. 3, p. 1232, 1968.
- [10] PANDA, S.; PANDA, B. K. Charged-boson fluid at zero-temperature in the fractional dimensional space. *The European Physical Journal B*, v. 76, n. 2, p. 187-196, 2010.
- [11] AGRAWAL, O. P. Generalized Euler-Lagrange equations and transversality conditions for FVPs in terms of the caputo derivative. *Journal of Vibration and Control*, v. 13, n. 9-10, p. 1217-1237, 2007.
- [12] BALEANU, D.; GOLMANKHANEH, A. K.; GOLMANKHANEH, A. K. On electromagnetic field in fractional space. *Nonlinear Analysis: Real World Applications*, v. 11, n. 1, p. 288-292, 2010.
- [13] MUSLIH, S. I. Solutions of a Particle with Fractional delta-Potential in a Fractional Dimensional Space. *International Journal Theoretical Physics*, v. 49, n. 9, p. 2095-2104, 2010.
- [14] GREEN, G. *An Essay on the Application of mathematical Analysis to the theories of Electricity and Magnetism*. Nottingham, 1828.

- [15] WYLD, H.G. *Mathematical Methods for Physics*. Massachusetts: Perseus Books, 1999. 651 p.
- [16] BUTKOV, E. *Física Matemática*. Massachusetts: Addison Wesley, 1988.
- [17] BRAGA, C. L. R., *Notas de Física Matemática: equações diferenciais, funções de Green e distribuições*. São Paulo: Livraria da Física, 2006.
- [18] SCHIFF, L. *Quantum Mechanics*. Stanford: Mc-Graw Hill Book Company, 1949.
- [19] STILLINGER, F. H. Axiomatic basis for spaces with non integer dimension. *Journal of Mathematical Physics*, v. 18, n. 6, p. 1224-1234, 1977.
- [20] CAMARGO, R. F., CHIACCHIO A. O. OLIVEIRA E. C. *Funções de Mittag-Leffler: Teorema de Adição e Aplicações*. Campinas: Unicamp.
- [21] HILFER, R. *Applications of Fractional Calculus in Physics*, Singapore: World Scientific, 2000. 473 p.
- [22] NABER, M. Time fractional Schrödinger equation. *Journal of Mathematical Physics*, v. 45, n. 8, p. 3339, 2004.
- [23] GRADSHTEYN, I. S.; RYZHIK, I. M. *Table of Integrals, Series, and Products*. San Diego: Academic Press, 2007. 1220 p.
- [24] PHILIBERT, J. One and a half Century of Diffusion: Fick, Einstein, Before and Beyond. *Diffusion Fundamentals*, v. 4, p. 6.1-6.19, 2006.
- [25] ROBERTS-AUSTEN, W. C. Bakerian Lecture on the Diffusion in Metals. *Phil. Trans. Roy. Soc.*, v. A 187, p. 383, 1896.
- [26] PHILIBERT, J. One and a half Century of Diffusion: Fick, Einstein, Before and Beyond. *Diffusion Fundamentals*, v. 4, p. 6.1-6.19, 2006.
- [27] BROWN, R. A brief Account of Microscopical Observations made in the Months of June, July, and August, 1827, on the Particles contained in the Pollen of Plants; and on the general Existence of active Molecules in Organic and Inorganic Bodies. *Philosophical Magazine N. S.*, v. 4, p. 161-173, 1828.
- [28] SALINAS, S. R. A. Einstein e a teoria do movimento Browniano. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 27, p. 263-269, 2005.
- [29] EINSTEIN A. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. *Ann. Physik*, v. 17, p. 549-560, 1905.
- [30] SMOLUCHOWSKI, M. Sur le chemin moyen parcouru par les molécules d'un gaz et sur son rapport avec la théorie de la diffusion. *Bulletin International de l'Académie des Sciences de Cracovie*, p. 202-203, 1906.
- [31] LEMONS, D. S. ; GYTHIEL A. Paul Langevin's 1908 paper - On the theory of Brownian motion [Sur la théorie du mouvement brownien. *C. R. Acad. Sci. (Paris)*, v. 146, p. 530-533] *Am. J. Phys.*, v. 65, p. 1079, 1997.