UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica

STEFÂNIA JAROSZ

Introdução aos Potenciais Supersingulares e uma Generalização Fracionária para o Problema de Primeira Ordem

Campinas

2021

Stefânia Jarosz

Introdução aos Potenciais Supersingulares e uma Generalização Fracionária para o Problema de Primeira Ordem

Tese apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutora em Matemática Aplicada.

Orientador: Jayme Vaz Júnior

Este trabalho corresponde à versão final da Tese defendida pela aluna Stefânia Jarosz e orientada pelo Prof. Dr. Jayme Vaz Júnior.

Campinas

2021

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Ana Regina Machado - CRB 8/5467

Jarosz, Stefânia, 1986-
J291i Introdução aos potenciais supersingulares e uma generalização fracionária para o problema de primeira ordem / Stefânia Jarosz. – Campinas, SP : [s.n.], 2021.

Orientador: Jayme Vaz Júnior.
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Equação de Schrödinger. 2. Delta de Dirac. 3. Transformadas integrais. 4. Cálculo fracionário. I. Vaz Júnior, Jayme, 1964-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Introduction to supersingular potentials and a fractional generalization for the first ordem problem
Palavras-chave em inglês:
Schrödinger equation
Dirac delta
Integral transforms
Fractional calculus
Área de concentração: Matemática Aplicada
Titulação: Doutora em Matemática Aplicada
Banca examinadora:
Jayme Vaz Júnior [Orientador]
Edmundo Capelas de Oliveira
Roldão da Rocha Júnior
Alexys Bruno-Alfonso
Ervin Kaminski Lenzi
Data de defesa: 26-02-2021
Programa de Pós-Graduação: Matemática Aplicada

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)
- ORCID do autor: https://orcid.org/0000-0002-3493-6187
- Currículo Lattes do autor: http://lattes.cnpq.br/3925101235186352

Tese de Doutorado defendida em 26 de fevereiro de 2021 e aprovada pela banca examinadora composta pelos Profs. Drs.

Prof(a). Dr(a). JAYME VAZ JÚNIOR

Prof(a). Dr(a). EDMUNDO CAPELAS DE OLIVEIRA

Prof(a). Dr(a). ROLDÃO DA ROCHA JÚNIOR

Prof(a). Dr(a). ALEXYS BRUNO-ALFONSO

Prof(a). Dr(a). ERVIN KAMINSKI LENZI

A Ata da Defesa, assinada pelos membros da Comissão Examinadora, consta no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria de Pós-Graduação do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

Este trabalho é dedicado a todos os meus amigos e alunos:
os do passado, os do presente e os do futuro.

Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço aos meus pais por todo o amor, incentivo, companheirismo, compreensão, cuidado e apoio durante toda a minha vida e, em especial, nesses intensos anos do doutorado.

Em segundo lugar, agradeço ao Prof. Jayme Vaz, meu “pai acadêmico”. Após todos esses anos de tentativas, erros e acertos, frente à conclusão dos meus estudos de pós-graduação consigo perceber que sua atuação de fato corresponde à de um pai, provendo todo o suporte necessário para que eu conseguisse andar com meus próprios pés.

Agradeço também aos funcionários do IMECC, em especial aos da Secretaria de Pós-Graduação, por toda a assistência e gentileza com que sempre fui atendida. Aos professores Aurelio Ribeiro, Antônio Moretti, Marcelo Terra Cunha, Marcelo Firer e Alberto Saa pelas valiosas experiências profissionais pelas quais passei durante este período.

Aos colegas do Cálculo Fracionário, pelo acolhimento: professores Edmundo Capelas, Rubens Camargo, Junior Soares, José Vanterler, Ester Rosa, Graziane Sales, Daniela de Oliveira e Luverci do Nascimento.

Aos professores Ervin Lenzi, Alexys Bruno-alfonso e Roldão da Rocha por aceitarem compor minha banca de defesa e pelas valiosas contribuições a este trabalho.

À Silvana Terume, pela assistência psicológica durante o doutorado.

Dedico o agradecimento mais importante às pessoas que, além de meus pais, estiveram ao meu lado durante todos esses anos, em diferentes momentos. O lugar-comum nessas horas é dar um agradecimento geral para não “correr o risco de esquecer alguém”, mas faço questão de nomear *todos* os meus queridos amigos: Alysson Prado, Nelson Brasil, Paola Ferraz, Mai Fukuda, Marina Lima, Marina Vasques, Neimar Lopes, Tiago Yuzo, Wendel Mota, Thais Rangel, Luis Fernando Brandão, Bruno Ferreira, Felipe Silva, Ivan Nascimento, Felipe Felix, Fernanda Peteam, Caroline Campos, Gabriel Franco, Gislaine Queiroz, Anny Almeida, Eduardo Sato, Diego Scolfaro, Arthur Miranda e Jardel Vieira.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001, e do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) - Processo 142416/2017-7.

What would you think if I sang out of tune,
Would you stand up and walk out on me?
Lend me your ears and I'll sing you a song,
And I'll try not to sing out of key.
I'll get by with a little help from my friends,
I'll get high with a little help from my friends,
I'm gonna try with a little help from my friends,
(Lennon-McCartney, 1967)

Resumo

Neste trabalho, realizamos um estudo sistemático sobre os efeitos que potenciais envolvendo combinações entre a função delta de Dirac e suas derivadas podem produzir sobre as soluções da equação de Schrödinger unidimensional e independente do tempo. Partindo de uma nova abordagem para o problema do potencial delta na equação de Schrödinger, investigamos como derivadas de ordens mais altas podem afetar as soluções e sob quais condições elas podem ocorrer. Além disso, com base em estudos prévios a respeito da presença de funções delta na equação de Schrödinger fracionária, introduzimos um modelo que incorpora um termo contendo a derivada de primeira ordem da função delta ao potencial e apresentamos o aparato teórico necessário para a resolução da equação de Schrödinger fracionária.

Palavras-chave: equação de Schrödinger, função delta de Dirac, derivadas da função delta de Dirac, transformadas integrais, cálculo fracionário, equação de Schrödinger fracionária

Abstract

In this work, we present a systematic study on the effects of potentials involving a combination between a Dirac delta term and its derivatives of any order in the one-dimensional time independent Schrödinger equation. Starting from a brand new approach for the delta potential problem in the Schrödinger equation, we investigate how derivatives of higher order affects their solutions and under which conditions they can occur. Moreover, we based on previous studies about fractional delta potentials to introduce a new model which contains a delta prime term in the potential, together with all the necessary theoretical framework to solve the fractional Schrödinger equation.

Keywords: Schrödinger equation, Dirac delta function, Dirac delta function derivatives, integral transforms, fractional calculus, fractional Schrödinger equation

Lista de ilustrações

Lista de tabelas

Sumário

Introdução

O desenvolvimento da teoria quântica teve como um de seus primeiros objetivos a descrição do comportamento de átomos e moléculas. Ao postular sua equação de onda baseada no trabalho de de Broglie, Schrödinger considerou diversos problemas práticos: o átomo de hidrogênio simplificado (potencial de Coulomb), o oscilador harmônico, o rotor rígido e o efeito Stark. Modelos de grande importância, como o poço infinito de potencial (ou partícula na caixa) e o potencial delta de Dirac, apareceriam posteriormente. De fato, a utilização da função delta de Dirac para modelar diversos problemas da mecânica quântica pode ser considerada um tópico bem estabelecido na literatura (BELLONI; ROBINETT, 2014). O potencial delta de Dirac atrativo é um dos modelos mais amplamente utilizados no estudo de sistemas de estados ligados unidimensionais.

A introdução da função delta se deu, provavelmente, em 1822 por Fourier (FOURIER, 1829), embora Cauchy e outros estudiosos tenham utilizado descrições similares no mesmo período (CAUCHY, 1827; LÜTZEN, 2012). A primeira utilização da função delta sob perspectiva matemática com aplicação direta na física remonta a Helmholtz e Kirchhoff, por volta de 1882. Dez anos depois, Heaviside relacionou a série de Fourier à função delta e utilizou esse conceito em problemas físicos. Kirchhoff e Heaviside são, provavelmente, os primeiros a descrever matematicamente a função delta, porém foi Dirac quem acrescentou mais rigor à definição da função delta, em meados de 1926 e, a partir disso, obteve diversas relações, que utilizou para conduzir seus trabalhos em mecânica quântica. No início da década de 50, Schwartz publicou uma obra em dois volumes (SCHWARTZ, 1966) que trazia uma conceituação teórica ainda mais rigorosa, com destaque para a introdução do conceito de funções-teste.

A equação de Schrödinger com potencial delta atrativo é, possivelmente, o sistema quântico mais simples que apresenta tanto estado ligado quanto um conjunto de estados contínuos. Contudo, as funções delta têm se mostrado importantes para a modelagem de sistemas quânticos reais, que podem ser criados em laboratório. Alguns exemplos de modelos que utilizam potenciais delta estão relacionados a sistemas atômicos e moleculares (FROST, 1956; FROST, 1954; FROST; LELAND, 1956), retículos cristalinos de átomos (KRONIG; PENNEY, 1931) e espectroscopia de corantes alimentícios (KUHN, 1948).

Os potenciais supersingulares são definidos como potenciais que envolvem derivadas de segunda ordem ou maiores da função delta. A utilização de potenciais envolvendo a derivada da função delta tem sido tema de alguma controvérsia há algum tempo, uma vez que nas primeiras tentativas de solucionar problemas deste tipo a abordagem escolhida para resolução foi semelhante à utilizada na resolução do caso em que apenas a função delta está envolvida, ou seja, simplesmente separar o domínio em duas partes e resolver cada uma delas separadamente como um problema de partícula livre, para em seguida ligar as duas soluções através de condições de contorno. Posteriormente, verificou-se que essa abordagem leva a resultados imprecisos, ao passo que Kurasov (KURASOV, 1996) propõe uma teoria que estende o conceito de distribuições de modo a incorporar descontinuidades de salto no espaço de funções-teste utilizados para definir tais distribuições, de onde se segue o conceito de extensões auto-adjuntas, possibilitando assim obter um método que fornece soluções consistentes a este problema.

Na referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009), os autores abordam o problema do potencial contendo a derivada da função delta sob a perspectiva da teoria das extensões auto-adjuntas. Embora o desenvolvimento desta teoria tenha extrema importância para o melhor entendimento e consolidação do conceito de derivação de distribuições, observamos que em termos práticos ela não se mostra suficiente para a resolução de problemas que envolvam derivadas de ordens mais altas. Além disso, esta abordagem está relacionada a operadores diferenciais locais, o que inviabiliza o estudo do problema sob a perspectiva do cálculo fracionário, que é um dos objetos de estudo deste trabalho.

Uma vez que um dos objetivos deste trabalho é, efetivamente, encontrar soluções para a equação de Schrödinger *fracionária* com potenciais que envolvam derivadas da função delta, devemos utilizar alguma abordagem que seja de caráter *não-local*. Em trabalhos anteriores (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010; DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011; JAROSZ; VAZ Jr, 2016; JAROSZ, 2016), a metodologia das transformadas de Fourier se mostrou totalmente adequada a esse tipo de problema e, portanto, é a escolha óbvia.

Neste trabalho, estendemos o modelo estudado por Gadella et. al a partir de duas frentes: buscando soluções para os potenciais supersingulares, nos aprofundando no caso particular do potencial supersingular de segunda ordem; e, após uma breve revisão de alguns modelos fracionários para os potenciais delta, apresentamos um modelo para o potencial que contém a derivada da função delta, tendo como base a formulação da mecânica quântica fracionária introduzida por Laskin (LASKIN, 2000).

Assim, iniciamos o trabalho buscando soluções para potenciais supersingulares no espaço de momento e, utilizando o método das transformadas de Fourier, obtemos uma expressão fechada para a função de onda; especificando-se o problema de estados ligados obtemos a equação algébrica que determina os valores possíveis para a energia e, no caso do problema de espalhamento, expressões para os coeficientes de transmissão e reflexão. Em seguida, nos concentramos nos casos particulares $N \leqslant 2$, que nos permite verificar os resultados já conhecidos para os potenciais delta e sua derivada de primeira ordem, bem como conhecer o comportamento de sistemas cujo potencial apresenta um termo com derivada de segunda ordem da função delta, que se mostra bem mais complexo que os demais. Enquanto os potenciais da forma $V(x) = V_0\delta(x) + V_1\delta'(x)$ apresentam um único estado ligado, o caso $N = 2$ pode apresentar nenhum, apenas um ou dois estados ligados, a depender da relação entre as suas constantes de acoplamento. Além disso, os coeficientes de transmissão e reflexão também apresentam um comportamento menos previsível na presença de um termo $\delta''(x)$.

Estendemos também o estudo do potencial com derivada de primeira ordem apresentando uma generalização fracionária para o modelo. Seguindo a mesma abordagem feita no modelo fracionário para o potencial delta simples (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010), utilizamos a derivada fracionária de Riesz em substituição à derivada de primeira ordem. A teoria de distribuições baseada em funções-teste com uma possível descontinuidade, proposta por Kurasov (KURASOV, 1996), é levada em consideração para a resolução desta equação, acrescentando um maior nível de complexidade necessário para o correto tratamento do problema. O fato de estarmos lidando agora com distribuições baseadas em funções-testes com uma possível descontinuidade faz com que nos deparemos com integrais que podem apresentar divergências que, felizmente, são tratáveis pelo ponto de vista físico por meio de métodos de regularização (ZEIDLER, 2009). A introdução de derivadas de ordem não-inteira ao modelo produz alguns resultados interessantes, como por exemplo, o fenômeno de tunelamento em energia de ponto zero, observado no modelo fracionário com potencial delta simples (DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011), repete-se no nosso modelo. Além disso, obtemos também estados ligados em alguns casos que não são possíveis no caso de ordem inteira e também no potencial delta simples de ordem arbitrária, como por exemplo caso a constante de acoplamento que acompanha a função delta seja positiva ou até mesmo nula.

O trabalho está estruturado da seguinte maneira:

No primeiro capítulo, apresentamos uma breve introdução a conceitos importantes e históricos do cálculo fracionário, bem como a teoria relacionada que utilizaremos.

No segundo capítulo, discutimos a importância dos modelos de equações diferenciais fracionárias no estudo de fenômenos da ciência e engenharia.

No terceiro capítulo, introduzimos o conceito da função delta de Dirac e apresentamos a equação de Schrödinger para potenciais delta, com alguns resultados já consolidados na literatura e, em seguida, uma proposta de modelo para o problema dos potenciais supersingulares.

No quarto, apresentamos a equação de Schrödinger fracionária com potenciais delta, recordando os modelos de potencial delta simples já estudamos em trabalhos anteriores e introduzindo o modelo que envolve a derivada da função delta no termo de potencial.

Por fim, apresentamos algumas conclusões e perspectivas para trabalhos futuros.

Capítulo 1

Uma Breve Introdução ao Cálculo Fracionário

1.1 Um pouco de história

O conceito de diferenciação e integração de ordens não-inteiras não é, de forma alguma, novidade. O interesse pelo assunto surgiu praticamente ao mesmo tempo que as ideias do cálculo clássico - Leibniz o menciona em uma carta para L'Hospital em 1695, no que é considerado o primeiro registro do que ficaria conhecido como *cálculo fracionário* (OLDHAM; SPANIER, 2006). O termo "fracionário", embora impreciso, permanece até os dias atuais por razões históricas, embora a terminologia mais adequada seria "cálculo de ordens arbitrárias".

Acredita-se que os estudos mais primários sobre o tema tenham sido feitos entre o início e a metade do século XIX por Liouville (1832), Riemann (1853) e Holmgren (1864), embora Euler (1730) e Lagrange (1772), entre outros, tenham dado alguma atenção a este assunto ainda antes.

Liouville efetuou o primeiro estudo importante para fornecer uma definição lógica de uma derivada fracionária, através da expansão de funções em séries na forma

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k e^{a_k x}, \tag{1.1}$$

definindo a derivada de ordem α arbitrária utilizando uma expressão para derivar termo a termo como uma generalização para a derivada de ordem α "inteira", isto é,

$$D^{\alpha} f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k a_k^{\alpha} e^{a_k x}. \tag{1.2}$$

Riemann, por sua vez, propôs uma definição baseada na ideia de generalizar uma integral iterada, utilizando a função gama como uma generalização para o fatorial (VAZ Jr; DE OLIVEIRA, 2016a), isto é

$$\frac{d^{-\gamma}}{dx^{-\gamma}}u(x) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)}\int_c^x (x-k)^{\gamma-1}\,u(k)dk, \tag{1.3}$$

que hoje em dia é conhecida como integral fracionária de Riemann-Liouville.

Mais tarde, Grünwald e Krug seriam os primeiros a unificar os resultados de Liouville e Riemann: em 1867, insatisfeito com as restrições da abordagem de Liouville, Grünwald utilizou o limite de um quociente de diferenças até chegar a expressões que envolviam integrais definidas para propor a derivada de ordem α e, em seguida, apresentou uma ideia de derivada fracionária como o limite de uma soma:

$$D^{\alpha}f(x) = \lim_{h\to 0}\frac{1}{h^{\alpha}}\sum_{j=0}^{n}(-1)^j\frac{\Gamma(\alpha+1)\,f(x-jh)}{\Gamma(j+1)\,\Gamma(\alpha-j+1)}. \tag{1.4}$$

Em 1890, Krug utilizou a fórmula integral de Cauchy para derivadas para mostrar que a integral definida de Riemann deveria possuir um limite inferior finito, enquanto que a definição de Liouville deveria ter limite inferior de menos infinito.

Em paralelo a esses princípios de conceituação teórica, houve o desenvolvimento de aplicações do Cálculo Fracionário para diversos problemas. Pode-se dizer que a primeira dessas aplicações foi a descoberta de Abel, em 1823, de que a solução de uma equação integral para o problema da tautócrona poderia ser obtida através de uma transformação integral e escrita como uma semiderivada. Um grande estímulo para a utilização do Cálculo Fracionário para resolver problemas vem dos métodos simbólicos para a resolução de equações diferenciais lineares com coeficientes constantes, desenvolvidos por Boole em 1844, cuja ideia reside essencialmente na expansão de uma função arbitrária de um operador diferencial como uma série de potências e a solução de equações diferenciais a partir da inversão dessas séries.

O cálculo operacional desenvolvido por Heaviside no final do século XIX para resolver problemas de eletromagnetismo foi também um importante passo para a aplicação das derivadas generalizadas. Em 1920, ele introduziu a diferenciação fracionária em suas investigações em teoria de linhas de transmissão e, em 1936, Gemant estendeu este conceito para utilizar em problemas de elasticidade.

No século XX, a teoria e suas aplicações tiveram notáveis contribuições. Weyl (1917), Hardy (1917), Hardy e Littlewood (1925, 1928, 1932), Kober (1940) e Kuttner (1953) analisaram algumas propriedades especiais de funções integro-diferenciais de funções pertencentes a classes de Lebesgue e Lipschitz. Erdélyi (1939, 1940, 1954) e Osler (1970) apresentaram definições para operadores diferintegrais com respeito a funções arbitrárias e Post (1930) usou coeficientes diferenciais para definir diferenciação generalizada para operadores. Em 1949, Riesz desenvolveu uma teoria de integração fracionária para funções de múltiplas variáveis. Em 1964, Erdélyi aplicou o Cálculo Fracionário a equações integrais e em 1967 Higgins utilizou operadores fracionários integrais para resolver equações diferenciais. Em 1968, Oldham e Spanier publicam o primeiro trabalho sobre Cálculo Fracionário aplicado à Química (OLDHAM; SPANIER, 2006), abrindo caminho a aplicações em áreas correlatas, como reologia (SCOTT BLAIR; VEINOGLOU; CAFFYN, 1947; SHERMERGOR, 1966; SCOTT BLAIR, 1947), biologia quantitativa (IONESCU et al., 2017; MAGIN, 2010), eletroquímica (BELAVIN; NIGMATULLIN; LUTSKAYA, 1964; OLDHAM, 1969; OLDHAM; SPANIER, 1970), difusão (MAINARDI, 1996), teoria de transporte, probabilidade e estatística (KELBERT; LEONENKO; RUIZ-MEDINA, 2005), teoria do potencial e elasticidade (MAINARDI, 2010).

Entre o início da década de sessenta e o final da década de setenta, os avanços na área de computação ofereceram mais recursos para lidarmos com problemas cujos cálculos são mais trabalhosos e complexos e isso possibilitou manipular mais facilmente modelos matemáticos que envolvem cálculo fracionário e, deste modo, deu-se início a um crescimento considerável no volume de estudos realizados nesta área.

Embora a primeira tese de doutorado relacionada à area de CF seja geralmente atribuída a Bagley, sob a orientação de Torvik, em 1979 (BAGLEY, 1979), aplicações de CF a viscoelasticidade foram estudadas já nos trabalhados de doutorado de Rossikhin, sob a orientação de Meshkov, em 1970 (ROSSIKHIN, 1970), e de Mainardi, sob a orientação de Caputo, em 1971 (MAINARDI, 2012).

Em junho de 1974, é realizada a primeira conferência internacional sobre Cálculo Fracionário e suas aplicações na universidade de New Haven, nos Estados Unidos (ERDÉLYI, 1975). Em seguida, Oldham e Spanier publicam o primeiro livro dedicado exclusivamente a aplicações (OLDHAM; SPANIER, 2006).

Da década de 80 em diante, o Cálculo Fracionário se consolida sob várias frentes, tanto no campo teórico quanto no de aplicações. Novas conferências internacionais são realizadas e diversos livros exclusivamente dedicados à area são lançados, com destaque para as obras de Samko, Marichev e Kilbas (SAMKO; KILBAS; MARICHEV, 1987), e Miller e Ross (MILLER; ROSS, 1993). Em 1992, Caputo propõe uma mudança na definição para a derivada de ordem arbitrária proposta por ele mesmo em 1969, que admite condições de contorno que possuam sentido físico e preserva a propriedade de que a derivada de uma constante seja zero mesmo em ordens não-inteiras, o que pode não ser verdade em algumas definições de derivada fracionária, como a de Riemann-Liouville. Esta definição, conhecida como *derivada fracionária de Caputo*, é uma das mais definições mais importantes e difundidas, tendo inclusive um grande valor didático no ensino de cálculo fracionário.

Ao leitor interessado em conhecer mais detalhadamente as diversas definições de integrais e derivadas fracionárias, indicamos as referências (DE OLIVEIRA; MACHADO, 2014; CAMARGO; DE OLIVEIRA, 2015; OLDHAM; SPANIER, 2006). Além disso, em vista da grande quantidade de definições propostas para derivadas fracionárias, definiu-se um conjunto de critérios para verificar se uma dada definição pode ser realmente enquadrada como uma derivada fracionária (ORTIGUEIRA; MACHADO, 2015).

Este trabalho, em particular, baseia-se na formulação de mecânica quântica fracionária proposta por Laskin (LASKIN, 2000) a partir do conceito de integrais de trajetória[1], que conduz à equação de Schrödinger com ordens fracionárias na derivada temporal, dando sequência aos estudos já feitos nas referências (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010; DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011; JAROSZ, 2016; JAROSZ; VAZ Jr, 2016). A seguir, apresentamos as definições do referencial teórico que utilizaremos neste trabalho.

1.2 Transformadas Integrais

A utilização das chamadas *transformadas integrais* para a resolução de equações diferenciais consiste em transformar a equação dada em uma outra equação, em princípio mais simples, resolver esta equação e, finalmente, calcular a transformada inversa da solução transformada, obtendo assim a solução da equação original. Este método é bastante útil para obter soluções de equações diferenciais ordinárias ou parciais, principalmente para problemas envolvendo regiões que se estendam ao infinito. Em particular, as transformadas integrais se mostram bastante úteis em problemas de cálculo de ordem não-inteira, uma vez que os operadores diferenciais relacionados exigem o conhecimento de todo o seu domínio de definição em vez de apenas em uma vizinhança de ponto, isto, é lidamos com operadores *não-locais* (TARASOV, 2018).

As transformadas integrais mais utilizadas no Cálculo Fracionário são as transformadas de Fourier, de Laplace e de Mellin. No que se segue, estaremos sempre assumindo a existência das transformadas envolvidas na apresentação de suas propriedades.

1.2.1 Transformada de Fourier

Embora não exista uma maneira única de se definir o par de transformadas de Fourier, de forma geral, pode-se escrever o par de transformadas, para x, $k \in \mathbb{R}$ como (VAZ Jr; DE OLIVEIRA, 2016b):

[1] A formulação da mecânica quântica a partir de integrais de trajetória é examinada com mais detalhes na referência (JAROSZ, 2016)

$$F(k) = \mathcal{F}\left[f(x)\right] = \sqrt{\frac{|b|}{(2\pi)^{1-a}}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ibkx} dx, \tag{1.5}$$

$$f(x) = \mathcal{F}^{-1}\left[f(x)\right] = \sqrt{\frac{|b|}{(2\pi)^{1+a}}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{-ibkx} dx, \tag{1.6}$$

com a e b parâmetros arbitrários, de modo que $\mathcal{F}^{-1}\left[\mathcal{F}\left[f(x)\right]\right] = f(x)$.

Neste trabalho, escolheremos os valores de a e b de modo a obtermos os espaços conhecidos como *de posição* e *de momento*, dados por $a = 1$ e $b = 1/\hbar$, sendo $\hbar$ a constante de Planck reduzida, e $k = p$, uma vez que estudaremos modelos relacionados à mecânica quântica. Deste modo, utilizaremos a seguinte notação:

$$\phi(p) = \mathcal{F}[\psi] = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \psi(x)\, dx, \qquad \psi(x) = \mathcal{F}^{-1}[\phi] = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \phi(p)\, dp. \tag{1.7}$$

Listamos, a seguir, algumas propriedades importantes das transformadas de Fourier:

1. *Linearidade.* A transformada de Fourier é uma transformação linear, ou seja,

$$\mathcal{F}\left[a\psi(x) + b\varphi(x)\right] = a\mathcal{F}\left[\psi(x)\right] + b\mathcal{F}\left[\varphi(x)\right]. \tag{1.8}$$

2. *Deslocamento.* A translação de um espaço é equivalente à multiplicação por uma exponencial complexa no espaço recíproco, a saber:

$$\mathcal{F}\left[\psi(x-a)\right] = e^{-iax/\hbar}\phi(p), \tag{1.9}$$

$$\mathcal{F}\left[e^{i\alpha x/\hbar}\psi(x)\right] = \phi(p-\alpha), \tag{1.10}$$

para $a, \alpha \in \mathbb{R}$.

3. *Escala.* A dilatação de uma variável corresponde à contração na variável recíproca, ou seja,

$$\mathcal{F}\left[\psi(ct)\right] = \frac{1}{|c|}\phi\left(\frac{p}{c}\right), \tag{1.11}$$

para uma constante real $c \neq 0$.

4. *Derivada.* A derivação com relação a uma variável é equivalente à multiplicação pela outra variável (a menos de um fator i) no espaço recíproco:

$$\mathcal{F}\left[\psi'(x)\right] = -\frac{ip}{\hbar}\phi(p), \tag{1.12}$$

$$\mathcal{F}\left[x\psi(x)\right] = -i\hbar\phi'(p). \tag{1.13}$$

5. *Identidade de Parseval.* O produto escalar é preservado pela transformada de Fourier, isto é,
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\varphi(x)dx = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p)\zeta(p)dp, \tag{1.14}$$
sendo $\zeta(p) = \mathcal{F}\left[\varphi(x)\right]$.

6. *Teorema da convolução.* Seja o produto de convolução entre as funções $\psi(x)$ e $\varphi(x)$ definido por
$$\left(\psi \star \varphi\right)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t-\xi)g(\xi)d\xi \tag{1.15}$$
Segue-se então que
$$\mathcal{F}\left[\left(\psi \star \varphi\right)(x)\right] = \phi(p)\zeta(p), \tag{1.16}$$
$$\mathcal{F}\left[\psi(x)\varphi(x)\right] = \frac{1}{2\pi\hbar}\left(\phi \star \zeta\right)(p). \tag{1.17}$$

1.2.2 Transformada de Laplace

O par de transformadas de Laplace é definido por (VAZ Jr; DE OLIVEIRA, 2016b)
$$F(s) = \mathcal{L}\left[f(t)\right] = \int_{0}^{\infty} e^{-st} f(t)dt, \tag{1.18}$$
$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}\left[f(t)\right] = \frac{1}{2\pi i}\int_{\gamma - i\infty}^{\gamma + i\infty} e^{st} F(s)ds, \tag{1.19}$$
com a constante real γ no plano complexo escolhida de modo que a reta $\Re(z) = \gamma$ esteja à direita de todas as singularidades de $F(s)$. A seguir, listamos as propriedades mais importantes da transformada de Laplace:

1. *Linearidade.* Para as funções $f(t)$ e $g(t)$ e as constantes a e b, tem-se que:
$$\mathcal{L}\left[af(t) + bg(t)\right] = a\mathcal{L}\left[f(t)\right] + b\mathcal{L}\left[g(t)\right]. \tag{1.20}$$

2. *Deslocamento.* Para $a > 0$, tem-se que
$$\mathcal{L}\left[f(t-a)\right] = e^{-as}\mathcal{L}\left[f(t)\right]. \tag{1.21}$$

3. *Deslocamento de $F(s)$.* Para $\alpha \in \mathbb{C}$, temos
$$\mathcal{L}\left[e^{\alpha t} f(t)\right] = F(s-\alpha). \tag{1.22}$$

4. *Escala.* Para $c > 0$, temos
$$\mathcal{L}\left[f(ct)\right] = \frac{1}{c}F\left(\frac{s}{c}\right). \tag{1.23}$$

5. *Teorema do Valor inicial.* Se os limites existirem, tem-se que

$$\lim_{t\to 0} f(t) = \lim_{s\to\infty} sF(s). \tag{1.24}$$

6. *Teorema do valor final.* Se os limites existirem, tem-se que

$$\lim_{t\to\infty} f(t) = \lim_{s\to 0} sF(s). \tag{1.25}$$

7. *Teorema da convolução.* Seja o produto de convolução entre as funções $f(t)$ e $g(t)$ definido por

$$(f \star g)(t) = \int_0^t f(t-\tau)g(\tau)d\tau = \int_0^t f(\tau)g(t-\tau)d\tau. \tag{1.26}$$

Segue-se então que

$$\mathcal{L}\left[(f \star g)(t)\right] = \mathcal{L}\left[f(t)\right]\mathcal{L}\left[g(t)\right]. \tag{1.27}$$

1.2.3 Transformada de Mellin

Em analogia às transformadas de Laplace e de Fourier, podemos introduzir a transformada de Mellin através de um par de integrais, que chamamos de transformada de Mellin direta e a sua respectiva transformada de Mellin inversa. No caso particular de a função a ser transformada conter uma ou mais funções gama, vamos obter as chamadas integrais de Mellin-Barnes. Tais integrais desempenham um papel fundamental, em particular, no estudo das funções H de Fox que contém, como casos particulares, diversas funções especiais clássicas da Física-Matemática e os vários tipos de funções de Mittag-Leffler (COSTA et al., 2011).

O par de transformadas de Mellin é definido por (OBERHETTINGER, 1974; VAZ Jr; DE OLIVEIRA, 2016b)

$$\begin{aligned} f^*(z) &= \mathcal{M}\left[f(x)\right](z) = \int_0^\infty f(x)\, x^{z-1}\, dx, \\ f(x) &= \mathcal{M}^{-1}\left[f^*(z)\right](x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{C-i\infty}^{C+i\infty} f^*(z)\, x^{-z}\, dx, \end{aligned} \tag{1.28}$$

com o domínio de analiticidade de $f^*(z)$ delimitando uma região $\{z \in \mathbb{C} \mid a < Re(z) < b\}$, denominada *faixa fundamental* (ou *faixa de analiticidade*). A constante real C na expressão da transformada inversa é tomada de modo que $C \in (a,b)$ e, deste modo, garante-se que a função $f(x)$ seja recuperada.

Em particular, se $f^*(z)$ é dado em termos de funções gama, a transformada de Mellin inversa é chamada *integral de Mellin-Barnes*. A seguir, listamos algumas propriedades da transformada de Mellin que iremos utilizar nos nossos cálculos.

1. Para $a > 0$, temos

$$\mathcal{M}\left[f(ax)\right](z) = a^{-z}\mathcal{M}\left[f(x)\right](z). \tag{1.29}$$

Demonstração. Basta tomar a mudança de variáveis $y = ax$:

$$\mathcal{M}\left[f(ax)\right](z) = \int_0^\infty f(ax)\; x^{z-1}dx = a^{-z}\int_0^\infty f(y)\; y^{z-1}dz = a^{-z}\mathcal{M}\left[f(x)\right](z).$$

□

2. Para $-\pi < \theta \leqslant \pi$, temos

$$\mathcal{M}\left[f(e^{i\theta}x)\right](z) = e^{-i\theta z}\mathcal{M}\left[f(x)\right](z). \tag{1.30}$$

Demonstração. Tomando a mudança de variáveis $y = e^{i\theta}x$, obtemos:

$$\mathcal{M}\left[f(e^{i\theta}x)\right](z) = \int_0^\infty f(e^{i\theta}x)\; x^{z-1}dx = e^{-i\theta z}\int_C f(y)\; y^{z-1}dy.$$

Como a operação $z \mapsto ze^{i\theta}$ é uma rotação por um ângulo θ no plano complexo, o caminho C é o limite do caminho C_R, descrito na Figura 1, para $R \to \infty$.

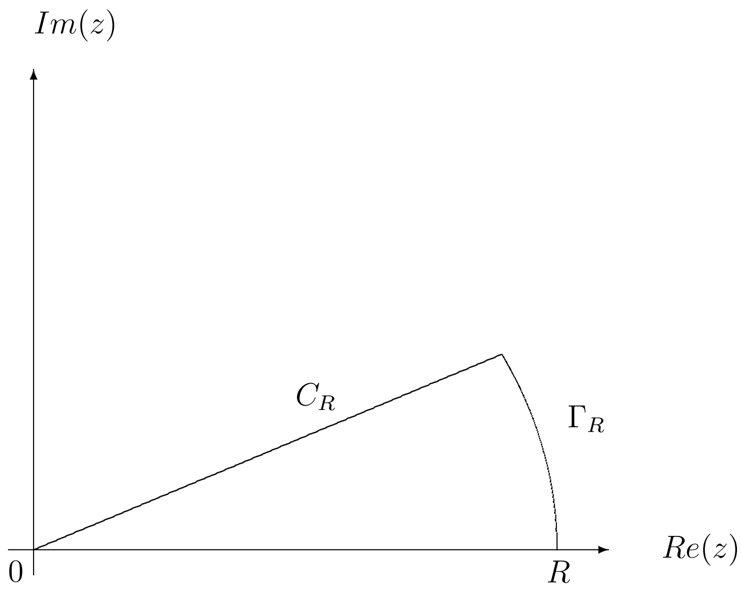


Figura 1 – Curva de integração C_R

Se $f(y)$ é analítica na região limitada pelas curvas C_R, Γ_R e o segmento de reta entre os pontos 0 e R, dadas pela Figura 1, temos:

$$0 = \oint f(y)\; y^{z-1}dy = \int_{C_R} f(y)\; y^{z-1}dy \; + \int_0^R f(y)\; y^{z-1}dy \; + \int_{\Gamma_R} f(y)\; y^{z-1}dy.$$

Na curva Γ_R, temos $y = Re^{i\theta}$ e $dy = Re^{i\theta} i\, d\theta$ e a integral sobre esta curva pode ser escrita como:

$$\int_{\Gamma_R} f(y) y^{z-1} dy = \int_{\Gamma_R} iRe^{i\theta} \left(Re^{i\theta}\right)^{z-1} f\left(Re^{i\theta}\right) d\theta = \int_{\Gamma_R} ie^{i\theta z} R^z\, f\left(Re^{i\theta}\right) d\theta,$$

e a assim, temos

$$\lim_{R\to\infty} \int_{\Gamma_R} f(y)\; y^{z-1} dy = 0,$$

se $\lim\limits_{R\to\infty} R^z\, f(R) = 0$. Partindo dessa hipótese, temos:

$$\int_C f(y)\; y^{z-1} dy = \int_0^\infty f(y)\; y^{z-1} dy, \tag{1.31}$$

e, portanto,

$$\mathcal{M}\left[f(xe^{i\theta})\right](z) = e^{-i\theta z} \mathcal{M}\left[f(x)\right](z), \tag{1.32}$$

ou ainda

$$\cos\theta z\; \mathcal{M}\left[f(x)\right](z) = \Re\left[\mathcal{M}\left[f(xe^{i\theta})\right](z)\right], \tag{1.33}$$

$$\operatorname{sen}\theta z\; \mathcal{M}\left[f(x)\right](z) = \Im\left[\mathcal{M}\left[f(xe^{i\theta})\right](z)\right]. \tag{1.34}$$

□

1.3 Função H de Fox

Definida por meio de transformadas de Mellin, a função de H de Fox foi introduzida na literatura como uma integral do tipo Mellin-Barnes (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010; DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011; GORENFLO A. A. KILBAS; ROGOSIN, 2014; MATHAI; SAXENA; HAUBOLD, 2009; KILBAS; SAIGO, 2004) e aparece frequentemente em soluções de equações diferenciais fracionárias.

Sejam m, n, p e q números inteiros e considere a seguinte função

$$\Lambda(s) = \frac{\prod_{k=1}^{m} \Gamma(b_k + \beta_k s) \prod_{j=1}^{n} \Gamma(1 - a_j - \alpha_j s)}{\prod_{k=m+1}^{q} \Gamma(1 - b_k - \beta_k s) \prod_{j=n+1}^{p} \Gamma(a_j + \alpha_j s)}, \tag{1.35}$$

com $1 \leqslant m \leqslant q$ e $0 \leqslant n \leqslant p$. Os coeficientes α_j e β_k são números reais positivos enquanto a_j e b_k são parâmetros complexos.

A função H de Fox, denotada por

$$H^{m,n}_{p,q}\left[x \;\middle|\; \begin{array}{c} (a_1,\alpha_1),\ldots,(a_p,\alpha_p) \\ (b_1,\beta_1),\ldots,(b_q,\beta_q) \end{array}\right] = H^{m,n}_{p,q}\left[x \;\middle|\; \begin{array}{c} (a_p,\alpha_p) \\ (b_q,\beta_q) \end{array}\right], \tag{1.36}$$

é definida por uma transformada inversa de Mellin, isto é,

$$H^{m,n}_{p,q}\left[x \;\middle|\; \begin{array}{c} (a_p,\alpha_p) \\ (b_q,\beta_q) \end{array}\right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{C-i\infty}^{C+i\infty} \Lambda(s) x^{-s} ds, \tag{1.37}$$

onde C define um contorno que separa os polos das $\Gamma(b_k+\beta_k s)$ dos polos de $\Gamma(1-a_j-\alpha_j s)$, $j=1,\ldots,n$, $k=1,\ldots,m$. Os parâmetros complexos a_j e b_k são tomados com a imposição de que os pólos não coincidam no integrando.

Há algumas propriedades interessantes associadas à função H de Fox. Consideremos as seguintes:

1. *Mudança de variável dependente.* Seja γ uma constante positiva. Temos então

$$H^{m,n}_{p,q}\left[x \left| \begin{array}{c}(a_p,\alpha_p)\\ (b_q,\beta_q)\end{array}\right.\right] = \gamma\, H^{m,n}_{p,q}\left[x^{\gamma} \left| \begin{array}{c}(a_p,\gamma\,\alpha_p)\\ (b_q,\gamma\,\beta_q)\end{array}\right.\right]. \tag{1.38}$$

Demonstração. Para mostrar que esta expressão é válida, introduzimos uma mudança de variáveis $s\mapsto \gamma s$ na integral da transformada inversa de Mellin:

$$\int_{C-i\infty}^{C+i\infty}\frac{\prod_{k=1}^{m}\Gamma(b_k+\beta_k s)\prod_{j=1}^{n}\Gamma(1-a_j-\alpha_j s)}{\prod_{k=m+1}^{q}\Gamma(1-b_k-\beta_k s)\prod_{j=n+1}^{p}\Gamma(a_j+\alpha_j s)}x^{-s}ds =$$

$$=\gamma\int_{\hat{C}-i\infty}^{\hat{C}+i\infty}\frac{\prod_{k=1}^{m}\Gamma(b_k+\gamma\beta_k s)\prod_{j=1}^{n}\Gamma(1-a_j-\gamma\alpha_j s)}{\prod_{k=m+1}^{q}\Gamma(1-b_k-\gamma\beta_k s)\prod_{j=n+1}^{p}\Gamma(a_j+\gamma\alpha_j s)}x^{-cs}ds\,,$$

com $\hat{C}=C/\gamma$. □

2. *Mudança do primeiro argumento.* Seja $\gamma\in\mathbb{R}$. Então podemos escrever:

$$x^{\gamma}H^{m,n}_{p,q}\left[x \left| \begin{array}{c}(a_p,\alpha_p)\\ (b_q,\beta_q)\end{array}\right.\right] = H^{m,n}_{p,q}\left[x \left| \begin{array}{c}(a_p+\gamma\alpha_p,\alpha_p)\\ (b_q+\gamma\beta_p,\beta_q)\end{array}\right.\right]. \tag{1.39}$$

Demonstração. Para mostrar que esta expressão é válida, introduzimos uma mudança de variáveis $s\mapsto s+\gamma$ na integral da transformada inversa de Mellin:

$$x^{\gamma}\int_{C-i\infty}^{C+i\infty}\frac{\prod_{k=1}^{m}\Gamma(b_k+\beta_k s)\prod_{j=1}^{n}\Gamma(1-a_j-\alpha_j s)}{\prod_{k=m+1}^{q}\Gamma(1-b_k-\beta_k s)\prod_{j=n+1}^{p}\Gamma(a_j+\alpha_j s)}x^{-s}ds =$$

$$=\int_{\hat{C}-i\infty}^{\hat{C}+i\infty}\frac{\prod_{k=1}^{m}\Gamma(b_k+\beta_k\,(s+\gamma))\prod_{j=1}^{n}\Gamma(1-a_j-\alpha_j\,(s+\gamma))}{\prod_{k=m+1}^{q}\Gamma(1-b_k-\beta_k\,(s+\gamma))\prod_{j=n+1}^{p}\Gamma(a_j+\alpha_j\,(s+\gamma))}x^{-s}ds\,.$$

com $\hat{C}=C-\gamma$. □

3. *Redução de ordem.* Se o primeiro fator, (a_1,α_1), é igual ao último, (b_q,β_q), temos:

$$H^{m,n}_{p,q}\left[x \left| \begin{array}{c}(a_1,\alpha_1),\ldots,(a_p,\alpha_p)\\ (b_1,\beta_1),\ldots,(b_{q-1},\beta_{q-1}),(a_1,\alpha_1)\end{array}\right.\right] = H^{p-1,q-1}_{m,n-1}\left[x \left| \begin{array}{c}(a_2,\alpha_2),\ldots,(a_p,\alpha_p)\\ (b_1,\beta_1),\ldots,(b_{q-1},\beta_{q-1})\end{array}\right.\right] \tag{1.40}$$

Demonstração. Da definição da função H de Fox, temos

$$\begin{aligned}\Lambda(s) &= \frac{\prod_{k=1}^{m}\Gamma(b_k+\beta_k s)\Gamma(1-a_1-\alpha_1 s)\prod_{j=2}^{n}\Gamma(1-a_j-\alpha_j s)}{\prod_{k=m+1}^{q-1}\Gamma(1-b_k-\beta_k s)\Gamma(1-a_1-\alpha_1 s)\prod_{j=n+1}^{p}\Gamma(a_j+\alpha_j s)}\\ &= \frac{\prod_{k=1}^{m}\Gamma(b_k+\beta_k s)\prod_{j=1}^{n-1}\Gamma(1-a_{j+1}-\alpha_{j+1} s)}{\prod_{k=m+1}^{q-1}\Gamma(1-b_k-\beta_k s)\prod_{j=n+1}^{p}\Gamma(a_j+\alpha_j s)}.\end{aligned}$$

□

4. *Deslocamento do último argumento.* Seja k um inteiro positivo. Tem-se que

$$\begin{aligned}&H_{p,q}^{m,n}\left[x\,\middle|\,\begin{matrix}(a_1,\alpha_1),\dots,(a_{p-1},\alpha_{p-1}),(c,\gamma)\\(b_1,\beta_1),\dots,(b_{q-1},\beta_{q-1}),(c,\gamma)\end{matrix}\right]=\\ &=(-1)^k H_{p,q}^{m,n}\left[x\,\middle|\,\begin{matrix}(a_1,\alpha_1),\dots,(a_{p-1},\alpha_{p-1}),(c+k,\gamma)\\(b_1,\beta_1),\dots,(b_{q-1},\beta_{q-1}),(c+k,\gamma)\end{matrix}\right].\end{aligned}\tag{1.41}$$

Demonstração. Utilizando a identidade $\operatorname{sen}(z+k\pi)=(-1)^k\operatorname{sen} z$ para $k\in\mathbb{Z}$, e a fórmula da reflexão da função gama, temos

$$\begin{aligned}\Lambda(s) &= \frac{\prod_{k=1}^{m}\Gamma(b_k+\beta_k s)\prod_{j=2}^{n}\Gamma(1-a_j-\alpha_j s)}{\prod_{k=m+1}^{q-1}\Gamma(1-b_k-\beta_k s)\prod_{j=n+1}^{p-1}\Gamma(a_j+\alpha_j s)\,\Gamma(c+\gamma s)\Gamma(1-c-\gamma s)}\\ &= \frac{(-1)^k\prod_{k=1}^{m}\Gamma(b_k+\beta_k s)\prod_{j=2}^{n}\Gamma(1-a_j-\alpha_j s)}{\prod_{k=m+1}^{q-1}\Gamma(1-b_k-\beta_k s)\prod_{j=n+1}^{p-1}\Gamma(a_j+\alpha_j s)\,\Gamma(c+k+\gamma s)\Gamma(1-c-k-\gamma s)}.\end{aligned}$$

□

5. *Expansões Assintóticas.* As expansões assintóticas para funções H de Fox foram estudadas nas referências (BRAAKSMA, 1964; KILBAS; SRIVASTAVA; TRUJILLO, 2006; MATHAI; SAXENA; HAUBOLD, 2009). Sejam Δ e Δ^* definidas por:

$$\Delta=\sum_{i=1}^{q}\beta_i-\sum_{i=1}^{p}\alpha_i,\quad \Delta^*=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i-\sum_{i=n+1}^{p}\alpha_i+\sum_{i=1}^{m}\beta_i-\sum_{i=m+1}^{q}\beta_i.\tag{1.42}$$

Se $\Delta>0$ e $\Delta^*>0$, temos

$$H_{p,q}^{m,n}\left[x\,\middle|\,\begin{matrix}(a_p,\alpha_p)\\(b_q,\beta_q)\end{matrix}\right]=\sum_{r=1}^{n}\left[h_r x^{(a_r-1)/\alpha_r}+o\left(x^{(a_r-1)/\alpha_r}\right)\right],\qquad |x|\to\infty,\tag{1.43}$$

com

$$h_r=\frac{1}{\alpha_r}\frac{\prod_{j=1}^{m}\Gamma\left(b_j+(1-a_r)\beta_j/\alpha_r\right)\prod_{j=1,j\neq r}^{n}\Gamma\left(1-a_j-(1-a_r)\alpha_j/\alpha_r\right)}{\prod_{j=n+1}^{p}\Gamma\left(a_j-(1-a_r)\alpha_j/\alpha_r\right)\prod_{j=m+1\neq r}^{q}\Gamma\left(1-b_j-(1-a_r)\beta_j/\alpha_r\right)}.\tag{1.44}$$

Se $\Delta > 0$ e $\Delta^* = 0$, temos

$$\begin{aligned} H^{m,n}_{p,q}\left[x \left| \begin{array}{c} (a_p, \alpha_p) \\ (b_q, \beta_q) \end{array} \right. \right] &= \sum_{r=1}^{n} \left[h_r x^{(a_r-1)/\alpha_r} + o\left(x^{(a_r-1)/\alpha_r} \right) \right] \\ &+ A x^{(\nu+1/2)/\Delta} \left(c_0 \exp\left[i(B + Cx^{1/\Delta}) \right] \right. \\ &\left. - d_0 \exp\left[-i(B + Cx^{1/\Delta}) \right] \right) + o\left(x^{(\nu+1/2)/|\Delta|} \right), \end{aligned} \tag{1.45}$$

para $|x| \to \infty$, e as constantes dadas por

$$\begin{aligned} c_0 &= (2\pi i)^{m+n-p} \exp\left[\pi i \left(\sum_{r=n+1}^{p} a_r - \sum_{j=1}^{m} b_j \right) \right], \\ d_0 &= (-2\pi i)^{m+n-p} \exp\left[-\pi i \left(\sum_{r=n+1}^{p} a_r - \sum_{j=1}^{m} b_j \right) \right], \\ A &= \frac{(2\pi)^{(p-q+1)/2}}{2\pi i \Delta} \Delta^{-\nu} \prod_{r=1}^{p} \alpha_r^{-a_r+1/2} \prod_{j=1}^{q} \beta_j^{b_j-1/2} \left(\frac{\Delta^\Delta}{\delta} \right)^{(\nu+1/2)/\Delta}, \\ B &= \frac{(2\nu+1)\pi}{4}, \qquad C = \left(\frac{\Delta^\Delta}{\delta} \right)^{1/\Delta}, \\ \delta &= \prod_{l=1}^{p} |\alpha_l|^{-\alpha_l} \prod_{j=1}^{q} |\beta_j|^{\beta_j}, \qquad \nu = \sum_{j=1}^{q} b_j - \sum_{j=1}^{p} a_j + \frac{p-q}{2}. \end{aligned} \tag{1.46}$$

1.4 Derivadas de Riemann-Liouville e Caputo

A definição de Riemann-Liouville baseia-se no fato de que a derivação é uma operação inversa à integração e na lei dos expoentes (CAMARGO; DE OLIVEIRA, 2015). De acordo com esta abordagem, a noção de integral fracionária é uma consequência natural da fórmula bem-conhecida que reduz o cálculo da primeira primitiva de uma função integrável $f(t)$ para uma única integral do tipo convolução. Partindo do resultado válido para a integral iterada (HILFER, 2000),

$$I^n f(t) = \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} f(t_n)\, dt_n \dots dt_2\, dt_1 = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^t f(\tau)(t-\tau)^{n-1}\, d\tau, \tag{1.47}$$

definimos a *integral fracionária de ordem* $\alpha > 0$ por

$$I^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{1-\alpha}}\, d\tau, \tag{1.48}$$

para $t > 0$.

A *derivada fracionária de Riemann-Liouville* de ordem $\alpha > 0$ é definida por

$$D^\alpha f(t) = \frac{d^n}{dt^n} I^{n-\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \int_0^t \frac{f(t)}{(t-\tau)^{\alpha-n+1}}\, d\tau, \tag{1.49}$$

com $n = [\mathcal{R}(\alpha)] + 1$ e $t > 0$, sendo $[\mathcal{R}(\alpha)]$ a parte inteira de $\mathcal{R}(\alpha)$.

Definindo operador identidade como $D^0 = J^0 \equiv I$, segue-se que $D^\alpha J^\alpha = I$. para $\alpha \geqslant 0$, e

$$D^\alpha\, t^\gamma = \frac{\Gamma(\gamma+1)}{\Gamma(\gamma+1-\alpha)}\, t^{\gamma-\alpha}, \qquad \alpha > 0,\ \gamma > -1,\ t > 0. \tag{1.50}$$

Essas propriedades são uma generalização natural para aquelas conhecidas de ordem inteira. Note o fato interessante de que a derivada fracionária $D^\alpha f$ **não é zero** para a função constante $f(t) \equiv 1$ se $\alpha \notin \mathbb{N}$: tomando $\gamma = 0$ em (1.50), vemos que:

$$D^\alpha\, 1 = \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}, \quad \alpha > 0, t > 0. \tag{1.51}$$

Para $\alpha = n \in \mathbb{N}$, tem-se que $D^n\, 1 =$ pois $1 - n$ são polos da função gama.

A definição de Caputo, por sua vez, foi desenvolvida com base na definição de Riemann Liouville, porém com adaptações para evitar a derivada não nula e condições iniciais que não possuam interpretação física (CAMARGO; DE OLIVEIRA, 2015). Assim, a *derivada fracionária de Caputo*, de ordem $\alpha > 0$ é dada pela inversão na ordem da integração com a derivação:

$$_C D^\alpha f(t) = I^{n-\alpha} \frac{d^n}{dt^n} f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^t \frac{f^{(n)}(\tau)}{(t-\tau)^{1+\alpha-n}}\, d\tau, n = [\mathcal{R}(\alpha)] + 1. \tag{1.52}$$

As definições de Riemann-Liouville e Caputo se relacionam por

$$_C D^\alpha f(t) = D^\alpha f(t) \; - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(0)}{\Gamma(k-\alpha+1)}\, t^{k-\alpha}. \tag{1.53}$$

A definição de Caputo, portanto, incorpora os valores iniciais da função e de suas derivadas inteiras de ordens mais baixas. De acordo com essa definição, a propriedade relevante de que a derivada fracionária de uma constante seja zero, isto é, $_C D^\alpha 1 \equiv 0$, pode ser facilmente deduzida.

1.5 Derivadas de Riesz e Riesz-Feller

Para introduzir a derivada fracionária de Riesz, consideraremos uma integral fracionária conhecida como *potencial de Riesz* (HILFER, 2000; DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010). Para $0 < \alpha < 1$, o *potencial de Riesz* de ordem α de f é dado por

$$R^\alpha f(x) = \frac{1}{2\Gamma(\alpha)\cos(\alpha\pi/2)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(u)}{|x-u|^{1-\alpha}}\, du \tag{1.54}$$

e o seu *potencial de Riesz conjugado* de ordem α de f é dado por

$$\tilde{R}^\alpha f(x) = \frac{1}{2\Gamma(\alpha)\,\mathrm{sen}\,(\alpha\pi/2)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{sgn}(x-u) f(u)}{|x-u|^{1-\alpha}}\, du. \tag{1.55}$$

Suponhamos que $f(x)$ satisfaça às condições apropriadas para garantir a existência desses operadores (veja a referência (RIESZ, 1939)). Como esses potenciais são escritos em termos de convoluções, suas transformadas de Fourier podem ser calculadas facilmente. Primeiramente, notemos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{|x|^{1-\alpha}}\, dx = 2\,|k|^{-\alpha}\,\Gamma(\alpha)\cos\frac{\pi\alpha}{2}, \tag{1.56}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}\operatorname{sgn}(x)}{|x|^{1-\alpha}}\, dx = -2i\,|k|^{-\alpha}\,\Gamma(\alpha)\operatorname{sen}\frac{\pi\alpha}{2}\operatorname{sgn}(k). \tag{1.57}$$

Definindo o par de transformadas de Fourier como

$$\hat{f}(k) = \mathcal{F}\left[f(x)\right](k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} f(x)\, dx, \tag{1.58}$$

$$f(x) = \mathcal{F}^{-1}\left[\hat{f}(k)\right](x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx}\hat{f}(k)\, dk, \tag{1.59}$$

segue do teorema da convolução que

$$\mathcal{F}\left[R^{\alpha}f(x)\right] = |k|^{-\alpha}\,\hat{f}(k), \qquad \mathcal{F}\left[\tilde{R}^{\alpha}f(x)\right] = -i\operatorname{sgn}(k)\,|k|^{-\alpha}\,\hat{f}(k). \tag{1.60}$$

Deste modo, temos

$$\mathcal{F}\left[\frac{d}{dx}\tilde{R}^{1-\alpha}f(x)\right] = ik\mathcal{F}\left[\tilde{R}^{1-\alpha}f(x)\right] = |k|^{\alpha}\,\hat{f}(k), \tag{1.61}$$

$$\mathcal{F}\left[\frac{d^2}{d^2x}R^{2-\alpha}f(x)\right] = -k^2\mathcal{F}\left[R^{2-\alpha}f(x)\right] = -\,|k|^{\alpha}\,\hat{f}(k). \tag{1.62}$$

A *derivada fracionária de Riesz* de ordem α, denotada por $(-\Delta)^{\alpha/2}$, é definida considerando a generalização da transformada de Fourier da derivada, sendo então dada, se $0 < \alpha \leqslant 1$, pelo potencial de Riesz conjugado,

$$(-\Delta)^{\alpha/2} f(x) = \frac{d}{dx}\tilde{R}^{1-\alpha}f(x), \tag{1.63}$$

e, se $1 < \alpha \leqslant 2$, pelo potencial de Riesz,

$$(-\Delta)^{\alpha/2} f(x) = -\frac{d^2}{dx^2}R^{2-\alpha}f(x). \tag{1.64}$$

Uma outra maneira de definir a derivada fracionária no sentido de Riesz utiliza as derivadas fracionárias no sentido de Weyl. A derivada de Riesz fica então definida pela expressão (CAMARGO; DE OLIVEIRA, 2015; DE OLIVEIRA; MACHADO, 2014)

$$(-\Delta)^{\alpha/2} f(x) = \frac{D_{+}^{\alpha}f(x) + D_{-}^{\alpha}f(x)}{2\cos\left(\pi\alpha/2\right)}, \tag{1.65}$$

para $\alpha \neq 1$, onde D_+^α e D_-^α são as derivadas fracionárias de Weyl (HILFER, 2000) à direita e à esquerda, respectivamente, de ordem α, dadas por

$$D_+^\alpha f(x) = \left(\frac{d}{dx}\right)^n I_+^{n-\alpha} f(x), \qquad D_-^\alpha f(x) = \left(-\frac{d}{dx}\right)^n I_-^{n-\alpha} f(x), \tag{1.66}$$

com $n \in \mathbb{N}$ tal que $n-1 < \alpha < n$ e I_+^α e I_-^α são, respectivamente, as integrais fracionárias à direita e à esquerda de Weyl de ordem $\alpha > 0$, dadas por

$$I_+^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_{-\infty}^x (x-\xi)^{\alpha-1} f(\xi)\, d\xi, \qquad I_-^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^\infty (\xi - x)^{\alpha-1} f(\xi)\, d\xi. \tag{1.67}$$

Esta representação não é válida para $\alpha = 1$, que neste caso é dada por uma transformada de Hilbert (CAMARGO; DE OLIVEIRA, 2015), isto é,

$$(-\Delta)^{1/2} f(x) = \frac{d}{dx} H\left[f(x)\right] = \frac{d}{dx}\left[\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\xi)}{\xi - x} d\xi\right], \tag{1.68}$$

com a integral devendo ser considerada no sentido do valor principal de Cauchy.

A derivada de Riesz-Feller, por sua vez, além da ordem não-inteira considera também uma assimetria (AL-SAQABI; BOYADJIEV; LUCHKO, 2013; MAINARDI; LUCHKO; PAGNINI, 2007). Denotada por D_θ^α, a *derivada fracionária de Riesz-Feller* de ordem α e assimetria θ é definida, a partir de sua transformada de Fourier, por

$$\mathcal{F}\left[D_\theta^\alpha f(x)\right](k) = -\left|k\right|^\alpha e^{i\ \mathrm{sgn}(k)\ \theta\pi/2} \hat{f}(k), \tag{1.69}$$

com $0 < \alpha \leqslant 2$, $|\theta| \leqslant \min\{\alpha, 2-\alpha\}$, e $\mathrm{sgn}(k)$ é a função sinal. Esta definição leva à representação integral, para $\alpha \neq 1$, dada por

$$D_\theta^\alpha f(x) = -\left(c_+ D_+^\alpha + c_- D_-^\alpha\right) f(x), \tag{1.70}$$

com os coeficientes c_+ e c_- dados por

$$c_\pm = \frac{\operatorname{sen}\left(\alpha \pm \theta\right)\pi/2}{\operatorname{sen}\alpha\pi}, \tag{1.71}$$

e D_+^α e D_-^α são as derivadas fracionárias de Weyl à direita e à esquerda, respectivamente, de ordem α, dadas por (1.66). Esta representação não é válida para $\alpha = 1$, que neste caso é dada por (AL-SAQABI; BOYADJIEV; LUCHKO, 2013)

$$D_\theta^1 f(x) = \left[\cos\left(\theta\pi/2\right) D_0^1 - \operatorname{sen}\left(\theta\pi/2\right)\frac{d}{dx}\right],$$

com o operador D_0^1 dado por (1.68).

A definição de Riesz-Feller pode ser entendida como um generalização para a derivada fracionária de Riesz, obtida tomando a assimetria como $\theta = 0$.

Utilizaremos, neste trabalho, as chamadas derivadas *quânticas* de Riesz e Riesz-Feller (AL-SAQABI; BOYADJIEV; LUCHKO, 2013). As derivadas quânticas diferem das derivadas convencionais de Riesz e Riesz-Feller apenas pelo sinal. Daqui para a frente, as notações $(-\Delta)^{\alpha/2}$ e D_θ^α devem ser entendidas como as derivadas **quânticas** de Riesz e Riesz-Feller, respectivamente.

Além disso, nesta seção, introduzimos as definições para as derivadas de Riesz e Riesz-Feller utilizando uma definição para a transformada de Fourier com que $a = b = 1$ nas expressões (1.5). No entanto, os resultados obtidos são equivalentes através da transformação de variáveis dadas por $k = p/\hbar$.

Capítulo 2

Equações Diferenciais Fracionárias

O estudo da natureza pelo ponto de vista da ciência baseia-se, predominantemente, na construção de modelos que, por sua vez, podem ser de natureza fenomenológica ou baseada em teorias (PODLUBNY, 1998); no caso da física, em particular, esse modelos são desenhados utilizando linguagem matemática. O grande sucesso alcançado na aplicação de modelos envolvendo cálculo diferencial e integral na modelagem do movimento de corpos celestiais fez com que o cálculo se tornasse a ferramenta mais importante para modelar fenômenos físicos. Contudo, embora seja uma ferramenta bastante poderosa, pode haver situações em que a modelagem de certos processos não é descrita de modo totalmente satisfatório apenas utilizando derivadas e integrais de ordem inteira e generalizações por meio do cálculo fracionário se mostram bastante úteis nesses casos. Alguns exemplos de aplicações interessantes são a modelagem de processos como difusão anômala (EVANGELISTA; LENZI, 2018; HILFER, 2000; DIETHELM, 2010; ORTIGUEIRA, 2011; HERRMANN, 2014; ATANACKOVIĆ et al., 2014; FALLAHGOUL; FOCARDI; FABOZZI, 2016), dissipação (GAUL; KLEIN; KEMPLE, 1991; RYABOV; PUZENKO, 2002; TOFIGHI, 2003; NABER, 2010), relaxação (MAINARDI, 2010; MAINARDI, 1996; DE OLIVEIRA; MAINARDI; VAZ Jr, 2014), teoria de controle (TEOLJAKOV, 2017; PODLUBNY, 1999; MACHADO, 2013; SHAH; AGASHE, 2016), e também a formulação de versões fracionárias para teorias físicas (SANDEV; TOMOVSKI, 2019) como, por exemplo, mecânica quântica fracionária (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010; JAROSZ; VAZ Jr, 2016; DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011; KONDEJ; VAZ Jr, 2012).

Neste capítulo, apresentamos alguns modelos que utilizam derivadas fracionárias em sua formulação e discutimos algumas características e limitações quando à sua utilização.

2.1 Relaxação Fracionária

Um processo de relaxação é uma resposta de um sistema a uma perturbação externa. Processos de relaxação são muito importantes em diversas áreas da física, como por exemplo, ressonância magnética, relaxação de energia vibracional, relaxação dielétrica e relaxação estrutural (DE OLIVEIRA; JAROSZ; VAZ Jr, 2018).

O modelo mais simples de relaxação fracionária é dado por

$$f'(t) = -\tau^{-1} f(t), \tag{2.1}$$

com $t > 0$ e τ constante (conhecida como tempo de relaxação), e sua solução é dada por

$$f(t) = f(0) \exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{\alpha}\right]. \tag{2.2}$$

Uma maneira de generalizar esta equação utilizando cálculo fracionário é

$${}_C D^{\alpha} f(t) = -\tau^{-\alpha} f(t), \tag{2.3}$$

com a derivada fracionária de Caputo de ordem $0 < \alpha \leqslant 1$, definida pela equação (1.52), na Seção 1.4.

Aplicando transformada de Laplace a esta equação, obtemos

$$F(s) = \frac{s^{\alpha-1}}{s^{\alpha} + \tau^{-\alpha}} = \frac{s^{-1}}{1 + (\tau s)^{-\alpha}}, \tag{2.4}$$

e, após aplicar a transformada de Laplace inversa, obtemos (DE OLIVEIRA; JAROSZ; VAZ Jr, 2018) a solução

$$f(t) = f(0) E_{\alpha}\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{\alpha}\right], \tag{2.5}$$

sendo $E_{\alpha}(.)$ a função de Mittag-Leffler (GORENFLO A. A. KILBAS; ROGOSIN, 2014),

$$E_{\alpha}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(ak+1)}. \tag{2.6}$$

Tomando $\alpha = 1$ na solução (2.5), recuperamos a solução dada por (2.2).

Na referência (DE OLIVEIRA; MAINARDI; VAZ Jr, 2014), os autores estudam um modelo ainda mais generalizado:

$${}_C D^{\alpha} f(t) = -\lambda t^{\beta} \tau^{-\alpha} f(t), \tag{2.7}$$

com $\lambda > 0$, $0 < \alpha \leqslant 1$, $-\alpha < \beta \leqslant 1 - \alpha$, e a condição inicial $f(0) = f_0 > 0$, cuja solução é dada por

$$f(t) = f_0 E_{\alpha, 1+\beta/\alpha, \beta/\alpha}\left(-\lambda t^{\alpha+\beta}\right), \tag{2.8}$$

com a função $E_{a,m,l}(.)$ definida por (KILBAS; SAIGO, 2004)

$$E_{a,m,l}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n, \qquad c_n = \prod_{i=0}^{n-1} \frac{\Gamma\left[a(im+l)+1\right]}{\Gamma\left[a(im+l+1)+1\right]}, \tag{2.9}$$

e $\alpha > 0$, $m > 0$ e $\alpha(im+l) \neq -1, -2, -3, \ldots$.

Tomando $\beta = 0$ em (2.8), obtemos $f(t) = f_0 E_{\alpha,1,1}(\lambda t^\alpha) = f_0 E_\alpha(-\lambda t^\alpha)$, ou seja, recuperamos a solução (2.5). Tomando $\alpha = 1$, obtemos uma exponencial esticada (ELTON, 2018), dada por

$$\begin{aligned} f(t) = f_0 E_{1,1+\beta,\beta}(-\lambda t^{\beta+1}) &= f_0 \sum_{n=0}^{\infty} (-\lambda t^{\beta+1})^n \prod_{i-0}^{n-1} \frac{1}{(1+\beta)(1+i)} \\ &= f_0 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-\lambda t^{\beta+1}}{1+\beta} \right)^n \frac{1}{n!} = f_0 \exp\left(\frac{-\lambda t^{\beta+1}}{1+\beta} \right). \end{aligned} \tag{2.10}$$

2.2 Oscilador harmônico fracionário

O oscilador harmônico simples é descrito pela EDO de segunda ordem:

$$mx''(t) + kx(t) = 0, \tag{2.11}$$

cuja solução é dada por

$$x(t) = x(0) \cos \omega t + \frac{x'(0)}{\omega} \operatorname{sen} \omega t, \tag{2.12}$$

com $\omega^2 = k/m$. Na presença de forças de atrito, temos o oscilador amortecido, que é descrito com a adição de um termo de primeira ordem à equação do oscilador harmônico simples:

$$mx''(t) + bx'(t) + kx(t) = 0, \tag{2.13}$$

com $m > 0$ e $k \in \mathbb{R}$.

A solução da equação (2.13) depende da relação entre m, b e k:

1. **Sub-amortecido**: $b^2 < 4mk$.

$$x(t) = e^{-bt/2m} \left(x_0 \cos \omega_1 t - v_1 \operatorname{sen} \omega_1 t \right), \tag{2.14}$$

   com $\omega_1 = \sqrt{4mk - b^2}/2m$, $x_0 = x(0)$ e $v_1 = (b/\omega_1)x(0) + x'(0)$.

2. **Super amortecido**: $b^2 > 4mk$.

$$x(t) = e^{-bt/2m} \left(x_0 \cosh \omega_2 t + v_2 \operatorname{senh} \omega_2 t \right), \tag{2.15}$$

   com $\omega_2 = \sqrt{b^2 - 4mk}/2m$, e $v_2 = (b/\omega_2)x(0) + x'(0)$.

3. **Criticamente amortecido**: $b^2 = 4mk$.

$$x(t) = e^{-bt/2m} \left(x_0 + x_1 t \right), \tag{2.16}$$

   com $x_1 = x'(0) + b/2m$.

O oscilador harmônico fracionário é um dos principais casos ilustrativos de aplicação do cálculo fracionário a modelos físicos. O modelo mais conhecido para o oscilador harmônico fracionário é dado pela substituição da derivada de segunda ordem na equação (2.11) por uma derivada de Caputo de ordem $1 < \alpha \leqslant 2$:

$$m^C D_t^\alpha x(t) + kx(t) = 0. \tag{2.17}$$

Aplicando transformada de Laplace à equação, obtemos

$$X(s) = \frac{x(0)\, s^{-1} + x'(0)\, s^{-2}}{1 + \omega^\alpha s^{-\alpha}}. \tag{2.18}$$

Após aplicar a transformada de Laplace inversa, obtemos uma solução geral em termos de funções de Mittag-Leffler de dois parâmetros,

$$x(t) = x(0)\, E_{\alpha,1}(-\omega^\alpha t^\alpha) + x'(0)\, tE_{\alpha,2}(-\omega^\alpha t^\alpha). \tag{2.19}$$

A Figura 2 nos permite observar que a solução dada por (2.19) apresenta um comportamento muito interessante: para $\alpha = 2$, recupera-se a solução do oscilador harmônico simples da equação (2.12); para $1 < \alpha < 2$, entretanto, observa-se que as soluções apresentam comportamento similar ao oscilador amortecido, com este amortecimento se intensificando conforme α se aproxima de 1.

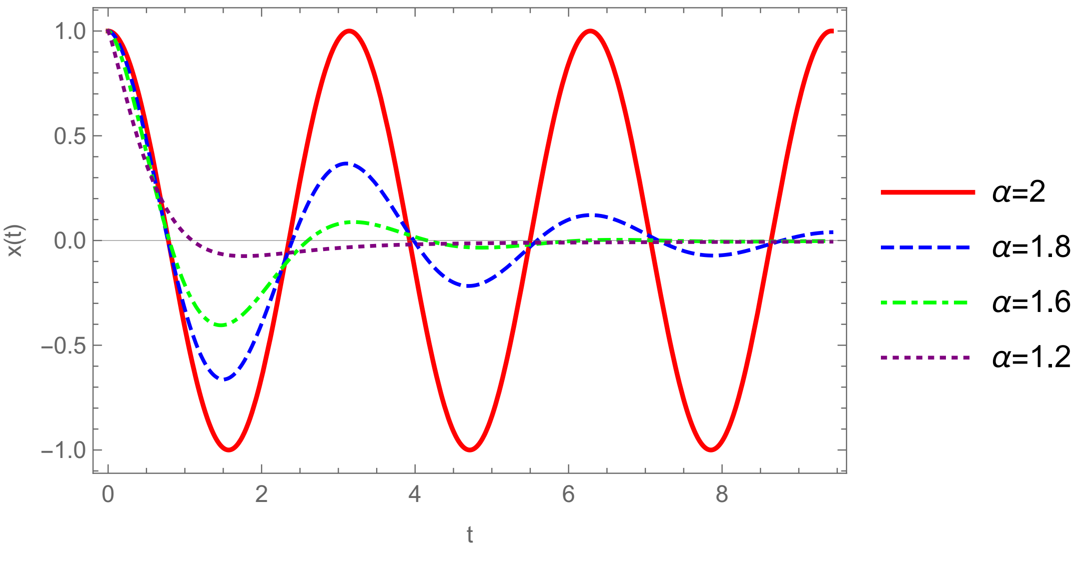


Figura 2 – Oscilador harmônico fracionário com derivada fracionária de Caputo.

Podemos generalizar ainda mais o modelo do oscilador harmônico fracionário utilizando a definição de derivada fracionária de Prabhakar (GARRA et al., 2014):

$$^P D^\gamma_{\alpha,\beta,\omega} f(t) = \int_0^t (t-\tau)^{m-\beta-1} E^{-\gamma}_{\alpha,m-\beta} \left[\mu(t-\tau)^\alpha\right] \frac{d^m}{d\tau^m} f(\tau) d\tau,$$

com os parâmetros $\alpha, \beta, \gamma, \mu \in \mathbb{C}$, $\mathcal{R}(\alpha)$, $m = \lceil \beta \rceil$.

O oscilador harmônico com derivada fracionária de Prabhakar é descrito por

$$m^P D^{\gamma}_{\alpha,\beta,\mu} x(t) + kx(t) = 0, \tag{2.20}$$

com $\alpha > 0, 1 < \beta \leqslant 2$, $\gamma > 0$ e $\mu \in \mathbb{R}$. Aplicando transformada de Laplace, obtemos,

$$X(s) = \frac{x(0)\, s^{-1} + x'(0)\, s^{-2}}{1 + \omega^{\beta} s^{-\beta}(1 - \mu s^{-\alpha})^{-\gamma}}, \tag{2.21}$$

e a transformada de Laplace fornece a solução

$$x(t) = x(0) \sum_{k=0}^{\infty} (-\omega^{\beta} t^{\beta})^k E^{\gamma k}_{\alpha, \beta k+1}(\mu t^{\alpha}) + x'(0) \sum_{k=0}^{\infty} (-\omega^{\beta} t^{\beta})^k E^{\gamma k}_{\alpha, \beta k+2}(\mu t^{\alpha}), \tag{2.22}$$

em termos de funções de Mittag-Leffler de três parâmetros (GARRA et al., 2014), que é dada por

$$E^{\gamma}_{\alpha,\beta}(z) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\gamma + k) z^k}{k! \Gamma(\alpha k + \beta)}, \tag{2.23}$$

de modo que $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{C}$ e $\mathrm{Re}(\alpha) > 0$.

Tomando $\gamma = 0$, recuperamos a solução do modelo que utiliza derivada de Caputo, isto é (2.19).

2.3 Outros modelos

Como já mencionado anteriormente, existe uma imensa gama de modelos fracionários desenvolvidos e utilizados pela ciência e engenharia. Na referência (SUN et al., 2018), diversos desses modelos são apresentados e discutidos pelos autores. Os modelos apresentados neste trabalho são motivados por modelos fracionários já existentes, que serão oportunamente discutidos, no Capítulo 4.

2.4 Limitações quanto à escolha de uma generalização

Como já discutimos anteriormente, a escolha de um operador integrodiferencial fracionário baseia-se na generalização de operadores ordinários segundo critérios que sejam de interesse. Por exemplo, a derivada de Caputo pode ser entendida como um generalização de acordo com a transformada de Laplace de derivadas no sentido distribucional (DE OLIVEIRA; JAROSZ; VAZ Jr, 2018). A partir disso, podemos tentar estabelecer algum critério mais geral para pensar em outras possíveis generalizações. Consideremos então um operador integrodiferencial D^{α} definido em termos de uma função $\Phi(s, \alpha)$, de modo que

$$\mathcal{L}\left[D^{\alpha} f(t)\right](s) = \Phi(s, \alpha) \mathcal{L}\left[f(t)\right](s), \tag{2.24}$$

de modo que $\Phi(s, 1) = s$, $\Phi(s, 0) = 1$ e $\Phi(s, -1) = s^{-1}$. De acordo com esse critério, uma escolha natural é $\Psi(s, \alpha) = s^{\alpha}$, isto é, a definição de Caputo. Entretanto, é possível propôr outras escolhas.

Para exemplificar a ideia, consideremos a tarefa um pouco mais modesta de definir um operador diferencial fracionário para $0 \leqslant \alpha \leqslant 1$. Escrevendo $\Phi(s,\alpha)$ na forma

$$\Phi(s,\alpha) = s\psi(s,\alpha), \tag{2.25}$$

de modo que $\psi(s,1) = 1$ e $\psi(s,0) = s^{-1}$, obtemos

$$^{*}D^{\alpha}\left[f(t)\right] = \frac{d}{dt}\int_0^t = \Psi(t-\tau,\alpha)f(\tau)d\tau, \tag{2.26}$$

com a função Ψ dada de modo que $\Psi(t,\alpha) = \psi(s,\alpha)$.

Assim, uma derivada fracionária do *tipo* Caputo é da forma

$$^{*}_{C}D^{\alpha}\left[f(t)\right] = \int_0^t \Psi(t-\tau,\alpha)f'(\tau)d\tau, \tag{2.27}$$

e sua transformada de Laplace é dada por

$$\mathcal{L}\left[^{*}_{C}D^{\alpha}\left[f(t)\right]\right] = \psi(s,\alpha)sF(s) - \psi(s,\alpha)f(0), \tag{2.28}$$

com $F(s) = \mathcal{L}\left[f(t)\right]$.

Recentemente, Fabrizio e Caputo (CAPUTO; FABRIZIO, 2015) propuseram uma nova definição de derivada fracionária que, de acordo com nossa abordagem, pode ser descrito pela função

$$\psi_1(s,\alpha) = \frac{1}{(1-\alpha)s + \alpha t_0^{-1}}, \tag{2.29}$$

com $t_0 > 0$, que leva a uma operador tipo Caputo com um termo exponencial em seu núcleo dada por

$$^{*}_{FC}D^{\alpha}\left[f(t)\right] = \frac{1}{1-\alpha}\int_0^t e^{(t-\tau)\alpha/t_0}f'(\tau)d\tau. \tag{2.30}$$

Há também uma segunda definição, proposta por Atangana e Baleanu, (ATANGANA; BALEANU, 2016), definida de modo que

$$\psi_2(s,\alpha) = \frac{s^{-1}}{(1-\alpha) + \alpha(st_0)^{-\alpha}}, \tag{2.31}$$

levando à definição de um operador integrodiferencial tipo Caputo com uma função de Mittag-Leffler no núcleo, dada por

$$^{*}_{AB}D^{\alpha}\left[f(t)\right] = \frac{1}{1-\alpha}\int_0^t E_{\alpha}\left[-\frac{\alpha(t-\tau)}{t_0^{\alpha}(1-\alpha)}\right]f'(\tau)d\tau. \tag{2.32}$$

As definições dadas por (2.30) e (2.32), entretanto, têm sido questionadas quanto à sua validade como operadores diferenciais fracionários (ORTIGUEIRA; MACHADO, 2018; DE OLIVEIRA; JAROSZ; VAZ Jr, 2020), devido a não satisfazer algumas condições consideradas necessárias (ORTIGUEIRA; MACHADO, 2015) como, por exemplo, não se comportar como um operador local (TARASOV, 2018) e levar a resultados inconsistentes em certos modelos (DE OLIVEIRA; JAROSZ; VAZ Jr, 2018).

2.5 Derivadas fracionárias do ponto de vista do passeio aleatório de tempo contínuo

Desde o advento da mecânica quântica, várias mentes brilhantes, inquietas diante do conjunto de ideias heterodoxas envolvidas na interpretação do formalismo quântico, buscaram interpretar esse formalismo em termos de ideias mais próximas do senso comum. Em particular, a equação de Schrödinger foi objeto de vários estudos buscando elucidar a sua natureza. Aparentemente, a primeira tentativa nesse sentido deveu-se a Madelung (MADELUNG, 1927), que usando a representação polar da função de onda complexa, reescreveu a equação de Schrödinger como um par de equações interpretadas como uma equação de continuidade e uma equação de Hamilton-Jacobi com um termo na forma de uma função potencial, que pela ausência de um análogo clássico, foi denominado potencial quântico. Essa linha de raciocínio culminou na chamada interpretação de de Broglie-Bohm da mecânica quântica, também chamada de mecânica bohmiana (DÜRR; TEUFEL, 2009).

Uma outra tentativa de interpretação da equação de Schrödinger está na chamada mecânica estocástica. O pioneiro nesta área é Fényes (FÉNYES, 1946; FÉNYES, 1952), onde se destaca a contribuição de Nelson (NELSON, 1966; NELSON, 1967). De uma forma geral, a ideia é identificar uma dualidade entre a equação de Schrödinger e a equação de difusão. Está completamente fora dos nossos objetivos discutir essa relação – uma monografia nesse sentido é (NAGASAWA, 1993) –, de modo que iremos nos contentar com uma das consequências dessa relação, que é olhar para a equação de Schrödinger como continuação analítica $t \to it$ da equação de difusão. Uma das vantagens dessa interpretação estocástica é que podemos extrapolar para a equação de Schrödinger as possíveis generalizações da equação de difusão.

A relação da equação de difusão com a teoria do passeio aleatório é bem conhecida. De fato, vamos considerar uma rede unidimensional com espaçamento Δx e pontos indexados por n ($\in \mathbb{Z}$). Se denotarmos por $W_n(t)$ a função densidade de probabilidade de uma partícula estar na posição n no instante t, e se após um intervalo Δx a partícula move-se para a direita ou para a esquerda com igual probabilidade, então esse processo é descrito pela equação

$$W_n(t+\Delta) = \frac{1}{2}W_{n-1}(t) + \frac{1}{2}W_{n+1}(t). \tag{2.33}$$

No limite $\Delta t \to 0$ e $\Delta x \to 0$, podemos escrever

$$W_n(t+\Delta) = W(x,t) + \frac{\partial W}{\partial t}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t), \tag{2.34}$$

$$W_{n\pm1}(t) = W(x,t) \pm \frac{\partial W}{\partial x}\Delta x + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 W(x,t)}{\partial x^2}(\Delta x)^2 + \mathcal{O}((\Delta x)^2), \tag{2.35}$$

e supondo constante o limite

$$D = \lim_{\substack{\Delta x \to 0 \\ \Delta t \to 0}} \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t}, \tag{2.36}$$

segue que a densidade de probabilidade de encontrarmos a partícula no instante t na posição x obedece a equação de difusão

$$\frac{\partial W}{\partial t} = D\frac{\partial^2 W}{\partial x^2}. \tag{2.37}$$

No modelo de passeio aleatório descrito acima, uma partícula tem que ser mover necessariamente para seu vizinho mais próximo, à direita ou à esquerda, a cada intervalo de tempo Δt. Em 1965, (MONTROLL; WEISS, 1965) apresentaram uma generalização desse modelo, onde o intervalo Δt e o comprimento do salto Δx foram substituídos por um tempo de espera e o comprimento de salto dados a partir de uma densidade de probabilidade $\phi(x,t)$. Esse modelo foi denominado passeio aleatório com tempo contínuo (CTRW, abreviação de "continuous time random walk"). Se o comprimento do salto e o tempo de espera forem variáveis aleatórias independentes, então $\phi(x,t) = \lambda(x)w(t)$, de modo que a densidade de probabilidade para um salto entre x e $x + dx$ é dada por $\lambda(x)\,dx$ e densidade de probabilidade de que o salto ocorra entre t e $t + dt$ é dada por $w(t)\,dt$. Denotando a transformada de Laplace de $w(t)$ por $\widetilde{w}(s)$ e a transformada de Fourier de $\lambda(x)$ por $\widehat{\lambda}(k)$, Montroll e Weiss mostraram, partindo da equação mestre para esse processo, que $\widehat{\widetilde{W}}(k,s)$ satisfaz a equação

$$\widehat{\widetilde{W}}(k,s) = \frac{1-\widetilde{w}(s)}{s}\frac{1}{1-\widehat{\lambda}(k)\widetilde{w}(s)}, \tag{2.38}$$

onde supomos como condição inicial $W(x,0) = \delta(x)$ (METZLER; KLAFTER, 2000).

A equação de difusão surge dentro do chamado limite difusivo do CTRW, que corresponde a $k \to 0$ e $s \to 0$. Supondo que $w(t)$ seja uma distribuição de Poisson e $\lambda(x)$ uma distribuição normal,

$$w(t) = \tau^{-1}\mathrm{e}^{-t/\tau}, \qquad \lambda(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\mathrm{e}^{-x^2/2\sigma^2}, \tag{2.39}$$

temos

$$\widetilde{w}(s) = \frac{1}{1+\tau s} = 1 - \tau s + \ldots, \qquad \widehat{\lambda}(k) = \mathrm{e}^{-\sigma^2 k^2/2} = 1 - \frac{\sigma^2}{4} + \ldots, \tag{2.40}$$

e com isso

$$\widehat{\widetilde{W}}(k,s) = \frac{1-(1-\tau s+\ldots)}{s}\frac{1}{[1-(1-\tau s+\ldots)(1-\frac{\sigma^2}{4}+\ldots)]} = \frac{1}{s+Dk^2} + \ldots \tag{2.41}$$

onde $D = \sigma^2/4\tau$. Logo

$$s\widehat{\widetilde{W}}(k,s) - 1 = -Dk^2\widehat{\widetilde{W}}(k,s), \tag{2.42}$$

e tomando as transformadas inversas de Fourier e Laplace segue a eq.(2.37).

Podemos, evidentemente, pensar em outras distribuições de probabilidade para $w(t)$ e $\lambda(x)$. Para a distribuição dos comprimentos dos saltos, vamos considerar uma generalização da distribuição normal, que é a distribuição de Lévy. Como estamos interessados no limite difusivo $k \to 0$, precisamos apenas considerar o comportamento assintótico de $\lambda(x)$, que no caso de uma distribuição de Lévy é dado por

$$\lambda(x) \approx A_\mu \sigma^{-\mu} |x|^{-1-\mu}, \tag{2.43}$$

onde $1 < \mu < 2$. No espaço de Fourier, temos

$$\widehat{\lambda}(k) = 1 - \sigma^\mu |k|^\mu + \dots . \tag{2.44}$$

Usando essa expressão para $\widehat{\lambda}(k)$, obtemos, no lugar da eq.(2.42),

$$s\widehat{\widetilde{W}}(k,s) - 1 = -c^\mu |k|^\mu \widehat{\widetilde{W}}(k,s), \tag{2.45}$$

onde $c^\mu = \sigma^\mu/\tau$. Tomando as transformadas inversas de Fourier e Laplace, obtemos

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = c^\mu \mathcal{D}^\mu W(x,t), \tag{2.46}$$

onde $\mathcal{D}^\mu W(x,t)$ é a chamada derivada fracionária de Riesz. Outros exemplos e generalizações podem ser encontrados em (METZLER; KLAFTER, 2000).

Considerando agora a continuação analítica da eq.(2.46), temos

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = c^\mu \mathcal{D}^\mu \psi(x,t), \tag{2.47}$$

onde $\psi(x,t) = W(x,it)$, que é uma equação do tipo Schrödinger com derivada fracionária espacial do tipo Riesz.

Capítulo 3

A Equação de Schrödinger com potenciais que envolvam a função delta e suas derivadas

A utilização da função delta de Dirac para modelar certos tipos de fenômenos, de maneira idealizada, em mecânica quântica é uma abordagem amplamente difundida e bem estabelecida na literatura (BELLONI; ROBINETT, 2014). Ela aparece em tais modelos incorporada a coeficientes de operadores diferenciais, cujo domínio possua suporte singular em um conjunto disjunto de pontos, sendo assim classificados como *interações singulares* (KURASOV, 1996). Uma interação singular ocorrendo de forma localizada em um ponto da reta real, isto é, valendo zero em todo o domínio exceto neste ponto é chamado *interação pontual* (DE VINCENZO; SÁNCHEZ, 2010).

3.1 A função delta de Dirac

A função delta de Dirac é uma ferramenta matemática bastante conhecida e utilizada na literatura, sendo frequentemente aplicada em problemas de mecânica quântica (veja, por exemplo, as referências (GASIOROWICZ, 1979; GRIFFITHS, 1995)). Denotada por $\delta(x)$, sua definição parte da imposição de que ela deva satisfazer às seguintes propriedades

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases}, \text{ com } \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\, dx = 1, \tag{3.1}$$

o que leva a uma possível interpretação de que a função delta representa uma ponta infinitamente alta e infinitesimalmente fina.

Tecnicamente, não é realmente uma função, uma vez que não assume valor finito em $x = 0$; dizemos então que é uma *função generalizada* ou *distribuição* (VAZ Jr; DE OLIVEIRA, 2016c). Entretanto, é uma construção extremamente útil em física teórica.

Multiplicar $\delta(x-a)$ por uma função *ordinária* $f(x)$, é o mesmo que multiplicá-la por $f(a)$, isto é,

$$f(x)\ \delta(x-a) = f(a)\ \delta(x-a), \tag{3.2}$$

pois o produto é zero **em qualquer ponto**, exceto a. Em particular,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\ \delta(x-a)\ dx = f(a) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)\ dx = f(a). \tag{3.3}$$

Esta é a propriedade mais importante da função delta, conhecida como *filtragem*: aplicada junto a uma integral que inclua o ponto a, ela serve para filtrar o valor de $f(x)$ neste ponto $x = a$.

A função delta de Dirac está intimamente associada ao conceito de *funções-teste*: funções infinitamente diferenciáveis com *suporte compacto*, isto é, identicamente nulas fora de um intervalo finito $(x_0, x_1) \subset \mathbb{R}$ (ARFKEN; WEBER, 2005; VAZ Jr; DE OLIVEIRA, 2016b). Sendo $\delta(x)$ definido como o limite de uma sequência $\{\delta_n(x)\}$ de funções-teste que satisfazem às condições

$$\lim_{n\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(x) dx = 1, \qquad \lim_{n\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(x)\phi(x) dx = \phi(0), \tag{3.4}$$

para uma função $\phi(x)$ ordinária, isto é, contínua e infinitamente diferenciável, uma vez que o produto entre uma função-teste e uma função ordinária resulta em uma função-teste.

Os operadores característicos da teoria de distribuições *clássica* são dados por

$$\phi(x)\delta(x) = \phi(0)\delta(x), \tag{3.5}$$

$$\phi(x)\delta'(x) = \phi(0)\delta'(x) - \phi'(0)\delta(x). \tag{3.6}$$

Neste trabalho, entretanto, precisaremos lidar com soluções que possuam uma descontinuidade isolada em um ponto $a \in \mathbb{R}$, o que não é coberto por essa teoria. Para que esta classe de funções esteja incluída no conjunto de possíveis soluções para a equação de Schrödinger com potenciais relacionados à derivada da função delta de Dirac, utilizaremos a teoria desenvolvida por P. Kurasov na referência (KURASOV, 1996). Ela é construída com base em um conjunto K de funções-teste com uma possível descontinuidade na origem (que pode ser facilmente generalizado para uma possível descontinuidade em um ponto qualquer na reta real).

Definamos, então, para uma função real f com uma possível descontinuidade em $x = 0$, que

$$\bar{f}(0) \equiv \frac{f(0+) + f(0-)}{2}, \tag{3.7}$$

com

$$f(0\pm) \equiv \lim_{x\to 0\pm} f(x). \tag{3.8}$$

Dada uma função-teste $\phi \in K$, a ação de $\delta(x)$ e $\delta'(x)$ é definida por

$$\phi(x)\delta(x) = \left[\frac{\phi(0+) + \phi(0-)}{2}\right]\delta(x) = \bar{\phi}(0)\delta(x), \tag{3.9}$$

$$\begin{aligned}\phi(x)\delta'(x) &= \left[\frac{\phi(0+) + \phi(0-)}{2}\right]\delta'(x) - \left[\frac{\phi'(0+) + \phi'(0-)}{2}\right]\delta(x) \\ &= \bar{\phi}(0)\delta'(x) - \bar{\phi}'(0)\delta(x).\end{aligned} \tag{3.10}$$

Devemos observar que, se ϕ for contínua em $x = 0$, recuperamos os operadores descritos em (3.5).

Na referência (KURASOV, 1996), é feito um estudo sistemático a respeito da teoria de distribuições sobre este conjunto K, mostrando que este operador é consistente e bem-definido. Não nos aprofundaremos nesses pormenores aqui, nos atendo apenas ao necessário para justificar a validade da utilização deste ferramental em nossa metodologia. Cabem, entretanto, algumas observações:

1. O operador diferencial de segunda ordem dado por

$$-\frac{d^2}{dx^2} + X_1\delta(x) + X_2\delta'(x), \quad X_1, X_1 \in \mathbb{R}, \tag{3.11}$$

não admite um operador auto-adjunto correspondente no espaço de operadores continuamente diferenciáveis na origem se $X_2 \neq 0$ (KURASOV, 1996). Por este motivo, a teoria de distribuições ordinárias é adequada para o problema do potencial delta simples, estudado nas referências (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010; DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011; JAROSZ, 2016), porém insuficiente para o problema do potencial que envolve derivadas da função delta.

2. Além de apresentar a teoria baseada no conjunto de distribuições com uma possível descontinuidade em um ponto isolado, Kurasov também introduz em seu trabalho uma metodologia para obter operadores auto-adjuntos baseado em extensões para o operador (3.11); a partir dessas extensões auto-adjuntas, obtém-se condições de contorno apropriadas para que o problema do potencial $V(x) = a\delta(x) + b\delta'(x)$ seja resolvido de forma correta e consistente, o que foi feito por na referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009).

3. Embora tomando como base o trabalho de Gadella, Negro e Nieto, não utilizaremos neste trabalho a abordagem das extensões auto-adjuntas, pois ela não funciona para derivadas de ordem não-inteira; ao invés disso, utilizaremos a abordagem das transformadas integrais, que servem tanto para operadores locais (isto é, derivadas de ordem inteira) quanto para os não-locais (derivadas de ordem não-inteira).

3.2 O potencial delta

Um tipo de interação pontual bastante familiar é dado pelo seguinte operador hamiltoniano

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_0 \delta(x), \tag{3.12}$$

com V_0 sendo um parâmetro constante e m uma constante que representa a massa da partícula. O procedimento padrão para resolver este problema é considerar a equação de Schrödinger no espaço de posição,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \tag{3.13}$$

para o problema da partícula livre, isto é, $V(x) = 0$, nas duas regiões separadas pelo ponto onde localiza-se o potencial delta - que neste caso é $x_0 = 0$ -, e em seguida aplicar as condições de contorno apropriadas, que seguem da análise do problema. Utilizando a notação

$$f(0\pm) = \lim_{x \to 0^\pm} f(x), \tag{3.14}$$

as condições são dadas por

$$\begin{aligned} \psi(0+) = \psi(0-) &= \psi(0), && \text{(continuidade)} \\ \psi'(0+) - \psi'(0-) &= \frac{2mV_0\psi(0)}{\hbar^2}. && \text{(salto da derivada)} \end{aligned} \tag{3.15}$$

O operador H_0 é auto-adjunto no domínio das funções de onda que satisfazem a essas condições e só admite estados ligados para $V_0 < 0$ (GALINDO; PASCUAL, 1990; GRIFFITHS, 1995).

Uma extensão natural para o potencial delta de Dirac é dado pelo operador

$$H_1 = \frac{p^2}{2m} + V_0\delta(x) + V_1\delta'(x), \tag{3.16}$$

com V_1 sendo um coeficiente constante e $\delta'(x)$ é a derivada da função delta. Entretanto, a derivada da função delta de Dirac apresenta particularidades que exigem uma abordagem diferente da utilizada no caso do hamiltoniano H_0. Uma maneira que se mostra bastante eficaz para contornar essas dificuldades consiste em estudar as extensões auto-adjuntas do operador hamiltoniano da partícula livre (ŠEBA, 1986), de modo que as interações pontuais sejam incorporadas nas condições de contorno da equação de Schrödinger no espaço de posição (DE VINCENZO; SÁNCHEZ, 2010).

Contudo, é possível lidar com problemas envolvendo interações pontuais como $\delta(x)$ e $\delta'(x)$ de uma segunda maneira, se observarmos que esses problemas podem apresentar descontinuidades em suas funções de onda e/ou suas derivadas. Isto significa que os termos $\delta(x)\psi(x)$ e $\delta'(x)\psi(x)$ são produtos entre uma distribuição e uma função que pode ser descontínua em seu ponto de suporte. A teoria das distribuições, entretanto, foi inicialmente construída com base no espaço das funções-teste contínuas e, portanto, é necessário buscar por uma teoria de distribuições que generalize este espaço de modo a abranger também funções-teste descontínuas. Este problema foi estudado por P. Kurasov (KURASOV, 1996), que fez algumas modificações na maneira de definir a ação de distribuições sobre funções-teste para que passassem a ser válidas também para casos de descontinuidade no ponto $x_0 = 0$, conforme pode ser visto na Seção 3.1.

Impondo a condição de que o problema definido por H_1 seja auto-adjunto, segue-se que as seguintes condições de contorno devem ser satisfeitas:

$$\begin{pmatrix} \psi(0+) \\ \psi'(0+) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{1+mV_1/\hbar^2}{1-mV_1/\hbar^2} & 0 \\ \dfrac{2mV_0/\hbar^2}{1-(mV_1/\hbar^2)^2} & \dfrac{1-mV_1/\hbar^2}{1+mV_1/\hbar^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(0-) \\ \psi'(0-) \end{pmatrix}. \tag{3.17}$$

Na referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009), essas condições são utilizadas para estudar o problema de estados ligados e espalhamento para H_1, onde obtém-se

$$\kappa = \frac{m|V_0|/\hbar}{1+m^2V_1^2/\hbar^4} = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, \tag{3.18}$$

ou, equivalentemente,

$$E = -\frac{mV_0^2/\hbar^2}{2(1+m^2V_1^2/\hbar^4)^2}, \tag{3.19}$$

e a função de onda

$$\Psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{m|V_0|}{\hbar^2}} \left[\dfrac{1+mV_1/\hbar^2}{1+(mV_1/\hbar^2)^2}\right] e^{-\kappa x}, & x > 0 \\ \sqrt{\dfrac{m|V_0|}{\hbar^2}} \left[\dfrac{1-mV_1/\hbar^2}{1+(mV_1/\hbar^2)^2}\right] e^{\kappa x}, & x < 0, \end{cases} \tag{3.20}$$

com a única diferença de que, no trabalho em questão, os autores adotam $\hbar = 1$.

3.3 Potenciais supersingulares

Partindo desses resultados já bem consolidados na literatura, podemos pensar em estender o estudo a operadores hamiltonianos da forma

$$H_n = \frac{p^2}{2M} + \sum_{n=0}^{N} V_n \delta^{(n)}(x), \tag{3.21}$$

com V_n sendo parâmetros constantes e $\delta^{(n)}(x)$ a derivada de ordem n da função delta de Dirac, para $n = 0, 1, \ldots, N$. Os potenciais que envolvem derivadas de ordens maiores da função delta são chamados *potenciais supersingulares*.

Valendo-se da ideia da resolução do problema envolvendo o operador H_1, a estratégia natural seria buscar uma resolução para H_n a partir de condições de contorno que garantissem a auto-adjunticidade do operador. Entretanto, o operador diferencial $(iD_x)^2 \equiv -d^2/dx^2$ só admite extensões auto-adjuntas que envolvam a função de onda e a sua derivada de primeira ordem, de modo que não é possível obter as condições que procuramos a partir deste operador. Na referência (ALBEVERIO; KURASOV, 2000), os autores optaram por utilizar a extensão auto-adjunta do operador $(iD_x)^n$ para estudar este problema. Na referência (LANGE, 2015), por sua vez, o autor utiliza uma versão integral da equação de Schrödinger para obter condições de contorno para potenciais do tipo supersingulares, porém as condições de contorno obtidas possuem a desvantagem de apresentar parâmetros dependentes da energia da própria solução do problema e, além disso, nenhuma solução para a equação é apresentada.

No presente trabalho, abordaremos o problema dos potenciais supersingulares por uma outra perspectiva: a utilização de transformadas de Fourier. Nas referências (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010; DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011; JAROSZ; VAZ Jr, 2016), esta mesma técnica foi utilizada para resolver a equação de Schrödinger fracionária para potenciais delta; partindo da ideia de que a equação de Schrödinger "tradicional" pode ser entendida como um caso particular de sua versão fracionária, também é possível buscar suas soluções através da transformada de Fourier.

A princípio, pode parecer uma complicação desnecessária em comparação com os métodos mais simples de resolução encontrados na literatura. Entretanto, um grande ponto a favor à técnica da transformada de Fourier é que a equação de Schrödinger, no espaço de momento, não exige que as condições de contorno sejam conhecidas e ainda assim a transformada de Fourier inversa da solução obtida no espaço de momento satisfaz às condições necessárias. Deste modo, observamos que trabalhar com a equação de Schrödinger no espaço de momento se mostra uma técnica promissora para a resolução do problema da equação de Schrödinger com potenciais supersingulares.

Neste capítulo, utilizaremos a representação da equação de Schrödinger no espaço de momento para estudar o efeito de potenciais supersingulares. Após obtermos as soluções de estado ligado e espalhamento neste espaço, utilizaremos a transformada de Fourier inversa para obter as expressões das soluções no espaço de posição e em seguida calcularemos as energias de estado ligado e os coeficientes de espalhamento.

3.4 Potenciais supersingulares no espaço de momento

Partindo da equação de Schrödinger independente do tempo, isto é,

$$-\frac{p^2}{2M}\phi(p) + \frac{1}{2\pi\hbar}\left(W \star \Psi\right)(p) = E\phi(p), \tag{3.22}$$

com $\psi(x)$ e $\phi(p)$ segundo a definição dada por (1.7), $W(p)$ sendo a transformada de Fourier de $V(x)$ e a convolução entre ψ e W dada por

$$(W \star \phi)(p) = \int_{-\infty}^{\infty} W(p-q)\phi(q)\, dq. \tag{3.23}$$

Considerando o potencial supersingular escrito na forma

$$V(x) = \sum_{n=0}^{N} V_n \delta^{(n)}(x), \tag{3.24}$$

e a transformada de Fourier da derivada de ordem m da função delta de Dirac dada por (DUISTERMAAT; KOLK, 2010)

$$\mathcal{F}\left[\delta^{(m)}\right] = \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^{m}, \tag{3.25}$$

obtemos:

$$\begin{aligned}(W \star \phi)(p) &= \sum_{n=0}^{N} V_n \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{n} \int_{-\infty}^{\infty} (p-q)^n \phi(q)\, dq \\ &= \sum_{n=0}^{N}\sum_{k=0}^{n} V_n \binom{n}{k} \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^{k} (-1)^{n-k} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{iz}{\hbar}\right)^{n-k} \phi(q)\, dq.\end{aligned}$$

Segue-se do teorema integral de Fourier (BROWN; CHURCHILL, 2011) que

$$\mathcal{F}^{-1}[\phi] = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar}\phi(p)\, dp = \frac{[\psi(x+) + \psi(x+)]}{2} = \bar{\psi}(0), \tag{3.26}$$

e, deste modo, a integral presente na expressão da convolução é dada por

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{iz}{\hbar}\right)^{n-k} \phi(q)\, dq = 2\pi\hbar\bar{\psi}^{(n-k)}(0), \tag{3.27}$$

para $k < n$, o que se aplica a este caso. Utilizando esses resultados, a convolução entre W e ϕ pode ser reescrita na forma

$$(W \star \phi)(p) = 2\pi\hbar \sum_{n=0}^{N}\sum_{k=0}^{n} V_n \binom{n}{k} \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^{k} (-1)^{n-k} \bar{\psi}^{(n-k)}(0), \tag{3.28}$$

Rearranjando os índices da soma, obtemos

$$\begin{aligned}(W \star \phi)(p) &= 2\pi\hbar \sum_{k=0}^{N} \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^{k} \sum_{n=k}^{N} V_n \binom{n}{k} (-1)^{n-k} \bar{\psi}^{(n-k)}(0) \\ &= 2\pi\hbar \sum_{k=0}^{N} \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^{k} \sum_{m=0}^{N-k} V_{m+k} \binom{m+k}{k} (-1)^{m} \bar{\psi}^{(m)}(0).\end{aligned} \tag{3.29}$$

Definindo o parâmetro

$$W_{m,N} = \sum_{k=0}^{N-m} V_{k+m} \binom{k+m}{m} (-1)^k \bar{\psi}^{(k)}(0), \tag{3.30}$$

a equação de Schrödinger, no espaço de momento, para um potencial singular pode ser reescrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\phi(p) + \sum_{m=0}^{N} W_{m,N} \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^m = E\phi(p). \tag{3.31}$$

É interessante observar que seguem-se do teorema da convolução da transformada de Fourier e da equação (3.25) que

$$V(x)\psi(x) = \mathcal{F}^{-1}\left[W \star \phi\right] = \sum_{m=0}^{N} W_{m,N} \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^m, \tag{3.32}$$

e este resultado coincide com a generalização das expressões (3.9) e (3.10) da teoria de Kurasov (KURASOV, 1996), ou seja,

$$\delta^{(n)}(x) = \sum_{k=0}^{n} (-1)^{n-k} \binom{n}{k} \bar{\psi}^{(n-k)}(0)\delta^{(k)}(x). \tag{3.33}$$

As soluções de estados ligados ($E < 0$) e de espalhamento ($E > 0$) devem ser obtidas separadamente.

3.5 Estados ligados para potenciais supersingulares

Começando pelo problema de estados ligados, escrevemos $E = -\lambda^2/2M$, com $\lambda > 0$, e a solução no espaço de momentos fica expressa por

$$\phi(p) = -2M \sum_{m=0}^{N} \frac{W_{m,N}(ip/\hbar)^m}{p^2 + \lambda^2}. \tag{3.34}$$

Aplicando transformada de Fourier inversa à equação (3.34), obtemos

$$\psi(x) = -\sum_{m=0}^{N} W_{m,N} I_m(x), \tag{3.35}$$

com $I_m(x)$ dado pela integral

$$I_m(x) = \frac{M}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx/\hbar}(ip/\hbar)^m}{p^2 + \lambda^2}\, dp. \tag{3.36}$$

As integrais $I_m(x)$ são calculadas na Seção A.1 do Apêndice A, onde podemos observar que elas possuem partes regulares e singulares para $m \geqslant 2$. Neste trabalho, temos interesse nas partes regulares e também nos comportamentos nos limites $x \to 0\pm$ e, deste modo, nos concentraremos nas partes regulares de $I_m(x)$, isto é, $I_m(x+)$ para $x > 0$ e $I_m(x-)$ para $x < 0$, que escreveremos da seguinte forma:

$$I_m(x\pm) = \frac{d^m}{dx^m} I_0(x\pm)\,dp, \quad I_0(x) = \frac{M}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx/\hbar}}{p^2 + \lambda^2}\,dp. \tag{3.37}$$

Os coeficientes $W_{m,N}$, por sua vez, dependem das condições iniciais $\psi^{(k)}(0)$, de modo que precisaremos determiná-las. Derivando $\psi(x)$ e utilizando a identidade dada pela equação (3.37), obtemos

$$\begin{aligned}\psi^{(n)}(x\pm) &= -\sum_{m=0}^{N} W_{m,N} \frac{d^n}{dx^n} I_m(x\pm) = -\sum_{m=0}^{N} W_{m,N} \frac{d^n}{dx^n}\frac{d^m}{dx^m} I_0(x\pm) \\ &= -\sum_{m=0}^{N} W_{m,N} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} I_0(x\pm) = -\sum_{m=0}^{N} W_{m,N} I_{m+n}(x\pm).\end{aligned} \tag{3.38}$$

Juntando os termos $\psi(0+)$ com os $\psi(0-)$, obtemos um sistema linear nas variáveis $\bar{\psi}^{(k)}(x)$, ou seja,

$$\bar{\psi}^{(n)}(0) = -\sum_{m=0}^{N} W_{m,N} \bar{I}_{m+n}(0). \tag{3.39}$$

A integral $I_0(x)$ é bem conhecida (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010),

$$I_0(x) = \frac{M}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx/\hbar}}{p^2 + \lambda^2} = \frac{M}{\hbar\lambda} e^{-\lambda|x|/\hbar}. \tag{3.40}$$

Utilizando os resultados dados por(A.46), na Seção A.1 do Apêndice A, obtemos

$$I_k(x\pm) = \frac{M}{\hbar^2}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{k-1} (\mp 1)^k e^{-(\lambda/\hbar)|x|}, \quad x \neq 0, \tag{3.41}$$

e tomando os limites $x \to 0$, encontramos

$$I_k(0\pm) = \frac{M}{\hbar^2}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{k-1} (\mp 1)^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots. \tag{3.42}$$

Substituindo esta expressão em (3.39), obtemos

$$\bar{\psi}^{(k)}(0) = -\sum_{m=0}^{N} W_{m,N} \frac{M}{\hbar^2}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{m+k-1} \frac{[1 + (-1)^{m+k}]}{2}, \tag{3.43}$$

e tomando $k = 0$ e $k = 1$, obtemos expressões para as condições iniciais,

$$\bar{\psi}(0) = -\sum_{m=0}^{N} W_{m,N} \frac{M}{\hbar^2}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{m-1} \frac{[1 + (-1)^{m}]}{2}, \tag{3.44}$$

$$\bar{\psi}'(0) = -\sum_{m=0}^{N} W_{m,N} \frac{M}{\hbar^2}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{m} \frac{[1 - (-1)^{m}]}{2}. \tag{3.45}$$

A partir dos resultados acima, observamos, para as derivadas de ordem par,

$$\bar{\psi}^{(2j)}(0) = -\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2j} \sum_{m=0}^{N} W_{m,N} \frac{M}{\hbar^2} \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{m-1} \frac{[1+(-1)^m]}{2} = -\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2j} \bar{\psi}(0), \tag{3.46}$$

e para as derivadas de ordem ímpar,

$$\bar{\psi}^{(2j+1)}(0) = -\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2j} \sum_{m=0}^{N} W_{m,N} \frac{M}{\hbar^2} \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{m} \frac{[1-(-1)^m]}{2} = -\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2j} \bar{\psi}'(0), \tag{3.47}$$

e em ambos os casos, tem-se que $j = 0, 1, 2, \ldots$.

As expressões para $\bar{\psi}^{(2j)}(0)$ e $\bar{\psi}^{(2j+1)}(0)$ dadas por (3.46) e (3.47), respectivamente, mostram que as derivadas de $\bar{\psi}(0)$ de todas as ordens podem ser expressas em termos apenas de $\bar{\psi}(0)$ e $\bar{\psi}'(0)$. Valendo-nos desta informação, iremos agora buscar expressões para essas duas condições iniciais.

Substituindo (3.30) em (3.39), obtemos a expressão

$$\psi^{(n)}(x\pm) = -\sum_{m=0}^{N} \sum_{k=0}^{N-m} (-1)^k V_{k+m} \binom{k+m}{k} \bar{\psi}^{(k)}(0) I_{m+n}(x\pm), \tag{3.48}$$

e redefinindo os índices da soma em termos de $r = m + k$ e k, chegamos a

$$\psi^{(n)}(x\pm) = -\sum_{r=0}^{N} \sum_{k=0}^{r} (-1)^k V_r \binom{r}{k} \bar{\psi}^{(k)}(0) I_{r-k+n}(x\pm). \tag{3.49}$$

Para simplificar a compreensão dos cálculos, iremos separar as somatórias em termos pares e ímpares, de modo a reescrever a soma dupla em 4 partes, a saber:

$$\psi^{(n)}(x\pm) = T_{++}^{(n)}(x\pm) + T_{+-}^{(n)}(x\pm) + T_{-+}^{(n)}(x\pm) + T_{--}^{(n)}(x\pm), \tag{3.50}$$

com os parâmetros dados por

$$\begin{aligned}
T_{++}^{(n)}(x\pm) &= -\sum_{s=0}^{\lfloor N/2 \rfloor} \sum_{j=0}^{\lfloor 2s/2 \rfloor} (-1)^{2j} V_{2s} \binom{2s}{2j} \bar{\psi}^{(2j)}(0) I_{2s-2j+n}(x\pm), \\
T_{+-}^{(n)}(x\pm) &= -\sum_{s=0}^{\lfloor N/2 \rfloor} \sum_{j=0}^{\lfloor (2s-1)/2 \rfloor} (-1)^{2j+1} V_{2s} \binom{2s}{2j+1} \bar{\psi}^{(2j+1)}(0) I_{2s-2j-1+n}(x\pm), \\
T_{-+}^{(n)}(x\pm) &= -\sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2 \rfloor} \sum_{j=0}^{\lfloor (2s+1)/2 \rfloor} (-1)^{2j} V_{2s+1} \binom{2s+1}{2j} \bar{\psi}^{(2j)}(0) I_{2s+1-2j+n}(x\pm), \\
T_{--}^{(n)}(x\pm) &= -\sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2 \rfloor} \sum_{j=0}^{\lfloor 2s/2 \rfloor} (-1)^{2j+1} V_{2s+1} \binom{2s+1}{2j+1} \bar{\psi}^{(2j+1)}(0) I_{2s-2j+n}(x\pm),
\end{aligned} \tag{3.51}$$

com $\lfloor n \rfloor$ denotando a função piso, isto é, o maior inteiro menor ou igual a n.

Substituindo (3.41), (3.46) e (3.47) nas expressões acima, obtemos

$$\begin{aligned}
T_{++}^{(n)}(x\pm) &= -\sum_{s=0}^{\lfloor N/2\rfloor}\sum_{j=0}^{s}\frac{MV_{2s}}{\hbar^2}\binom{2s}{2j}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2s+n-1}(\mp 1)^n e^{-(\lambda/\hbar)|x|}\bar{\psi}(0),\\
T_{+-}^{(n)}(x\pm) &= \sum_{s=0}^{\lfloor N/2\rfloor}\sum_{j=0}^{s-1}\frac{MV_{2s}}{\hbar^2}\binom{2s}{2j+1}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2s+n-2}(\mp 1)^{n-1} e^{-(\lambda/\hbar)|x|}\bar{\psi}'(0),\\
T_{-+}^{(n)}(x\pm) &= -\sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor}\sum_{j=0}^{s}\frac{MV_{2s+1}}{\hbar^2}\binom{2s+1}{2j}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2s+n}(\mp 1)^{n+1} e^{-(\lambda/\hbar)|x|}\bar{\psi}(0),\\
T_{--}^{(n)}(x\pm) &= \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor}\sum_{j=0}^{s}\frac{MV_{2s+1}}{\hbar^2}\binom{2s+1}{2j+1}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2s+n-1}(\mp 1)^{n} e^{-(\lambda/\hbar)|x|}\bar{\psi}'(0).
\end{aligned} \tag{3.52}$$

Para o termo $T_{++}^{(n)}(x\pm)$, usaremos o seguinte resultado auxiliar,

$$\sum_{j=0}^{s}\binom{2s}{2j} = \begin{cases} 1, & s=0,\\ 2^{2s-1}, & s=1,2,\ldots, \end{cases} \tag{3.53}$$

cuja demonstração encontra-se no Apêndice D. Segue-se que

$$\begin{aligned}
T_{++}^{(n)}(x\pm) =& -\frac{MV_0}{\hbar^2}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n-1}(\mp 1)^n e^{-(\lambda/\hbar)|x|}\bar{\psi}(0)\\
& -\sum_{s=1}^{\lfloor N/2\rfloor}\frac{2^{2s-1}MV_{2s}}{\hbar^2}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2s+n-1}(\mp 1)^n e^{-(\lambda/\hbar)|x|}\bar{\psi}(0),
\end{aligned} \tag{3.54}$$

e redefinindo os índices da somatória, obtemos

$$\begin{aligned}
T_{++}^{(n)}(x\pm) =& -\frac{MV_0}{\hbar^2}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n-1}(\mp 1)^n e^{-(\lambda/\hbar)|x|}\bar{\psi}(0)\\
& -\sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor}\frac{MV_{2s+2}}{\hbar^2}\left(\frac{2\lambda}{\hbar}\right)^{2s+1}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n}(\mp 1)^n e^{-(\lambda/\hbar)|x|}\bar{\psi}(0).
\end{aligned} \tag{3.55}$$

Para lidar com o termo $T_{+-}^{(n)}(x\pm)$, devemos redobrar a atenção com a notação, pois o termo $s=0$ não está presente, uma vez que a somatória no índice j neste caso ficaria $\sum_{j=0}^{-1}$. Para contornar esta dificuldade, escreveremos a somatória iniciando-se em $s=1$ e em seguida redefiniremos os índices tomando $s\to s+1$, de modo a obter uma soma que de fato de inicie em $s=0$:

$$T_{+-}^{(n)}(x\pm) = \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor}\sum_{j=0}^{s}\frac{MV_{2s+2}}{\hbar^2}\binom{2s+2}{2j+1}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2s+n}(\mp 1)^{n-1} e^{-(\lambda/\hbar)|x|}\bar{\psi}'(0). \tag{3.56}$$

Para a soma em j, usamos a relação *(ii)* para obter

$$T_{+-}^{(n)}(x\pm) = \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2 \rfloor} \frac{MV_{2s+2}}{\hbar^2} \left(\frac{2\lambda}{\hbar}\right)^{2s+1} \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n-1} (\mp 1)^{n-1} e^{-(\lambda/\hbar)|x|} \bar{\psi}'(0). \tag{3.57}$$

Para os termos $T_{-+}^{(n)}(x\pm)$ e $T_{--}^{(n)}(x\pm)$, utilizamos as identidades *(iii)* e obtemos

$$T_{-+}^{(n)}(x\pm) = -\sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2 \rfloor} \frac{MV_{2s+1}}{\hbar^2} \left(\frac{2\lambda}{\hbar}\right)^{2s} \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n} (\mp 1)^{n+1} e^{-(\lambda/\hbar)|x|} \bar{\psi}(0), \tag{3.58}$$

$$T_{--}^{(n)}(x\pm) = \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2 \rfloor} \frac{MV_{2s+1}}{\hbar^2} \left(\frac{2\lambda}{\hbar}\right)^{2s} \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n-1} (\mp 1)^{n} e^{-(\lambda/\hbar)|x|} \bar{\psi}'(0). \tag{3.59}$$

A fim de simplificar os cálculos de agora em diante, iremos definir os seguintes parâmetros auxiliares:

$$A(\lambda) = \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2 \rfloor} \frac{MV_{2s+2}}{\hbar^2} \left(\frac{2\lambda}{\hbar}\right)^{2s+1}, \tag{3.60}$$

$$B(\lambda) = \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2 \rfloor} \frac{MV_{2s+1}}{\hbar^2} \left(\frac{2\lambda}{\hbar}\right)^{2s}, \tag{3.61}$$

e assim reescrevemos as expressões $T_{++}^{(n)}(x\pm)$, $T_{+-}^{(n)}(x\pm)$, $T_{-+}^{(n)}(x\pm)$ e $T_{--}^{(n)}(x\pm)$ como

$$T_{++}^{(n)}(x\pm) = -\left[\frac{MV_0}{\hbar^2} \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n-1} (\mp 1)^n + A(\lambda) \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n} (\mp 1)^n\right] e^{-(\lambda/\hbar)|x|} \bar{\psi}(0), \tag{3.62}$$

$$T_{+-}^{(n)}(x\pm) = A(\lambda) \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n-1} (\mp 1)^{n-1} e^{-(\lambda/\hbar)|x|} \bar{\psi}'(0), \tag{3.63}$$

$$T_{-+}^{(n)}(x\pm) = -B(\lambda) \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n} (\mp 1)^{n+1} e^{-(\lambda/\hbar)|x|} \bar{\psi}(0), \tag{3.64}$$

$$T_{--}^{(n)}(x\pm) = B(\lambda) \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n-1} (\mp 1)^{n} e^{-(\lambda/\hbar)|x|} \bar{\psi}'(0). \tag{3.65}$$

Substituindo (3.62),(3.63),(3.64) e (3.65) em (3.50), obtemos a seguinte expressão para $\psi^{(n)}(x\pm)$:

$$\begin{aligned} \psi^{(n)}(x\pm) = &\left[-\frac{MV_0}{\hbar^2} \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n-1} (\mp 1)^n - \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n} (\mp 1)^n \left[A(\lambda) \mp B(\lambda)\right]\right] e^{-\lambda|x|/\hbar} \bar{\psi}(0) \\ &+ \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{n-1} (\mp 1)^n \left[\mp A(\lambda) + B(\lambda)\right] e^{-\lambda|x|/\hbar} \bar{\psi}'(0). \end{aligned} \tag{3.66}$$

Para encontrar os valores que estamos buscando, isto é, $\bar{\psi}(0)$ e $\bar{\psi}'(0)$, começaremos tomando $n = 0$ e $n = 1$ na expressão dada por (3.66), obtendo

$$\psi(x\pm) = -\left[\frac{MV_0}{\hbar\lambda} + \left[A(\lambda) \mp B(\lambda)\right]\right] e^{-\lambda|x|/\hbar} \bar{\psi}(0) + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{-1} \left[\mp A(\lambda) + B(\lambda)\right] e^{-\lambda|x|/\hbar} \bar{\psi}'(0), \tag{3.67}$$

e

$$\psi^{'}(x\pm) = -\left[\mp\frac{MV_0}{\hbar^2} + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)[\mp A(\lambda) + B(\lambda)]\right] e^{-\lambda|x|/\hbar}\bar{\psi}(0) + [A(\lambda) \mp B(\lambda)]\, e^{-\lambda|x|/\hbar}\bar{\psi}'(0). \tag{3.68}$$

Tomando o limite para $x \to \pm$, obtemos

$$\psi(0\pm) = -\left[\frac{MV_0}{\hbar\lambda} + [A(\lambda) \mp B(\lambda)]\right]\bar{\psi}(0) + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{-1}[\mp A(\lambda) + B(\lambda)]\,\bar{\psi}'(0), \tag{3.69}$$

$$\psi^{'}(0\pm) = \left[\pm\frac{MV_0}{\hbar^2} + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)[\pm A(\lambda) - B(\lambda)]\right]\bar{\psi}(0) + [A(\lambda) \mp B(\lambda)]\,\bar{\psi}'(0). \tag{3.70}$$

de onde obtemos, por fim,

$$\bar{\psi}(0) = -\left[\frac{MV_0}{\hbar\lambda} + A(\lambda)\right]\bar{\psi}(0) + B(\lambda)\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{-1}\bar{\psi}'(0), \tag{3.71}$$

$$\bar{\psi}'(0) = -\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)B(\lambda)\bar{\psi}(0) + A(\lambda)\bar{\psi}'(0). \tag{3.72}$$

As equações (3.71) e (3.72) definem um sistema linear em $\bar{\psi}(0)$ e $\bar{\psi}'(0)$,

$$\begin{cases} \left[1 + \dfrac{MV_0}{\hbar\lambda} + A(\lambda)\right]\bar{\psi}(0) - \left(\dfrac{\lambda}{\hbar}\right)^{-1} B(\lambda)\bar{\psi}'(0) = 0, \\ \left(\dfrac{\lambda}{\hbar}\right)B(\lambda)\bar{\psi}(0) + [1 - A(\lambda)]\,\bar{\psi}'(0) = 0, \end{cases} \tag{3.73}$$

que só possui soluções não-triviais caso o determinante de sua matriz associada seja nulo:

$$[1 - A(\lambda)]\frac{MV_0}{\hbar\lambda} + \left[1 + B^2(\lambda) - A^2(\lambda)\right] = 0. \tag{3.74}$$

A existência de estados ligados está condicionada à existência de soluções na variável λ para a equação (3.74). Sejam então $\bar{\psi}(0)$ e $\bar{\psi}'(0)$ obtidos de uma solução não-trivial de (3.73) para algum valor de λ que satisfaça à equação (3.74). Isolando os termos $(\lambda/\hbar)^{-1}B(\lambda)\bar{\psi}'(0)$ e $(\lambda/\hbar)B(\lambda)\bar{\psi}(0)$, respectivamente, na primeira e segunda equações do sistema (3.73) e substituindo nas expressões (3.67) e (3.68), obtemos

$$\psi(x\pm) = \left[\bar{\psi}(0) \mp \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{-1}\bar{\psi}'(0)\right] e^{-\lambda|x|/\hbar}, \tag{3.75}$$

$$\psi'(x\pm) = \left[\bar{\psi}'(0) \mp \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)\bar{\psi}(0)\right] e^{-\lambda|x|/\hbar}. \tag{3.76}$$

Esses resultados obtidos nos fornecem um procedimento para estudar o problema de estados ligados para o potencial dado por $V(x) = \sum_{n=0}^{N} V_n \delta^{(n)}(x)$:

- obter expressões para os coeficientes $A(\lambda)$ e $B(\lambda)$, a partir de (3.60) e (3.61);
- determinar os autovalores de estados ligados utilizando a equação (3.74);
- encontrar os coeficientes $\bar{\psi}(0)$ e $\bar{\psi}'(0)$ resolvendo o sistema linear (3.73).

De posse de todos os parâmetros necessários, a função de onda correspondente a este estado ligado é dada pela expressão

$$\psi(x) = \begin{cases} \left[\bar{\psi}(0) - \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{-1} \bar{\psi}'(0)\right] e^{-\lambda x/\hbar}, & x > 0, \\ \left[\bar{\psi}(0) + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{-1} \bar{\psi}'(0)\right] e^{\lambda x/\hbar}, & x < 0. \end{cases} \tag{3.77}$$

É interessante observar que, embora este método de solução não exija que sejam definidas condições de contorno, é possível obtê-las a partir dos resultados obtidos durante o cálculo da solução (3.77). Definindo $\Delta f(0) = f(0+) - f(0-)$, seguem das expressões (3.69) e (3.70) que

$$\frac{1}{2}\Delta\psi(0) = B(\lambda)\bar{\psi}(0) - \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{-1} A(\lambda)\bar{\psi}'(0), \tag{3.78}$$

$$\frac{1}{2}\Delta\psi'(0) = \left[\frac{MV_0}{\hbar^2} + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right) A(\lambda)\right]\bar{\psi}(0) - B(\lambda)\bar{\psi}'(0). \tag{3.79}$$

Comparando as expressões acima com (3.71) e (3.72), obtemos

$$\Delta\psi(0) = -2\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{-1} \psi'(0), \tag{3.80}$$

$$\Delta\psi'(0) = -2\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)\psi(0), \tag{3.81}$$

e combinando as expressões acima através de soma e substração, obtemos, respectivamente,

$$\psi'(0+) = -\frac{\lambda}{\hbar}\psi(0+), \qquad \psi'(0-) = -\frac{\lambda}{\hbar}\psi(0-). \tag{3.82}$$

Nosso próximo passo será estudar alguns casos particulares de potenciais supersingulares. Antes disso, porém, verificaremos um resultado geral que nos será muito útil para esta tarefa: *não existem estados ligados para potenciais supersingulares que envolvam apenas derivadas de ordens ímpares.*

Seja $V(x) = \sum_{n=0}^{N} V_m \delta^{(n)}(x)$ potencial supersingular tal que não possua termos de ordem par, ou seja, $V_{2m} = 0$ para $m = 0, 1, 2, \ldots$. Segue-se de (3.60), portanto, que $A(\lambda) = 0$ e assim a equação (3.74) toma a forma

$$1 + B^2(\lambda) = 0, \tag{3.83}$$

que claramente não possui solução real e, deste modo, não existem valores reais de λ que satisfaçam à condição de existência de estado ligado, isto é, a equação (3.74).

3.5.1 Casos Particulares

Iremos agora estudar o comportamento de alguns casos particulares para os resultados gerais que acabamos de obter, mais especificamente os potenciais que envolvem a função delta e suas derivadas de primeira e segunda ordem.

Embora bem conhecido e consolidado na literatura, o potencial delta é bastante útil como caso ilustrativo para o nosso método. O potencial δ', apesar de ainda não ser tão conhecido, também serve bem ao propósito de caso ilustrativo. O caso do potencial δ'', por sua vez, nunca foi tratado na literatura, até onde é de nosso conhecimento.

Para dar prosseguimento às nossas análises, definiremos as seguintes constantes:

$$\alpha = \frac{MV_0}{\hbar^2}, \qquad \beta = \frac{MV_1}{\hbar^2}, \qquad \gamma = \frac{MV_2}{\hbar^2}, \qquad \kappa = \frac{\lambda}{\hbar}. \tag{3.84}$$

3.5.1.1 O potencial delta

Para o potencial delta $V(x) = V_0\delta(x)$ segue-se que $A(\lambda) = B(\lambda) = 0$. A equação (3.74) fica então expressa por $\alpha/\kappa + 1 = 0$, cuja solução é dada por

$$\kappa = -\alpha = -\frac{MV_0}{\hbar^2}, \tag{3.85}$$

de onde segue que

$$\lambda = -\frac{MV_0}{\hbar}, \tag{3.86}$$

que é válida apenas para $\alpha < 0$, ou seja, $V_0 < 0$. Substituindo no sistema linear (3.73), observa-se que $\bar{\psi}'(0) = 0$ e $\bar{\psi}(0)$ é arbitrário (mas não nulo, pois buscamos soluções não-triviais). Das expressões (3.80) e (3.81), seguem-se que $\psi(x)$ é contínua e $\psi'(x)$ descontínua em $x = 0$, e de (3.77) que a solução da equação é dada por $\psi(x) = \psi(0)e^{\alpha|x|}$, com $\alpha < 0$.

Resta agora normalizar a função de onda. Para isto, devemos encontrar o valor de $\bar{\psi}(0)$ que satisfaça à equação $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\, dx = 1$ e, desse modo,

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\, dx = |\bar{\psi}(0)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\lambda x/\hbar}\, dx = |\bar{\psi}(0)|^2 \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right), \tag{3.87}$$

de onde obtém-se $\bar{\psi}(0) = \sqrt{-\lambda/\hbar} = \sqrt{-\alpha}$.

Por fim, a energia de estado ligado fica dada por

$$E = -\frac{\lambda^2}{2M} = \frac{MV_0^2}{2\hbar^2}, \tag{3.88}$$

e a função de onda normalizada por

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{M|V_0|}{\hbar}} e^{-M|V_0||x|/\hbar^2}, \tag{3.89}$$

e assim recuperamos a solução bem conhecida pela literatura (GRIFFITHS, 1995).

3.5.1.2 O potencial $\delta'(x)$

Sabemos que o potencial $V(x) = V_1\delta'(x)$, dado apenas pela derivada da função delta, não admite soluções de estado ligado; isto segue imediatamente do resultado mostrado em (3.83) e também foi mostrado na referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009). Contudo, adicionando um termo delta no potencial, isto é, $V(x) = V_0\delta(x) + V_1\delta'(x)$, obtemos $A(\lambda) = 0$ e $B(\lambda) = MV_1/\hbar^2 = \beta$, e a equação (3.74) se reduz a

$$\frac{\alpha}{\kappa} + 1 + \beta^2 = 0, \tag{3.90}$$

cuja solução é

$$\kappa = -\frac{\alpha}{1+\beta^2} = -\frac{MV_0/\hbar^2}{1 + (MV_1/\hbar^2)^2}. \tag{3.91}$$

Assim como no caso do potencial delta simples, este caso também admite solução apenas para $\alpha < 0$, isto é, $V_0 < 0$. A solução do sistema linear (3.73) fornece a relação

$$\bar{\psi}'(0) = \bar{\psi}(0)\frac{\alpha\beta}{1+\beta^2}, \tag{3.92}$$

com $\bar{\psi}(0)$ arbitrário. A expressão (3.77) fornece a função de onda, dada por

$$\psi(x) = \begin{cases} \bar{\psi}(0)(1+\beta^2)e^{\frac{\lambda x}{\hbar}}, & x > 0 \\ \bar{\psi}(0)(1-\beta^2)e^{\frac{\lambda x}{\hbar}}, & x < 0. \end{cases} \tag{3.93}$$

Para normalizar esta função, devemos separar a integral em duas partes:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = |\bar{\psi}(0)|^2 \left[\int_{-\infty}^{0} (1-\beta)^2 e^{2\lambda x/\hbar} dx + \int_{0}^{\infty} (1+\beta)^2 e^{-2\lambda x/\hbar} dx\right] \\ &= |\bar{\psi}(0)|^2 \left[(1-\beta)^2 + (1+\beta)^2\right] \frac{\hbar}{2\lambda} = |\bar{\psi}(0)|^2 (1+\beta^2)\kappa = |\bar{\psi}(0)|^2 \frac{(1+\beta^2)^2}{(-\alpha)}, \end{aligned} \tag{3.94}$$

obtendo assim

$$\bar{\psi}(0) = \frac{\sqrt{-\alpha}}{1+\beta^2}, \tag{3.95}$$

e a função de onda normalizada fica expressa como

$$\Psi(x) = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{-\alpha}(1+\beta)}{1+\beta^2} e^{\alpha x/(1+\beta^2)}, & x > 0 \\ \dfrac{\sqrt{-\alpha}(1-\beta)}{1+\beta^2} e^{-\alpha x/(1+\beta^2)}, & x < 0. \end{cases} \tag{3.96}$$

Voltando às constantes originais, obtemos as seguintes expressões para a energia de estado ligado e função de onda, respectivamente,

$$E = -\frac{MV_0^2/\hbar^2}{2[1+M^2V_1^2/\hbar^4]}, \tag{3.97}$$

e

$$\Psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{M|V_0|}{\hbar^2}} \left[\dfrac{1+MV_1/\hbar^2}{1+(MV_1/\hbar^2)^2}\right] e^{-\frac{(M|V_0|/\hbar^2)x}{1+(MV_1/\hbar^2)^2}}, & x > 0 \\ \sqrt{\dfrac{M|V_0|}{\hbar^2}} \left[\dfrac{1-MV_1/\hbar^2}{1+(MV_1/\hbar^2)^2}\right] e^{\frac{(M|V_0|/\hbar^2)x}{1+(MV_1/\hbar^2)^2}}, & x < 0. \end{cases} \tag{3.98}$$

Cabe observar que, tomando $\hbar = 1$, recuperamos os resultados obtidos na referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009).

3.5.1.3 O potencial $\delta''(x)$

Partindo de $N = 2$ e $V_2 \neq 0$, iremos analisar cada possível caso separadamente

(i) $\boldsymbol{V_2 \neq 0}$ **e** $\boldsymbol{V_0 = V_1 = 0}$

Para o potencial dado por $V(x) = V_2\delta''(x)$, temos $A(\lambda) = 2\gamma\kappa$ e $B(\lambda) = 0$, e a equação (3.74) fica dada por

$$1 - A^2(\lambda) = 1 - (2\gamma\kappa)^2 = 0, \tag{3.99}$$

de onde obtemos

$$\kappa = \pm\frac{1}{2|\gamma|} = \pm\frac{\hbar^2}{2M|V_2|}, \tag{3.100}$$

e, portanto, existe um único estado ligado, dado por

$$\lambda = \operatorname{sgn}(V_2)\frac{\hbar^3}{2M|V_2|}. \tag{3.101}$$

Para $\gamma > 0$, tem-se $1 - A(\lambda) = 0$, de modo que (3.73) se reduz a

$$[1 + A(\lambda)]\,\bar{\psi}(0) = 0, \tag{3.102}$$

e, consequentemente, $\bar{\psi}(0) = 0$, de onde segue-se de (3.81) que $\Delta\psi'(x) = 0$, isto é, $\psi'(x)$ é contínua em $x = 0$. A função de onda é, portanto, dada por

$$\psi(x) = \begin{cases} -\kappa^{-1}\bar{\psi}'(0)e^{-\kappa x}, & x > 0, \\ \kappa^{-1}\bar{\psi}'(0)e^{\kappa x}, & x < 0. \end{cases} \tag{3.103}$$

Normalizando a função, tem-se que

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \frac{2}{\kappa^2} |\bar{\psi}'(0)|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{|\bar{\psi}'(0)|^2}{\kappa^3}, \tag{3.104}$$

de onde segue que

$$\frac{|\bar{\psi}'(0)|}{\kappa} = \sqrt{\kappa} = \sqrt{\frac{1}{2\gamma}}, \tag{3.105}$$

e assim, a função normalizada é dada por

$$\Psi(x) = \begin{cases} -\sqrt{\dfrac{1}{2\gamma}} e^{-x/\sqrt{2\gamma}}, & x > 0, \\ \sqrt{\dfrac{1}{2\gamma}} e^{x/\sqrt{2\gamma}}, & x < 0. \end{cases} \tag{3.106}$$

Retornando às constantes originais, obtemos, para a energia de estado ligado,

$$E = -\frac{\lambda^2}{2M} = -\frac{\left(\hbar^2/2M\right)^3}{V_2^2}, \tag{3.107}$$

e a função de onda normalizada é dada por

$$\Psi(x) = \begin{cases} -\sqrt{\dfrac{\hbar^2}{2MV_2}} e^{-\hbar x/\sqrt{2MV_2}}, & x > 0, \\ \sqrt{\dfrac{\hbar^2}{2MV_2}} e^{\hbar x/\sqrt{2MV_2}}, & x < 0, \end{cases} \tag{3.108}$$

para $V_0 = V_1 = 0$ e $V_2 > 0$.

Para $\gamma < 0$, temos $A(\lambda) < 0$ e assim o sistema linear (3.73) se reduz a

$$[1 - A(\lambda)] \, \bar{\psi}'(0) = 0, \tag{3.109}$$

de onde segue-se que $\bar{\psi}'(0) = 0$ e, portanto, a equação (3.80) é dada por $\Delta\bar{\psi}(0) = 0$, de onde concluímos que $\psi(x)$ é contínua em $x = 0$ e expressa por

$$\psi(x) = \begin{cases} \bar{\psi}(0) e^{-\kappa x}, & x > 0, \\ \bar{\psi}(0) e^{\kappa x}, & x < 0. \end{cases} \tag{3.110}$$

Normalizando, tem-se

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 2|\bar{\psi}(0)|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{|\bar{\psi}(0)|^2}{\kappa}, \tag{3.111}$$

de onde obtemos

$$|\bar{\psi}(0)| = \sqrt{\kappa} = \sqrt{\frac{1}{2|\gamma|}}, \tag{3.112}$$

e assim a função de onda é

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{1}{2|\gamma|}} e^{|x/2\gamma|}. \tag{3.113}$$

Voltando às constantes originais, obtemos a energia de estado ligado

$$E = -\frac{\lambda^2}{2M} = -\frac{(\hbar^2/2M)^3}{V_2^2}, \tag{3.114}$$

e a função de onda normalizada

$$\Psi(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2M|V_2|}} e^{\hbar|x|/\sqrt{2M|V_2|}}, \tag{3.115}$$

para $V_0 = V_1 = 0$ e $V_2 < 0$.

É interessante observar a diferença entre as energias de estado ligado do potencial delta e a do potencial dado pela derivada de segunda ordem da função delta. Observando a expressão para a energia para o potencial delta, dada por (3.88), nota-se que o valor absoluto da energia decresce com o decrescimento da constante de acoplamento V_0, enquanto a expressão da energia para o potencial $V(x) = \delta''(x)$, dada por (3.114), mostra que o valor absoluto da energia decresce com o crescimento da constante de acoplamento V_2. Além disso, o caso do potencial delta só admite estado ligado para $V_0 < 0$, enquanto o potencial com a derivada de segunda ordem da função delta admite estados ligados para $V_2 < 0$ e $V_2 > 0$.

Pode-se dizer que a relação entre a energia de estados ligados e os valores das constantes de acoplamento V_0 e V_2 segue o que seria esperado, tendo em vista suas dimensões físicas. De fato, considerando $V(x) = \sum_{n=0}^{N} V_n \delta^{(n)}(x)$, a dimensão de $\delta^{(n)}(x)$ é $[L]^{-(n+1)}$, com $[L]$ sendo a dimensão de comprimento; deste modo, a dimensão de V_n deve ser $[E][L]^{(n+1)}$, sendo $[E]$ a dimensão de energia. Como a dimensão de energia pode ser escrita na forma $[E] = \hbar^2/M[L]^2$, segue que

$$[E] = \left(\frac{\hbar^2}{M}\right)^{(n+1)/(n-1)} [V_n]^{2/(1-n)}, \tag{3.116}$$

e assim, tomando $n = 2$, verificamos que a equação (3.114) apresenta as dimensões físicas corretamente. Além disso, a partir das dimensões de V_0 e V_2 podemos concluir que

$$[V_0][V_2] = [E]^2[L]^4 = \left[\frac{\hbar^2}{M}\right]^2, \tag{3.117}$$

e, definindo $U_2 = (\hbar^2/2M)^2 V_2^{-1}$, a equação (3.114) pode ser reescrita na forma

$$E = -\frac{2M}{\hbar^2}|U_2|^2, \tag{3.118}$$

que possui o mesmo formato da expressão da energia para o caso do potencial delta e U_2 tem a mesma dimensão física de V_0. Ainda assim, a função de onda no espaço de posição é descontínua em $x = 0$ no caso do potencial $\delta''(x)$ mas é contínua no caso do potencial delta.

(ii) $\boldsymbol{V_2 \neq 0, V_1 \neq 0}$ **e** $\boldsymbol{V_0 = 0}$

Para o potencial dado por $V(x) = V_1\delta'(x) + V_2\delta''(x)$, temos $A(\lambda) = 2\lambda\kappa$ e $B(\lambda) = \beta$, e assim a equação (3.74) se torna

$$1 + \beta^2 - (2\gamma\kappa)^2 = 0, \tag{3.119}$$

de modo que obtemos

$$\kappa = \pm\frac{\sqrt{1+\beta^2}}{2|\gamma|}, \tag{3.120}$$

e mais uma vez tem-se um único estado ligado, com o autovalor dado por

$$\lambda = \operatorname{sgn}(V_2)\frac{\sqrt{1+(MV_1/\hbar^2)^2}}{MV_2/\hbar^2}. \tag{3.121}$$

Cabe observar que $A(\lambda) \neq \pm 1$, uma vez que segue-se de (3.119) que

$$A(\lambda) = \operatorname{sgn}(\gamma)\sqrt{1+\beta^2}, \tag{3.122}$$

e assim $\bar{\psi}(0), \bar{\psi}'(0) \neq 0$ e, portanto, segue-se de (3.80) e (3.81) que $\psi(x)$ e $\psi'(x)$ não são contínuas em $x = 0$.

O sistema linear (3.73) fica expresso como

$$\begin{cases} \left[1 + 2\gamma\kappa\right]\bar{\psi}(0) - \dfrac{\beta}{\kappa}\bar{\psi}'(0) = 0, \\ \kappa\beta\bar{\psi}(0) + \left[1 - 2\gamma\kappa\right]\bar{\psi}'(0) = 0, \end{cases} \tag{3.123}$$

de onde obtemos a relação

$$\bar{\psi}'(0) = \frac{\kappa\left[1 + 2\gamma\kappa\right]}{\beta}\bar{\psi}(0), \tag{3.124}$$

que fornece a solução

$$\psi(x) = \begin{cases} \bar{\psi}(0)\left[1 - \dfrac{1}{\beta}\left(1 + \operatorname{sgn}(\gamma)\sqrt{1+\beta^2}\right)\right]e^{-\sqrt{1+\beta^2}x/2|\gamma|}, & x > 0, \\ \bar{\psi}(0)\left[1 + \dfrac{1}{\beta}\left(1 + \operatorname{sgn}(\gamma)\sqrt{1+\beta^2}\right)\right]e^{\sqrt{1+\beta^2}x/2|\gamma|}, & x < 0. \end{cases} \tag{3.125}$$

As expressões para este caso particular já começam a ficar mais complexas. Vamos agora encontrar o valor de $\bar{\psi}(0)$ que normalize a função de onda:

$$
\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx \\
&= |\bar{\psi}(0)|^2 \left\{ \left[1 + \frac{1}{\beta} \left(1 + \operatorname{sgn}(\gamma)\sqrt{1+\beta^2} \right) \right]^2 \int_{-\infty}^{0} e^{2\kappa x} dx \right. \\
&\qquad \left. + \left[1 - \frac{1}{\beta} \left(1 + \operatorname{sgn}(\gamma)\sqrt{1+\beta^2} \right) \right]^2 \int_{0}^{\infty} e^{-2\kappa x} dx \right\} \\
&= \frac{|\bar{\psi}(0)|^2}{2\kappa} \left[2 + \frac{2\left(1 + \operatorname{sgn}(\gamma)\sqrt{1+\beta^2}\right)^2}{\beta^2} \right] \\
&= \frac{|\bar{\psi}(0)|^2}{\kappa\beta^2} \left[2\beta^2 + 2 + 2\operatorname{sgn}(\gamma)\sqrt{1+\beta^2} \right] \\
&= \frac{4|\bar{\psi}(0)|^2 |\gamma|}{\beta^2\sqrt{1+\beta^2}} \left[\beta^2 + 1 + \operatorname{sgn}(\gamma)\sqrt{1+\beta^2} \right] \\
&= \frac{4|\bar{\psi}(0)|^2 |\gamma|}{\beta^2} \left[\sqrt{1+\beta^2} + \operatorname{sgn}(\gamma) \right],
\end{aligned}
$$

de onde segue que

$$
\bar{\psi}(0) = \frac{\beta}{2\sqrt{|\gamma| \left[\sqrt{1+\beta^2} + \operatorname{sgn}(\gamma) \right]}}, \tag{3.126}
$$

e assim a função de onda normalizada é dada por

$$
\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{\beta - 1 + \operatorname{sgn}(\gamma)\sqrt{1+\beta^2}}{2\sqrt{|\gamma| \left[\sqrt{1+\beta^2} + \operatorname{sgn}(\gamma) \right]}} e^{-\sqrt{1+\beta^2}x/2|\gamma|}, & x > 0, \\[2ex] \dfrac{\beta + 1 + \operatorname{sgn}(\gamma)\sqrt{1+\beta^2}}{2\sqrt{|\gamma| \left[\sqrt{1+\beta^2} + \operatorname{sgn}(\gamma) \right]}} e^{\sqrt{1+\beta^2}x/2|\gamma|}, & x < 0. \end{cases} \tag{3.127}
$$

(iii) $\boldsymbol{V_2 \neq 0, V_0 \neq 0}$ **e** $\boldsymbol{V_1 = 0}$

Para o potencial dado por $V(x) = V_0\delta(x) + V_2\delta''(x)$, temos $A(\lambda) = 2\gamma\kappa$ e $B(\lambda) = 0$, e a equação (3.74) fica dada por

$$
(1 - 2\gamma\kappa)\frac{\alpha}{\kappa} + 1 - 4\gamma^2\kappa^2 = 0. \tag{3.128}
$$

Esta equação pode ser fatorada de modo a ser reescrita como

$$
(1 - 2\gamma\kappa)\left(\frac{\alpha}{\kappa} + 1 + 2\gamma\kappa\right) = 0, \tag{3.129}
$$

e assim podemos dividir a resolução desta equação em duas partes:

(a) $\mathbf{1 - 2\gamma\kappa = 0}$:

Nesse caso, $\kappa = \kappa_0 = 1/2$, e o problema se assemelha ao caso $V(x) = V_2\delta''(x)$, para $V_2 > 0$, e deste modo a energia de estado ligado é dada por

$$E = -\frac{(\hbar^2/2M)^3}{V_2^2}, \tag{3.130}$$

e a função de onda normalizada é dada por

$$\Psi(x) = \begin{cases} -\sqrt{\dfrac{1}{2\gamma}}e^{-x/\sqrt{2\gamma}} = -\sqrt{\dfrac{\hbar^2}{2MV_2}}e^{-\hbar x/\sqrt{2MV_2}}, & x > 0, \\ \sqrt{\dfrac{1}{2\gamma}}e^{x/\sqrt{2\gamma}} = \sqrt{\dfrac{\hbar^2}{2MV_2}}e^{\hbar x/\sqrt{2MV_2}}, & x < 0. \end{cases} \tag{3.131}$$

(b) $\boldsymbol{\alpha/\kappa + 1 + 2\gamma\kappa = 0}$

Neste caso, o sistema (3.73) se reduz a

$$(1 - \alpha\gamma\kappa)\,\bar{\psi}'(0) = 0, \tag{3.132}$$

de onde se segue imediatamente que $\bar{\psi}'(0) = 0$ e, portanto, $\Delta\psi(0) = 0$. Logo, $\psi(x)$ é contínua em $x = 0$ e dada pela expressão

$$\psi(x) = \bar{\psi}(0)e^{-\kappa|x|}, \tag{3.133}$$

que, após normalização, é expressa por

$$\Psi(x) = \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x|}. \tag{3.134}$$

Os possíveis valores de κ são dados pelas soluções da equação

$$2\gamma\kappa^2 + \kappa + \alpha = 0, \tag{3.135}$$

que dependem do valor de seu discriminante,

$$\Delta = 1 - 8\alpha\gamma, \tag{3.136}$$

e são dadas por

$$\kappa_\pm = \frac{-1 \pm \sqrt{\Delta}}{4\gamma}. \tag{3.137}$$

Essas soluções precisam satisfazer à condição de serem reais e positivas. Assim, a primeira condição a ser satisfeita é $\Delta \geqslant 0$. Além disso, estamos considerando $V_0, V_2 \neq 0$, isto é, $\alpha \neq 0$ e $\gamma \neq 0$ e, portanto, $\Delta \neq 1$. Iremos, então, dividir este problema em três casos:

- $\mathbf{0 < \Delta < 1}$:
  Neste caso, temos duas soluções,

$$\kappa_{+} = \frac{-1 + \sqrt{\Delta}}{4\gamma}, \tag{3.138}$$

$$\kappa_{-} = \frac{-1 - \sqrt{\Delta}}{4\gamma}, \tag{3.139}$$

  dadas por (3.137), ambas válidas apenas para $\gamma < 0$. Segue-se, portanto, que $0 < \alpha\gamma \leqslant 1/8$, de onde segue que devemos também ter que $\alpha < 0$.

- $\mathbf{\Delta > 1}$:
  Neste caso, temos também duas soluções,

$$\kappa'_{+} = \frac{-1 + \sqrt{\Delta}}{4\gamma}, \tag{3.140}$$

  válida para $\gamma > 0$, e

$$\kappa'_{-} = \frac{-1 - \sqrt{\Delta}}{4\gamma}, \tag{3.141}$$

  para $\gamma < 0$. Observamos que, caso $\alpha\gamma = -1$, $\Delta = 9$, de onde segue-se que $\kappa_{+} = 1/2\gamma$ para $\gamma > 0$, ou seja, recupera-se a solução κ_0. Deste modo, suporemos que $\alpha\gamma \neq -1$ para a solução κ_{+}.
  Da condição $\Delta > 1$, tem-se que $\alpha\gamma < 0$ e assim temos que a solução κ_{+} existe para $\gamma > 0$ e $\alpha < 0$, enquanto κ_{-} existe para $\gamma < 0$ e $\alpha > 0$.

- $\mathbf{\Delta = 0}$:
  Neste caso, temos uma única solução, dada por $\kappa'_0 = -1/4\gamma$, válida apenas para $\gamma < 0$, com $\alpha = 1/8\gamma$.

Como as expressões obtidas para as soluções já se encontram em uma forma bastante complexa, as deixaremos expressas em termos das constantes α, γ e κ. Para facilitar a compreensão, expressaremos todos os possíveis resultados de forma resumida:

1. Para $\gamma > 0$, existe um estado ligado independente do valor de α, dado por

$$\kappa_0 = \frac{\lambda_0}{\hbar} = \frac{1}{2\gamma}, \tag{3.142}$$

   e a função de onda no espaço de posição é dada por

$$\Psi_0(x) = \begin{cases} -\sqrt{\dfrac{1}{2\gamma}} e^{-x/2\gamma}, & x > 0, \\ \sqrt{\dfrac{1}{2\gamma}} e^{x/2\gamma}, & x > 0. \end{cases} \tag{3.143}$$

2. Para $\gamma > 0$ e $\alpha < 0$ tais que $\alpha\gamma \neq 1$, existe mais um estado ligado, dado por

$$\kappa'_{+} = \frac{\lambda'_{+}}{\hbar} = \frac{-1 + \sqrt{1 - 8\alpha\gamma}}{4\gamma}. \tag{3.144}$$

3. Para $\gamma < 0$ e $\alpha > 0$ existe um estado ligado, dado por

$$\kappa'_- = \frac{\lambda'_-}{\hbar} = \frac{-1 - \sqrt{1 - 8\alpha\gamma}}{4\gamma}. \tag{3.145}$$

4. Para $\gamma < 0$ e $\alpha < 0$ tais que $\alpha\gamma < 1/8$, existem dois estados ligados, dados por

$$\kappa_\pm = \frac{\lambda_\pm}{\hbar} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 8\alpha\gamma}}{4\gamma}. \tag{3.146}$$

5. Para $\gamma < 0$ e $\alpha < 0$ tais que $\alpha\gamma = 1/8$, existe um estado ligado dado por

$$\kappa^0_- = \frac{\lambda^0_-}{\hbar} = -\frac{1}{4\gamma}. \tag{3.147}$$

Para os autovalores $\kappa = \kappa_\pm$, $\kappa'_\pm$ e κ^0_-, a função de onda normalizada é dada por

$$\Psi(x) = \sqrt{\kappa}e^{\kappa|x|}. \tag{3.148}$$

6. Para $\gamma < 0$ e $\alpha < 0$ tais que $\alpha\gamma > 1/8$, não existem estados ligados.

(iv) $\boldsymbol{V_0 \neq 0}$, $\boldsymbol{V_1 \neq 0}$ **e** $\boldsymbol{V_2 \neq 0}$

Por fim, o caso mais geral, $V(x) = V_0\delta(x) + V_1\delta'(x) + V_2\delta''(x)$, onde tem-se que $A(\lambda) = 2\gamma\kappa$ e $B(\lambda) = \beta$. A equação (3.74) fica expressa na forma

$$(1 - 2\gamma\kappa)\frac{\alpha}{\kappa} + \left(1 - 4\gamma^2\kappa^2 + \beta^2\right) = 0. \tag{3.149}$$

Agrupando os termos, notamos que trata-se de uma equação cúbica reduzida na variável κ, isto é

$$\kappa^3 + p\kappa + q = 0, \tag{3.150}$$

com

$$p = \frac{2\alpha\gamma - 1 - \beta^2}{4\gamma^2}, \quad q = -\frac{\alpha}{4\gamma^2}. \tag{3.151}$$

Esta equação pode ser analisada utilizando a fórmula de Cardano-Tartaglia. No entanto, observando a existência de valores complexos nas expressões das soluções e a dificuldade em separar as soluções reais das complexas neste caso, utilizaremos uma outra abordagem, proposta na referência (BIRKHOFF; LANE, 2010), que fornece as raízes reais da equação, que são as que estamos interessados neste trabalho.

A ideia deste método é fazer uma mudança de variáveis $\kappa = zh$ na equação (3.150) de modo a transformá-la em uma equação na forma

$$4z^3 \pm 3z + C = 0, \tag{3.152}$$

sendo C uma constante arbitrária, e explorar relações trigonométricas do tipo

$$\operatorname{sen}(3\theta) = -4\operatorname{sen}^3\theta + 3\operatorname{sen}\theta, \tag{3.153}$$

$$\cos(3\theta) = 4\cos^3\theta - 3\cos\theta, \tag{3.154}$$

$$\operatorname{senh}(3\theta) = 4\operatorname{senh}^3\theta + 3\operatorname{senh}\theta, \tag{3.155}$$

$$\cosh(3\theta) = 4\cosh^3\theta - 3\cosh\theta, \tag{3.156}$$

que são demonstradas no Apêndice D.

Comparando as equações (3.150) e (3.152), obtemos a relação $p = 3h^2/4$. Como p pode, a princípio, assumir valores positivos ou negativos, tomamos

$$h = \sqrt{\frac{4|p|}{3}}, \tag{3.157}$$

e multiplicamos (3.150) por $4/h^3$, obtendo assim a equação

$$4z^3 + 3\operatorname{sgn}(p)z + \operatorname{sgn}(q)|\omega| = 0, \tag{3.158}$$

com ω dado por

$$\omega = \frac{27q^2}{4|p|^3} = \frac{27\alpha^2\gamma^2}{|2\alpha\gamma - 1 - \beta^2|^3}. \tag{3.159}$$

Para estudar a equação (3.150), dividimos o problema em 3 casos:

(a) $\boldsymbol{p > 0}$:

Esta condição equivale a $\alpha\gamma > (1+\beta^2)/2$. A equação (3.158) fica dada por

$$4z^3 + 3z + \operatorname{sgn}(q)|\omega| = 0. \tag{3.160}$$

Para $z \in \mathbb{R}$, podemos escrever $z = \operatorname{senh}\theta$, com $\theta \in \mathbb{R}$, de onde obtemos

$$4\operatorname{senh}^3\theta + 3\operatorname{senh}\theta + \operatorname{sgn}(q)|\omega| = 0. \tag{3.161}$$

Utilizando a relação dada pela equação (3.155), obtemos

$$\operatorname{senh}(3\theta) = -\operatorname{sgn}(q)|\omega|. \tag{3.162}$$

Isolando θ e voltando à variável z, tem-se que

$$z = -\operatorname{sgn}(q)\left[\frac{\operatorname{arcsenh}\,|\omega|}{3}\right], \tag{3.163}$$

de onde segue-se que

$$\kappa = -\operatorname{sgn}(q)\sqrt{\frac{4p}{3}}\operatorname{senh}\left(\frac{1}{3}\operatorname{arcsenh}\sqrt{\frac{27q^2}{4p^3}}\right). \tag{3.164}$$

Como os valores de κ que nos interessam são os reais e positivos, segue-se que $q < 0$ e, portanto, $\alpha > 0$ e $\gamma > 0$. Em suma, para $\alpha\gamma > (1+\beta^2)/2$, existe estado ligado apenas para $\alpha > 0$, sendo dado por

$$\kappa = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{2\alpha\gamma - 1 - \beta^2}{3}}\,\mathrm{senh}\left[\frac{1}{3}\,\mathrm{arcsenh}\,\sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(2\alpha\gamma - 1 - \beta^2)^3}}\right] \tag{3.165}$$

(b) $\boldsymbol{p = 0}$:

Neste caso, tem-se $\alpha\gamma = (1+\beta^2)/2$ e a equação (3.150) se reduz a

$$\kappa^3 + q = 0, \tag{3.166}$$

cuja solução é dada por

$$\kappa = \sqrt[3]{-q} = \sqrt[3]{\frac{\alpha}{4\gamma^2}} = \sqrt[3]{\frac{1+\beta^2}{8\gamma^3}} = \frac{1}{2\gamma}\sqrt[3]{1+\beta^2}, \tag{3.167}$$

e portanto o problema admite estados ligados apenas para $\alpha > 0$, e segue-se também que $\gamma > 0$.

(c) $\boldsymbol{p < 0}$:

Esta condição equivale a $\alpha\gamma < (1+\beta^2)/2$ e a equação (3.158) fica dada por

$$4z^3 - 3z + \mathrm{sgn}(q)|\omega| = 0. \tag{3.168}$$

No caso $p > 0$, simplesmente tomamos $z = \mathrm{senh}\,\theta$ e utilizamos a relação dada pela equação (3.155), visto que a função senh é bijetora em $\mathbb{R}$. No caso $p < 0$, entretanto, a substituição $z = \mathrm{senh}\,\theta$ não vale em todos os casos para a equação (3.168), uma vez que a imagem do cosseno hiperbólico é o intervalo $[1, \infty)$. Dividiremos então o problema em três casos:

- $\boldsymbol{|\omega| = 1}$:
  Para $|\omega| = 1$, tem-se que $27q^2 = -4p^3$, de onde obtemos a equação

$$3(\alpha\gamma)^{2/3} + 2\alpha\gamma - (1+\beta^2) = 0. \tag{3.169}$$

  Escrevendo $x^3 = \alpha\gamma$ e ajeitando os termos, obtemos a equação cúbica

$$x^3 + \frac{3x^2}{2} - \frac{(1+\beta^2)}{2} = 0, \tag{3.170}$$

  e, tomando a mudança de variáveis $x = y - 2$, chegamos a uma equação cúbica reduzida,

$$y^3 - \frac{3y}{4} - \frac{(1+\beta^2)}{2} = 0, \tag{3.171}$$

  que resolveremos utilizando a fórmula de Cardano-Tartaglia, escrevendo

$$\tilde{p} = -\frac{3}{4}, \quad \tilde{q} = -\frac{(1+2\beta^2)}{4}.$$

O discriminante desta equação é dado por

$$\tilde{D} = -4\tilde{p}^3 - 27\tilde{q}^2 = -\frac{27\beta^2(1+\beta^2)}{4}.$$

Como $\tilde{D} < 0$, a equação em y possui duas soluções complexas conjugadas e uma real, que é a que nos interessa, dada por

$$y = \left(-\frac{\tilde{q}}{2} + \sqrt{\frac{\tilde{q}^2}{4} + \frac{\tilde{p}^2}{27}}\right)^{1/3} + \left(-\frac{\tilde{q}}{2} - \sqrt{\frac{\tilde{q}^2}{4} + \frac{\tilde{p}^2}{27}}\right)^{1/3}. \tag{3.172}$$

Observando que

$$\frac{\tilde{q}^2}{4} + \frac{\tilde{p}^3}{27} = -\frac{\tilde{D}}{4\times 27} = -\frac{\beta^2(1+\beta^2)}{16},$$

obtemos

$$-\frac{\tilde{q}}{2} \pm \sqrt{\frac{\tilde{q}^2}{4} + \frac{\tilde{p}^3}{27}} = \frac{1+\beta^2}{8} \pm \frac{2|\beta|\sqrt{1+\beta^2}}{8} + \frac{\beta^2}{8} = \frac{(|\beta| \pm \sqrt{1+\beta^2})^2}{8},$$

e assim, vemos que a condição $|\omega| = 1$ é equivalente a

$$8\alpha\gamma = \chi(\beta) = \left[(|\beta| + \sqrt{1+\beta^2})^{2/3} + (|\beta| - \sqrt{1+\beta^2})^{2/3} - 1\right]^3. \tag{3.173}$$

A equação (3.158), neste caso, é dada por

$$4z^3 - 3z + \operatorname{sgn}(q) = 0, \tag{3.174}$$

cujas soluções são $z_1 = -\operatorname{sgn}(q)$ e $z_2 = \operatorname{sgn}(q)/2$. Como estamos interessados nas soluções positivas, para $q < 0$ $(\alpha > 0)$ o estado ligado é dado por

$$\kappa = h = \sqrt{\frac{\beta^2 + 1 - 2\alpha\gamma}{3\gamma^2}} = \frac{1}{2|\gamma|}\sqrt{\frac{4(\beta^2+1) - \chi(\beta)}{3}}, \tag{3.175}$$

e para $q > 0$ $(\alpha < 0)$ o estado ligado é dado por

$$\kappa = \frac{h}{2} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\beta^2 + 1 - 2\alpha\gamma}{3\gamma^2}} = \frac{1}{4|\gamma|}\sqrt{\frac{4(\beta^2+1) - \chi(\beta)}{3}}, \tag{3.176}$$

- $|\boldsymbol{\omega}| > \mathbf{1}$:
  Esta condição é equivalente a $8\alpha\gamma > \chi(\beta)$. Escrevendo $z = \cosh\theta$, a equação (3.168) fica

$$4\cosh^3\theta - 3\cosh\theta + \operatorname{sgn}(q)|\omega| = 0. \tag{3.177}$$

Utilizando a relação (3.156), obtemos

$$\cosh(3\theta) = -\operatorname{sgn}(q)|\omega|, \tag{3.178}$$

que só tem solução se o lado direito for maior ou igual a 1, de modo que é necessário que q seja negativo e, nesse caso, temos

$$z = \cosh\left(\frac{1}{3}\ \text{arccosh}\ |\omega|\right), \tag{3.179}$$

de onde obtem-se, por fim,

$$\kappa = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cosh\left[\frac{1}{3}\ \text{arccosh}\ \sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(1+\beta^2-2\alpha\gamma)^3}}\right], \tag{3.180}$$

para $\alpha > 0$.
Este procedimento feito acima só é válido para $z > 0$, de onde segue que $\kappa > 0$. Para $z < 0$, deve-se supor $z = -\cosh\theta$, porém, como estamos interessados apenas em valores positivos para κ, isto não é necessário.

- $|\boldsymbol{\omega}| < \mathbf{1}$:
Esta condição é equivalente a $8\alpha\gamma < \chi(\beta)$. Como $|\omega| < 1$, faremos a substituição $z = \cos\theta$ na equação (3.158), obtendo

$$4\cos^3\theta - 3\cos\theta + \text{sgn}(q)|\omega| = 0, \tag{3.181}$$

e utilizando a a expressão (3.154), obtemos

$$\cos(3\theta) = -\,\text{sgn}(q)|\omega|. \tag{3.182}$$

Para $\text{sgn}(q) = -1$, a equação toma a forma $\cos(3\theta) = |\omega|$. Os valores de θ que satisfazem a esta relação estão no domínio

$$-\frac{\pi}{2} + 2k\pi < 3\theta < \frac{\pi}{2} + 2k\pi, \quad k \in \mathbb{Z},$$

que corresponde ao primeiro e quarto quadrante do ciclo trigonométrico.
Cabem aqui algumas observações importantes. Sabemos que os valores de θ que satisfazem à equação (3.182) são dados em termos da função arco cosseno, que tem como conjunto imagem o intervalo $[0, \pi]$ e, deste modo, $2\pi/3 - \theta$ também é uma solução. Além disso, para descrever completamente o conjunto de soluções é necessário considerar três voltas completas no ciclo trigonométrico, com respeito a $\varphi = 3\theta$.
A Figura 3 ilustra a estrutura das soluções no ciclo trigonométrico. A área hachurada representa as regiões onde pode existir soluções e as linhas sólidas são um exemplo de possível solução: as vermelhas representam θ_1 e θ_2; as verdes representam θ_3 e θ_4 e, por fim, as azuis representam θ_5 e θ_6.

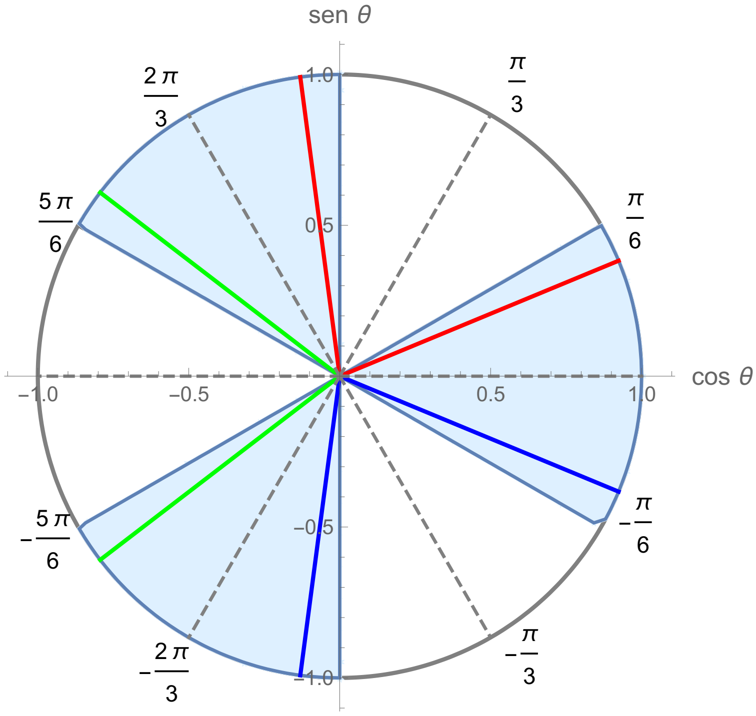


Figura 3 – Representação das soluções de $\cos(3\theta) = |\omega|$ no ciclo trigonométrico.

Desta forma, temos 6 soluções

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \theta, & \theta_2 &= \frac{2\pi}{3} - \theta, & \theta_3 &= \frac{2\pi}{3} + \theta, \\ \theta_4 &= \frac{4\pi}{3} - \theta, & \theta_5 &= \frac{4\pi}{3} + \theta, & \theta_6 &= 2\pi - \theta, \end{aligned} \tag{3.183}$$

com

$$\theta = \frac{1}{3}\arccos\sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(1+\beta^2-2\alpha\gamma)^3}} \in \left(0, \frac{\pi}{6}\right). \tag{3.184}$$

Valendo-se da paridade do arco cosseno e também da expressão das somas de arcos, observamos que as que as seguintes duplas de arco são equivalentes: θ_1 e θ_6; θ_2 e θ_5; e θ_3 e θ_4, o que nos leva a 3 soluções em z, que podem ser expressas por

$$z_1 = \cos\theta, \quad z_2 = \cos\left(\theta + \frac{2\pi}{3}\right), \quad z_3 = \cos\left(\theta + \frac{4\pi}{3}\right),$$

com θ dada pela expressão (3.184).

Com o auxílio da Figura 3, observamos que, $z_1 > 0$ e $z_2, z_3 < 0$. Como estamos interessados apenas em soluções positivas, segue-se que, para $\alpha > 0$ e $\gamma > 0$ tal que $\alpha\gamma < 1/8$ ou $\alpha > 0$ e $\gamma < 0$, temos um estado ligado dado por

$$\kappa_1 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\theta, \tag{3.185}$$

com $\theta \in (0, \pi/6)$.

Para $\operatorname{sgn}(q) = 1$, a equação toma a forma $\cos(3\theta) = -|\omega|$, que tem como solução os intervalos

$$\frac{\pi}{2} + 2k\pi < 3\theta < \frac{3\pi}{2} + 2k\pi, \quad k \in \mathbb{Z},$$

que correspondem aos segundo e terceiro quadrantes do ciclo trigonométrico. Seguindo o mesmo raciocínio do caso anterior, temos as seis soluções Desta forma, temos 6 soluções para θ, dadas por

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \theta, & \theta_2 &= \frac{2\pi}{3} - \theta, & \theta_3 &= \frac{2\pi}{3} + \theta, \\ \theta_4 &= \frac{4\pi}{3} - \theta, & \theta_5 &= \frac{4\pi}{3} + \theta, & \theta_6 &= 2\pi - \theta, \end{aligned} \tag{3.186}$$

com

$$\theta = \frac{1}{3}\arccos\sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(1+\beta^2-2\alpha\gamma)^3}} \in \left(\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{3}\right).$$

Na Figura 4, vemos uma representação dessas 6 soluções em θ e as regiões em que elas podem estar no ciclo trigonométrico.

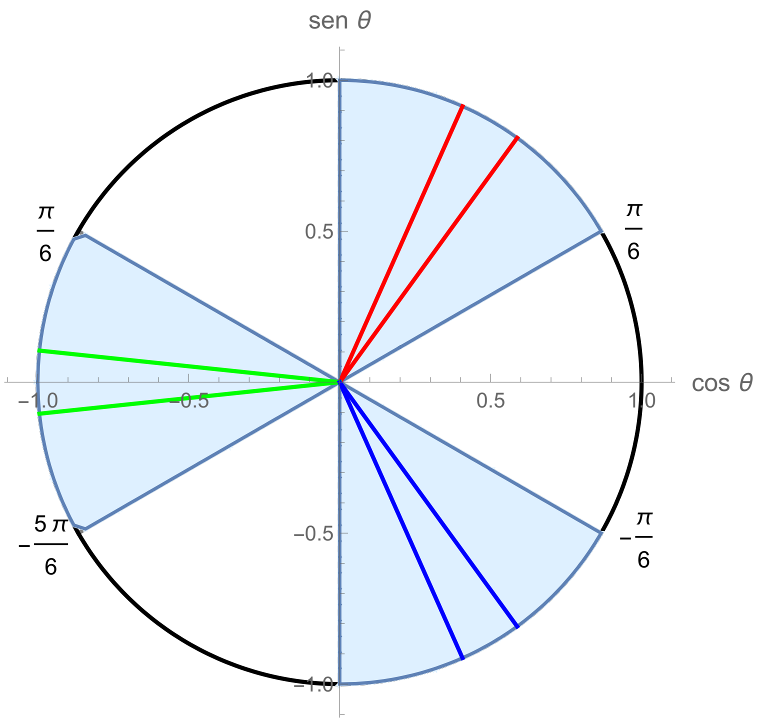


Figura 4 – Representação das soluções de $\cos(3\theta) = -|\omega|$ no ciclo trigonométrico.

Novamente, com o auxílio do gráfico e das propriedades de paridade do arco cosseno, obtemos as seguintes soluções, na variável z:

$$\frac{\pi}{6} + 2k\pi < 3\theta < \frac{\pi}{2} + 2k\pi, \quad k \in \mathbb{Z},$$

e as soluções são dadas por

$$z_1 = \cos\theta, \qquad z_2 = \cos\left(\theta + \frac{2\pi}{3}\right), \qquad z_3 = \cos\left(\theta + \frac{4\pi}{3}\right).$$

Neste caso, $z_1 > 0$, $z_3 > 0$ e $\gamma > 0$, e $z_2 > 0$. Deste modo, para $\alpha < 0$ e $\gamma > 0$ ou $\alpha < 0$ e $\gamma < 0$ tal que $\alpha\gamma < 1/8$, temos dois estados ligados,

$$\kappa_1 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\theta, \tag{3.187}$$

$$\kappa_2 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\left(\theta+\frac{4\pi}{3}\right), \tag{3.188}$$

com $\theta \in (\pi/6, \pi/2)$. Entretanto, para escrever corretamente todas as soluções devemos nos atentar a alguns detalhes. Observando que o termo

$$\arccos\sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(1+\beta^2-2\alpha\gamma)^2}} \tag{3.189}$$

assume valores mais baixos quando α e γ têm sinais diferentes do que caso seus sinais sejam iguais, segue que a solução dada por (3.185) só vale para o caso $\alpha, \gamma > 0$, uma vez que para o caso $\alpha > 0$, $\gamma < 0$ o valor de θ sai do domínio especificado. Do mesmo modo, as soluções dadas por (3.187) e (3.188) valem apenas para $\alpha < 0$ e $\gamma > 0$.
Para contornar este problema, contaremos com o auxílio das soluções θ obtidas no segundo quadrante, mas descartadas por apresentarem valores negativos para o cosseno, adicionando um sinal negativo à solução. Para $\alpha > 0$ e $\gamma < 0$, a solução fica dada por

$$\kappa_3 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\left(\theta+\frac{2\pi}{3}\right), \tag{3.190}$$

com $\theta \in (\pi/6, \pi/2)$, e para $\alpha < 0$ e $\gamma < 0$ as soluções são dadas por

$$\kappa_4 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\left(\theta+\frac{2\pi}{3}\right), \tag{3.191}$$

$$\kappa_5 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\left(\theta+\frac{4\pi}{3}\right), \tag{3.192}$$

para $\theta \in (0, \pi/6)$.

O sistema linear (3.74), neste caso, é dado por

$$\begin{cases} (1+\alpha/\kappa+2\gamma\kappa)\,\bar{\psi}(0) - (\beta/\kappa)\,\bar{\psi}'(0) = 0, \\ \\ \kappa\beta\bar{\psi}(0) + (1-2\gamma\kappa)\,\bar{\psi}'(0) = 0, \end{cases} \tag{3.193}$$

e nenhum coeficiente zera no sistema. No entanto, como os autovalores estão condicionados ao determinante da matriz associada a este sistema ser zero, segue que as duas equações são linearmente dependentes, de modo que pode-se escolher isolar tanto

$\psi(\bar{0})$ quanto $\psi'(\bar{0})$ para obter uma expressão para a solução $\psi(x)$. Como pretendemos comparar a solução para este caso com as obtidas no item (iii), encontraremos expressões utilizando as duas opções. Isolando $\psi'(\bar{0})$, obtemos

$$\psi'(\bar{0}) = -\left(\frac{\kappa\beta}{1-2\gamma\kappa}\right)\psi(\bar{0}), \tag{3.194}$$

de onde segue a solução

$$\psi(x) = \begin{cases} \left[1+\dfrac{\beta}{1-2\gamma\kappa}\right]\psi(\bar{0})e^{-\kappa x}, & x>0, \\ \left[1-\dfrac{\beta}{1-2\gamma\kappa}\right]\psi(\bar{0})e^{\kappa x}, & x<0. \end{cases} \tag{3.195}$$

Agora, isolando $\psi(\bar{0})$, obtemos

$$\psi(\bar{0}) = \frac{\beta\psi'(\bar{0})}{\kappa\left(1+\alpha/\kappa+2\gamma\kappa\right)}, \tag{3.196}$$

e a solução fica dada por

$$\psi(x) = \begin{cases} \left[\dfrac{\beta}{(1+\alpha/\kappa+2\gamma\kappa)}-1\right]\dfrac{\psi(\bar{0})e^{-\kappa x}}{\kappa}, & x>0, \\ \left[\dfrac{\beta}{(1+\alpha/\kappa+2\gamma\kappa)}+1\right]\dfrac{\psi(\bar{0})e^{\kappa x}}{\kappa}, & x<0. \end{cases} \tag{3.197}$$

Para facilitar a compreensão dos resultados, segue-se uma apresentação de forma resumida: para o potencial na forma

$$V(x) = V_0\delta(x)+V_1\delta'(x)+V_2\delta''(x) = \frac{\hbar^2}{M}\left[\alpha\delta(x)+\beta\delta'(x)+\gamma\delta''(x)\right], \tag{3.198}$$

temos as possíveis situações:

1. Para $\alpha>0$, $\beta\in\mathbb{R}$ e $\gamma>0$:

   (a) Se $\alpha\gamma > (1+\beta^2)/2$, o estado ligado é dado por

   $$\kappa_1 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{2\alpha\gamma-1-\beta^2}{3}}\,\text{senh}\left(\frac{1}{3}\,\text{arcsenh}\sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(2\alpha\gamma-1-\beta^2)^3}}\right); \tag{3.199}$$

   (b) Se $\alpha\gamma = (1+\beta^2)/2$, o estado ligado é dado por

   $$\kappa_2 = \frac{\sqrt[3]{1+\beta^2}}{2\gamma}; \tag{3.200}$$

   (c) Se $\chi(\beta)/8 < \alpha\gamma < (1+\beta^2)/2$, o estado ligado é dado por

   $$\kappa_3 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cosh\left(\frac{1}{3}\,\text{arccosh}\sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{\left(1+\beta^2-2\alpha\gamma\right)^3}}\right), \tag{3.201}$$

(d) Se $\alpha\gamma = \chi(\beta)/8$, o estado ligado é dado por

$$\kappa_4 = \frac{1}{2\gamma}\sqrt{\frac{4(\beta^2+1)-\chi(\beta)}{3}} \tag{3.202}$$

(e) Se $0 < \alpha\gamma < \chi(\beta)/8$, o estado ligado é dado por

$$\kappa_5 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\theta, \tag{3.203}$$

com

$$\theta = \frac{1}{3}\arccos\sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(1+\beta^2-2\alpha\gamma)^3}} \in \left(0, \frac{\pi}{6}\right) \tag{3.204}$$

2. Para $\alpha > 0$, $b \in \mathbb{R}$ e $\gamma < 0$, temos um estado ligado, dado por

$$\kappa_6 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\left(\theta + \frac{2\pi}{3}\right), \tag{3.205}$$

com

$$\theta = \frac{1}{3}\arccos\sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(1+\beta^2-2\alpha\gamma)^3}} \in \left(\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{2}\right) \tag{3.206}$$

3. Para $\alpha < 0$, $b \in \mathbb{R}$ e $\gamma > 0$, temos dois estados ligados, dados por

$$\kappa_5 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\theta, \tag{3.207}$$

$$\kappa_7 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\left(\theta + \frac{4\pi}{3}\right), \tag{3.208}$$

com

$$\theta = \frac{1}{3}\arccos\sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(1+\beta^2-2\alpha\gamma)^3}} \in \left(\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{2}\right). \tag{3.209}$$

4. Para $\alpha < 0$, $b \in \mathbb{R}$ e $\gamma < 0$:

(a) Se $\alpha\gamma > \chi(\beta)$, **não há** estados ligados;

(b) Se $\alpha\gamma = \chi(\beta)$, o estado ligado é dado por

$$\kappa_8 = -\frac{1}{4\gamma}\sqrt{\frac{4(\beta^2+1)-\chi(\beta)}{3}}; \tag{3.210}$$

(c) Se $\alpha\gamma < \chi(\beta)$, há dois estados o ligados, dados por

$$\kappa_6 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\left(\theta + \frac{2\pi}{3}\right), \tag{3.211}$$

$$\kappa_7 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1+\beta^2-2\alpha\gamma}{3}}\cos\left(\theta + \frac{4\pi}{3}\right), \tag{3.212}$$

com

$$\theta = \frac{1}{3}\arccos\sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(1+\beta^2-2\alpha\gamma)^3}} \in \left(0, \frac{\pi}{6}\right). \tag{3.213}$$

Verifiquemos agora que, tomando $V_1 = 0$, os resultados obtidos para o caso (iv) recuperam os mesmos do caso (iii). Como as expressões nesses dois casos são dadas em termos dos parâmetros α, β, γ e κ, analisaremos os resultados no limite $\beta \to 0$, de onde segue-se que $\chi(0) = 1$.

Começando pelo caso $\alpha > 0$ e $\gamma > 0$, temos

- Para $\alpha\gamma > 1/2$, a expressão dada por (3.199) fica

$$\kappa_1 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{2\alpha\gamma - 1}{3}}\,\mathrm{senh}\left(\frac{1}{3}\ \mathrm{arcsenh}\ \sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(2\alpha\gamma-1)^3}}\right). \tag{3.214}$$

  Utilizando o resultado da Proposição **4** no Apêndice D, temos

$$\kappa_1 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{2\alpha\gamma - 1}{3}}\sqrt{\frac{3}{4(2\alpha\gamma-1)}} = \frac{1}{2\gamma}. \tag{3.215}$$

- Para $\alpha\gamma = 1/2$, a expressão (3.200) se reduz a $\kappa_2 = \dfrac{1}{2\gamma}$.
- Para $1/8 < \alpha\gamma < 1/2$, a expressão (3.201) se torna

$$\kappa_3 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1 - 2\alpha\gamma}{3}}\cosh\left(\frac{1}{3}\ \mathrm{arccosh}\ \sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(1-2\alpha\gamma)^3}}\right). \tag{3.216}$$

  Utilizando o resultado da Proposição **5** no Apêndice D, obtemos

$$\kappa_3 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1 - 2\alpha\gamma}{3}}\sqrt{\frac{3}{4(1-2\alpha\gamma)}} = \frac{1}{2\gamma}. \tag{3.217}$$

- Para $\alpha\gamma = 1/8$, a expressão (3.202) se reduz a $\kappa_4 = \dfrac{1}{2\gamma}$.
- Para $0 < \alpha\gamma < 1/8$, a expressão (3.203) se torna

$$\kappa_5 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1 - 2\alpha\gamma}{3}}\cos\left(\frac{1}{3}\mathrm{arccos}\sqrt{\frac{27\alpha^2\gamma^2}{(1-2\alpha\gamma)^3}}\right). \tag{3.218}$$

  Utilizando o resultado da Proposição **6** no Apêndice D, obtemos

$$\kappa_5 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1 - 2\alpha\gamma}{3}}\sqrt{\frac{3}{4(1-2\alpha\gamma)}} = \frac{1}{2\gamma}. \tag{3.219}$$

Para encontrar a função de onda deste caso, utilizaremos a expressão (3.197). Tomando $\beta = 0$, ela se reduz a

$$\psi(x) = \begin{cases} -\dfrac{\psi'(\bar{0})}{\kappa}e^{-\kappa x}, & x > 0, \\ \dfrac{\psi'(\bar{0})}{\kappa}e^{\kappa x}, & x > 0, \end{cases} \tag{3.220}$$

e após a normalização, obtém-se

$$\Psi_0(x) = \begin{cases} -\sqrt{\dfrac{1}{2\gamma}}e^{-x/2\gamma}, & x > 0, \\ \sqrt{\dfrac{1}{2\gamma}}e^{x/2\gamma}, & x > 0. \end{cases} \tag{3.221}$$

Para $\gamma > 0$ e $\alpha < 0$, os dois estados ligados, dados pelas expressões (3.207) e (3.208) ficam, respectivamente, dados por

$$\kappa_5 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1-2\alpha\gamma}{3}}\cos\theta, \tag{3.222}$$

$$\kappa_7 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1-2\alpha\gamma}{3}}\cos\left(\theta + \frac{4\pi}{3}\right). \tag{3.223}$$

Conforme já visto no caso $0 < \alpha\gamma < 1/8$, $\kappa_5 = 1/2\gamma$. Assim, para $\beta \to 0$, $\kappa_1, \ldots, \kappa_5$ recuperam κ_0 e o caso (iv) generaliza (iii) para $\gamma > 0$.

Para κ_6 e κ_7, utilizaremos algumas relações bem conhecidas da trigonometria:

$$\cos\left(\theta + \frac{2\pi}{3}\right) = \cos\theta\cos\frac{\pi}{6} + \operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\frac{2\pi}{3} = -\frac{1}{2}\cos\theta \mp \frac{\sqrt{3}\sqrt{1-\cos^2\theta}}{2}, \tag{3.224}$$

$$\cos\left(\theta + \frac{4\pi}{3}\right) = \cos\theta\cos\frac{4\pi}{3} - \operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\frac{4\pi}{3} = -\frac{1}{2}\cos\theta \pm \frac{\sqrt{3}\sqrt{1-\cos^2\theta}}{2}, \tag{3.225}$$

de onde obtemos

$$\begin{aligned} \kappa_6 &= \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1-2\alpha\gamma}{3}}\left[-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{4(1-2\alpha\gamma)}} \mp \frac{\sqrt{3}}{2}\sqrt{1-\frac{3}{4(1-2\alpha\gamma)}}\right] \\ &= -\frac{1}{4\gamma} - \frac{\sqrt{1-8\alpha\gamma}}{4\gamma} = \kappa'_-, \end{aligned} \tag{3.226}$$

$$\begin{aligned} \kappa_7 &= \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{1-2\alpha\gamma}{3}}\left[-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{4(1-2\alpha\gamma)}} \mp \frac{\sqrt{3}}{2}\sqrt{1-\frac{3}{4(1-2\alpha\gamma)}}\right] \\ &= -\frac{1}{4\gamma} + \frac{\sqrt{1-8\alpha\gamma}}{4\gamma} = \kappa'_+, \end{aligned} \tag{3.227}$$

e assim κ_6 e κ_7 recuperam, respectivamente, κ'_- e κ'_+, ou seja, os itens (3.145) e (3.144) para o caso (iii).

Para $\gamma < 0$ e $\alpha > 0$, o estado ligado é dado por κ_5, que já mostramos que se reduz a $\kappa_5 = \kappa_0 = 1/2\gamma$.

Para o caso $\gamma < 0$ e $\alpha < 0$, temos:

- Para $\alpha\gamma < 1/8$, os estados ligados são dados por κ_6 e κ_7, de modo que recuperamos os resultados $\kappa_\pm$ em (3.146).

- Para $\alpha\gamma = 1/8$, a expressão (3.210) fica
$$\kappa_8 = \kappa_-^0 = -\frac{1}{4\gamma}. \tag{3.228}$$

- Para $\alpha\gamma > 1/8$, não existem estados ligados.

Para os estados ligados diferentes de κ_0, utilizaremos a expressão dada por (3.195) para recuperar o caso $\beta = 0$. Assim, obtemos $\psi(x) = \psi(\bar{0})e^{-\kappa|x|}$ e, após normalização, fica
$$\Psi(x) = \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x|}. \tag{3.229}$$

3.6 Espalhamento para potenciais supersingulares

Para o estado de espalhamento, escrevemos $E = \lambda^2/2M$, com $\lambda > 0$. Substituindo na equação (3.22), obtemos a solução no espaço de momento (DUISTERMAAT; KOLK, 2010)
$$\phi(p) = 2\pi\hbar C_1\delta(p-\lambda) + 2\pi\hbar C_2\delta(p+\lambda) - 2M\sum_{m=0}^{N}\frac{W_{m,N}(ip/\hbar)^m}{p^2-\lambda^2}, \tag{3.230}$$
com C_1 e C_2 constantes arbitrárias e $2\pi\hbar$ inserido por conveniência; o termo $1/(p^2-\lambda^2)$ deve ser entendido como uma distribuição regularizada. Aplicando a transformada de Fourier inversa, obtemos a solução no espaço de posição na seguinte forma
$$\psi(x) = C_1e^{i\lambda x/\hbar} + C_2e^{-i\lambda x/\hbar} - \sum_{m=0}^{N} W_{m,N}J_m(x), \tag{3.231}$$
com a integral $J_m(x)$ sendo dada por
$$J_m(x) = \frac{M}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ipx/\hbar}(ip/\hbar)^m}{p^2-\lambda^2}. \tag{3.232}$$

Esta integral deve ser tomada no sentido do valor principal de Cauchy. Do mesmo modo que no problema de estados ligados, consideraremos as partes regulares de $J_m(x)$, isto é, $J_m(x\pm)$, e podemos reescrevê-las na forma
$$J_m(x\pm) = \frac{d^m}{dx^m}J_0(x\pm)\,dp, \qquad J_0(x) = \frac{M}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ipx/\hbar}}{p^2-\lambda^2}\,dp. \tag{3.233}$$

A integral $J_0(x)$ avaliada no Apêndice **B**, dada por
$$J_0(x) = -\frac{M}{\hbar\lambda}\operatorname{sen}\frac{\lambda|x|}{\hbar}. \tag{3.234}$$

Denotando por $J_m(x+)$ e $J_m(x-)$ a função $J_m(x)$ para $x > 0$ e $x < 0$, respectivamente, podemos representar essas funções utilizando as seguintes expressões:
$$J_m(x+) = -\frac{M}{\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{m-1}\left[\frac{e^{i\lambda x/\hbar}-(-1)e^{-i\lambda x/\hbar}}{2}\right], \tag{3.235}$$

$$J_m(x-) = \frac{M}{\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{m-1}\left[\frac{e^{i\lambda x/\hbar} - (-1)e^{-i\lambda x/\hbar}}{2}\right]. \tag{3.236}$$

Sabe-se, pela expressão (3.30), que os coeficientes $W_{m,N}$ na expressão (3.231) dependem dos parâmetros $\bar{\psi}^{(k)}(0)$, para $k = 0, 1, 2, \ldots, N$, e na Seção 3.5, verificamos que podemos escrevê-los em função apenas dos parâmetros $\bar{\psi(0)}$ e $\bar{\psi'(0)}$ para o problema de estados ligados. Derivando n vezes a expressão (3.231) e separando o domínio em duas regiões $x > 0$ e $x < 0$, obtemos

$$\psi^{(n)}(x\pm) = C_1\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n e^{i\lambda x/\hbar} + C_2\left(-\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n e^{-i\lambda x/\hbar} - \sum_{m=0}^{N} W_{m,N}J_{m+n}(x\pm). \tag{3.237}$$

O próximo passo é tomar os limites laterais $x \to \pm 0$. Começando pelas funções $J_m(x\pm)$, obtemos

$$J_m(0\pm) = \mp\frac{M}{2\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{m-1}\left[1-(-1)^m\right], \tag{3.238}$$

de onde segue-se que

$$\bar{J_m}(0) = \frac{J_m(0+) + J_m(0-)}{2} = 0, \tag{3.239}$$

para $m = 0, 1, 2, \ldots$. Assim, as expressões para $\psi^{(n)}(0)$ ficam dadas por

$$\bar{\psi}^{(2j)}(0) = \left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{2j}(C_1 + C_2), \quad \bar{\psi}^{(2j+1)}(0) = \left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{2j}(C_1 - C_2), \tag{3.240}$$

para $j = 0, 1, 2, \ldots$.

Para calcular o termo de somatório em (3.237), vamos denotá-lo por

$$\chi^{(n)}(x\pm) = -\sum_{m=0}^{N} W_{m,N}J_{m+n}(x\pm). \tag{3.241}$$

Substituindo a expressão dada por (3.30) em (3.241), obtemos

$$\begin{aligned}
\chi^{(n)}(x\pm) &= -\sum_{m=0}^{N} W_{m,N}J_{m+n}(x\pm) \\
&= \pm\sum_{m=0}^{N}\sum_{k=0}^{N-m}(-1)^k V_{k+m}\binom{k+m}{m}\frac{\bar{\psi}^{(k)}(0)M}{2\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{m+n-1}\left[e^{i\lambda x/\hbar} - (-1)^{m+n}e^{-i\lambda x/\hbar}\right] \\
&= \pm\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n\sum_{m=0}^{N}\sum_{k=0}^{N-m}(-1)^k V_{k+m}\binom{k+m}{m}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{k+m-1}\left[C_1 + (-1)^k C_2\right]\frac{M}{2\hbar^2}\times \\
&\qquad \times\left[e^{i\lambda x/\hbar} - (-1)^{m+n}e^{-i\lambda x/\hbar}\right].
\end{aligned}$$

Redefinindo os índices do duplo somatório para $j = k + m$, obtemos

$$\begin{aligned}
\chi^{(n)}(x\pm) = \pm\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n\sum_{j=0}^{N}\frac{V_jM}{2\hbar^2}\sum_{m=0}^{j}(-1)^{j-m}V_j\binom{j}{m}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{j-1}\left[C_1 + (-1)^{j-m}C_2\right]\times \\
\times\left[e^{i\lambda x/\hbar} - (-1)^{m+n}e^{-i\lambda x/\hbar}\right].
\end{aligned}$$

O próximo passo é separar os termos pares e ímpares da soma em j. Para a soma par, temos

$$\chi^{(n)}_{par}(x\pm) = \pm\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \sum_{s=0}^{\lfloor N/2\rfloor} \frac{MV_{2s}}{2\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{2s-1} \sum_{m=0}^{2s}(-1)^m\binom{2s}{m}\left[C_1+(-1)^m C_2\right]$$
$$\times\left[e^{i\lambda x/\hbar}-(-1)^{m+n}e^{-i\lambda x/\hbar}\right],$$

e para a ímpar,

$$\chi^{(n)}_{ímpar}(x\pm) = \mp\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor} \frac{MV_{2s+1}}{2\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{2s} \sum_{m=0}^{2s+1}(-1)^m\binom{2s+1}{m}\left[C_1-(-1)^m C_2\right]\times$$
$$\times\left[e^{i\lambda x/\hbar}-(-1)^{m+n}e^{-i\lambda x/\hbar}\right].$$

Em seguida, separamos também a soma em m em termos pares e ímpares:

$$\chi^{(n)}_{p,p}(x\pm) = \pm\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \sum_{s=0}^{\lfloor N/2\rfloor} \frac{MV_{2s}}{2\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{2s-1}(C_1+C_2)\left[e^{i\lambda x/\hbar}-(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right]\sum_{l=0}^{s}\binom{2s}{2l},$$

$$\chi^{(n)}_{p,i}(x\pm) = \mp\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \sum_{s=1}^{\lfloor N/2\rfloor} \frac{MV_{2s}}{2\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{2s-1}(C_1-C_2)\left[e^{i\lambda x/\hbar}+(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right]\sum_{l=0}^{s-1}\binom{2s}{2l+1},$$

$$\chi^{(n)}_{i,p}(x\pm) = \mp\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor} \frac{MV_{2s+1}}{2\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{2s}(C_1-C_2)\left[e^{i\lambda x/\hbar}-(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right]\sum_{l=0}^{s}\binom{2s+1}{2l},$$

$$\chi^{(n)}_{i,i}(x\pm) = \pm\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor} \frac{MV_{2s+1}}{2\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{2s}(C_1+C_2)\left[e^{i\lambda x/\hbar}+(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right]\sum_{l=0}^{s}\binom{2s+1}{2l+1}.$$

Utilizando o resultado *(i)* do Apêndice D, obtemos

$$\chi^{(n)}_{p,p}(x\pm) = \pm\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \frac{(C_1+C_2)}{2}\left\{\frac{MV_0}{i\hbar\lambda}+\sum_{s=1}^{\lfloor N/2\rfloor}\frac{MV_{2s}}{\hbar^2}\left(\frac{2i\lambda}{\hbar}\right)^{2s-1}\right\}\left[e^{i\lambda x/\hbar}-(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right]$$

$$= \pm\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \frac{(C_1+C_2)}{2}\left\{\frac{MV_0}{i\hbar\lambda}+\sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor}\frac{MV_{2s+2}}{\hbar^2}\left(\frac{2i\lambda}{\hbar}\right)^{2s+1}\right\}\left[e^{i\lambda x/\hbar}-(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right].$$

Redefinindo os indíces do somatório em s e utilizando o resultado *(ii)* do Apêndice D, obtemos

$$\chi^{(n)}_{p,i}(x\pm) = \mp\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \frac{(C_1-C_2)}{2}\sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor}\frac{MV_{2s+2}}{\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{2s+1}\left[e^{i\lambda x/\hbar}+(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right]\sum_{l=0}^{s}\binom{2s+2}{2l+1}$$

$$= \mp\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \frac{(C_1-C_2)}{2}\sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor}\frac{MV_{2s+2}}{\hbar^2}\left(\frac{2i\lambda}{\hbar}\right)^{2s+1}\left[e^{i\lambda x/\hbar}+(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right].$$

Utilizando o resultado *(iii)* do Apêndice D, teremos

$$\chi^{(n)}_{i,p}(x\pm) = \mp\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \frac{(C_1-C_2)}{2}\sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor}\frac{MV_{2s+1}}{\hbar^2}\left(\frac{2i\lambda}{\hbar}\right)^{2s}\left[e^{i\lambda x/\hbar}-(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right],$$

$$\chi_{i,i}^{(n)}(x\pm) = \pm\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \frac{(C_1+C_2)}{2} \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor} \frac{MV_{2s+1}}{\hbar^2}\left(\frac{2i\lambda}{\hbar}\right)^{2s}\left[e^{i\lambda x/\hbar}+(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right].$$

Definindo os parâmetros auxiliares

$$A(i\lambda) = \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor} \frac{MV_{2s+2}}{\hbar^2}\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^{2s+1}, \tag{3.242}$$

$$B(i\lambda) = \sum_{s=0}^{\lfloor (N-1)/2\rfloor} \frac{MV_{2s+1}}{\hbar^2}\left(\frac{2i\lambda}{\hbar}\right)^{2s}, \tag{3.243}$$

podemos reescrever (3.241) como

$$\chi^{(n)}(x\pm) = \chi_{p,p}^{(n)}(x\pm)+\chi_{p,i}^{(n)}(x\pm)+\chi_{i,p}^{(n)}(x\pm)+\chi_{i,i}^{(n)}(x\pm), \tag{3.244}$$

com

$$\chi_{p,p}^{(n)}(x\pm) = \pm\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \frac{(C_1+C_2)}{2}\left[-\frac{iMV_0}{\hbar\lambda}+A(i\lambda)\right]\left[e^{i\lambda x/\hbar}-(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right], \tag{3.245}$$

$$\chi_{p,i}^{(n)}(x\pm) = \mp\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \frac{(C_1-C_2)}{2}A(i\lambda)\left[e^{i\lambda x/\hbar}+(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right], \tag{3.246}$$

$$\chi_{i,p}^{(n)}(x\pm) = \mp\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \frac{(C_1-C_2)}{2}B(i\lambda)\left[e^{i\lambda x/\hbar}-(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right], \tag{3.247}$$

$$\chi_{i,i}^{(n)}(x\pm) = \pm\left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \frac{(C_1+C_2)}{2}B(i\lambda)\left[e^{i\lambda x/\hbar}+(-1)^n e^{-i\lambda x/\hbar}\right]. \tag{3.248}$$

Substituindo (3.244) na equação (3.237), obtemos

$$\begin{aligned}
\psi^{(n)}(x\pm) = {} & \left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \Bigg\{e^{i\lambda x/\hbar}\Bigg[C_1 \pm \frac{(C_1+C_2)}{2}\left(-\frac{iMV_0}{\hbar\lambda}+A(i\lambda)\right) \\
& \mp\frac{(C_1-C_2)}{2}A(i\lambda)\mp\frac{(C_1-C_2)}{2}B(i\lambda)\pm\frac{(C_1+C_2)}{2}B(i\lambda)\Bigg] \\
& +(-1)^n e^{i\lambda x/\hbar}\Bigg[C_2 \mp \frac{(C_1+C_2)}{2}\left(-\frac{iMV_0}{\hbar\lambda}+A(i\lambda)\right) \\
& \mp\frac{(C_1-C_2)}{2}A(i\lambda)\pm\frac{(C_1-C_2)}{2}B(i\lambda)\pm\frac{(C_1+C_2)}{2}B(i\lambda)\Bigg]\Bigg\} \\
= {} & \left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^n \Bigg\{e^{i\lambda/\hbar}\Bigg[C_1\left(1\mp\frac{iMV_0}{2\hbar\lambda}\right)+C_2\left(\mp\frac{iMV_0}{2\hbar\lambda}\pm A(i\lambda)\pm B(i\lambda)\right)\Bigg] \\
& +(-1)^n e^{-i\lambda/\hbar}\Bigg[C_1\left(\pm\frac{iMV_0}{2\hbar\lambda}\mp A(i\lambda)\pm B(i\lambda)\right)+C_2\left(1\pm\frac{iMV_0}{2\hbar\lambda}\right)\Bigg]\Bigg\}.
\end{aligned}$$

Tomando $n=0$ na expressão acima, obtemos a função de onda para o caso de espalhamento no seguinte formato:

$$\psi(x) = \begin{cases} \tilde{A}e^{i\lambda x/\hbar}+\tilde{B}e^{-i\lambda x/\hbar} & x>0, \\ \tilde{C}e^{i\lambda x/\hbar}+\tilde{D}e^{-i\lambda x/\hbar} & x<0, \end{cases} \tag{3.249}$$

com os coeficientes $\tilde{A}$, $\tilde{B}$, $\tilde{C}$ e $\tilde{D}$ dados por

$$\tilde{A} = \left(1 - \frac{iMV_0}{2\hbar\lambda}\right) C_1 - \left(\frac{iMV_0}{2\hbar\lambda} - A\,(i\lambda) - B\,(i\lambda)\right) C_2, \tag{3.250}$$

$$\tilde{B} = \left(\frac{iMV_0}{2\hbar\lambda} - A\,(i\lambda) + B\,(i\lambda)\right) C_1 + \left(1 + \frac{iMV_0}{2\hbar\lambda}\right) C_2, \tag{3.251}$$

$$\tilde{C} = \left(1 + \frac{iMV_0}{2\hbar\lambda}\right) C_1 + \left(\frac{iMV_0}{2\hbar\lambda} - A\,(i\lambda) - B\,(i\lambda)\right) C_2, \tag{3.252}$$

$$\tilde{D} = \left(-\frac{iMV_0}{2\hbar\lambda} + A\,(i\lambda) + B\,(i\lambda)\right) C_1 + \left(1 - \frac{iMV_0}{2\hbar\lambda}\right) C_2. \tag{3.253}$$

A partir desta expressão para a função de onda, obtemos os coeficientes de reflexão e transmissão para o problema de espalhamento. Consideremos a situação em que as partículas viajam da esquerda para a direita e são espalhadas pelo potencial supersingular; deste modo, $\tilde{B} = 0$ e os coeficientes denotados por $T = |t|^2$ e $R = |r|^2$ com $t = \tilde{A}/\tilde{C}$ e $r = \tilde{D}/\tilde{C}$ representam, respectivamente, as partículas refletidas e transmitidas pelo potencial.

Da condição $\tilde{B} = 0$, obtemos a relação

$$\left(1 + \frac{iMV_0}{2\hbar\lambda}\right) C_2 = -\left(\frac{iMV_0}{2\hbar\lambda} - A\,(i\lambda) + B\,(i\lambda)\right) C_1. \tag{3.254}$$

Utilizando a relação (3.254) nas expressões de t e r, obtemos

$$t = \frac{1 - \left[(B\,(i\lambda))^2 - (A\,(i\lambda))^2 + iA\,(i\lambda)\,MV_0/\lambda\hbar\right]}{1 + \left[(B\,(i\lambda))^2 - (A\,(i\lambda))^2 + iA\,(i\lambda)\,MV_0/\lambda\hbar\right] + iMV_0/\lambda\hbar},$$
$$r = \frac{-iMV_0/\lambda\hbar + 2A\,(i\lambda) + 2B\,(i\lambda)}{1 + \left[(B\,(i\lambda))^2 - (A\,(i\lambda))^2 + iA\,(i\lambda)\,MV_0/\lambda\hbar\right] + iMV_0/\lambda\hbar},$$

de onde se segue que os coeficientes de transmissão e reflexão para os potenciais supersingulares são dados por

$$T = \frac{\left[1 - (B\,(i\lambda))^2 + (A\,(i\lambda))^2 - iA\,(i\lambda)\,MV_0/\lambda\hbar\right]^2}{\left[1 + (B\,(i\lambda))^2 - (A\,(i\lambda))^2 + iA\,(i\lambda)\,MV_0/\lambda\hbar\right]^2 + (MV_0/\lambda\hbar)^2}, \tag{3.255}$$

$$R = \frac{4\,(B\,(i\lambda))^2 + \left[MV_0/\lambda\hbar + 2iA\,(i\lambda)\right]^2}{\left[1 + (B\,(i\lambda))^2 - (A\,(i\lambda))^2 + iA\,(i\lambda)\,MV_0/\lambda\hbar\right]^2 + (MV_0/\lambda\hbar)^2}. \tag{3.256}$$

Observamos que $T + R = 1$.

3.6.1 Casos Particulares

Assim como no caso de estados ligados, estudaremos alguns casos particulares para os potenciais supersingulares, a fim de verificar que nosso modelo generaliza os casos já conhecidos na literatura e também investigar o comportamento para casos ainda não estudados. Para simplificar a execução e compreensão dos cálculos, utilizaremos os mesmos paraâmetros definidos em (3.84), ou seja,

$$\alpha = \frac{MV_0}{\hbar^2}, \qquad \beta = \frac{MV_1}{\hbar^2}, \qquad \gamma = \frac{MV_2}{\hbar^2}, \qquad \kappa = \frac{\lambda}{\hbar}. \tag{3.257}$$

3.6.1.1 O potencial delta

Para $V_0 \neq 0$ e $V_m = 0$ para $m > 0$, tem-se o bem conhecido *potencial delta*. Segue-se daí que $A(i\lambda) = B(i\lambda) = 0$. Os coeficientes de transmissão e reflexão, descritos pelas equações (3.255) e (3.256), respectivamente, são dados por

$$T = \frac{\kappa^2}{\kappa^2 + \alpha^2} = \frac{(MV_0/\lambda\hbar)^2}{1 + (MV_0/\lambda\hbar)^2}, \qquad R = \frac{\alpha^2}{\kappa^2 + \alpha^2} = \frac{1}{1 + (MV_0/\lambda\hbar)^2}, \tag{3.258}$$

com $\kappa = \hbar\sqrt{2ME}$ e, deste modo, nosso modelo recupera os resultados bem conhecidos da literatura (GRIFFITHS, 1995; GALINDO; PASCUAL, 1990).

3.6.1.2 O potencial $\delta'(x)$

Para o potencial dado por $V_1 \neq 0$, $V_m = 0$ para $m > 1$, temos $A(i\lambda) = 0$ e $B(i\lambda) = \beta$, de onde segue-se que os coeficientes de transmissão e reflexão são dados por

$$T = \frac{(1-\beta^2)^2}{(1+\beta^2)^2 + \alpha^2/\kappa^2}, \qquad R = \frac{4\beta^2 + \alpha^2/\kappa^2}{(1+\beta^2)^2 + \alpha^2/\kappa^2}. \tag{3.259}$$

Denotando por t_G e r_G as constantes dadas pela equação (23) da referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009),

$$t_G = \frac{(1 - M^2V_1^2/\hbar^4)\,\lambda i}{MV_0/\hbar + (1 + M^2V_1^2/\hbar^4)\,\lambda i} = \frac{(1-\beta^2)\,\hbar\kappa i}{\alpha\hbar + (1+\beta^2)\,\hbar\kappa i} = \frac{(1-\beta^2)\,\kappa i}{\alpha + (1+\beta^2)\,\kappa i}, \tag{3.260}$$

$$r_G = -\frac{MV_0/\hbar + 2MV_1/\hbar^2\lambda i}{MV_0/\hbar + (1 + M^2V_1^2/\hbar^4)\,\lambda i} = -\frac{\alpha\hbar + 2\beta\kappa\hbar i}{\alpha\hbar + (1+\beta^2)\,\kappa\hbar i} = -\frac{\alpha + 2\beta\kappa i}{\alpha + (1+\beta^2)\,\kappa i}, \tag{3.261}$$

Seus respectivos coeficientes de transmissão e reflexão são

$$T_G = |t_G|^2 = \frac{(1-\beta^2)^2\kappa^2}{\alpha^2 + (1+\beta^2)^2\kappa^2} = \frac{(1-\beta^2)^2}{\alpha^2/\kappa^2 + (1+\beta^2)^2},$$

$$R_G = |r_G|^2 = \frac{\alpha^2 + 4\beta^2\kappa^2}{\alpha^2 + (1+\beta^2)^2\kappa^2} = \frac{\alpha^2/\kappa^2 + 4\beta^2}{\alpha^2/\kappa^2 + (1+\beta^2)^2},$$

que coincidem com os coeficientes (3.259), e assim observamos que os nossos resultados generalizam os da literatura utilizada como referência.

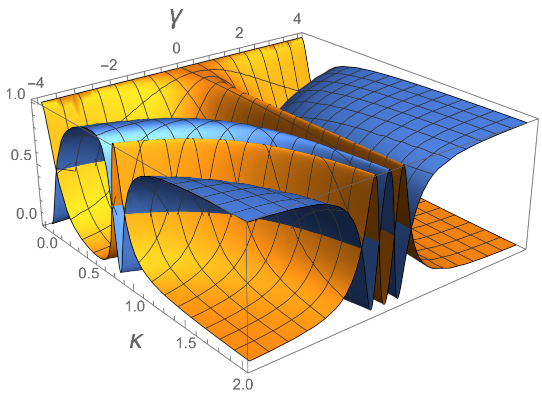
3.6.1.3 O potencial $\delta''(x)$

No problema de estados ligados, para estudar o caso $N = 2$ e $V_2 \neq 0$ foi necessário dividir o estudo em diversos subcasos. Entretanto, para estudar o espalhamento pode-se considerar apenas um caso geral. Neste caso, tem-se que $A(i\lambda) = 2i\gamma\kappa$ e $B(i\lambda) = \beta$.

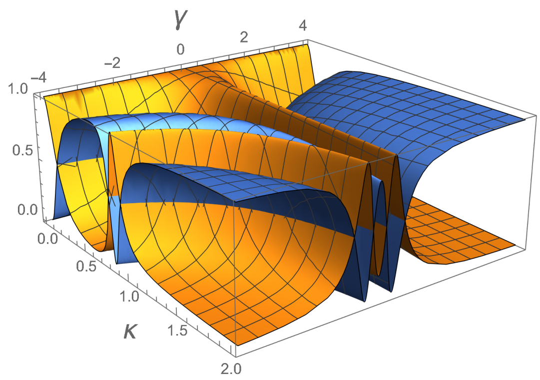
Os coeficientes de transmissão e reflexão são dados por

$$T = \frac{\left(1 - \beta^2 - 4\gamma^2\kappa^2 + 2\alpha\gamma\right)^2}{\left(1 + \beta^2 + 4\gamma^2\kappa^2 - 2\kappa\gamma\right)^2 + \alpha^2/\kappa^2}, \tag{3.262}$$

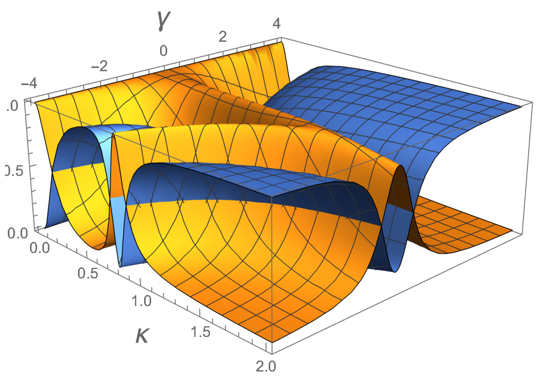
$$R = \frac{4\beta^2 + \left(\alpha/\kappa - 4\kappa\gamma\right)^2}{\left(1 + \beta^2 + 4\gamma^2\kappa^2 - 2\kappa\gamma\right)^2 + \alpha^2/\kappa^2}. \tag{3.263}$$



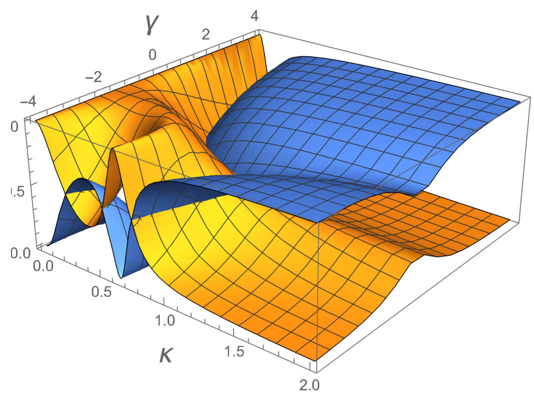
(a) $\beta = 0$



(b) $\beta = 0.5$



(c) $\beta = 2$



(d) $\beta = 4$

Figura 5 – Coeficientes de transmissão (amarelo) e reflexão (azul) conforme equações (3.262) e (3.263) para $\kappa \in [0, 2]$, $\gamma \in [-4, 4]$, $\alpha = -5$ e alguns valores de β.

Na Figura 5, temos algumas representações gráficas para os coeficientes de transmissão e reflexão em função do parâmetro κ, que representa a energia, e γ, que representa o coeficiente V_2 do termo $\delta''(x)$.

Tomando $R = 0$ na expressão (3.263), observamos que só é possível haver reflexão total para $\beta = 0$ e α e γ de mesmo sinal, com a energia dada por $\kappa = \dfrac{\sqrt{\alpha/\gamma}}{2}$. Tomando $R = 0$, observamos que existe transmissão total para $\beta^2 - 2\alpha\gamma < 1$, com a energia dada por $\kappa = \sqrt{2\alpha\gamma + 1 - \beta^2}/2|\gamma|$.

Capítulo 4

Equações de Schrödinger fracionárias com potencial tipo função delta e sua derivada

Como estamos interessados em estudar o efeito de derivadas fracionárias do tipo Riesz, nosso foco estará na *Equação de Schrödinger fracionária unidimensional independente do tempo* (FSE), que é dada por

$$D_\alpha \left(-\hbar^2\Delta\right)^{\alpha/2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \tag{4.1}$$

com $V(x)$ sendo um potencial que envolve as funções delta e sua derivada que, de modo geral, pode ser escrito na forma

$$V(x) = a\delta(x) + b\delta'(x), \tag{4.2}$$

com $0 < \alpha \leqslant 1$, $D_\alpha > 0$, E, a, b são constantes e $\hbar$ é a constante de Planck reduzida.

O termo $\left(-\hbar^2\Delta\right)^{\alpha/2}$ é conhecido *operador laplaciano fracionário* e relaciona-se com a derivada fracionária de Riesz (BUTZER; WESTPHAL, 2000).

Nas referências (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010; DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011), a equação (4.1) foi estudada considerando o problema conhecido conhecido como *potencial delta*, ou seja, $V(x) = a\delta(x)$, utilizando a derivada de Riesz segundo a definição

$$\left(-\hbar^2\Delta\right)^{\alpha/2} \psi(x) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ipx}{\hbar}} |p|^\alpha \phi(p)\, dp, \tag{4.3}$$

com $\psi(x)$ e $\phi(p)$ dados pelo par de transformadas de Fourier definidos por (1.7). A resolução desta equação deve ser separada em dois casos: (i) $E < 0$, conhecido como *problema de estados ligados*, e (ii) $E > 0$, conhecido como *problema de espalhamento*.

Para $E < 0$, tomaremos o parâmetro $\lambda > 0$, de modo que $-\lambda^\alpha = E/D_\alpha$. Aplicando a transformada de Fourier dada por (1.7) à equação (4.1), obtemos a equação no espaço de momento,

$$\phi(p) = -\frac{a\psi(0)}{|p|^\alpha + \lambda^\alpha}, \tag{4.4}$$

que nos fornece informações importantes como o fato de que só é possível obter estados ligados para $b < 0$ e, neste caso particular, existe um único estado ligado, dado por

$$E = -\left(\frac{|a| \operatorname{cossec} \pi/\alpha^{1/\alpha}}{\alpha\hbar D_\alpha}\right)^{\alpha/(\alpha-1)}, \tag{4.5}$$

com a solução (normalizada), em termos da função H de Fox, sendo dada por

$$\Psi(x) = \alpha\sqrt{\frac{\hbar \text{ sen } \pi/\alpha}{\lambda(\alpha-1)}}\frac{1}{|x|}H^{2,1}_{2,3}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), \left(1, \frac{\alpha}{2}\right) \\ (1,\alpha), (1,1), \left(1, \frac{\alpha}{2}\right) \end{matrix}\right]. \tag{4.6}$$

Já para $E > 0$, $\lambda > 0$ é tomado de modo que $\lambda^\alpha = E/D_\alpha$ e aplicando a transformada de Fourier à equação (4.1), obtemos

$$\phi(p) = -\frac{a\psi(0)}{|p|^\alpha - \lambda^\alpha} + 2\pi\hbar C_1\delta(p-\lambda) + 2\pi\hbar C_2\delta(p+\lambda), \tag{4.7}$$

sendo C_1 e C_2 constantes arbitrárias e o coeficiente $2\pi\hbar$ inserido por conveniência. A presença dos termos delta se deve à incorporação das singularidades de $\phi(p)$ nos pontos $p = \lambda$ e $p = -\lambda$.

Aplicando transformada de Fourier inversa, conseguimos determinar os valores da constante $\psi(0)$, obtendo a solução de espalhamento em termos da função H de Fox,

$$\psi(x) = C_1 e^{i\lambda x/\hbar} + C_2 e^{-i\lambda x/\hbar} + \Omega_\alpha \frac{(C_1 + C_2)}{2}\Phi_\alpha\left(\frac{\lambda x}{\hbar}\right), \tag{4.8}$$

com a função auxiliar $\Phi_\alpha(x)$ dada por

$$\begin{aligned} \Phi_\alpha(x) = \frac{\alpha}{|x|}\Bigg\{ & H^{2,1}_{2,3}\left[|x|^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), (1,(2+\alpha)/2) \\ (1,\alpha), (1,1), (1,(2+\alpha)/2) \end{matrix}\right] \\ & -H^{2,1}_{2,3}\left[|x|^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), (1,(2-\alpha)/2) \\ (1,\alpha), (1,1), (1,(2-\alpha)/2) \end{matrix}\right]\Bigg\}, \end{aligned} \tag{4.9}$$

e a constante Ω_α por

$$\Omega_\alpha = \left(\lambda^{\alpha-1} - \frac{a \operatorname{cotg} \pi/\alpha}{\alpha\hbar D_\alpha}\right)^{-1}. \tag{4.10}$$

A função H de Fox, com os parâmetros conforme aparecem em (4.9), possui um comportamento assintótico idêntico a uma função seno, de modo que

$$\Phi_\alpha(x) = 2 \text{ sen}\,|x| + o(|x|^{-1}), \quad |x| \to \infty, \tag{4.11}$$

e assim, a solução $\psi(x)$ para $|x| \to \infty$ é

$$\psi(x) = C_1 e^{i\lambda x/\hbar} + C_2 e^{-i\lambda x/\hbar} + \Omega_\alpha (C_1 + C_2) \operatorname{sen} \frac{\lambda |x|}{\hbar} + o(|x|^{-1}). \tag{4.12}$$

Entretanto, para estudar as propriedades que nos interessam no problema de espalhamento, é mais conveniente escrever esta solução como uma combinação de exponenciais complexas, isto é,

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} + Be^{-\frac{i\lambda x}{\hbar}} + o\,(1)\,, & x \to -\infty \\ Ce^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} + De^{-\frac{i\lambda x}{\hbar}} + o\,(1)\,, & x \to +\infty, \end{cases} \tag{4.13}$$

com os coeficientes dados por

$$\begin{aligned} A &= C_1 + i(C_1 + C_2)\Omega_\alpha/2, & B &= C_2 - i(C_1 + C_2)\Omega_\alpha/2, \\ C &= C_1 - i(C_1 + C_2)\Omega_\alpha/2, & D &= C_2 + i(C_1 + C_2)\Omega_\alpha/2. \end{aligned} \tag{4.14}$$

Considerando a situação em que as partículas viajam da esquerda para a direita e são espalhadas pelo potencial delta, segue que $D = 0$, $B = Ar$ e $C = At$. Os coeficientes de reflexão e transmissão são dados, respectivamente, por $R = |r|^2$ e $T = |t|^2$:

$$R = \frac{\Omega_\alpha^2}{1 + \Omega_\alpha^2}, \qquad T = \frac{1}{1 + \Omega_\alpha^2}, \tag{4.15}$$

e, claramente, $R + T = 1$.

Na referência (DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011), os autores observam que, de acordo com este modelo, é possível ocorrer tunelamento na energia de ponto zero. Tomando o limite $\lambda \to 0$ em (4.10), para $a \neq 0$, obtemos

$$\lim_{\lambda \to 0} \Omega_\alpha \Delta_\alpha = \operatorname{tg} \frac{\pi}{\alpha}, \tag{4.16}$$

e, portanto, o coeficiente de transmissão é dado por

$$\lim_{\lambda \to 0} T = \cos^2 \frac{\pi}{\alpha}, \tag{4.17}$$

e este resultado independe dos valores de a.

Para $\alpha = 2$, mostra-se que esses resultados recuperam os resultados bem estabelecidos da mecânica quântica "de ordem inteira".

Na referência (JAROSZ; VAZ Jr, 2016), este mesmo modelo é estudado, porém utilizando a derivada de Riesz-Feller, tendo como base o trabalho da referência (AL-SAQABI; BOYADJIEV; LUCHKO, 2013), que apresenta um estudo sobre o efeito do parâmetro de assimetria no problema da partícula livre. Neste caso, o termo $(-\hbar\Delta)^{\alpha/2}$ é substituído pela derivada de Riesz-Feller, segundo a seguinte definição

$$\mathcal{D}_\theta^\alpha \psi(x) = \frac{1}{2\hbar\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{ipx}{\hbar}} |p|^\alpha e^{i\,\operatorname{sgn}(p)\theta\pi/2} \phi(p)\, dp. \tag{4.18}$$

Para o problema de espalhamento, novamente tomamos $\lambda^\alpha = E/D_\alpha$ e, após aplicar a transformada de Fourier, obtemos

$$\left(|p|^\alpha e^{i\,\mathrm{sgn}(p)\theta\pi/2} - \lambda^\alpha\right)\phi(p) = -b\psi(0), \tag{4.19}$$

com $1 < \alpha \leqslant 2$ e $|\theta| \leqslant \max\{\alpha, 2-\alpha\}$.

A análise desta expressão, entretanto, nos leva à conclusão de que esta abordagem não admite casos de espalhamento, isto é, não é possível obter soluções para $E > 0$.

Para o problema de estado ligado, $E < 0$, escrevemos $\lambda^\alpha = -E/D_\alpha$ e, após aplicar a transformada de Fourier à equação (4.1), obtemos

$$\phi(p) = -\frac{b\psi(0)}{\left(|p|^\alpha e^{i\,\mathrm{sgn}(p)\theta\pi/2} + \lambda^\alpha\right)}, \tag{4.20}$$

e a partir desta expressão encontramos o valor da energia de estado ligado,

$$E = -\left(\frac{|b|\ \operatorname{sen}\theta\pi/2\alpha\ \operatorname{cossec}\pi/\alpha}{\alpha\hbar D_\alpha^{1/\alpha}}\right)^{\alpha/(\alpha-1)}, \tag{4.21}$$

que existe apenas para $b < 0$ sendo, neste caso, única e também a solução normalizada da equação, dada em termos de funções H de Fox,

$$\Psi(x) = \begin{cases} \dfrac{N_{\alpha,\theta}}{|x|} H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\dfrac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), \left(1, \dfrac{\alpha+\theta}{2}\right) \\ (1,\alpha), (1,1), \left(1, \dfrac{\alpha+\theta}{2}\right) \end{matrix}\right], & x < 0 \\[2ex] \dfrac{N_{\alpha,\theta}}{|x|} H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\dfrac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), \left(1, \dfrac{\alpha-\theta}{2}\right) \\ (1,\alpha), (1,1), \left(1, \dfrac{\alpha-\theta}{2}\right) \end{matrix}\right], & x > 0 \end{cases} \tag{4.22}$$

com a constante de normalização dada por

$$N_{\alpha,\theta} = \alpha\sqrt{\frac{\hbar\ \operatorname{sen}\pi/\alpha\ \operatorname{sen}\theta\pi/2}{\lambda\operatorname{sen}(\alpha-1)\theta\pi/2}}. \tag{4.23}$$

Tomando o limite $\theta \to 0$, recuperamos as expressões das por (4.5) e (4.6).

Além desses modelos mostrados acima, que são conhecidos como potencial *delta simples*, também foram estudados modelos que envolvem mais de uma função delta em seu termo potencial: o *delta duplo*, estudado nas referências (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010; JAROSZ; VAZ Jr, 2016; DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011), que se trata de um potencial contendo funções delta em dois pontos diferentes; o *delta triplo*, estudado na referência (TARE; ESGUERRA, 2014), onde também foi mostrado que a generalização para um número finito de funções delta no termo de potencial, embora apresente dificuldade no cálculo dos autovalores para dimensões mais altas, é de simples resolução sob o ponto de vista numérico; e, por fim, o *modelo de Kronig-Penney*, estudado nas referências (JAROSZ, 2016; GOMES, 2018), que consiste em um potencial formado por funções delta no termo potencial em uma quantidade infinita, porém enumerável, de pontos. Neste trabalho, de modo geral, nos concentramos apenas em modelos que envolvam potenciais delta e suas derivadas em apenas um ponto.

Aplicando transformada de Fourier ao termo do potencial, obtemos

$$\mathcal{F}\left[V(x)\psi(x)\right] = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\left[a\delta(x) + b\delta'(x)\right]\psi(x)dx = \left(a + \frac{ibp}{\hbar}\right)\bar{\psi}(0) - b\bar{\psi}'(0), \quad (4.24)$$

e deste modo a representação da equação (4.1) no espaço de Fourier é dada por

$$\left(D_\alpha|p|^\alpha - E\right)\phi(p) = -\left(a + \frac{ibp}{\hbar}\right)\bar{\psi}(0) + b\bar{\psi}'(0). \quad (4.25)$$

A resolução desta equação se desdobra em duas situações: problema de estado ligado ($E < 0$) e problema de espalhamento ($E > 0$).

4.1 Problema de Estados Ligados

Para estudar o problema de estados ligados, consideramos $E < 0$ e definimos

$$\lambda^\alpha = -\frac{E}{D_\alpha}, \quad (4.26)$$

com $\lambda > 0$. A equação (4.25) fica dada por

$$\phi(p) = \frac{1}{D_\alpha}\left[\frac{-a\bar{\psi}(0) + b\bar{\psi}'(0)}{|p|^\alpha + \lambda^\alpha} - \frac{ib\bar{\psi}(0)}{\hbar}\frac{p}{|p|^\alpha + \lambda^\alpha}\right]. \quad (4.27)$$

Após aplicar a transformada de Fourier inversa, obtemos uma forma integral para a solução,

$$\psi(x) = \left[-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)\right]\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{|p|^\alpha + \lambda^\alpha}\,dp - B\bar{\psi}(0)\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{ip}{\hbar}\right)\frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{|p|^\alpha + \lambda^\alpha}\,dp, \quad (4.28)$$

com

$$A = \frac{a}{2\pi\hbar D_\alpha}, \qquad B = \frac{b}{2\pi\hbar D_\alpha}. \quad (4.29)$$

Para encontrar a energia de estados ligados, devemos observar que a presença do termo $\delta'(x)$ no potencial indica a possibilidade de que a função de onda apresente uma descontinuidade na origem (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009).

Deste modo, podemos reescrever a função de onda na seguinte forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} [-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)]I_+^{(0)}(x) - B\bar{\psi}(0)I_+^{(1)}(x), & x > 0 \\ [-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)]I_-^{(0)}(x) - B\bar{\psi}(0)I_-^{(1)}(x), & x < 0, \end{cases} \tag{4.30}$$

com

$$I_\pm^{(n)}(x) \equiv H(\pm x)\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{ip}{\hbar}\right)^n \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{|p|^\alpha + \lambda^\alpha}\,dp, \tag{4.31}$$

e $H(x)$ é a função degrau. Derivando a equação (4.30) com respeito à variável x, obtemos

$$\psi'(x) = \begin{cases} [-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)]I_+^{(1)}(x) - B\bar{\psi}(0)I_+^{(2)}(x), & x > 0 \\ [-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)]I_-^{(1)}(x) - B\bar{\psi}(0)I_-^{(2)}(x), & x < 0, \end{cases} \tag{4.32}$$

Tomando o limite $x \to 0+$ na equação (4.30), obtemos

$$\begin{aligned} \left[1 + \frac{A}{2}I_+^{(0)}(0+) + \frac{B}{2}I_+^{(1)}(0+)\right]\psi(0+) + \left[\frac{A}{2}I_+^{(0)}(0+) + \frac{B}{2}I_+^{(1)}(0+)\right]\psi(0-) = \\ = \frac{B}{2}I_+^{(0)}(0+)\left[\psi'(0+) + \psi'(0-)\right], \end{aligned} \tag{4.33}$$

e tomando agora o limite $x \to 0-$ na mesma equação, obtemos

$$\begin{aligned} \left[\frac{A}{2}I_-^{(0)}(0-) + \frac{B}{2}I_-^{(1)}(0-)\right]\psi(0+) + \left[1 + \frac{A}{2}I_-^{(0)}(0-) + \frac{B}{2}I_-^{(1)}(0-)\right]\psi(0-) = \\ = \frac{B}{2}I_-^{(0)}(0-)\left[\psi'(0+) + \psi'(0-)\right] \end{aligned} \tag{4.34}$$

Tomando o limite $x \to 0+$ na equação (4.32), obtemos

$$\begin{aligned} \left[\frac{A}{2}I_+^{(1)}(0+) + \frac{B}{2}I_+^{(2)}(0+)\right]\left[\psi(0+) + \psi(0-)\right] = \left[1 - \frac{B}{2}I_+^{(1)}(0+)\right]\psi'(0+) + \\ + \frac{B}{2}I_+^{(1)}(0+)\psi'(0-) \end{aligned} \tag{4.35}$$

Por fim, tomando o limite $x \to 0-$ na equação (4.32), obtemos

$$\begin{aligned} \left[\frac{A}{2}I_-^{(1)}(0-) + \frac{B}{2}I_-^{(2)}(0-)\right]\left[\psi(0+) + \psi(0-)\right] = \frac{B}{2}I_-^{(1)}(0-)\psi'(0+) + \\ + \left[1 - \frac{B}{2}I_-^{(1)}(0-)\right]\psi'(0-) \end{aligned} \tag{4.36}$$

Combinando as quatro expressões acima, obteremos um sistema linear homogêneo nas variáveis $\psi(0+)$ e $\psi(0-)$,

$$\begin{cases} C_1\psi(0+) + C_2\psi(0-) &= 0 \\ C_3\psi(0+) + C_4\psi(0-) &= 0, \end{cases} \tag{4.37}$$

com seus coeficientes dados por

$$C_1 = \left[1 - B\bar{I}^{(1)}(0)\right]\left[1 + \frac{A}{2}I_+^{(0)}(0+) + \frac{B}{2}I_+^{(1)}(0+)\right] + \frac{B}{2}I_+^{(0)}(0+)\left[A\bar{I}^{(1)}(0) + B\bar{I}^{(2)}(0)\right],$$

$$C_2 = \left[1 - B\bar{I}^{(1)}(0)\right]\left[\frac{A}{2}I_+^{(0)}(0+) + \frac{B}{2}I_+^{(1)}(0+)\right] + \frac{B}{2}I_+^{(0)}(0+)\left[A\bar{I}^{(1)}(0) + B\bar{I}^{(2)}(0)\right],$$

$$C_3 = \left[1 - B\bar{I}^{(1)}(0)\right]\left[1 + \frac{A}{2}I_-^{(0)}(0-) + \frac{B}{2}I_-^{(1)}(0-)\right] + \frac{B}{2}I_-^{(0)}(0-)\left[A\bar{I}^{(1)}(0) + B\bar{I}^{(2)}(0)\right],$$

$$C_4 = \left[1 - B\bar{I}^{(1)}(0)\right]\left[\frac{A}{2}I_-^{(0)}(0-) + \frac{B}{2}I_-^{(1)}(0-)\right] + \frac{B}{2}I_-^{(0)}(0-)\left[A\bar{I}^{(1)}(0) + B\bar{I}^{(2)}(0)\right],$$

com $\bar{I}^{(n)}(0) = I_+^{(n)}(0+) + I_-^{(n)}(0-)$.

Este sistema admite soluções não triviais apenas se os coeficientes satisfizerem à relação $C_1C_4 - C_2C_3 = 0$, de onde obtemos a igualdade

$$1 + A\bar{I}^{(0)}(0) - B^2\left[(\bar{I}^{(1)}(0))^2 - \bar{I}^{(0)}(0)\bar{I}^{(2)}(0)\right] = 0. \tag{4.38}$$

As integrais $\bar{I}^{(0)}(0)$, $\bar{I}^{(1)}(0)$ e $\bar{I}^{(2)}(0)$ são calculadas no Apêndice A,

$$\bar{I}^{(0)}(0) = \frac{2\pi}{\alpha}\lambda^{1-\alpha}\operatorname{cossec}\frac{\pi}{\alpha}, \quad \bar{I}^{(1)}(0) = 0, \quad \bar{I}^{(2)}(0) = \left(-\frac{1}{\hbar^2}\right)\frac{2\pi}{\alpha}\lambda^{3-\alpha}\operatorname{cossec}\frac{3\pi}{\alpha}, \tag{4.39}$$

e assim podemos reescrever a equação (4.38) na forma

$$\lambda^{\alpha-1}\left[1 + B_0\lambda^{4-2\alpha}\right] = -A_0, \tag{4.40}$$

com

$$A_0 \equiv A\frac{2\pi}{\alpha}\operatorname{cossec}\frac{\pi}{\alpha}, \qquad B_0 \equiv B^2\left(-\frac{1}{\hbar^2}\right)\left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^2\operatorname{cossec}\frac{\pi}{\alpha}\operatorname{cossec}\frac{3\pi}{\alpha}. \tag{4.41}$$

Observando que $\operatorname{cossec}(3\pi/\alpha)$ possui uma descontinuidade infinita em $\alpha = 1.5$, concluímos que o termo B_0 e, consequentemente, a equação (4.40) não estão definidas para este valor. Entretanto, $\alpha = 1.5$ marca uma mudança de sinal no termo B_0, o que nos leva a algumas observações interessantes:

- $a < 0$, para $1.5 < \alpha < 2$;
- para $1 < \alpha < 1.5$, pode haver situações em que $a > 0$;
- para $\alpha = 1.5$, não existe estado ligado.

Para $a \neq 0$, é possível encontrar soluções exatas para alguns autovalores na equação (4.40). Entretanto, para os valores de α que não possuem correspondentes gerados por essas equações polinomiais, não conseguiremos um método fechado para encontrar a solução de (4.40) e por este motivo é conveniente encontrar soluções aproximadas que, conforme veremos mais adiante, serão diferentes a depender da maior proximidade do valor de α a 1 ou 2.

4.1.1 Soluções Exatas para o Autovalor

Escrevendo $4 - 2\alpha = n(\alpha - 1)$, com $n = 1, 2, 3, \ldots$, e $K = \lambda^{\alpha-1}$, a equação (4.40) se torna

$$K\left(1 + B_0 K^n\right) = -A_0. \tag{4.42}$$

Vamos agora obter algumas expressões que fornecem valores exatos de λ para alguns valores de n:

- Para $n = 0$, $\alpha = 2$, e assim a equação (4.42) é dada por

  $$K\left(1 + B_0\right) = -A_0, \tag{4.43}$$

  de onde obtemos $\lambda = -A_0/(1 + B_0)$.

- Para $n = 1$, $\alpha = 5/3 \approx 1.667$, e assim a equação (4.42) se torna a equação quadrática

  $$K\left(1 + B_0 K\right) = -A_0, \tag{4.44}$$

  cujas soluções são dadas por

  $$K_{\pm} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 4A_0 B_0}}{2B_0}. \tag{4.45}$$

  Observando a forma das soluções desta equação, podemos concluir que, como $B_0 > 0$, as soluções para $A_0 < 0$ sempre serão reais, sendo uma delas positiva e a outra negativa; além disso, as soluções reais existentes para $A_0 > 0$ serão sempre negativas e, deste modo, não há autovalores para $a > 0$, corroborando a conclusão tirada pela análise da equação (4.40).

- Para $n = 2$, $\alpha = 3/2 = 1.5$. Já se sabe que para este valor de α, não existe solução de estado ligado.

- Para $n = 3$, $\alpha = 7/5 = 1.4$, e a equação (4.42) é de quarto grau,

  $$K\left(1 + B_0 K^3\right) = -A_0. \tag{4.46}$$

  Expandindo a expressão e utilizando a relação de Girard dada por

  $$K_1 K_2 K_3 K_4 = \frac{A_0}{B_0}, \tag{4.47}$$

  sendo K_i as soluções da equação para $i = 1, \ldots, 4$, segue que, como $B_0 < 0$ para $\alpha = 1.4$, se $A_0 > 0$, o produto entre as suas raízes é negativo, ou seja, existe pelo menos uma raiz real negativa e, portanto, pelo menos uma raiz positiva; as demais raízes podem tanto ser complexas conjugadas ou ambas reais com o mesmo sinal e, deste modo, para $A_0 > 0$ sempre haverá pelo menos uma solução de estado ligado. Caso $A_0 < 0$, o produto entre as raízes é positivo e, portanto, não pode-se garantir a existência de uma raiz real positiva; porém, caso exista, a mesma não será única.

- Para $n = 4$, $\alpha = 4/3 \approx 1.333$, e obtemos a equação de quinto grau,

$$K\left(1 + B_0 K^4\right) = -A_0. \tag{4.48}$$

Utilizaremos novamente a relação de Girard,

$$K_1 K_2 K_3 K_4 K_5 = -\frac{A_0}{B_0}, \tag{4.49}$$

com K_i as soluções da equação para $i = 1, \ldots, 5$.

Aqui, o produto entre as raízes é positivo, então a existência de pelo menos uma raiz real positiva é garantida para $A_0 > 0$; para $A_0 < 0$, a única coisa que se pode garantir é a existência de uma raiz real negativa.

- Para valores maiores de n, o grau do polinômio aumenta, porém a presença de pelo menos uma solução real positiva para $A_0 > 0$ é assegurada de maneira totalmente análoga à mostrada nos itens $n = 3$ e $n = 4$. Observemos também que a ordem α decresce conforme o valor de n aumenta, o que garante que para $1 < \alpha < 1.5$ sempre existirá estado ligado para $A_0 > 0$.

Uma segunda maneira de obter soluções exatas: escrevendo $\alpha - 1 = N(4 - 2\alpha)$, para $N = 1, 2, 3, \ldots$, a equação (4.40) fica dada por

$$\tau^N \left(1 + B_0 \tau\right) = -A_0, \tag{4.50}$$

com $\tau = \lambda^{4-2\alpha}$. Novamente, vamos encontrar expressões para obter soluções exatas para alguns valores de N.

- Para $N = 0$, $\alpha = 1$, que está fora do domínio de definição.

- Para $N = 1$, $\alpha = 5/3 \approx 1.667$ e a equação (4.40) fica dada por

$$\tau \left(1 + B_0 \tau\right) = -A_0, \tag{4.51}$$

que é idêntica à equação (4.44), obtida no primeiro método.

- Para $N = 2$, $\alpha = 9/5 = 1.8$, e obtemos a equação quadrática dada por

$$\tau^2 \left(1 + B_0 \tau\right) = -A_0. \tag{4.52}$$

Como esta equação não se enquadra na fórmula de Cardano-Tartaglia, iremos utilizar a relação de Girard dada por

$$\tau_1 \tau_2 \tau_3 = -\frac{A_0}{B_0}, \tag{4.53}$$

com τ_i sendo as raízes da equação para $i = 1, 2, 3$, para analisar as soluções.

Como $B_0 > 0$ para $1.5 < \alpha \leqslant 2$, segue-se que para $A_0 < 0$ deve-se ter um número par de raízes negativas, o que nos assegura a existência de ao menos uma raiz positiva; para $A_0 > 0$, entretanto, não é possível assegurar a existência de raízes para quaisquer valores de a e b.

Esta estratégia permite encontrar uma quantidade infinita e enumerável de valores exatos para os autovalores; entretanto, o grau de complexidade da resolução das equações (4.42) e (4.50) aumenta conforme os valores de n e N crescem, inviabilizando a obtenção de valores exatos, sendo mais conveniente recorrer a aproximações, conforme veremos nas subseções a seguir.

4.1.2 Aproximação para autovalores no intervalo $1.5 < \alpha \leqslant 2$

Para os valores de α que não são gerados por essas equações polinomiais, não conseguiremos um método fechado para encontrar a solução de (4.40) e por este motivo é conveniente encontrar uma solução aproximada. Escrevendo $\alpha = 2-\epsilon$, com $\epsilon > 0$, obtemos

$$\lambda(1 + B_0\lambda^{2\epsilon}) + A_0\lambda^{\epsilon} = 0. \tag{4.54}$$

Para resolver a equação, utilizaremos uma expansão em série em torno de $\epsilon = 0$. Como os parâmetros A_0, B_0 e λ também dependem de ϵ, também devemos expandi-los em série e substituir as expressões obtidas na equação (4.54) e em seguida agrupar os termos de mesma ordem em ϵ. Para isso, vamos escrever

$$A_0 = \frac{a_0}{\alpha}\,\mathrm{cossec}\,\frac{\pi}{\alpha}, \qquad B_0 = -\left(\frac{b_0}{\alpha}\right)^2 \mathrm{cossec}\,\frac{\pi}{\alpha}\,\mathrm{cossec}\,\frac{3\pi}{\alpha}, \tag{4.55}$$

com as constantes $a_0 = 2\pi A$ e $b_0 = 2\pi B/\hbar$.

As expansões de A_0 e B_0 são, respectivamente,

$$\begin{aligned} A_0 = {} & \frac{a_0}{2} + \frac{a_0}{4}\epsilon + \frac{a_0}{8}\left(1 + \frac{\pi^2}{8}\right)\epsilon^2 + \frac{a_0}{16}\left(1 + \frac{3\pi^2}{8}\right)\epsilon^3 \\ & + \frac{a_0}{32}\left(1 + \frac{3\pi^2}{4} + \frac{5\pi^4}{384}\right)\epsilon^4 + \mathcal{O}\left(\epsilon^5\right), \end{aligned} \tag{4.56}$$

$$\begin{aligned} B_0 = {} & \frac{b_0^2}{4} + \frac{b_0^2}{4}\epsilon + \frac{3b_0^2}{16}\left(1 + \frac{5\pi^2}{12}\right)\epsilon^2 + \frac{b_0^2}{8}\left(1 + \frac{5\pi^2}{4}\right)\epsilon^3 \\ & + \frac{5b_0^2}{64}\left(1 + \frac{5\pi^2}{2} + \frac{29\pi^4}{120}\right)\epsilon^4 + \mathcal{O}\left(\epsilon^5\right). \end{aligned} \tag{4.57}$$

Escrevemos λ em forma de série,

$$\lambda = \lambda_0 + \lambda_1\epsilon + \lambda_2\epsilon^2 + \lambda_3\epsilon^3 + \lambda_4\epsilon^4 + \mathcal{O}(\epsilon^5), \tag{4.58}$$

com $\lambda_i \in \mathbb{R}$ para $i = 0, 1, 2, \ldots$.

Obtemos as expressões

$$\begin{aligned}
\lambda^{\epsilon} = {} & 1 + \ln(\lambda_0)\,\epsilon + \frac{1}{2}\left(\frac{2\lambda_1}{\lambda_0} + \ln^2(\lambda_0)\right)\epsilon^2 \\
& + \frac{\left(-3\lambda_1^2 + 6\lambda_0\lambda_2 + \lambda_0^2\ln^3(\lambda_0) + 6\lambda_0\lambda_1\ln(\lambda_0)\right)}{6\lambda_0^2}\epsilon^3 \\
& + \left[\frac{8\lambda_1^3 + 12\lambda_0\lambda_1^2 - 24\lambda_0\lambda_1\lambda_2 + 24\lambda_0^2\lambda_3}{24\lambda_0^3}\right. \\
& \left. + \frac{\lambda_0^3\ln^4(\lambda_0) + 12\lambda_0^2\lambda_1\ln^2(\lambda_0) - 12\ln(\lambda_0)\left(\lambda_0\lambda_1^2 - 2\lambda_0^2\lambda_2\right)}{24\lambda_0^3}\right]\epsilon^4 + \mathcal{O}\left(\epsilon^5\right),
\end{aligned} \tag{4.59}$$

$$\begin{aligned}
\lambda^{2\epsilon} = {} & 1 + 2\ln(\lambda_0)\,\epsilon + \frac{2\left(\lambda_1 + \lambda_0\ln^2(\lambda_0)\right)}{\lambda_0}\epsilon^2 \\
& + \frac{\left(-3\lambda_1^2 + 6\lambda_0\lambda_2 + 4\lambda_0^2\ln^3(\lambda_0) + 12\lambda_0\lambda_1\ln(\lambda_0)\right)}{3\lambda_0^2}\epsilon^3 \\
& + \left[\frac{2(\lambda_1^3 + 3\lambda_0\lambda_1^2 - 3\lambda_0\lambda_1\lambda_2 + 3\lambda_0^2\lambda_3)}{3\lambda_0^3}\right. \\
& \left. + \frac{2(\lambda_0^3\ln^4(\lambda_0) + 6\lambda_0^2\lambda_1\ln^2(\lambda_0) - 3\lambda_0\lambda_1^2\ln(\lambda_0) + 6\lambda_0^2\lambda_2\ln(\lambda_0))}{3\lambda_0^3}\right]\epsilon^4 + \mathcal{O}\left(\epsilon^5\right).
\end{aligned} \tag{4.60}$$

Substituindo as (4.56), (4.57), (4.58), (4.59) e (4.60) na equação (4.54) e agrupando os termos de mesma ordem, obtemos uma expressão na forma

$$\Lambda_0 + \Lambda_1\epsilon + \Lambda_2\epsilon^2 + \Lambda_3\epsilon^3 + \Lambda_4\epsilon^4 + \mathcal{O}(\epsilon^5) = 0, \tag{4.61}$$

de onde segue-se que

$$0 = \Lambda_0 = \frac{a_0}{2} + \left(\frac{b_0^2}{4} + 1\right)\lambda_0, \tag{4.62}$$

$$0 = \Lambda_1 = \frac{a_0}{4} + \frac{a_0}{2}\ln\lambda_0 + \frac{b_0^2}{4}(1 + 2\ln\lambda_0)\lambda_0 + \left(\frac{b_0^2}{4} + 1\right)\lambda_1, \tag{4.63}$$

$$\begin{aligned}
0 = \Lambda_2 = {} & \frac{a_0}{8}\left(1 + \frac{\pi^2}{8}\right) + \frac{a_0}{4}\ln\lambda_0 + \frac{a_0}{4}\left(\ln^2\lambda_0 + \frac{2\lambda_1}{\lambda_0}\right) \\
& + \frac{b_0^2}{2}\left[\frac{3}{8}\left(1 + \frac{5\pi^2}{12}\right)\lambda_0 + \lambda_0\ln\lambda_0 + \ln^2\lambda_0 + \lambda_1\right] \\
& + \frac{b_0^2}{4}(1 + 2\ln\lambda_0)\lambda_1 + \left(1 + \frac{b_0^2}{4}\right)\lambda_2,
\end{aligned} \tag{4.64}$$

$$
\begin{aligned}
0 = \Lambda_3 = {} & \frac{a_0}{16}\left(1+\frac{3\pi^2}{8}\right)+\frac{a_0}{8}\left(1+\frac{\pi^2}{8}\right)\ln\lambda_0+\frac{a_0}{8}\left(\ln^2\lambda_0+2\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\right) \\
& +\frac{a_0}{12}\left(\ln^3\lambda_0+6\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\ln\lambda_0-3\frac{\lambda_1^2}{\lambda_0^2}+6\frac{\lambda_2}{\lambda_0}\right) \\
& +\frac{b_0^2}{2}\left[\frac{3}{8}\left(1+\frac{5\pi^2}{12}\right)+\ln\lambda_0+\ln^2\lambda_0+\frac{\lambda_1}{\lambda_0}+1\right]\lambda_1 \\
& +\frac{b_0^2}{2}\left[\frac{1}{4}\left(1+\frac{5\pi^2}{4}\right)\lambda_0+\frac{3}{4}\left(1+\frac{5\pi^2}{12}\right)\lambda_0\ln\lambda_0+\lambda_0\ln^2\lambda_0\right] \\
& +\frac{b_0^2}{12}\left(4\lambda_0\ln^3\lambda_0+12\lambda_1\ln\lambda_0-3\frac{\lambda_1^2}{\lambda_0}+6\lambda_2\right) \\
& +\frac{b_0^2}{4}(1+2\ln\lambda_0)\lambda_2+\left(1+\frac{b_0^2}{4}\right)\lambda_3,
\end{aligned}
\tag{4.65}
$$

$$
\begin{aligned}
0 = \Lambda_4 = {} & \frac{a_0}{32}\left(1+\frac{3\pi^2}{4}+\frac{5\pi^4}{384}\right)+\frac{a_0}{16}\left[\left(1+\frac{3\pi^2}{8}\right)\ln\lambda_0+\left(1+\frac{\pi^2}{8}\right)\left(\ln^2\lambda_0+\frac{2\lambda_1}{\lambda_0}\right)\right] \\
& +\frac{a_0}{24}\left(\ln^3\lambda_0+6\frac{\lambda_1}{\lambda_0}-3\frac{\lambda_1^2}{\lambda_0^2}+6\frac{\lambda_2}{\lambda_0}\right)+\frac{a_0}{48}\left(\ln^4\lambda_0+12\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\ln^2\lambda_0\right) \\
& +\frac{a_0}{48}\left(12\frac{\lambda_1^2}{\lambda_0^2}-12\frac{\lambda_1^2}{\lambda_0^2}\ln\lambda_0+24\frac{\lambda_2}{\lambda_0}\ln\lambda_0-23\frac{\lambda_1\lambda_2}{\lambda_0^2}+24\frac{\lambda_3}{\lambda_0}+8\right) \\
& +\frac{b_0^2}{2}\left[\frac{3}{8}\left(1+\frac{5\pi^2}{12}\right)+\ln\lambda_0+\ln^2\lambda_0+\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\right]\lambda_2+\frac{b_0^2}{4}\left(1+2\ln\lambda_0\right)\lambda_3 \\
& +\frac{b_0^2}{2}\left[\frac{1}{4}\left(1+\frac{5\pi^2}{4}\right)+\frac{3}{4}\left(1+\frac{5\pi^2}{12}\right)\ln\lambda_0+\ln^2\lambda_0+\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\right]\lambda_1 \\
& +\frac{b_0^2}{12}\left(4\ln^3\lambda_0+12\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\ln\lambda_0-3\frac{\lambda_1^2}{\lambda_0^2}+6\frac{\lambda_2}{\lambda_0}\right)\lambda_1 \\
& +\frac{b_0^2}{32}\left[\frac{5}{2}\left(1+\frac{5\pi^2}{2}+\frac{29\pi^4}{120}\right)\lambda_0+(8+10\pi^2)\lambda_0\ln\lambda_0+(12+5\pi^2)(\lambda_0\ln^2\lambda_0+\lambda_1)\right] \\
& +\frac{b_0^2}{6}\left(\ln^4\lambda_0+6\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\ln^2\lambda_0+3\frac{\lambda_1^2}{\lambda_0^2}(1-\ln\lambda_0)+6\frac{\lambda_2}{\lambda_0}\ln\lambda_0-3\frac{\lambda_1\lambda_2}{\lambda_0^2}+3\frac{\lambda_3}{\lambda_0}+1\right)\lambda_0 \\
& +\frac{b_0^2}{12}\left(4\ln^3\lambda_0+12\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\ln\lambda_0-3\frac{\lambda_1^2}{\lambda_0^2}+6\frac{\lambda_2}{\lambda_0}\right)\lambda_0+\left(1+\frac{b_0^2}{4}\right)\lambda_4.
\end{aligned}
\tag{4.66}
$$

A equação (4.62) fornece λ_0; substituindo este valor na equação (4.63), obtemos λ_1; Do mesmo modo, λ_0 e λ_1 na equação (4.64) fornece o valor λ_2, e assim por diante, de onde segue que

$$
\lambda_0 = -\frac{2a_0}{4+b_0^2}, \qquad \lambda_1 = \frac{a_0}{(4+b_0^2)^2}\left[(-4+b_0^2)\left(1+2\ln\left(-\frac{2a_0}{4+b_0^2}\right)\right)\right], \tag{4.67}
$$

$$\lambda_2 = \frac{a_0}{16(4+b_0^2)^3}\Big[32b_0^2(7+\pi^2) - 16(24+\pi^2) + b_0^4\left(-16+9\pi^2\right) \\ - 16(48-40b_0^2+3b_0^4)\ln\left(\frac{-2a_0}{4+b_0^2}\right) - 16(16-24b_0^2+b_0^4)\ln^2\left(\frac{-2a_0}{4+b_0^2}\right)\Big], \tag{4.68}$$

$$\lambda_3 = \frac{a_0}{96(4+b_0^2)^4}\Big[24(-512+592b_0^2-120b_0^4+5b_0^6) - 3(4+b_0^2)\left(80-264b_0^2+9b_0^4\right)\pi^2 \\ - 6\big[64(72+\pi^2) - 16b_0^2(496+29\pi^2) + b_0^4\left(1824-84\pi^2\right) + b_0^6\left(-64+9\pi^2\right)\big]\ln\left(\frac{-2a_0}{4+b_0^2}\right) \\ + 48(-4+b_0^2)(80-216b_0^2+5b_0^4)\ln^2\left(\frac{-2a_0}{4+b_0^2}\right) \\ + 32(-4+b_0^2)(16-88b_0^2+b_0^4)\ln^3\left(\frac{-2a_0}{4+b_0^2}\right)\Big], \tag{4.69}$$

$$\lambda_4 = \frac{-a_0}{3072(4+b_0^2)^5}\Big[128(15872-31616b_0^2+12432b_0^4-1376b_0^6+35b_0^8) \\ - 48(4+b_0^2)(-1152+5648b_0^2-1056b_0^4+45b_0^6)\pi^2 + (4+b_0^2)^2(80-2056b_0^2+81b_0^4)\pi^4 \\ + 32\big[159744-474624b_0^2+220032b_0^4-24480b_0^6+504b_0^8) \\ + 3(4+b_0^2)(-448+4560b_0^2-1284b_0^4+27b_0^6)\pi^2\big]\ln\left(\frac{-2a_0}{4+b_0^2}\right) \\ + 32\big[48(2432-12064b_0^2+6648b_0^4-710b_0^6+9b_0^8) \\ - 3(4+b_0^2)(-64+1520b_0^2-540b_0^4+9b_0^6)\pi^2\big]\ln^2\left(\frac{-2a_0}{4+b_0^2}\right) \\ + 256\big[3584-33280b_0^2+21824b_0^4-2080b_0^6+14b_0^8\big]\ln^3\left(\frac{-2a_0}{4+b_0^2}\right) \\ + 256\big[256-4864b_0^2+3680b_0^4-304b_0^6+b_0^8\big]\ln^4\left(\frac{-2a_0}{4+b_0^2}\right). \tag{4.70}$$

Observamos que esta aproximação só é válida para $a < 0$ e, somando-se ao fato de que é desenvolvida em torno de $\alpha = 2$, a mesma parece bastante adequada para $1.5 < \alpha \leqslant 2$, conforme verificaremos a seguir.

Tomando os parâmetros $m = 1$, $D_\alpha = 1/2m$ temos, para $a = -1$ e $b = 1$, os seguintes valores para os coeficientes da aproximação de λ dada por (4.58):

$$\lambda_0 = \frac{1}{2}, \quad \lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = -0.626177, \quad \lambda_3 = -0.45585, \quad \lambda_4 = -1.37747.$$

Deste modo, obtemos uma aproximação para o autovalor λ dado em termos de um polinômio de quarto grau, dado por

$$\begin{aligned} p_\lambda(\alpha) &= -1.3347(2-\alpha)^4 - 0.45585(2-\alpha)^3 - 0.0626177(2-\alpha)^2 + 0.5 \\ &= 1.36747\alpha^4 + 11.3956\alpha^3 - 36.1806\alpha^2 + 51.7339\alpha - 27.531. \end{aligned} \tag{4.71}$$

A seguir, resolvemos as equações (4.42) e (4.50) para alguns valores de n e N. Cada uma dessas equações possui apenas uma raiz positiva, que utilizaremos para obter o valor exato de λ e compararemos com a aproximação polinomial que acabamos de obter. A Tabela 1 apresenta uma comparação entre os valores exatos e aproximados de λ.

α	λ (aproximado)	λ (exato)	aprox/exato
2	0.5	0.5	1
1.857	0.485303	0.485237	1.000136
1.8	0.469166	0.468618	1.001169
1.667	0.397282	0.38824	1.023289

Tabela 1 – Soluções exata e aproximada de λ, para $a = -1$ e $b = 1$.

4.1.3 Aproximação para autovalores no intervalo $1 < \alpha < 1.5$

Queremos agora obter uma expressão para λ que ofereça uma boa aproximação para o intervalo $1 < \alpha < 1.5$. À primeira vista, o caminho natural parece ser tomar $\alpha = 1+\epsilon$ ou $\alpha = 1.5-\epsilon$, porém devemos observar que, em torno desses valores, surgem singularidades nos coeficientes A_0 e B_0 definidos conforme (4.55). Por este motivo, expandiremos α em torno de um valor intermediário entre 1 e 1.5, e optamos por escolhê-lo de modo a conseguir comparar a aproximação de α com valores obtidos das soluções exatas. Escrevendo $\alpha = 4/3 - \epsilon$, com $\epsilon \neq 0$, obtemos

$$\begin{aligned} A_0 =& \frac{3a_0}{2\sqrt{2}} + \frac{9\sqrt{2}a_0}{64}(4+3\pi)\epsilon + \frac{27\sqrt{2}a_0}{2048}(32+48\pi+\pi^2)\epsilon^2 \\ &+ \frac{81\sqrt{2}a_0}{32768}(128+288\pi+324\pi^2+99\pi^3)\epsilon^3 \\ &+ \frac{243\sqrt{2}a_0}{2097152}(2048+6144\pi+10368\pi^2+6336\pi^3+1539\pi^4)\epsilon^4 \\ &+ \mathcal{O}(\epsilon^5), \end{aligned} \tag{4.72}$$

$$\begin{aligned} B_0 =& -\frac{9b_0^2}{8} + \frac{27b_0^2}{64}(-4+3\pi)\epsilon + \frac{243b_0^2}{512}(-4+6\pi-9\pi^2)\epsilon^2 \\ &+ \frac{243b_0^2}{8192}(-64+144\pi-432\pi^2+261\pi^3)\epsilon^3 \\ &+ \frac{3645b_0^2}{32768}(-16+48\pi-216\pi^2+261\pi^3-162\pi^4)\epsilon^4 + \mathcal{O}(\epsilon^5). \end{aligned} \tag{4.73}$$

Substituindo $\alpha = 4/3 - \epsilon$ - com ϵ nesse caso podendo ser negativo - na equação (4.40), obtemos

$$\lambda^{1/3}(1 + B_0\lambda^{4/3+2\epsilon}) + A_0\lambda^{\epsilon} = 0. \tag{4.74}$$

Escrevendo λ em forma de série conforme (4.58), as expressões para λ^{ϵ} e $\lambda^{2\epsilon}$ são dadas por (4.59) e (4.60), respectivamente, e

$$\begin{aligned}\lambda^{1/3} = \lambda_0^{1/3} + \frac{\lambda_1}{3\lambda_0^{2/3}}\epsilon + \frac{(-\lambda_1^2 + 3\lambda_0\lambda_2)}{9\lambda_0^{5/3}}\epsilon^2 + \frac{(5\lambda_1^3 - 18\lambda_0\lambda_1\lambda_2 + 27\lambda_0^2\lambda_3)}{81\lambda_0^{8/3}}\epsilon^3 \\ + \frac{(-10\lambda_1^4 + 45\lambda_0\lambda_1^2\lambda_2 - 27\lambda_0^2\lambda_2^2 - 54\lambda_0^2\lambda_1\lambda_3 + 81\lambda_0^3\lambda_4)}{243\lambda_0^{11/3}}\epsilon^4 + \mathcal{O}(\epsilon^5),\end{aligned} \tag{4.75}$$

$$\begin{aligned}\lambda^{4/3} = \lambda_0^{4/3} + \frac{4\lambda_0^{1/3}\lambda_1}{3}\epsilon + \frac{2(\lambda_1^2 + 6\lambda_0\lambda_2)}{9\lambda_0^{2/3}}\epsilon^2 + \frac{4(-\lambda_1^3 + 9\lambda_0\lambda_1\lambda_2 + 27\lambda_0^2\lambda_3)}{81\lambda_0^{5/3}}\epsilon^3 \\ + \frac{(5\lambda_1^4 - 36\lambda_0\lambda_1^2\lambda_2 + 54\lambda_0^2\lambda_2^2 + 108\lambda_0^2\lambda_1\lambda_3 + 324\lambda_0^3\lambda_4)}{243\lambda_0^{8/3}}\epsilon^4 + \mathcal{O}(\epsilon^5).\end{aligned} \tag{4.76}$$

A resolução da equação (4.64) envolve expressões longas e por isso será feita com detalhes no Apêndice C.

Vamos agora calcular os coeficientes λ_i, para $i = 0, 1, \ldots, 4$, para os parâmetros $a = 1$ e $b = 1$. A equação (C.3), que determina o valor de λ_0 fica dada por

$$-\frac{9}{2}\omega^5 + \omega + \frac{3}{\sqrt{2}} = 0, \tag{4.77}$$

com $\omega = \lambda_0^{1/3}$, e suas soluções são dadas por

$$\begin{gathered}\omega_1 = 0.924934, \quad \omega_2 = -0.676587 - 433667i, \quad \omega_3 = -0.676587 + 433667i, \\ \omega_4 = 0.21412 - 0.86215i, \quad \omega_5 = 0.21412 + 0.86215i.\end{gathered}$$

Conforme discutido no Apêndice C, para $a = 1$ esta equação deve possuir ao menos uma raiz positiva e, de fato, possui uma única, dada por $\omega_1 = 0.924934$, que nos fornece $\lambda_0 = 0.791284$.

Observando que λ_0 corresponde ao autovalor associado a $\alpha = 4/3$, podemos comparar este valor com o obtido pela solução exata, dada pela equação (4.48), com $K = \lambda^{1/3}$, isto é, obtemos exatamente a mesma equação e, deste modo, λ_0 corresponde à solução *exata* para o autovalor λ no caso $\alpha = 4/3$.

Substituindo este valor de λ_0 nas expressões (C.4), (C.5), (C.6) e (C.7), obtemos

$$\lambda_1 = 2.06853, \quad \lambda_2 = -11.9768, \quad \lambda_3 = 7.10355, \quad \lambda_4 = -9.81096,$$

que fornece uma aproximação para o autovalor como um polinômio de quarto grau,

$$\begin{aligned}q_\lambda(\alpha) = &- 9.81096(4/3 - \alpha)^4 + 7.10355(4/3 - \alpha)^3 \\ &- 11.9768(4/3 - \alpha)^2 + 2.06853(4/3 - \alpha) + 0.791284,\end{aligned} \tag{4.78}$$

ou, simplificando,

$$q_\lambda(\alpha) = -9.81096\alpha^4 + 45.2216\alpha^3 - 88.2129\alpha^2 + 85.0065\alpha - 31.9122. \tag{4.79}$$

A seguir, resolvemos as equações (4.42) e (4.50) para alguns valores de n e N e utilizamos os mesmos valores de α para encontrar as soluções aproximadas para λ e compará-las. Os resultados obtidos são mostrados na Tabela 2.

α	λ (aproximado)	λ (exato)	aprox/exato
1.4	0.597853	0.597796	1.000095
1.333	0.791284	0.791284	1
1.286	0.863344	0.863345	0.999998
1.25	0.884127	0.884149	0.999975

Tabela 2 – Soluções exata e aproximada de λ, para $a = 1$ e $b = 1$.

Observando o cálculo feito no Apêndice C, notamos que esta aproximação requer que $\lambda_0 > 0$ e, portanto, pode ser utilizada para o caso $a > 0$, o que é um fato interessante visto que o problema do potencial que envolve apenas a função delta, sem as suas derivadas (conhecido como *delta simples*), admite soluções apenas para $a < 0$. A partir disso, é natural nos perguntarmos se também é possível obter soluções para $a = 0$, isto é, um potencial definido apenas pela derivada da função delta.

Analisando a equação (4.40) e os parâmetros (4.41), observamos que o problema sempre admite estados ligados para $1.5 < \alpha \leqslant 2$ se $a < 0$ ou $1 < \alpha < 1.5$ se $a > 0$ caso $b \neq 0$, e as aproximações dadas por (4.71) e (4.78) cobrem todas estas situações. Ainda assim, é possível obter autovalores reais positivos para os casos $a > 0$ para $1.5 < \alpha < 2$ e $a < 0$ para $1 < \alpha < 1.5$ para certos valores de a e b. Entretanto, a equação (4.41) se mostra inviável para alguma tentativa de análise em busca de alguma relação entre os valores de a e b. As aproximações polinomiais podem ser úteis para obter, mesmo que por tentativa e erro, valores para estes parâmetros que levem a essas soluções. O caso $b = 0$, estudado na referência (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010). por sua vez, admite estados ligados apenas para $a < 0$, $1 < \alpha \leqslant 2$.

Uma análise mais rigorosa do raio de convergência dessas aproximações em série pode ser feita com o auxílio de testes de convergência para séries, como o teorema de Cauchy-Hadamard (DE OLIVEIRA; RODRIGUES Jr., 2006), por exemplo.

4.1.4 O caso $a = 0$

Para $a = 0$, a equação (4.40) fica

$$\lambda^{\alpha-1}\left[1 + B_0\lambda^{4-2\alpha}\right] = 0. \tag{4.80}$$

Para $\alpha = 2$, esta equação se reduz a $\lambda = 0$. Porém, para $\alpha \neq 2$, obtemos a equação

$$\lambda^{4-2\alpha} = -\frac{1}{B_0}. \tag{4.81}$$

Como $\lambda > 0$ e o sinal de B_0 é determinado por cossec$(3\pi/\alpha)$, existe um valor não-trivial para a energia de estado ligado para $1 < \alpha < 1.5$, que é dado por

$$E = -\left[\frac{b^2 \operatorname{cossec}(\pi/\alpha)\ \operatorname{cossec}(3\pi/\alpha)}{\alpha^2 \hbar^2 D_\alpha^{4/\alpha}}\right]^{-\frac{1}{4-2\alpha}}. \tag{4.82}$$

A aproximação em torno de $\alpha = 4/3$ também vale para este caso. Para $a = 0$, a equação (C.3) fica dada por

$$\omega\left(1 - \frac{9b_0^2}{8}\omega^4\right) = 0, \tag{4.83}$$

com $\omega = \lambda^{1/3}$, que possui 5 soluções, a saber:

$$\omega_1 = 0,\ \ \omega_2 = \left(\frac{8}{9b_0^2}\right)^{1/4},\ \ \omega_3 = -\left(\frac{8}{9b_0^2}\right)^{1/4},\ \ \omega_4 = i\left(\frac{8}{9b_0^2}\right)^{1/4},\ \ \omega_5 = -i\left(\frac{8}{9b_0^2}\right)^{1/4},$$

e como o autovalor deve ser positivo, a solução que buscamos é dada por

$$\lambda_0 = \left(\frac{8}{9b_0^2}\right)^{3/4}. \tag{4.84}$$

Para $a = 0$, os coeficientes da aproximação são dados por

$$\lambda_0 = 0.323661, \quad \lambda_1 = 1.04148, \quad \lambda_2 = 6.96015, \quad \lambda_3 = -0.774321, \quad \lambda_4 = 25.6291,$$

e assim a aproximação fica dada por

$$\begin{aligned} r_\lambda(\alpha) = {} & 25.6291(4/3-\alpha)^4 - 0.774321(4/3-\alpha)^3 + 6.96015(4/3-\alpha)^2 \\ & + 1.04148(4/3-\alpha) + 0.323661, \end{aligned} \tag{4.85}$$

ou, expandindo,

$$r_\lambda(\alpha) = 25.6291\alpha^4 - 135.914\alpha^3 + 263.32\alpha^2 - 221.353\alpha + 68.5039. \tag{4.86}$$

A Tabela 3 apresenta os valores da aproximação e da solução exata (4.82).

α	λ (aproximado)	λ (exato)	aprox/exato
1.4	0.224031	0.224166	0.999397
1.333	0.323661	0.323661	1
1.286	0.35741	0.357393	0.100005
1.25	0.362904	0.362624	1.000772

Tabela 3 – Soluções exata e aproximada de λ, para $a = 0$ e $b = 1$.

As Figuras 6, 7 e 8 mostram a energia de estado ligado como função de mb, com o parâmetro a fixado. Vale observar que a energia de estados ligados se torna infinitamente grande à medida que b se aproxima de zero, para $a \leqslant 0$. Este resultado vai de acordo com a referência (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010), em que os autores concluem que a deve ser positivo para o potencial do tipo delta simples.

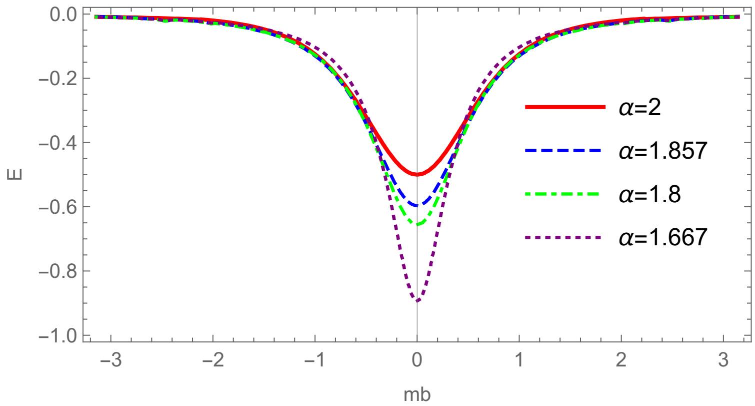


Figura 6 – Energia de estado ligado em função de mb para $a < 0$, conforme (4.40).

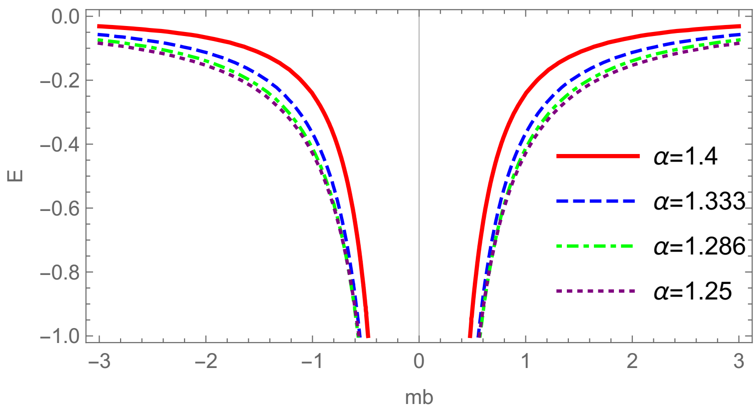


Figura 7 – Energia de estado ligado em função de mb para $a > 0$, conforme (4.40).

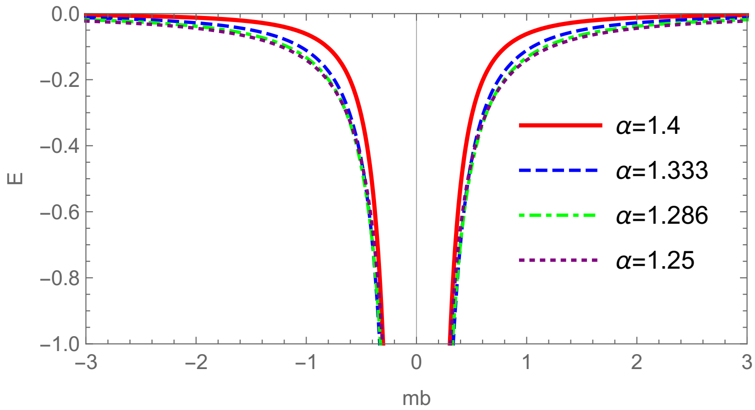


Figura 8 – Energia de estado ligado em função de mb para $a < 0$, conforme (4.82).

As integrais na equação (4.28) são calculadas no Apêndice A, dadas por (A.23) e (A.32). A função de onda para o problema de estados ligados é, portanto,

$$\begin{aligned}\psi(x) = \left[-a\bar{\psi}(0) + b\bar{\psi}'(0)\right] \frac{1}{D_\alpha \lambda^\alpha |x|} H^{2,1}_{2,3} &\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), \left(1, \frac{\alpha}{2}\right) \\ (1,\alpha), (1,1), \left(1, \frac{\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right] + \\ + \frac{b\bar{\psi}(0)}{D_\alpha \lambda^\alpha |x|^2} \operatorname{sgn}(x) H^{2,1}_{2,3} &\left[\left(\frac{\lambda x}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), \left(1, \frac{\alpha}{2}\right) \\ (2,\alpha), (1,1), \left(1, \frac{\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right].\end{aligned} \tag{4.87}$$

Vamos agora encontrar a solução normalizada, isto é, $\bar{\psi}(0)$ e $\bar{\psi}'(0)$ tais que $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\, dx = 1$. Contudo, uma vez que o cálculo de integrais envolvendo a função H de Fox não é uma tarefa fácil, faremos este cálculo utilizando a identidade de Parseval, isto é,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\, dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(p)|^2\, dp, \tag{4.88}$$

onde $|\phi(p)|^2 = \phi^*(p)\phi(p)$ e * denota a conjugação complexa. Utilizando $\phi(p)$ dado por (4.27), obtemos a equação

$$1 = \frac{1}{2\pi\hbar D_\alpha^2} \left[\left(-a\bar{\psi}(0) + b\bar{\psi}'(0)\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{(|p|^\alpha + \lambda^\alpha)^2} + \left(\frac{b\bar{\psi}(0)}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{(|p|^\alpha + \lambda^\alpha)^2} dp \right].$$

As integrais nesta equação são dadas pela fórmula **3.241.2** da referência (GRADSHTEYN; RYZHIK, 2007). Rearranjando os termos, obtemos

$$\begin{aligned}\alpha^2 \hbar D_\alpha^2 = &\left(-a\bar{\psi}(0) + b\bar{\psi}'(0)\right)^2 \lambda^{1-2\alpha} (1-\alpha) \operatorname{cossec}\left(\frac{1-\alpha}{\alpha}\right)\pi \\ &+ \left(\frac{b\bar{\psi}(0)}{\hbar}\right)^2 \lambda^{3-2\alpha} (3-\alpha) \operatorname{cossec}\left(\frac{3-\alpha}{\alpha}\right)\pi.\end{aligned} \tag{4.89}$$

Porém, esta equação não é suficiente para obter a solução normalizada, uma vez que temos dois parâmetros para determinar. Precisamos, portanto, encontrar uma segunda equação para que estes parâmetros sejam estabelecidos de maneira única. Combinando as expressões (4.33) e (4.34), obtemos a seguinte relação

$$\left[1 + A\bar{I}^{(0)}(0) + B\bar{I}^{(1)}(0)\right] \bar{\psi}(0) = B\bar{I}^{(0)}(0)\bar{\psi}'(0). \tag{4.90}$$

Voltando aos parâmetros originais, obtemos

$$\bar{\psi}'(0) = \frac{\alpha\hbar D_\alpha + a\lambda^{1-\alpha} \operatorname{cossec} \pi/\alpha}{b\lambda^{1-\alpha} \operatorname{cossec} \pi/\alpha} \bar{\psi}(0). \tag{4.91}$$

Substituindo (4.91) em (4.89), obtemos:

$$\bar{\psi}(0) = \alpha D_\alpha \sqrt{\frac{\hbar^3}{b^2 \lambda^{3-2\alpha}} (3-\alpha) \operatorname{cossec}(3-\alpha)\pi/\alpha - \hbar^2 \alpha^2 D_\alpha^2 (1-\alpha) \operatorname{sen}(\pi/\alpha) \lambda^{-1}}. \tag{4.92}$$

Substituindo (4.92) em (4.89), obtemos a função de onda normalizada, isto é,

$$\Psi(x) = N_\alpha \left\{ \frac{1}{|x|} H^{2,1}_{2,3} \left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1)\,, \left(1, \frac{\alpha}{2}\right) \\ (1,\alpha), (1,1)\,, \left(1, \frac{\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right] + \right.$$
$$\left. + \frac{b}{\alpha\hbar D_\alpha \operatorname{sen}\pi/\alpha} \frac{\lambda^{1-\alpha}}{|x|^2} \operatorname{sgn}(x) H^{2,1}_{2,3} \left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1)\,, \left(1, \frac{\alpha}{2}\right) \\ (2,\alpha), (1,1)\,, \left(1, \frac{\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right] \right\}, \tag{4.93}$$

com a constante de normalização dada por

$$N_\alpha = \alpha \sqrt{\frac{\hbar \operatorname{sen}\pi/\alpha}{\lambda(\alpha-1) + \frac{b^2\lambda^{5-2\alpha}}{\alpha^2\hbar^4 D_\alpha^2}(\alpha-3)\operatorname{cossec}\pi/\alpha \ \operatorname{cossec}3\pi/\alpha}}. \tag{4.94}$$

Verifiquemos que nossos resultados recuperam o caso inteiro, estudado na referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009), tomando $\alpha = 2$ e $D_\alpha = 1/2m$, e substituindo na expressão (4.40), o autovalor fica dado por

$$\lambda = \frac{m|a|}{\hbar\left(1 + \frac{m^2b^2}{\hbar^4}\right)}, \tag{4.95}$$

e, portanto, a expressão para a energia de estado ligado fica dada por

$$E = -\frac{ma^2}{2\hbar^2\left(1 + \frac{m^2b^2}{\hbar^4}\right)^2}. \tag{4.96}$$

As funções H de Fox presentes na expressão (4.93), para $\alpha = 2$, são calculadas no Apêndice A e dadas pelas expressões (A.35) e (A.36). Deste modo, a função de onda normalizada para o caso $\alpha = 2$ será

$$\Psi(x) = \frac{\sqrt{m|a|}}{\hbar\left(1 + \frac{m^2b^2}{\hbar^4}\right)} \left[1 + \frac{mb}{\hbar}\operatorname{sgn}(x)\right] e^{\frac{\lambda|x|}{\hbar}}, \tag{4.97}$$

que é o mesmo que

$$\Psi(x) = \frac{\sqrt{m|a|}}{\hbar\left(1 + \dfrac{m^2b^2}{\hbar^4}\right)} \left[\left(1 - \frac{mb}{\hbar^2}\right) H(-x) e^{\frac{\lambda x}{\hbar}} + \left(1 + \frac{mb}{\hbar^2}\right) H(x) e^{\frac{-\lambda x}{\hbar}}\right]. \tag{4.98}$$

Tomando os limites $x \to 0+$ e $x \to 0-$ em (4.98) e em sua derivada, obtemos a seguinte relação

$$\bar{\psi}'(0) = -\frac{m^2|a|b}{\hbar^4\left(1 + \dfrac{m^2b^2}{\hbar^4}\right)} \bar{\psi}(0), \tag{4.99}$$

que corresponde à expressão (4.91), fixando os parâmetros $\alpha = 2$ e $D_\alpha = 1/2m$.

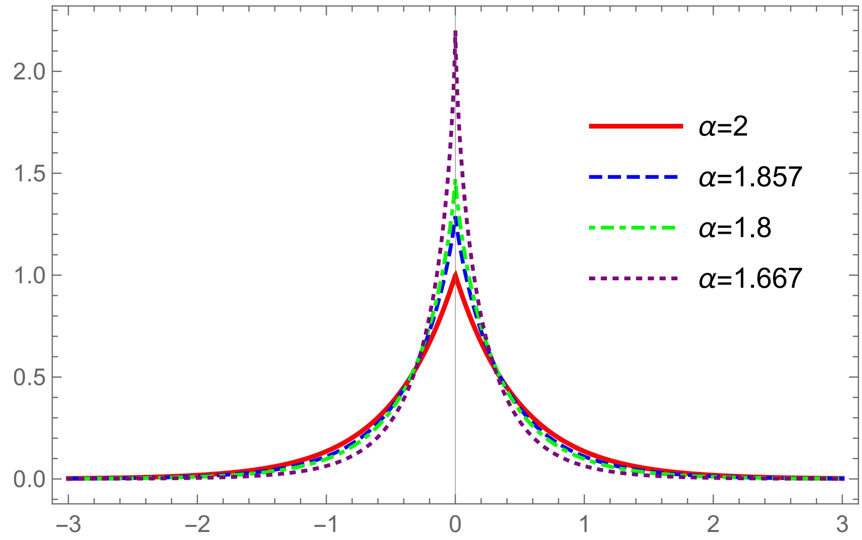


Figura 9 – $|\Psi(x)|^2$ em função de x para $a < 0$, $b = 0$ e alguns valores de α.

Tomando $\hbar = 1$, recuperamos os resultados obtidos por Gadella et al na referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009).

Para $b = 0$, recuperam-se os resultados obtidos na referência (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010) para o potencial delta simples, ou seja,

$$\Psi(x) = \alpha\sqrt{\frac{\hbar\ \mathrm{sen}\,\pi/\alpha}{\lambda(\alpha-1)}}\frac{1}{|x|}H^{2,1}_{2,3}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^{\alpha}\middle|\begin{array}{c}(1,1)\,,\left(1,\frac{\alpha}{2}\right)\\(1,\alpha),(1,1)\,,\left(1,\frac{\alpha}{2}\right)\end{array}\right], \tag{4.100}$$

com energia de estado ligado dada por

$$E = -\left(\frac{|a|\ \mathrm{cossec}\,\pi/\alpha}{\alpha\hbar D_\alpha^{1/\alpha}}\right)^{\alpha/(\alpha-1)}. \tag{4.101}$$

Iremos agora analisar o comportamento gráfico das soluções obtidas. Devido à dificuldade de lidar diretamente com a função H de Fox, recorreremos à integração numérica utilizando a representação (4.28). Todos os gráficos foram construídos por meio do software **Mathematica 12**, tomando $D_\alpha = 1/2$ e $\hbar = 1$.

Nas Figuras 9, 10, 11 e 12, temos representadas a função de densidade de probabilidade, isto é, $|\Psi(x)|^2 = \Psi^*(x)\Psi(x)$. Para $b = 0$, existe solução apenas para o caso $a < 0$ e, como esperado, as curvas são idênticas às obtidas na referência (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010). Para $b \neq 0$, a função de onda é descontínua na origem e devemos observar que, para $\alpha \neq 2$, a função de densidade de probabilidade sofre um crescimento rápido nos limites $x \to 0-$ e $x \to 0+$.

Na referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009), os autores observam que, para $b = 1/m$, a função de onda é zero no semi-eixo real negativo; isto ocorre pois $D_\alpha = 1/2m$ no caso inteiro, isto é, $\alpha = 2$. Esta análise não é conveniente em nosso caso, uma vez que o coeficiente D_α, embora seja entendido como dependente da massa m, não

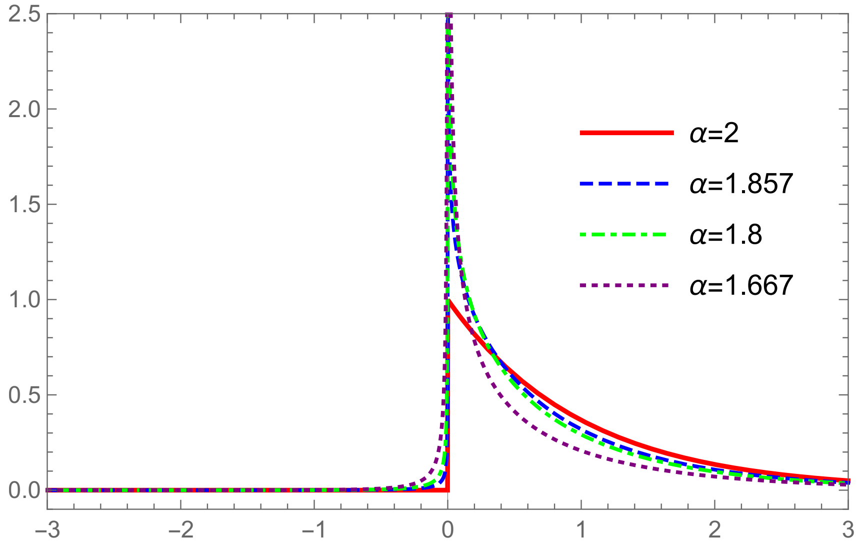


Figura 10 – $|\Psi(x)|^2$ em função de x para $a < 0$, $b = 1$ e alguns valores de α.

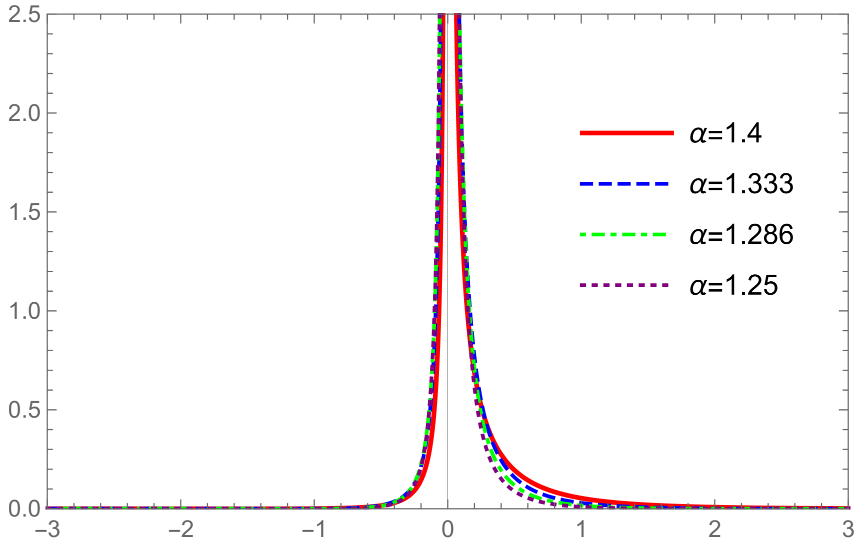


Figura 11 – $|\Psi(x)|^2$ em função de x para $a > 0$, $b = 1$ e alguns valores de α.

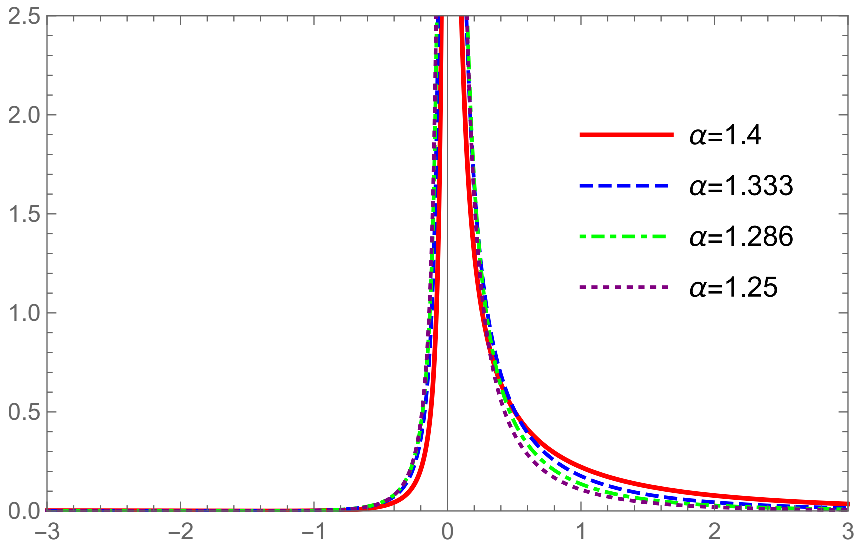


Figura 12 – $|\Psi(x)|^2$ em função de x para $a = 0$, $b = 1$ e alguns valores de α.

está definido. Entretanto, podemos considerar a imposição de que a função de onda seja igual a zero no semi-eixo real negativo para $b = 1/m$ como um critério para definir D_α. Neste trabalho, escolhemos os parâmetros $D_\alpha = 1/2m$, com $m = 1$.

4.2 Problema de Espalhamento

Considerando agora o problema de espalhamento, isto é, $E > 0$, escrevemos

$$\lambda^\alpha = \frac{E}{D_\alpha}, \tag{4.102}$$

com $\lambda > 0$. Substituindo na equação (4.25), obtemos

$$\phi(p) = \frac{1}{D_\alpha}\left[\frac{-a\bar{\psi}(0) + b\bar{\psi}'(0)}{|p|^\alpha - \lambda^\alpha} - \frac{ib\bar{\psi}(0)}{\hbar}\frac{p}{|p|^\alpha - \lambda^\alpha}\right] + 2\pi\hbar C_1\delta(p-\lambda) + 2\pi\hbar C_2\delta(p+\lambda), \tag{4.103}$$

com os coeficientes $2\pi\hbar$ acompanhando as constantes arbitrárias C_1 e C_2 para simplificar a compreensão dos cálculos, e a presença dos termos delta se deve à incorporação das singularidades no espaço de momento.

Aplicando transformada de Fourier inversa, obtemos uma representação para a solução em termos de integrais, sendo dada por

$$\begin{aligned}\psi(x) = [-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)]\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{|p|^\alpha - \lambda^\alpha}\,dp\; - B\bar{\psi}(0)\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{ip}{\hbar}\right)\frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{|p|^\alpha - \lambda^\alpha}\,dp\, + \\ + C_1 e^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} + C_2 e^{\frac{-i\lambda x}{\hbar}},\end{aligned} \tag{4.104}$$

com as constantes A e B novamente dadas por

$$A = \frac{a}{2\pi\hbar D_\alpha}, \quad B = \frac{b}{2\pi\hbar D_\alpha}. \tag{4.105}$$

Para determinar os coeficientes $\bar{\psi}(0)$ e $\bar{\psi}'(0)$, devemos nos lembrar que a presença do termo $\delta'(x)$ no potencial indica que a função de onda pode apresentar uma descontinuidade na origem (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009) e, por isso, escreveremos a solução dada por (4.104) na seguinte forma:

$$\psi(x) = \begin{cases}[-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)]J_+^{(0)}(x) - B\bar{\psi}(0)J_+^{(1)}(x) + C_1 e^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} + C_2 e^{-\frac{i\lambda x}{\hbar}}, & x > 0 \\ [-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)]J_-^{(0)}(x) - B\bar{\psi}(0)J_-^{(1)}(x) + C_1 e^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} + C_2 e^{-\frac{i\lambda x}{\hbar}}, & x < 0,\end{cases} \tag{4.106}$$

com

$$J_\pm^{(n)}(x) \equiv H(\pm x)\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{ip}{\hbar}\right)^n \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{|p|^\alpha - \lambda^\alpha}\,dp. \tag{4.107}$$

Derivando (4.106), obtemos

$$\psi'(x) = \begin{cases} [-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)]J_+^{(1)}(x) - B\bar{\psi}(0)J_+^{(2)}(x) + \dfrac{i\lambda}{\hbar}C_1 e^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} - \dfrac{i\lambda}{\hbar}C_2 e^{-\frac{i\lambda x}{\hbar}}, & x > 0 \\ [-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)]J_-^{(1)}(x) - B\bar{\psi}(0)J_-^{(2)}(x) + \dfrac{i\lambda}{\hbar}C_1 e^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} - \dfrac{i\lambda}{\hbar}C_2 e^{-\frac{i\lambda x}{\hbar}}, & x < 0. \end{cases} \tag{4.108}$$

Tomando o limite $x \to 0+$ nas equações (4.106) e (4.108), obtemos

$$\bar{\psi}(0) = \left[-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)\right]\bar{J}_\alpha^0(0) - B\bar{\psi}(0)\bar{J}_\alpha^1(0) + C_1 + C_2, \tag{4.109}$$

e tomando $x \to 0-$ nessas mesmas equações, obtemos

$$\bar{\psi}'(0) = \left[-A\bar{\psi}(0) + B\bar{\psi}'(0)\right]\bar{J}_\alpha^1(0) - B\bar{\psi}(0)\bar{J}_\alpha^2(0) + \frac{i\lambda}{\hbar}\left(C_1 - C_2\right). \tag{4.110}$$

Combinando as expressões obtidas, obtemos um sistema linear em $\bar{\psi}(0)$ e $\bar{\psi}'(0)$:

$$\begin{aligned} \left[1 + A\bar{J}_\alpha^{(0)}(0) + B\bar{J}_\alpha^{(1)}(0)\right]\bar{\psi}(0) - B\bar{J}_\alpha^{(0)}(0)\bar{\psi}'(0) &= C_1 + C_2 \\ \left[A\bar{J}_\alpha^{(1)}(0) + B\bar{J}_\alpha^{(2)}(0)\right]\bar{\psi}(0) + \left[1 - B\bar{J}_\alpha^{(1)}(0)\right]\bar{\psi}'(0) &= \frac{i\lambda}{\hbar}\left(C_1 - C_2\right). \end{aligned} \tag{4.111}$$

No Apêndice B, além de calcularmos a integral $J_\pm^{(n)}(x)$, dada pela equação (4.107), também avaliamos as expressões $\bar{J}_\alpha^{(0)}(0)$, $\bar{J}_\alpha^{(1)}(0)$ e $\bar{J}_\alpha^{(2)}(0)$ e, substituindo-as no sistema linear, obtemos valores explícitos para as condições iniciais:

$$\bar{\psi}(0) = \frac{(C_1 + C_2) - \frac{i\lambda}{\hbar}(C_1 - C_2)\frac{2\pi B}{\alpha}\lambda^{1-\alpha}\operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}}{1 - \frac{2\pi A}{\alpha}\lambda^{1-\alpha}\operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha} - \left(\frac{2\pi B}{\alpha\hbar}\right)^2\lambda^{4-2\alpha}\operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\operatorname{cotg}\frac{3\pi}{\alpha}}, \tag{4.112}$$

$$\bar{\psi}'(0) = \frac{-\left(C_1 + C_2\right)\frac{2\pi B}{\alpha\hbar^2}\lambda^{3-\alpha}\operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha} + \frac{i\lambda}{\hbar}\left(C_1 - C_2\right)\left(1 - \frac{2\pi A}{\alpha}\lambda^{1-\alpha}\operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\right)}{1 - \frac{2\pi A}{\alpha}\lambda^{1-\alpha}\operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha} - \left(\frac{2\pi B}{\alpha\hbar}\right)^2\lambda^{4-2\alpha}\operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\operatorname{cotg}\frac{3\pi}{\alpha}}. \tag{4.113}$$

Substituindo (4.112) e (4.113) em (4.104), a solução toma a forma

$$\begin{aligned} \psi(x) = {} & C_1 e^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} + C_2 e^{\frac{-i\lambda x}{\hbar}} + \Omega_\alpha\left[\frac{(C_1 + C_2)}{2}\Delta_\alpha - \frac{i\left(C_1 - C_2\right)}{2}\Lambda_\alpha\right]\Phi_\alpha^1(x) \\ & - \Omega_\alpha\left[\frac{(C_1 + C_2)}{2}\Lambda_\alpha - \frac{i\left(C_1 - C_2\right)}{2}\lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2\operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\right]\operatorname{sgn}(x)\Phi_\alpha^2(x), \end{aligned} \tag{4.114}$$

com a função $\Phi_\alpha^n(x)$ dada por

$$\begin{aligned} \Phi_\alpha^n(x) = \alpha\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^{-n}\Bigg\{ & H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1),(1,(2+\alpha)/2) \\ (n,\alpha),(1,1),(1,(2+\alpha)/2) \end{matrix}\right] \\ & -H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1),(1,(2-\alpha)/2) \\ (n,\alpha),(1,1),(1,(2-\alpha)/2) \end{matrix}\right]\Bigg\}, \end{aligned} \tag{4.115}$$

e os coeficientes

$$\Lambda_\alpha = \frac{b\lambda}{\alpha\hbar^2 D_\alpha}, \tag{4.116}$$

$$\Delta_\alpha = \frac{a}{\alpha\hbar D_\alpha} + \frac{b^2\lambda^{3-\alpha}\operatorname{cotg}\frac{3\pi}{\alpha}}{\alpha^2\hbar^4 D_\alpha^2}, \tag{4.117}$$

$$\Omega_\alpha = \left(\lambda^{\alpha-1} - \Delta_\alpha \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\right)^{-1}. \tag{4.118}$$

Neste modelo de espalhamento, cada partícula viaja apenas em uma direção, que pode ser da esquerda para a direita (modelada por uma exponencial positiva) ou da direita para a esquerda (modelada por uma exponencial negativa), e assim estamos interessados apenas no comportamento da solução para $|x| \to \infty$. Para estudar este comportamento *assintótico* da solução, iremos nos basear nos resultados obtidos na referência (KILBAS; SRIVASTAVA; TRUJILLO, 2006). Assim, para $\omega \to \infty$, temos que

$$H_{2,3}^{2,1}\left[\omega^\alpha \left| \begin{matrix} (1,1),(1,(2+\alpha)/2) \\ (1,\alpha),(1,1),(1,(2+\alpha)/2) \end{matrix}\right.\right] = \frac{2\omega}{\alpha}\operatorname{sen}\omega + o(\omega), \tag{4.119}$$

$$H_{2,3}^{2,1}\left[\omega^\alpha \left| \begin{matrix} (1,1),(1,(2+\alpha)/2) \\ (2,\alpha),(1,1),(1,(2+\alpha)/2) \end{matrix}\right.\right] = -\frac{2\omega^2}{\alpha}\cos\omega + o\left(\omega^2\right), \tag{4.120}$$

$$H_{2,3}^{2,1}\left[\omega^\alpha \left| \begin{matrix} (1,1),(1,(2-\alpha)/2) \\ (1,\alpha),(1,1),(1,(2-\alpha)/2) \end{matrix}\right.\right] = o(1), \tag{4.121}$$

$$H_{2,3}^{2,1}\left[\omega^\alpha \left| \begin{matrix} (1,1),(1,(2-\alpha)/2) \\ (2,\alpha),(1,1),(1,(2-\alpha)/2) \end{matrix}\right.\right] = o(1), \tag{4.122}$$

e assim, a solução (4.114) apresenta o seguinte comportamento para $|x| \to \infty$:

$$\begin{aligned} \psi(x) = {} & C_1 e^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} + C_2 e^{\frac{-i\lambda x}{\hbar}} + \Omega_\alpha\left[(C_1+C_2)\Delta_\alpha - i(C_1-C_2)\Lambda_\alpha\right]\operatorname{sen}\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right) \\ & - \Omega_\alpha\left[(C_1+C_2)\Lambda_\alpha - i(C_1-C_2)\lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2\operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\right]\operatorname{sgn}(x)\cos\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right) + o(1). \end{aligned} \tag{4.123}$$

Reescrevendo as funções seno e cosseno em termos da função exponencial complexa, isto é,

$$\operatorname{sen}|\omega| = \begin{cases} \dfrac{-e^{i\omega}+e^{-i\omega}}{2i}, & \omega < 0 \\ \dfrac{e^{i\omega}-e^{-i\omega}}{2i}, & \omega > 0 \end{cases} \qquad \operatorname{sgn}(\omega)\cos|\omega| = \begin{cases} \dfrac{-e^{i\omega}-e^{-i\omega}}{2i}, & \omega < 0 \\ \dfrac{e^{i\omega}+e^{-i\omega}}{2i}, & \omega > 0, \end{cases} \tag{4.124}$$

a solução dada por (4.123) pode ser expressa como

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} + Be^{-\frac{i\lambda x}{\hbar}} + o(1), & x \to -\infty \\ Ce^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} + De^{-\frac{i\lambda x}{\hbar}} + o(1), & x \to +\infty, \end{cases} \tag{4.125}$$

com os coeficientes dados por

$$\begin{aligned} A &= C_1 + \frac{\Omega_\alpha}{2}\left[(C_1 + C_2)\, Z + (C_1 - C_2)\, W\right], \\ B &= C_2 + \frac{\Omega_\alpha}{2}\left[(C_1 + C_2)\, Z^* - (C_1 - C_2)\, W^*\right], \\ C &= C_1 - \frac{\Omega_\alpha}{2}\left[(C_1 + C_2)\, Z + (C_1 - C_2)\, W\right], \\ D &= C_2 - \frac{\Omega_\alpha}{2}\left[(C_1 + C_2)\, Z^* - (C_1 - C_2)\, W^*\right], \end{aligned} \tag{4.126}$$

e os coeficientes auxiliares

$$Z = -\Lambda_\alpha + i\Delta_\alpha, \qquad W = \Lambda_\alpha + i\lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}. \tag{4.127}$$

Iremos descrever uma situação em que as partículas viajam da esquerda para a direita, sendo espalhadas pelo potencial formado pela combinação da função delta e de sua derivada de primeira ordem. Em termos práticos, isto significa que $D = 0$. Por fim, tomando $r = B/A$ e $t = C/A$, obtemos

$$r = -\Omega_\alpha \left[\frac{2\Lambda_\alpha + i\left(\Delta_\alpha - \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\right)}{1 - \Omega_\alpha^2 \Delta_\alpha \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha} + \Omega_\alpha^2\Lambda_\alpha^2 + i\Omega_\alpha\left(\Delta_\alpha + \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\right)}\right], \tag{4.128}$$

$$t = \frac{1 + \Omega_\alpha^2 \Delta_\alpha \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha} - \Omega_\alpha^2\Lambda_\alpha^2}{1 - \Omega_\alpha^2 \Delta_\alpha \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha} + \Omega_\alpha^2\Lambda_\alpha^2 + i\Omega_\alpha\left(\Delta_\alpha + \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\right)}. \tag{4.129}$$

Os coeficientes de reflexão e transmissão são, respectivamente, as taxas de partículas sendo refletidas e transmitidas, isto é, $R = |r|^2$ and $T = |t|^2$, dadas por

$$R = \Omega_\alpha^2 \left[\frac{4\Lambda_\alpha^2 + \left(\Delta_\alpha - \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\right)^2}{\left(1 - \Omega_\alpha^2 \Delta_\alpha \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha} + \Omega_\alpha^2\Lambda_\alpha^2\right)^2 + \Omega_\alpha^2\left(\Delta_\alpha + \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\right)^2}\right], \tag{4.130}$$

$$T = \frac{\left(1 + \Omega_\alpha^2 \Delta_\alpha \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha} - \Omega_\alpha^2\Lambda_\alpha^2\right)^2}{\left(1 - \Omega_\alpha^2 \Delta_\alpha \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha} + \Omega_\alpha^2\Lambda_\alpha^2\right)^2 + \Omega_\alpha^2\left(\Delta_\alpha + \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 \operatorname{cotg}\frac{\pi}{\alpha}\right)^2}. \tag{4.131}$$

Observamos que $R + T = 1$, como esperado.

Conforme já mencionado anteriormente, sabe-se que em mecânica quântica fracionária é possível ocorrer tunelamento na energia de ponto zero (DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011). Para $a \neq 0$, temos

$$\lim_{\lambda \to 0} \Omega_\alpha \Delta_\alpha = -\operatorname{tg} \frac{\pi}{\alpha}, \tag{4.132}$$

de modo que o coeficiente de transmissão é dado por

$$\lim_{\lambda \to 0} T = \cos^2 \frac{\pi}{\alpha}, \tag{4.133}$$

que é diferente de zero para $\alpha \neq 2$ e, portanto, este modelo também prevê tunelamento para energia de ponto zero. Este resultado não depende dos valores de a (caso não seja nulo) e b, e coincide com o valor obtido na referência (DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011), que refere-se ao caso correspondente a $b = 0$ no nosso modelo. Para $a = 0$, entretanto, caso $\alpha \neq 1.5$ e $\alpha \neq 2$ temos

$$\lim_{\lambda \to 0} \Omega_\alpha \Delta_\alpha = 0, \tag{4.134}$$

o que nos leva a um resultado contra-intuitivo, isto é,

$$\lim_{\lambda \to 0} T = 1, \tag{4.135}$$

para qualquer que seja o valor de b, ou seja, para o potencial dado puramente pela derivada da função delta, este modelo prevê transmissão total em energia de ponto zero.

Para $\alpha = 1.5$, também temos um resultado inusitado. Para $b \neq 0$, os coeficientes de reflexão e transmissão são constantes e independentes dos parâmetros a, b e até mesmo do autovalor λ:

$$T(\alpha = 1.5) = 0.25, \qquad R(\alpha = 1.5) = 0.75. \tag{4.136}$$

Outro resultado interessante que aparece no problema do potencial que envolve a derivada da função delta é o comportamento para energias altas. Começando pelo caso $b = 0$, os coeficientes (4.116), (4.117) e (4.118) ficam dados por

$$\Lambda_\alpha = 0, \quad \Delta_\alpha = \frac{a}{\alpha \hbar D_\alpha}, \quad \Omega_\alpha = \left[\lambda^{\alpha-1} - \frac{a \operatorname{cotg} \pi/\alpha}{\alpha \hbar D_\alpha} \right]^{-1},$$

de onde segue-se que $\lim_{\lambda \to \infty} \Omega_\alpha \Delta_\alpha = 0$. Temos, então, que

$$\lim_{\lambda \to \infty} T = 1, \tag{4.137}$$

isto é, para um potencial dado puramente em termos de $\delta(x)$, o problema de espalhamento tende à transmissão total conforme a energia aumenta.

Vamos agora ao caso $b \neq 0$. Como o coeficiente de transmissão dado por (4.131) envolve uma expressão extensa, tomaremos o limite dos termos separadamente e em seguida as utilizaremos para calcular o limite desejado, nos valendo das propriedades de soma, subtração, multiplicação e divisão de limites (LIMA, 2009). Tomando as constantes

$$\tilde{a_0} = \frac{a}{\alpha\hbar D_\alpha}, \qquad \tilde{b_0} = \frac{b}{\alpha\hbar^2 D_\alpha},$$

temos

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda\to\infty} \Omega_\alpha \Lambda_\alpha &= \lim_{\lambda\to\infty} \frac{\tilde{b_0}}{\lambda^{\alpha-2} - \tilde{a_0}\lambda^{-1}\operatorname{cotg}\pi/\alpha - \tilde{b_0}^2\lambda^{2-\alpha}\operatorname{cotg}\pi/\alpha\ \operatorname{cotg}3\pi/\alpha} \\ &= \begin{cases} 0, & \text{se } \alpha \neq 2, \\ b_0, & \text{se } \alpha = 2, \end{cases} \end{aligned} \tag{4.138}$$

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda\to\infty} \Omega_\alpha \Delta_\alpha &= \lim_{\lambda\to\infty} \frac{\tilde{a_0}\lambda^{\alpha-3} + \tilde{b_0}^2\operatorname{cotg}3\pi/\alpha}{\lambda^{2\alpha-4} - \tilde{a_0}\lambda^{\alpha-3}\operatorname{cotg}\pi/\alpha - \tilde{b_0}^2\operatorname{cotg}\pi/\alpha\ \operatorname{cotg}3\pi/\alpha} \\ &= \begin{cases} -\operatorname{tg}\pi/\alpha, & \text{se } \alpha \neq 2, \\ 0, & \text{se } \alpha = 2, \end{cases} \end{aligned} \tag{4.139}$$

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda\to\infty} \Omega_\alpha \lambda^{1-\alpha}\Lambda_\alpha^2 &= \lim_{\lambda\to\infty} \frac{\tilde{b_0}^2}{\lambda^{2\alpha-4} - \tilde{a_0}\lambda^{\alpha-3}\operatorname{cotg}\pi/\alpha - \tilde{b_0}^2\operatorname{cotg}\pi/\alpha\ \operatorname{cotg}3\pi/\alpha} \\ &= \begin{cases} -\operatorname{tg}\pi/\alpha\ \operatorname{tg}3\pi/\alpha, & \text{se } \alpha \neq 2, \\ \tilde{b_0}^2, & \text{se } \alpha = 2, \end{cases} \end{aligned} \tag{4.140}$$

de onde obtemos, por fim,

$$\lim_{\lambda\to\infty} T = \frac{(1 + \operatorname{tg}\pi/\alpha\ \operatorname{tg}3\pi/\alpha)^2}{(1 - \operatorname{tg}\pi/\alpha\ \operatorname{tg}3\pi/\alpha)^2 + (\operatorname{tg}\pi/\alpha + \operatorname{tg}3\pi/\alpha)^2}, \tag{4.141}$$

para $1 < \alpha < 2$, e

$$\lim_{\lambda\to\infty} T = \left(\frac{1 - \tilde{b_0}^2}{1 + \tilde{b_0}^2}\right)^2, \tag{4.142}$$

para $\alpha = 2$.

É interessante observar que para $b \neq 0$ a ocorrência de transmissão total para $\lambda \to \infty$ não é garantida. Além disso, para $\alpha = 2$, isto é, o problema equivalente ao proposto para a mecânica quântica "tradicional" na referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009), o coeficiente de transmissão no limite é dependente do coeficiente de $\delta'(x)$; enquanto que para $\alpha \neq 2$, o ele *não depende* deste parâmetro, mas apenas da ordem da derivada.

A figura 13 mostra os valores para o coeficiente de transmissão no limite $\lambda \to \infty$ em função da ordem α da derivada. Este gráfico nos permite observar que o coeficiente de transmissão tende a se estabilizar para energias altas, com o adendo de que, a depender do valor de α, pode-se ter casos com taxa de transmissão menor do que 1 e até mesmo reflexão total, ao contrário do que ocorre para o caso do potencial dado apenas em termos de $\delta(x)$, em que ocorre apenas transmissão total.

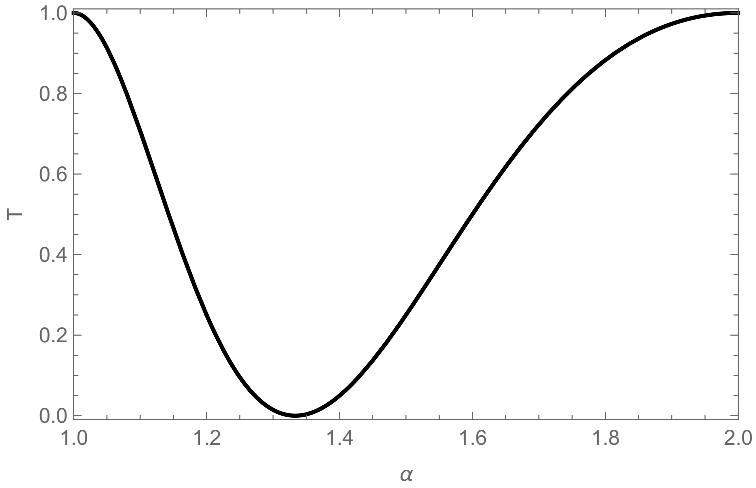


Figura 13 – Coeficiente de transmissão no limite $\lambda \to \infty$, para $b \neq 0$ e $\alpha \neq 2$, conforme equação (4.141).

Antes de prosseguir com a discussão dos resultados, verificaremos que resultados estabelecidos na literatura particularizam os resultados que obtivemos neste trabalho.

Para $b = 0$, recuperamos os resultados obtidos para o potencial delta "simples", estudado nas referências (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010; DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011), ou seja,

$$\psi(x) = C_1 e^{\frac{i\lambda x}{\hbar}} + C_2 e^{\frac{-i\lambda x}{\hbar}} + \tilde{\Omega}_\alpha \frac{(C_1 + C_2)}{2} \Phi^1_\alpha(x), \tag{4.143}$$

com os coeficientes de transmissão e reflexão dados por

$$T = \frac{1}{1 + \tilde{\Omega}^2_\alpha}, \qquad R = \frac{\tilde{\Omega}^2_\alpha}{1 + \tilde{\Omega}^2_\alpha}, \tag{4.144}$$

com $\Phi^1_\alpha(x)$ dada por (4.115) e

$$\tilde{\Omega}_\alpha = \left[\frac{\lambda^{\alpha-1} - a\,\mathrm{cotg}(\pi/\alpha)}{\alpha\hbar D_\alpha}\right]^{-1}. \tag{4.145}$$

Neste caso, para $\alpha = 1.5$, os coeficientes de transmissão e reflexão são dependentes de a e λ e o coeficiente $\tilde{\Omega}_\alpha$ é dado por

$$\tilde{\Omega}_\alpha = \left[\frac{\sqrt{\lambda} - a\,\mathrm{cotg}(2\pi/3)}{\alpha\hbar D_\alpha}\right]^{-1}, \tag{4.146}$$

e o limite para $\lambda \to 0$ fica dado por

$$\lim_{\lambda \to 0} \Omega_\alpha \Delta_\alpha = \operatorname{tg} \frac{\pi}{\alpha}. \tag{4.147}$$

Deste modo, podemos observar que o comportamento incomum apresentado para $\alpha = 1.5$, conforme a equação (4.136), se deve à presença da derivada da função delta no termo de potencial, que provoca uma descontinuidade infinita no coeficiente Δ_α dado por (4.117).

Tomando $\alpha = 2$ e $D_2 = 1/2m$, obtemos

$$T = \frac{\lambda^2 \left(1 - \frac{b^2 m^2}{\hbar^4}\right)^2}{\lambda^2 \left(1 + \frac{b^2 m^2}{\hbar^4}\right)^2 + \frac{a^2 m^2}{\hbar^2}}, \tag{4.148}$$

$$R = \frac{4\lambda^2 \frac{b^2 m^2}{\hbar^4} + \frac{a^2 m^2}{\hbar^2}}{\lambda^2 \left(1 + \frac{b^2 m^2}{\hbar^4}\right)^2 + \frac{a^2 m^2}{\hbar^2}}. \tag{4.149}$$

Assim, se considerarmos $\hbar = 1$, recuperamos os resultados obtidos para o potencial delta e derivada de delta obtidos na referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009). Ao contrário do problema de estado ligado, existe solução de espalhamento para $a = 0$. Os coeficientes T e R dados pelas equações (4.148) e (4.149), respectivamente, nesse caso ficam dados por

$$T = \frac{\left(1 - \frac{b^2 m^2}{\hbar^4}\right)^2}{\left(1 + \frac{b^2 m^2}{\hbar^4}\right)^2}, \qquad R = \frac{4 \frac{b^2 m^2}{\hbar^4}}{\left(1 + \frac{b^2 m^2}{\hbar^4}\right)^2}. \tag{4.150}$$

Nas Figuras 14 a 21 são mostradas algumas representações gráficas para os coeficientes de reflexão e transmissão em função do autovalor λ, de acordo com as expressões dadas por (4.130) e (4.131), de modo que podemos verificar também de forma visual os resultados que obtivemos de forma analítica.

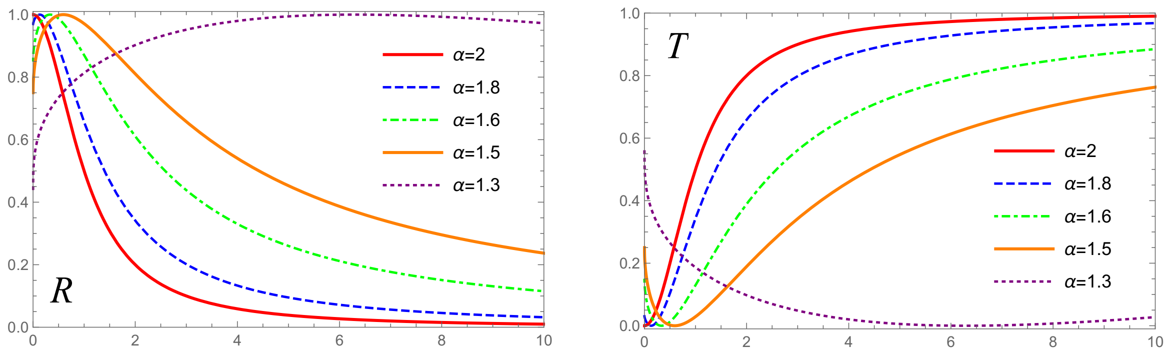


Figura 14 – Coeficientes R e T para $a = 1$ e $b = 0$, conforme eqs (4.130) e (4.131).

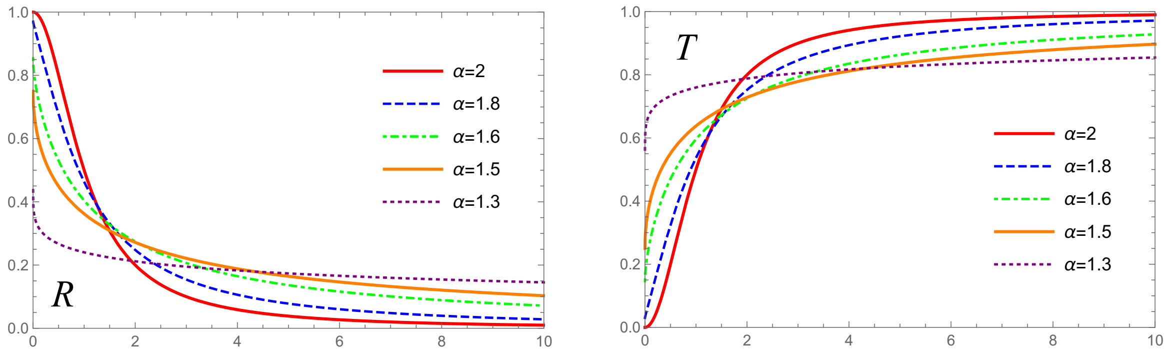


Figura 15 – Coeficientes R e T para $a = -1$ e $b = 0$, conforme eqs (4.130) e (4.131).

Para $b = 0$, já vimos que recuperamos os mesmos resultados que foram obtidos nos trabalhos das referências (DE OLIVEIRA; COSTA; VAZ Jr, 2010; DE OLIVEIRA; VAZ Jr, 2011), sendo o mais interessante a possibilidade de ocorrer o fenômeno de tunelamento para energia de ponto zero, para ordens não inteiras. Para $b \neq 0$, observamos ainda que este mesmo fenômeno se repete, e de forma independente do coeficiente que acompanha o termo $\delta(x)$ caso este seja diferente de zero, mas para o caso do potencial puramente dado pela derivada da função delta ocorre um fenômeno de transmissão total para ordens não-inteiras, exceto $\alpha = 1.5$, que se mostra bastante problemático na presença da derivada da função delta.

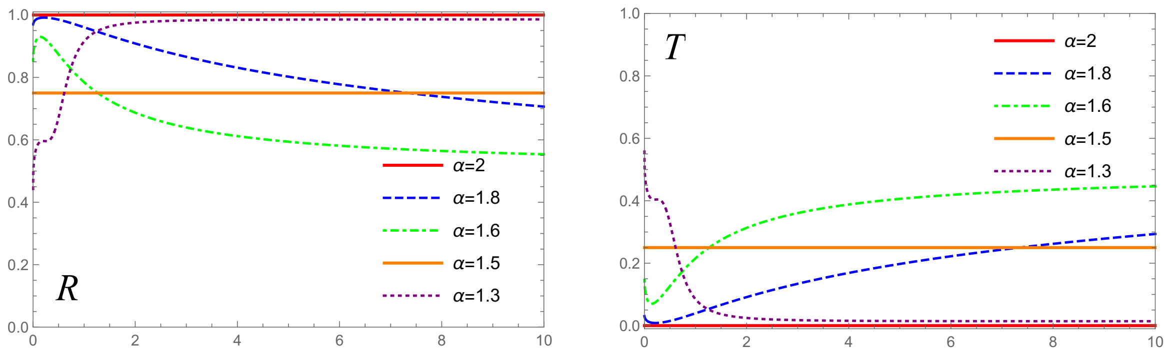


Figura 16 – Coeficientes R e T para $a = 1$ e $b = 1$, conforme eqs (4.130) e (4.131).

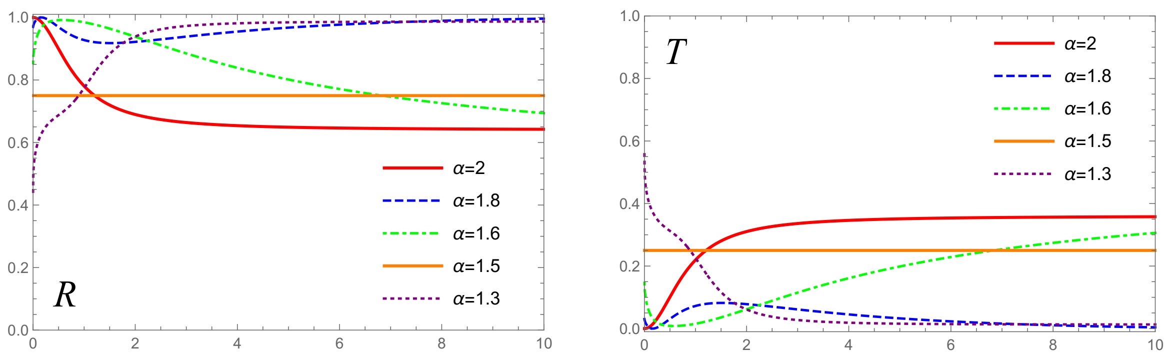


Figura 17 – Coeficientes R e T para $a = 1$ e $b = 0.5$, conforme eqs (4.130) e (4.131).

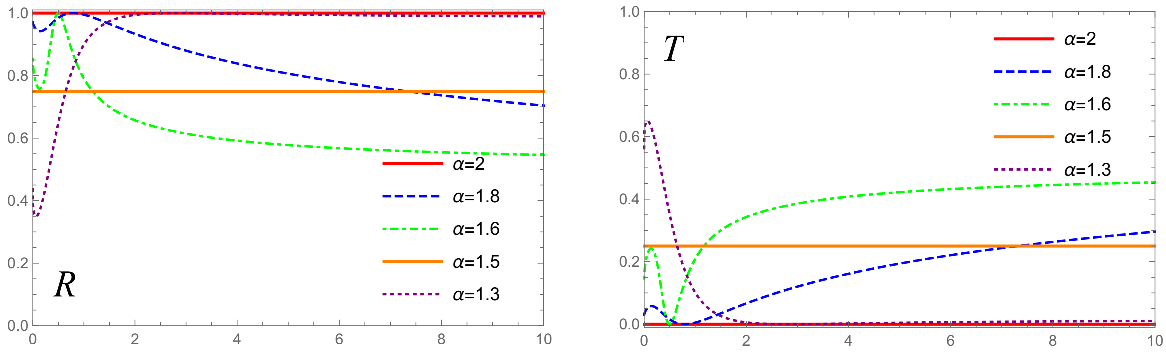


Figura 18 – Coeficientes R e T para $a = -1$ e $b = 1$, conforme eqs (4.130) e (4.131).

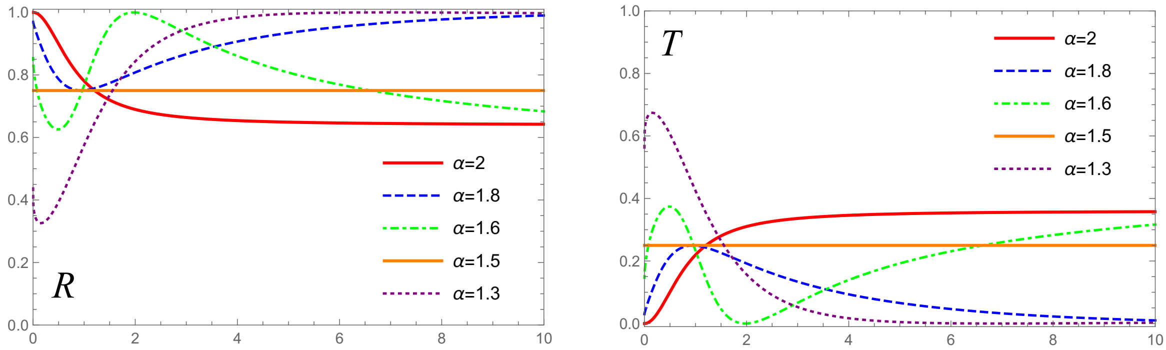


Figura 19 – Coeficientes R e T para $a = -1$ e $b = 0.5$, conforme eqs (4.130) e (4.131).

Entretanto, o comportamento dos coeficientes de reflexão e transmissão para $b \neq 0$ em geral se mostra um pouco diferente do caso $b = 0$; enquanto o primeiro apresenta tendência à transmissão com o aumento do valor da energia, o segundo apresenta tendência a se estabilizar conforme o valor da energia aumenta, embora não necessariamente para transmissão total. Para $\alpha = 2$, observamos pelos gráficos que o valor de T para energias altas varia de acordo com o valor do parâmetro b, resultado que é verificado pela expressão (4.142).

Agora, vamos olhar para o caso $\alpha \neq 2$ com um pouco mais de atenção. Sabemos que a taxa de transmissão tende a se estabilizar a um valor dependente de α com o aumento da energia, de acordo com os cálculos em (4.141). Isto é facilmente percebido observando os gráficos das Figuras 16 a 19.

Esses gráficos nos ajudam a perceber que um efeito bastante expressivo da incorporação de derivadas de ordens não-inteiras se dá na presença do termo $\delta'(x)$, acrescentando alguma oscilação nas taxas de reflexão e transmissão para energias baixas, enquanto que para valores suficientemente altos para a energia, essas taxas tendem a se estabilizar, porém não necessariamente para uma situação de transmissão total, como seria esperado para potenciais que envolvam apenas o termo $\delta(x)$.

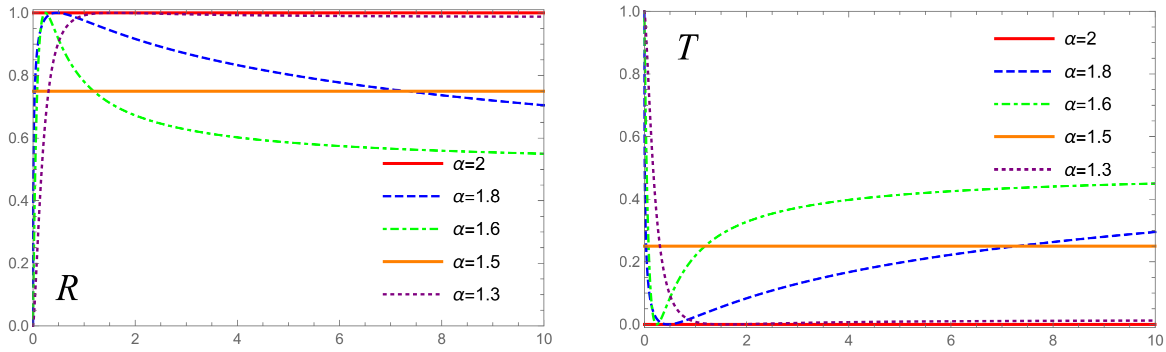


Figura 20 – Coeficientes R e T para $a = 0$ e $b = 1$, conforme eqs (4.130) e (4.131).

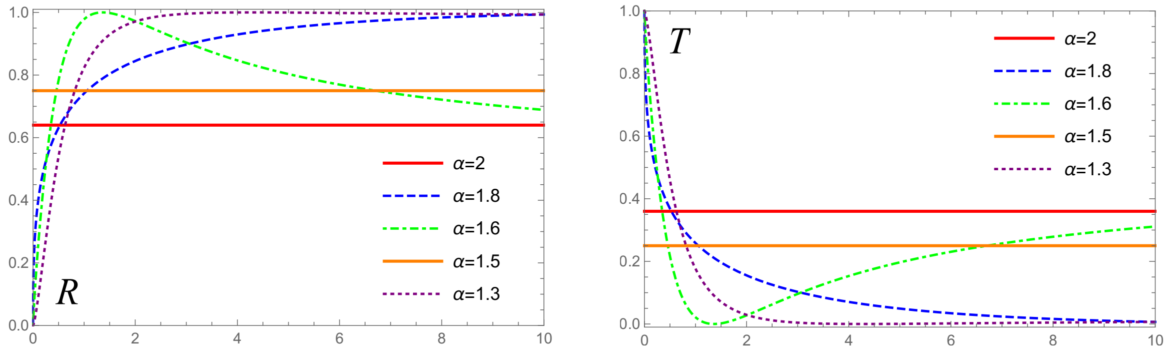


Figura 21 – Coeficientes R e T para $a = 0$ e $b = 0.5$, conforme eqs (4.130) e (4.131).

Na referência (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009), os autores comparam os seus resultados com os obtidos em outros trabalhos, que apresentam diferenças decorrentes da utilização de teorias que definem $\delta(x)$ de maneiras distintas das consideradas neste trabalho; em particular, o caso $a = 0$ se mostra controverso pois apresenta transmissão total de acordo com algumas das abordagens mencionadas no trabalho, enquanto no modelo de Gadella et al. não existe nenhum caso de transmissão. É interessante observar que, embora o modelo que apresentamos neste trabalho generalize os resultados de Gadella et al., ele também apresenta transmissão total para $a = 0$ nos casos em que a ordem da derivada é diferente de $\alpha = 2$.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Com este trabalho, buscamos expandir o entendimento acerca do efeito que a presença de derivadas da função delta de Dirac no termo de potencial produz nas soluções da equação de Schrödinger, com o intuito de poder contar com mais este recurso para a modelagem de fenômenos e, mais ainda, incorporar a função delta e suas derivadas na sua generalização fracionária.

A busca por uma maneira consistente de lidar com a equação de Schrödinger com uma a derivada da função delta de Dirac incorporada a seu termo de potencial já vem de longa data, com algumas tentativas tendo sido feitas. Os resultados inconsistentes obtidos ao longo dos anos, em conjunto com o trabalho de Kurasov e colaboradores (KURASOV, 1996; ALBEVERIO; DABROWSKI; KURASOV, 1998), foram de suma importância para a compreensão de que os modelos que utilizam derivadas da função delta precisam admitir funções-teste descontínuas em seu domínio de definição, o que originalmente não é coberto pela teoria de distribuições.

Embora tendo obtido alguns resultados gerais no estudo dos potenciais supersingulares, ao examinar alguns casos particulares observamos que o grau de complexidade aumenta conforme a ordem da derivação se torna mais alta e assim optamos por focar a análise nos potenciais supersingulares de primeira e segunda ordem. Neste último, mostramos que no caso geral pode-se obter nenhum, apenas um ou dois estados ligados, a depender das relações entre os valores dos parâmetros V_0, V_1 e V_2. A introdução do termo $V_2\delta''(x)$ acrescenta propriedades interessantes ao modelo: enquanto no caso do potencial delta simples a energia de estado ligado cresce com V_0 na ordem de V_0^2, no caso da derivada de segunda ordem da função delta a energia decresce com V_2 à ordem de V_2^{-2}. Deste modo, observamos que o estudo deste tipo de problema está longe de esgotar-se, com uma imensidão de problemas em aberto para direcionarmos nossos estudos.

O modelo com derivada de primeira ordem da função delta no termo de potencial foi, em particular, o estudado com maior detalhamento até agora e apresenta a propriedade muito interessante de admitir soluções com descontinuidades de salto. Neste trabalho, revisitamos a solução obtida por Gadella et al. (GADELLA; NEGRO; NIETO, 2009) através de um meio alternativo ao feito em seu estudo: a metodologia das transformadas integrais. Isto possibilitou não apenas reforçar a validade dos resultados por ele obtidos, mas também estender a resolução do problema para derivadas de ordens não-inteiras, o que não era possível a partir da abordagem anterior. Uma consequência muito interessante disso é a constatação de que podemos obter soluções com descontinuidade de salto a partir de abordagens não-locais e isso representa um grande avanço na direção do estudo, sob a perspectiva do Cálculo Fracionário, de problemas intrinsicamente descontínuos, como por exemplo o poço de potencial finito ou a partícula na caixa, que vem chamando a atenção de pesquisadores há algum tempo, mas até o momento todas as tentativas de solução se mostraram incorretas.

As perspectivas futuras para este trabalho residem exatamente nesta direção. Como próximo passo, pretendemos estudar modelos supersingulares para ordens mais altas a partir da perspectiva do Cálculo Fracionário, ou seja, verificar se os resultados obtidos no Capítulo 3 podem ser generalizados através da substituição da derivada espacial de segunda ordem por uma de ordem arbitrária $1 < \alpha \leqslant 2$ na equação de Schrödinger independente do tempo.

Referências

ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 3. ed. Washington: National Bureau of Standards Applied Mathematics Series, 1972. Citado 3 vezes nas páginas 131, 139 e 140.

AL-SAQABI, B.; BOYADJIEV, L.; LUCHKO, Y. Comments on employing the Riesz-Feller derivative in the Schrödinger equation. *The European Physical Journal Special Topics*, v. 222, p. 1779–1794, 2013. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1140/epjst/e2013-01963-3>. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 88.

ALBEVERIO, S.; DABROWSKI, L.; KURASOV, P. Symmetries of Schrödinger operator with point interactions. *Letters in Mathematical Physics*, v. 45, p. 33–47, 1998. Disponível em: <https://doi.org/10.1023/A:1007493325970>. Citado na página 119.

ALBEVERIO, S.; KURASOV, P. *Singular Perturbations of Differential Operators: Solvable Schrödinger-type Operators*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000. (London Mathematical Society Lecture Note Series). Citado na página 48.

ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. *Mathematical Methods for Physicists*. 6. ed. Burlington: Elsevier Academic Press, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 44, 131 e 139.

ATANACKOVIĆ, T. M.; PILIPOVIĆ, S.; STANKOVIĆ, B.; ZORICA, D. *Fractional Calculus with Applications in Mechanics: Wave Propagation, Impact and Variational Principles*. New Jersey: John Wiley & Sons, 2014. Citado na página 34.

ATANGANA, A.; BALEANU, D. New fractional derivatives with nonlocal and non-singular kernel: Theory and application to heat transfer model. *Thermal Science*, v. 20, n. 2, p. 763–769, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.2298/TSCI160111018A>. Citado na página 39.

BAGLEY, R. L. *Applications of Generalized Derivatives to Viscoelasticity*. Tese (Doutorado) — Air Force Institute of Technology, 1979. Citado na página 20.

BELAVIN, V. A.; NIGMATULLIN, R. S.; LUTSKAYA, N. Fractional differentiation of oscillographic polarograms by means of an electrochemical two-terminal network. *Trudy of Kazan Aviation Institute*, v. 5, p. 144–145, 1964. Citado na página 20.

BELLONI, M.; ROBINETT, R. W. The infinite well and Dirac delta function potentials as pedagogical, mathematical and physical models in quantum mechanics. *Physics Reports*, v. 540, n. 2, p. 25–122, 2014. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2014.02.005>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 43.

BIRKHOFF, G.; LANE, S. M. *A Survey of Modern Algebra*. 5. ed. New Jersey: A. K. Peters, Ltd., reprinted by CRC Press, 2010. Citado na página 66.

BRAAKSMA, B. L. J. Asymptotic expansions and analytic continuations for a class of Barnes-integrals. *Compositio Mathematica*, v. 15, p. 239–341, 1964. Disponível em: <http://www.numdam.org/item?id=CM_1962-1964___15___239_0>. Citado na página 28.

BROWN, J. W.; CHURCHILL, R. *Fourier Series and Boundary Value Problems*. 8. ed. New York: McGraw-Hill Co., 2011. Citado na página 49.

BUTZER, P. L.; WESTPHAL, U. An introduction to fractional calculus. In: HILFER, R. (Ed.). *Applications of Fractional Calculus in Physics*. Singapore: World Scientific, 2000. p. 1–85. Disponível em: <https://doi.org/10.1142/9789812817747_0001>. Citado na página 86.

CAMARGO, R. F.; DE OLIVEIRA, E. C. *Cálculo Fracionário*. São Paulo: Livraria da Física, 2015. Citado 5 vezes nas páginas 21, 29, 30, 31 e 32.

CAPUTO, M.; FABRIZIO, M. A new definition of fractional derivative without singular kernel. *Progress in Fractional Differentiation and Applications*, v. 1, p. 73–85, 2015. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.12785/pfda/010201>. Citado na página 39.

CAUCHY, A. L. Théorie de la propagation des ondes a la surface d'un fluide pesant d'une profondeur indéfinie note xix sur les fonctions réciproques. *Mémoires présentés par divers savants á l'Académie Royale des Sciences de l'Institut de France et imprimés par son ordre. Sciences mathématiques et physiques*, v. 1, 1827. Disponível em: <http://sites.mathdoc.fr/cgi-bin/oeitem?id=OE_CAUCHY_1_1_5_0>. Citado na página 14.

COSTA, F. S.; VAZ Jr, J.; DE OLIVEIRA, E. C.; CAMARGO, R. F. As integrais de Mellin-Barnes e a função de Fox. *Trends in Applied and Computational Mathematics*, v. 12, n. 2, p. 157–169, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.5540/tema.2011.012.02.0157>. Citado na página 24.

DE OLIVEIRA, E. C.; COSTA, F. S.; VAZ Jr, J. The fractional Schrödinger equation for delta potentials. *Journal of Mathematical Physics*, n. 51, p. 123517, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.3525976>. Citado 16 vezes nas páginas 15, 16, 21, 26, 30, 34, 45, 48, 51, 86, 89, 101, 103, 106, 114 e 116.

DE OLIVEIRA, E. C.; JAROSZ, S.; VAZ Jr, J. Fractional calculus via Laplace transform and its application in relaxation processes. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, n. 69, p. 58–72, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2018.09.013>. Citado 3 vezes nas páginas 35, 38 e 39.

______. On the mistake in defining fractional derivative using a non-singular kernel. *arXiv preprint 1912.04422v3*, 2020. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1912.04422>. Citado na página 39.

DE OLIVEIRA, E. C.; MACHADO, J. A. T. A review of definitions for fractional derivatives and integral. *Mathematical Problems in Engineering*, Hindawi Publishing, v. 2014, p. 238459, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1155/2014/238459>. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 31.

DE OLIVEIRA, E. C.; MAINARDI, F.; VAZ Jr, J. Fractional models of anomalous relaxation based on the Kilbas and Saigo function. *New Trends in Fluid and Solid Mechanical Models*, n. 49, p. 2049–2060, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11012-014-9930-0>. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 35.

DE OLIVEIRA, E. C.; RODRIGUES Jr., W. A. *Funções Analíticas com Aplicações*. São Paulo: Editoria Livraria da Física, 2006. Citado na página 101.

DE OLIVEIRA, E. C.; VAZ Jr, J. Tunneling in fractional quantum mechanics. *Journal Of Physics A: Mathematical and Theoretical*, n. 44, p. 185303, 2011. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1088/1751-8113/44/18/185303>. Citado 13 vezes nas páginas 15, 16, 21, 26, 34, 45, 48, 86, 88, 89, 112, 114 e 116.

DE VINCENZO, S.; SÁNCHEZ, C. Point interactions: Boundary conditions or potentials with the Dirac delta function. *Canadian Journal of Physics*, v. 88, p. 809–815, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1139/P10-060>. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 46.

DIETHELM, K. *The Analysis of Fractional Differential Equations: An Application-Oriented Exposition Using Differential Operators of Caputo Type*. Berlin: Springer Science & Business Media, 2010. Citado na página 34.

DUISTERMAAT, J. J.; KOLK, J. A. C. *Distributions: Theory and Applications*. Basel: Birkhäuser, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 78.

DÜRR, D.; TEUFEL, S. *Bohmian Mechanics: the Physics and Mathematics of Quantum Theory*. 8. ed. Berlin: Springer-Verlag, 2009. Citado na página 40.

ELTON, D. C. Stretched exponential relaxation. *arXiv preprint abs/1808.00881*, 2018. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1808.00881>. Citado na página 36.

ERDÉLYI, A. Fractional integrals of generalized functions. In: *Proceedings of the International Conference Held at the University of New Haven*. Berlin: Springer, 1975, (Lecture Notes in Mathematics, v. 457). Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BFb0067103>. Citado na página 20.

EVANGELISTA, L. R.; LENZI, E. K. *Fractional Diffusion Equations and Anomalous Diffusion*. Cambridge: Cambridge University Press, 2018. Citado na página 34.

FALLAHGOUL, H. A.; FOCARDI, S. M.; FABOZZI, F. J. *Fractional Calculus and Fractional Processes with Applications to Financial Economics: Theory and Application*. Cambridge: Academic Press, 2016. Citado na página 34.

FÉNYES, I. A deduction of Schrödinger equation. *Acta Bolyaina*, n. 1, p. 5, 1946. Citado na página 40.

______. Eine wahrscheinlichkeitstheoretische begründung und interpretation der quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, n. 40, p. 81–106, 1952. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF01338578>. Citado na página 40.

FOURIER, J. B. J. Mémoire sur la theorie analytique de la chaleur. *Mémoires de l'Academie Royale des Sciences de l'Institut de France pour l'année 1825*, Paris, Didot, n. 8, p. 581–622, 1829. Disponível em: <http://gallica.bnf.fr/ark:/12148/bpt6k33707/f152>. Citado na página 14.

FROST, A. A. Delta potential function model for electronic energies in molecules. *The Journal of Chemical Physics*, n. 22, p. 1613, 1954. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1740472>. Citado na página 14.

______. Delta-function model. I. electronic energies of hydrogen-like atoms and diatomic molecules. *The Journal of Chemical Physics*, n. 25, p. 1150–1153, 1956. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1743167>. Citado na página 14.

FROST, A. A.; LELAND, F. E. Delta-potential function model. II. Aromatic hydrocarbons. *The Journal of Chemical Physics*, n. 25, p. 1154–1160, 1956. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1743168>. Citado na página 14.

GADELLA, M.; NEGRO, J.; NIETO, L. M. Bound states and scattering coefficients of the $-a\delta(x) + b'\delta(x)$ potential. *Physics Letters A*, n. 373, p. 1310–1313, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2009.02.025>. Citado 14 vezes nas páginas 15, 45, 47, 58, 59, 83, 90, 105, 106, 108, 113, 115, 118 e 120.

GALINDO, A.; PASCUAL, D. *Quantum Mechanics I*. Berlin: Springer-Verlag, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 83.

GARRA, R.; GORENFLO, R.; POLITO, F.; TOMOVSKI, R. Hilfer-Prabhakar derivatives and some applications. *Applied Mathematics and Computation*, v. 242, p. 576–589, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.amc.2014.05.129>. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 38.

GASIOROWICZ, S. *Quantum Physics*. New Jersey: John Wiley & Sons, 1979. Citado na página 43.

GAUL, L.; KLEIN, P.; KEMPLE, S. Damping description involving fractional operators. *Mechanical Systems and Signal Processing*, v. 5, n. 2, p. 81–88, 1991. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/0888-3270(91)90016-X>. Citado na página 34.

GOMES, A. V. *Estrutura eletrônica de cristais: Generalizaçāo mediante o Cálculo Fracionário*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual Paulista, 2018. Disponível em: <http://hdl.handle.net/11449/154280>. Citado na página 90.

GORENFLO A. A. KILBAS, F. M. R.; ROGOSIN, S. V. *Mittag-Leffler Functions: Related Topics and Applications*. Berlin: Springer, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 35.

GRADSHTEYN, I. S.; RYZHIK, I. M. *Table of Integrals, Series, and Products*. 7. ed. Cambridge: Academic Press, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 104, 132 e 134.

GRAF, U. *Introduction to Hyperfunctions and Their Integral Transforms: An Applied and Computational Approach*. Basel: Birkhäuser, 2010. Citado na página 140.

GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. New Jersey: Prentice Hall, 1995. Citado 4 vezes nas páginas 43, 46, 58 e 83.

HERRMANN, R. *Fractional calculus: an introduction for physicists*. Singapore: World scientific, 2014. Citado na página 34.

HILFER, R. *Applications of Fractional Calculus in Physics*. Singapore: World Scientific, 2000. Citado 4 vezes nas páginas 29, 30, 32 e 34.

IONESCU, C.; LOPES, A.; COPOT, D.; MACHADO, J.; BATES, J. The role of fractional calculus in modeling biological phenomena: A review. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, v. 51, p. 141–159, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2017.04.001>. Citado na página 20.

JAROSZ, S. *A Equação de Schrödinger Fracionária com Potenciais Delta*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Campinas, 2016. Disponível em: <http://repositorio.unicamp.br/jspui/handle/REPOSIP/321498>. Citado 4 vezes nas páginas 15, 21, 45 e 90.

JAROSZ, S.; VAZ Jr, J. Fractional Schrödinger equation with Riesz-Feller derivative for delta potentials. *Journal of Mathematical Physics*, n. 57, p. 123506, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.4972291>. Citado 6 vezes nas páginas 15, 21, 34, 48, 88 e 89.

KELBERT, M. Y.; LEONENKO, N. N.; RUIZ-MEDINA, M. D. Fractional random fields associated with stochastic fractional heat equations. *Advances in Applied Probability*, Cambridge University Press, v. 37, n. 1, p. 108–133, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1239/aap/1113402402>. Citado na página 20.

KILBAS, A.; SRIVASTAVA, H. M.; TRUJILLO, J. *Theory and Applications of Fractional Differential Equations*. 1. ed. Amsterdam: Elsevier, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 110.

KILBAS, A. A.; SAIGO, M. *H-Transforms: Theory and Applications*. New York: CRC Press, 2004. v. 9. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 35.

KONDEJ, S.; VAZ Jr, J. Fractional Schrödinger operator with delta potential localized on circle. *Journal of mathematical physics*, American Institute of Physics, v. 53, n. 3, p. 033503, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.3691199>. Citado na página 34.

KRONIG, R. de L.; PENNEY, W. G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, The Royal Society, v. 130, n. 814, p. 499–513, 1931. Disponível em: <https://doi.org/10.1098/rspa.1931.0019>. Citado na página 14.

KUHN, H. Free electron model for absorption spectra of organic dyes. *The Journal of Chemical Physics*, v. 16, p. 840, 1948. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1747011>. Citado na página 14.

KURASOV, P. Distribution theory for discontinuous test functions and differential operators with generalized coefficients. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, v. 201, p. 297–323, 1996. Disponível em: <https://doi.org/10.1006/jmaa.1996.0256>. Citado 8 vezes nas páginas 15, 16, 43, 44, 45, 47, 50 e 119.

LANGE, R. J. Distribution theory for Schrödinger's integral equation. *Journal of Mathematical Physics*, n. 56, p. 122105, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.4936302>. Citado na página 48.

LASKIN, N. Fractional quantum mechanics and Lévy path integrals. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 268, n. 4, p. 298–305, 2000. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/S0375-9601(00)00201-2>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 21.

LIMA, E. L. *Curso de análise*. 12. ed. Rio de Janeiro: Associação Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada, 2009. v. 1. Citado na página 113.

LÜTZEN, J. *The prehistory of the theory of distributions*. New York: Springer Science & Business Media, 2012. v. 7. Citado na página 14.

MACHADO, J. T. Fractional calculus: Application in modeling and control. *Integral Methods in Science and Engineering*, p. 279–295, 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-1-4614-7828-7_20>. Citado na página 34.

MADELUNG, E. Quantentheorie in hydrodynamischer form. *Zeitschrift für Physik*, v. 40, p. 322, 1927. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF01400372>. Citado na página 40.

MAGIN, R. L. Fractional calculus models of complex dynamics in biological tissues. *Computers & Mathematics with Applications*, v. 59, n. 5, p. 1586–1593, 2010. Fractional Differentiation and Its Applications. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2009.08.039>. Citado na página 20.

MAINARDI, F. Fractional relaxation-oscillation and fractional diffusion-wave phenomena. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 7, n. 9, p. 1461–1477, 1996. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/0960-0779(95)00125-5>. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 34.

_____. *Fractional Calculus And Waves In Linear Viscoelasticity: An Introduction To Mathematical Models*. London: Imperial College Press, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 34.

_____. An historical perspective on fractional calculus in linear viscoelasticity. *Fractional Calculus and Applied Analysis*, v. 15, n. 4, p. 712–717, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.2478/s13540-012-0048-6>. Citado na página 20.

MAINARDI, F.; LUCHKO, Y.; PAGNINI, G. The fundamental solution of the space-time fractional diffusion equation. *arXiv preprint cond-mat/0702419*, 2007. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0702419>. Citado na página 32.

MATHAI, A. M.; SAXENA, R. K.; HAUBOLD, H. J. *The H -Function*. New York: Springer, 2009. Citado 4 vezes nas páginas 26, 28, 135 e 146.

METZLER, R.; KLAFTER, J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Physics Reports*, n. 339, p. 1, 2000. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/S0370-1573(00)00070-3>. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 42.

MILLER, K. S.; ROSS, B. *An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations*. New York: John Wiley and Sons, 1993. Citado na página 20.

MONTROLL, E. W.; WEISS, G. H. Random walks on lattices. ii. *Journal of Mathematical Physics*, v. 6, p. 167, 1965. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1704269>. Citado na página 41.

NABER, M. Linear fractionally damped oscillator. *International Journal of Differential Equations*, Hindawi, v. 2010, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1155/2010/197020>. Citado na página 34.

NAGASAWA, M. *Schrödinger Equations and Diffusion Theory*. 8. ed. Basel: Birkhauser, 1993. Citado na página 40.

NELSON, E. Derivation of the Schrödinger equation from newtonian mechanics. *Physical Review*, n. 150, p. 1079, 1966. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.150.1079>. Citado na página 40.

_____. *Dynamical Theories of Brownian Motion*. 8. ed. Princeton: Princeton University Press, 1967. Citado na página 40.

OBERHETTINGER, F. *Tables of Mellin Transforms*. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1974. Citado na página 24.

OLDHAM, K. B. New approach to the solution of electrochemical problems involving diffusion. *Analytical Chemistry*, v. 41, n. 13, p. 1904–1905, 1969. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ac60282a016>. Citado na página 20.

OLDHAM, K. B.; SPANIER, J. The replacement of Fick's laws by a formulation involving semidifferentiation. *Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry*, v. 26, n. 2, p. 331–341, 1970. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/S0022-0728(70)80316-3>. Citado na página 20.

_____. *The Fractional Calculus*. Mineola: Dover, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 18, 20 e 21.

ORTIGUEIRA, M. D. *Fractional calculus for scientists and engineers*. New York: Springer Science & Business Media, 2011. v. 84. Citado na página 34.

ORTIGUEIRA, M. D.; MACHADO, J. A. T. What is a fractional derivative? *Journal of Computational Physics*, n. 293, p. 4–13, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.07.019>. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 39.

_____. A critical analysis of the Caputo-Fabrizio operator. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, n. 59, p. 608–11, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2017.12.001>. Citado na página 39.

PODLUBNY, I. *Fractional differential equations: an introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications*. 1. ed. Cambridge: Elsevier, 1998. Citado na página 34.

_____. Fractional-order systems and $PI^{\lambda}D^{\mu}$-controllers. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 44, n. 1, p. 208–214, 1999. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/9.739144>. Citado na página 34.

RIESZ, M. L'intégrale de Riemann-Liouville et le problème de Cauchy. *Acta mathematica*, Springer, v. 81, n. 1, p. 1–222, 1939. Disponível em: <http://www.numdam.org/item?id=BSMF_1939___67___S153_0>. Citado na página 31.

ROSSIKHIN, Y. A. *Dynamic Problems of Linear Viscoelasticity Connected with the Investigation of Retardation and Relaxation Spectra*. Tese (Doutorado) — Voronezh Polytechnic Institute, 1970. (Publicado originalmente em russo). Citado na página 20.

RYABOV, Y. E.; PUZENKO, A. Damped oscillations in view of the fractional oscillator equation. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 66, p. 184201, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.184201>. Citado na página 34.

SAMKO, S. G.; KILBAS, A. A.; MARICHEV, O. I. *Fractional integrals and derivatives : theory and applications*. Minsk: Nauka i Tekhnika, 1987. (Publicado originalmente em russo). Citado na página 20.

SANDEV, T.; TOMOVSKI, Z. *Fractional Equations and Models: Theory and Applications*. New York: Springer International Publishing, 2019. Citado na página 34.

SCHWARTZ, L. *Théorie des distributions*. Paris: Hermann, 1966. v. 2. Citado na página 14.

SCOTT BLAIR, G. W. The role of psychophysics in rheology. *Journal of Colloid Science*, v. 2, n. 1, p. 21–32, 1947. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/0095-8522(47)90007-X>. Citado na página 20.

SCOTT BLAIR, G. W.; VEINOGLOU, B. C.; CAFFYN, J. E. Limitations of the newtonian time scale in relation to non-equilibrium rheological states and a theory of quasi-properties. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, v. 189, n. 1016, p. 69–87, 1947. Disponível em: <https://doi.org/10.1098/rspa.1947.0029>. Citado na página 20.

ŠEBA, P. The generalized point interaction in one dimension. *Czechoslovak Journal of Physics B*, v. 36, n. 6, p. 667–673, 1986. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF01597402>. Citado na página 46.

SHAH, P.; AGASHE, S. Review of fractional PID controller. *Mechatronics*, v. 38, p. 29–41, 09 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.mechatronics.2016.06.005>. Citado na página 34.

SHERMERGOR, T. D. On the use of fractional differentiation operators for the description of elastic-after effect properties of materials. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, v. 7, p. 85–87, 1966. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF00914347>. Citado na página 20.

SUN, H.; ZHANG, Y.; BALEANU, D.; CHEN, W.; CHEN, Y. A new collection of real world applications of fractional calculus in science and engineering. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, v. 64, p. 213–231, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2018.04.019>. Citado na página 38.

TARASOV, V. E. No nonlocality. No fractional derivative. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, v. 62, p. 157–163, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2018.02.019>. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 39.

TARE, J. D.; ESGUERRA, J. P. H. Bound states for multiple Dirac-δ wells in space-fractional quantum mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, n. 55, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.4861933>. Citado na página 89.

TEOLJAKOV, A. *Fractional-order Modeling and Control of Dynamic Systems*. New York: Springer International Publishing, 2017. Citado na página 34.

TOFIGHI, A. The intrinsic damping of the fractional oscillator. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 329, n. 1, p. 29–34, 2003. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/S0378-4371(03)00598-3>. Citado na página 34.

VAZ Jr, J.; DE OLIVEIRA, E. C. *Métodos Matemáticos*. Campinas: Editora da Unicamp, 2016. v. 1. Citado na página 19.

______. *Métodos Matemáticos*. Campinas: Editora da Unicamp, 2016. v. 2. Citado 4 vezes nas páginas 21, 23, 24 e 44.

______. *Métodos Matemáticos*. Campinas: Editora da Unicamp, 2016. v. 3. Citado na página 43.

ZEIDLER, E. *Quantum Field Theory II: Quantum Electrodynamics*. Berlin: Springer, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 16, 131 e 139.

APÊNDICE A

Cálculo das integrais em (4.28) e (3.36)

Consideremos a integral

$$I_\alpha^n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^n \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{|p|^\alpha + \lambda^\alpha}\, dp, \tag{A.1}$$

com $1 < \alpha \leqslant 2$ e $n = 0, 1, 2, \ldots$.

Reescrevendo a exponencial complexa na forma trigonométrica, obtemos

$$I_\alpha^n(x) = \begin{cases} 2\left(\dfrac{i}{\hbar}\right)^n \displaystyle\int_0^\infty \frac{p^n \cos\left(\frac{px}{\hbar}\right)}{p^\alpha + \lambda^\alpha}\, dp, \text{ se } n \text{ é par;} \\ 2i\left(\dfrac{i}{\hbar}\right)^n \displaystyle\int_0^\infty \frac{p^n \operatorname{sen}\left(\frac{px}{\hbar}\right)}{p^\alpha + \lambda^\alpha}\, dp, \text{ se } n \text{ é ímpar.} \end{cases} \tag{A.2}$$

Vamos começar pelo caso par, tomando a mudança de variáveis $p = \lambda y$,

$$\int_0^\infty \frac{p^n \cos\left(\frac{px}{\hbar}\right)}{p^\alpha + \lambda^\alpha}\, dp = \lambda^{n-\alpha+1} \lim_{R\to\infty} \int_0^R \frac{y^n \cos\left(\frac{\lambda x}{\hbar} y\right)}{y^\alpha + 1}\, dy. \tag{A.3}$$

Definamos agora a integral dada por

$$I_C^{\alpha,\nu}(\omega; R) = \frac{1}{\pi} \int_0^R \frac{y^{\nu-1} \cos \omega y}{y^\alpha + 1}\, dy, \tag{A.4}$$

para $\omega \geqslant 0$ e $R > 0$. Calcularemos $I_C^{\alpha,\nu}(0; R)$ no limite $R \to \infty$:

$$I_C^{\alpha,\nu}(0; R) = \frac{1}{\pi} \int_0^R \frac{y^{\nu-1}}{y^\alpha + 1}\, dy. \tag{A.5}$$

Tomando a mudança de variáveis $t = (y/R)^\alpha$, reescrevemos a integral como

$$I_C^{\alpha,\nu}(0; R) = \frac{R^\nu}{\pi\alpha} \int_0^1 t^{\frac{\nu}{\alpha}-1} (1 + R^\alpha t)^{-1}\, dt. \tag{A.6}$$

Utilizando a representação integral da função hipergeométrica (ARFKEN; WEBER, 2005), isto é,

$$
{}_2F_1(a,b;c;z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)\Gamma(c-b)}\int_0^1 t^{b-1}(1-t)^{c-b-1}(1-tz)^{-a}\,dt, \tag{A.7}
$$

obtemos

$$
I_C^{\alpha,\nu}(0;R) = \frac{R^\nu}{\pi\nu}\,{}_2F_1\left(1,\frac{\nu}{\alpha};\frac{\nu}{\alpha}+1,-R^\alpha\right). \tag{A.8}
$$

Utilizando a equação **15.3.7** da referência (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1972) e as propriedades $z\Gamma(z) = \Gamma(z+1)$ e de reflexão da função gama (ARFKEN; WEBER, 2005), temos

$$
I_C^{\alpha,\nu}(0;R) = \frac{R^{\nu-\alpha}}{\pi\left(\nu-\alpha\right)}{}_2F_1\left(1,1-\frac{\nu}{\alpha};2-\frac{\nu}{\alpha};-R^\alpha\right)+\frac{1}{\alpha\,\mathrm{sen}\left(\pi\nu/\alpha\right)}{}_2F_1\left(\frac{\nu}{\alpha},0;\frac{\nu}{\alpha}-1;-R^\alpha\right). \tag{A.9}
$$

Da representação em série da função hipergeométrica, ${}_2F_1\left(\alpha,0;\gamma;z\right) = 1$ e assim segue-se que

$$
I_C^{\alpha,\nu}(0;R) = \frac{\mathrm{cossec}\left(\nu\pi/\alpha\right)}{\alpha} + \frac{R^{\nu-\alpha}}{\pi\left(\nu-\alpha\right)}\,{}_2F_1\left(1,1-\frac{\nu}{\alpha};2-\frac{\nu}{\alpha};-R^\alpha\right). \tag{A.10}
$$

Para $\nu-\alpha > 0$, o segundo termo de (A.10) diverge no limite $R\to\infty$:

$$
\begin{aligned}
\frac{R^{\nu-\alpha}}{\nu-\alpha}\,{}_2F_1\left(1,1-\frac{\nu}{\alpha};2-\frac{\nu}{\alpha};-\frac{1}{R^\alpha}\right) &= \frac{R^{\nu-\alpha}}{\nu-\alpha}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(1)_k(1-\nu/\alpha)_k}{(2-\nu/\alpha)_k}\frac{(-1)^k R^{-\alpha k}}{k!} \\
&= \frac{R^{\nu-\alpha}}{\nu-\alpha}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k R^{-\alpha k}\frac{\Gamma(k+1-\nu/\alpha)\Gamma(2-\nu/\alpha)}{\Gamma(k+2-\nu/\alpha)\Gamma(1-\nu/\alpha)} \\
&= \frac{R^{\nu-\alpha}}{\nu-\alpha}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k R^{-\alpha k}\frac{(1-\nu/\alpha)}{(k+1-\nu/\alpha)} \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k R^{\nu-(k+1)\alpha}}{\nu-(k+1)\alpha}.
\end{aligned} \tag{A.11}
$$

No limite $R\to\infty$, cada termo k da somatória em (A.11) tende a zero para $\nu-(k+1)\alpha < 0$ e diverge caso contrário. Temos interesse nos valores de $I_C^{\alpha,0}(0;R)$ e $I_C^{\alpha,2}(0;R)$, com $0<\alpha\leqslant 1$, pois eles serão utilizados para encontrar a energia de estado ligado para o potencial delta-delta prime. Nessas integrais, $\nu = n+1$, então em alguns casos particulares a integral deverá ser regularizada (ZEIDLER, 2009). Esta regularização será feita removendo os termos divergentes da soma na equação (A.11). Vamos então analisar quais casos necessitam de regularização:

- se $n = 0$, o expoente de R em cada termo da série é $1-(k+1)\alpha$, que é negativo para todo k de modo que a regularização não é necessária;

- se $n = 2$, cada expoente será dado por $3-(k+1)\alpha$, de modo que o termo $k = 0$ é divergente para qualquer valor de α, enquanto o termo $k = 1$ diverge para $1 < \alpha < 1.5$.

Isto significa que a regularização da integral $I_C^{\alpha,\nu}(0;R)$ depende do valor de seus parâmetros, isto é

$$\lim_{R\to\infty} I_C^{\alpha,1}(0;R) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{dy}{y^\alpha+1} = \frac{\operatorname{cossec}(\pi/\alpha)}{\alpha}, \tag{A.12}$$

e

$$\begin{aligned}\left[\lim_{R\to\infty} I_C^{\alpha,3}(0;R)\right]_{\text{reg}} &= \begin{cases} \dfrac{1}{\pi}\lim\limits_{R\to\infty}\left\{\displaystyle\int_0^R \frac{y^2}{y^\alpha+1}\,dy - \frac{R^{3-\alpha}}{3-\alpha} - \frac{R^{3-2\alpha}}{3-2\alpha}\right\}, & 1<\alpha<1.5,\\ \dfrac{1}{\pi}\lim\limits_{R\to\infty}\left\{\displaystyle\int_0^R \frac{y^2}{y^\alpha+1}\,dy - \frac{R^{3-\alpha}}{3-\alpha}\right\}, & 1.5<\alpha\leqslant 2,\end{cases}\\ &= \frac{\operatorname{cossec}(3\pi/\alpha)}{\alpha}.\end{aligned} \tag{A.13}$$

Deste modo, obtemos

$$I_\alpha^0(0) = 2\lambda^{1-\alpha}\pi\lim_{R\to\infty} I_C^{\alpha,1}(0;R) = \frac{2\pi}{\alpha}\lambda^{1-\alpha}\operatorname{cossec}\frac{\pi}{\alpha}, \tag{A.14}$$

$$I_\alpha^2(0)\big|_{\text{reg}} = 2\lambda^{3-\alpha}\pi\left[\lim_{R\to\infty} I_C^{\alpha,2}(0;R)\right]_{\text{reg}} = -\frac{2\pi}{\alpha\hbar^2}\lambda^{3-\alpha}\operatorname{cossec}\frac{3\pi}{\alpha}. \tag{A.15}$$

Vamos agora avaliar a integral $I_C^{\alpha,\nu}(\omega;R)$ para $\omega\in\mathbb{R}$. A transformada de Mellin da função cosseno é dada pela equação **17.43.3** da referência (GRADSHTEYN; RYZHIK, 2007), e portanto a transformada de Mellin da referência (A.4) é dada por

$$\mathcal{M}\left[I_C^{\alpha,\nu}(\omega;R)\right](z) = \frac{\Gamma(z)\cos\pi z/2}{\pi}\int_0^R \frac{y^{\nu-1-z}}{y^\alpha+1}\,dy. \tag{A.16}$$

Os resultados obtidos no cálculo de $I_C^{\alpha,\nu}(0;R)$ na equação (A.10) são válidos para valores complexos de ν e deste modo segue que

$$\begin{aligned}\mathcal{M}\left[I_C^{\alpha,\nu}(\omega;R)\right](z) =& \frac{\Gamma(z)}{\pi}\cos\frac{\pi z}{2}\left[\frac{\pi}{\alpha}\operatorname{cossec}\left(\frac{\nu-z}{\alpha}\right)\pi\right.\\ &\left.+\frac{R^{\nu-z-\alpha}}{\nu-z-\alpha}\,{}_2F_1\left(1,1-\frac{\nu-z}{\alpha};2-\frac{\nu-z}{\alpha};-R^\alpha\right)\right].\end{aligned} \tag{A.17}$$

O próximo passo é aplicar a transformada de Mellin inversa a esta expressão. Trataremos cada termo separadamente, começando por

$$F_c(z) = \frac{\Gamma(z)}{\alpha}\cos\frac{\pi z}{2}\operatorname{cossec}\left(\frac{\nu-z}{\alpha}\right)\pi., \tag{A.18}$$

Utilizando a relação $\cos \pi z/2 = \operatorname{sen}(1-z)\pi/2$ e a reflexão da função gama,

$$\begin{aligned} F_c(z) &= \frac{\Gamma(z)}{\alpha} \frac{\cos \pi z/2}{\operatorname{sen}\,(\nu - z)\,\pi/\alpha} = \frac{\Gamma(z)}{\alpha} \frac{\operatorname{sen}(1-z)\pi/2}{\operatorname{sen}\,(\nu - z)\,\pi/\alpha} \\ &= \frac{\Gamma(z)\Gamma\,(\nu/\alpha - z/\alpha)\,\Gamma\,(1 - \nu/\alpha + z/\alpha)}{\alpha\Gamma\,(1/2 - z/2)\,\Gamma\,(1 - 1/2 + z/2)}, \end{aligned} \tag{A.19}$$

e aplicando transformada de Mellin a F_c, obtemos

$$\mathcal{M}^{-1}\left[F_c(z)\right](\omega) = \frac{1}{\alpha} H^{2,1}_{2,3}\left[\omega \left| \begin{array}{c} \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\ (0,1), \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \end{array} \right. \right]. \tag{A.20}$$

Vamos analisar agora o segundo termo:

$$F_R(z) = \frac{R^{\nu - z - \alpha}\Gamma(z)}{(\nu - z - \alpha)\,\pi} \cos \frac{\pi z}{2}\, {}_2F_1\left(1, 1 + \frac{z-\nu}{\alpha}; 2 + \frac{z - \nu}{\alpha}; -R^\alpha\right). \tag{A.21}$$

Como aplicaremos a transformada de Mellin inversa a $F_R(z)$, segue da definição dada pela equação (1.37) e pelos valores permitidos para os parâmetros ν e α na equação (A.19) que podemos definir a curva de integração no plano complexo de modo que a parte real de z seja um número positivo e fixo. Isto significa que, seguindo os mesmos critérios discutidos para o caso $I_C^{\alpha,\nu}(0;R)$, o termo R^{-z} não causará nenhuma divergência no limite $R \to \infty$, ou seja, não é necessário regularizar esta integral e, mais ainda, $\lim_{R\to\infty} F_R(z) = 0$ e portanto o mesmo é válido para $\mathcal{M}^{-1}\left[F_R(z)\right](\omega)$. Tomando o limite $R \to \infty$, obteremos, finalmente,

$$\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{y^{\nu-1}\cos \omega y}{y^\alpha + 1}\,dy = \frac{1}{\alpha} H^{2,1}_{2,3}\left[\omega \left| \begin{array}{c} \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\ (0,1), \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \end{array} \right. \right]. \tag{A.22}$$

Partindo para o cálculo da integral (A.1) para valores pares de n, ou seja, $n = 2m$, para $m = 0, 1, 2, \ldots$, isto é o mesmo que tomar $\nu = 2m + 1$ na integral $I_C^{\alpha,\nu}(\omega;R)$. Entretanto, precisamos ser cuidadosos neste passo: como utilizamos o método da transformada de Mellin para calcular esta integral, devemos observar que nossos resultados são válidos apenas para $\omega > 0$. Contudo, notando que $I_C^{\alpha,\nu}(\omega;R)$ é uma função par, podemos estender os resultados obtidos para valores negativos de x simplesmente considerando o valor absoluto.

Utilizando as propriedades (1.39) e (1.38) da função H de Fox na equação (A.20), obteremos

$$\begin{aligned} I_{\alpha}^{2m}(x) &= \frac{2(-1)^m}{\hbar^{2m}} \int_0^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{p|x|}{\hbar}\right)}{p^{\alpha}+\lambda^{\alpha}}\, dp = \frac{2\pi\lambda^{2m+1-\alpha}(-1)^m}{\hbar^{2m}} \lim_{R\to\infty} I_C^{\alpha,2m+1}\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}; R\right) \\ &= \frac{2\pi\hbar(-1)^m}{\lambda^{\alpha}|x|^{2m+1}} H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^{\alpha} \middle| \begin{matrix} (1,1),\left(m+1,\frac{\alpha}{2}\right) \\ (2m+1,\alpha),(1,1),\left(m+1,\frac{\alpha}{2}\right) \end{matrix}\right]. \end{aligned} \tag{A.23}$$

Trataremos agora do caso ímpar, tomando a mudança de variáveis $p = \lambda y$,

$$\int_0^{\infty} \frac{p^n \operatorname{sen}\left(\frac{px}{\hbar}\right)}{p^{\alpha}+\lambda^{\alpha}}\, dp = \lambda^{n-\alpha+1} \lim_{R\to\infty} \int_0^{R} \frac{y^n \operatorname{sen}\left(\frac{\lambda x}{\hbar} y\right)}{y^{\alpha}+1}\, dy. \tag{A.24}$$

Vamos definir a seguinte integral

$$I_S^{\alpha,\nu}(\omega; R) = \frac{1}{\pi} \int_0^{R} \frac{y^{\nu-1} \operatorname{sen} \omega y}{y^{\alpha}+1}\, dy, \tag{A.25}$$

para $\omega \geqslant 0$ e $R > 0$. Observando que trata-se de uma função ímpar, segue de imediato que $I_S^{\alpha,2k}(0;R) = 0$, de modo que $I_{\alpha}^{2k+1}(0) = 0$. Usando a equação **17.43.4** da referência (GRADSHTEYN; RYZHIK, 2007), a transformada de Mellin da equação (A.25) é

$$\mathcal{M}\left[I_S^{\alpha,\nu}(\omega;R)\right](z) = \frac{\Gamma(z) \operatorname{sen} \pi z/2}{\pi} \int_0^{R} \frac{y^{\nu-1-z}}{y^{\alpha}+1}\, dy. \tag{A.26}$$

Utilizando os resultados obtidos para $I_C^{\alpha,\nu}(\omega;0)$ na equação (A.10), temos

$$\begin{aligned} \mathcal{M}\left[I_S^{\alpha,\nu}(\omega;R)\right](z) =& \frac{\Gamma(z)}{\pi} \operatorname{sen}\frac{\pi z}{2} \left[\frac{\pi}{\alpha} \operatorname{cossec}\left(\frac{\nu-z}{\alpha}\right)\pi \right. \\ &\left. + \frac{R^{\nu-z-\alpha}}{\nu-z-\alpha}\, {}_2F_1\left(1, 1-\frac{\nu-z}{\alpha}; 2-\frac{\nu-z}{\alpha}; -R^{\alpha}\right)\right]. \end{aligned} \tag{A.27}$$

Tratando cada termo em separado e utilizando a fórmula de reflexão da função gama, o primeiro termo é dado por

$$F_s(z) = \frac{\Gamma(z)}{\alpha} \frac{\operatorname{sen} \pi/\alpha}{\operatorname{sen}(\nu-z)\pi/\alpha} = \frac{\Gamma(z)\Gamma(\nu/\alpha - z/\alpha)\Gamma(1-\nu/\alpha+z/\alpha)}{\alpha\Gamma(z/2)\Gamma(1-z/2)}. \tag{A.28}$$

Após aplicar a transformada de Mellin inversa, obtemos

$$\mathcal{M}^{-1}\left[F_s(z)\right](\omega) = \frac{1}{\alpha} H_{2,3}^{2,1}\left[\omega \middle| \begin{matrix} \left(1-\frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right), \left(0, \frac{1}{2}\right) \\ (0,1), \left(1-\frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right), \left(0, \frac{1}{2}\right) \end{matrix}\right]. \tag{A.29}$$

O segundo termo é dado por

$$F_R(z) = \frac{R^{\nu-z-\alpha}\Gamma(z)}{(\nu-z-\alpha)\pi} \operatorname{sen}\frac{\pi z}{2}\, {}_2F_1\left(1, 1-\frac{\nu-z}{\alpha}; 2-\frac{\nu-z}{\alpha}; -R^{\alpha}\right), \tag{A.30}$$

e, partindo da mesma discussão para a função definida em (A.21), segue que $\lim_{R\to\infty} F_R(z) = 0$. Assim, temos que

$$\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{y^{\nu-1}\operatorname{sen}\omega y}{y^\alpha + 1}\,dy = \frac{1}{\alpha} H_{2,3}^{2,1}\left[\omega \left| \begin{matrix} \left(1-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(0,\frac{1}{2}\right) \\ (0,1),\left(1-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(0,\frac{1}{2}\right) \end{matrix} \right.\right]. \tag{A.31}$$

Para avaliar a integral (A.1) para valores ímpares de n, levamos em conta o fato de que $I_S^{\alpha,\nu}(\omega;R)$ é uma função ímpar na variável ω. Assim, escrevemos $n = 2m+1$, ou seja, $\nu = 2m+2$ e portanto $I_\alpha^{2m+1}(x) = \operatorname{sgn}(x)\, I_\alpha^{2m+1}(|x|)$, sendo $\operatorname{sgn}(x)$ a função sinal, que denotaremos por $\operatorname{sgn}(x)$. Utilizando as propriedades (1.39), (1.38) e (1.41) da função H de Fox na equação (A.29), obtemos

$$\begin{aligned} I_\alpha^{2m+1}(x) &= \frac{2(-1)^{m+1}}{\hbar^{2m+1}}\int_0^\infty \frac{p\operatorname{sen}\left(\frac{px}{\hbar}\right)}{p^\alpha+\lambda^\alpha}\,dp = \frac{2\pi\lambda^{2m+2-\alpha}(-1)^{m+1}}{\hbar^{2m+1}}\lim_{R\to\infty} I_S^{\alpha,2m+2}\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar};R\right) \\ &= \frac{2\pi\hbar(-1)^{m+1}}{\lambda^\alpha|x|^{2m+2}}\operatorname{sgn}(x)\, H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda x}{\hbar}\right)^\alpha \left| \begin{matrix} (1,1),\left(m+1,\frac{\alpha}{2}\right) \\ (2m+2,\alpha),(1,1),\left(m+1,\frac{\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right.\right]. \end{aligned} \tag{A.32}$$

Neste trabalho, nosso interesse reside nas integrais $I_\alpha^0(x)$ e $I_\alpha^1(x)$, que são obtidas tomando-se $k=0$ nas equações (A.23) e (A.32), respectivamente, isto é,

$$I_\alpha^0(x) = \frac{2\pi\hbar}{\lambda^\alpha|x|} H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \left| \begin{matrix} (1,1),\left(1,\frac{\alpha}{2}\right) \\ (1,\alpha),(1,1),\left(1,\frac{\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right.\right], \tag{A.33}$$

$$I_\alpha^1(x) = -\frac{2\pi\hbar}{\lambda^\alpha|x|^2}\operatorname{sgn}(x)\, H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda x}{\hbar}\right)^\alpha \left| \begin{matrix} (1,1),\left(1,\frac{\alpha}{2}\right) \\ (2,\alpha),(1,1),\left(1,\frac{\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right.\right]. \tag{A.34}$$

Segue imediatamente da definição de $I_\alpha^n(x)$ que $I_\alpha^{2k+1}(0) = 0$ para $k = 0,1,2,\ldots$.

A.1 Caso particular: $\alpha = 2$

No caso particular $\alpha = 2$, utilizando a definição de função H de Fox e a equação **1.125** da referência (MATHAI; SAXENA; HAUBOLD, 2009), obtemos

$$H_{2,3}^{2,1}\left[\omega^2 \left| \begin{matrix} (1,1),(1,1) \\ (1,\alpha),(1,1),(1,1) \end{matrix} \right.\right] = H_{0,1}^{1,0}\left[\omega^2 \left| \begin{matrix} - \\ (1,2) \end{matrix} \right.\right] = \frac{\omega}{2}\,e^{-\omega}, \tag{A.35}$$

$$H_{2,3}^{2,1}\left[\omega^2 \left| \begin{matrix} (1,1),(1,1) \\ (2,\alpha),(1,1),(1,1) \end{matrix} \right.\right] = H_{0,1}^{1,0}\left[\omega^2 \left| \begin{matrix} - \\ (2,2) \end{matrix} \right.\right] = \frac{\omega^2}{2}\,e^{-\omega}. \tag{A.36}$$

Através dessas expressões, recuperamos os resultados já conhecidos da literatura

$$I_2^0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{p^2+\lambda^2}\, dp = \frac{\pi}{\lambda}\, e^{-\frac{\lambda x}{\hbar}}, \tag{A.37}$$

$$I_2^1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{ip}{\hbar}\right) \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{p^2+\lambda^2}\, dp = -\frac{\pi}{\hbar}\,\mathrm{sgn}(x)\, e^{-\frac{\lambda x}{\hbar}}. \tag{A.38}$$

Queremos agora calcular a integral

$$I_2^m(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^m \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{p^2+\lambda^2}\, dp, \tag{A.39}$$

para todos os valores de m inteiros não-negativos, isto é, $m = 0, 1, 2, ...$

Comecemos pelo caso par, ou seja, $m = 2n$, para $n = 0, 1, 2, \ldots$. Para ter uma ideia do que irá surgir no resultado, vamos calcular $I_2^2(x)$:

$$\begin{aligned} I_2^2(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{p^2+\lambda^2} \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2 dp \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{p^2+\lambda^2} \left[\left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2 + \left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^2 - \left(\frac{i\lambda}{\hbar}\right)^2\right] dp \\ &= -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{\hbar^2}\, dp + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{p^2+\lambda^2}\, dp \\ &= -\frac{2\pi}{\hbar}\delta(x) + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^2 I_2^0(x). \end{aligned} \tag{A.40}$$

Observamos, a partir do resultado acima, que para $m = 2$ a integral apresenta uma parte singular, dada pelo termo $\delta(x)$. A partir deste raciocínio provaremos, utilizando indução finita, que

$$I_2^{2n}(x) = \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2n} I_2^0(x) + I_{sing}^{2n}(x), \tag{A.41}$$

com $I_2^0(x)$ dada por (A.37) e a parte singular dada por

$$I_{sing}^{2n}(x) = \begin{cases} 0, & n = 0, \\ -\dfrac{2\pi}{\hbar} \displaystyle\sum_{k-0}^{n-1} \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2k} \delta^{(2n-2-2k)}(x), & n = 1, 2, 3, \ldots. \end{cases} \tag{A.42}$$

A expressão para $I_2^0(x)$ dadas por (A.37) serve como passo inicial e assim, supondo (A.41) válido para $n \geqslant 0$, calculemos $I_2^{2n+2}(x)$:

$$\begin{aligned}
I_2^{2n+2}(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{p^2+\lambda^2}\left(\frac{ip}{\hbar}\right)^{2n+2} dp \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{\hbar^2}\left(\frac{ip}{\hbar}\right)^{2n} dp + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{p^2+\lambda^2}\left(\frac{ip}{\hbar}\right)^{2n} dp \\
&= -\frac{2\pi}{\hbar}\delta^{(2n)}(x) + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^2 I_2^{2n}(x) \qquad \text{(A.43)} \\
&= -\frac{2\pi}{\hbar}\delta^{(2n)}(x) + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2n+2} I_2^0(x) - \frac{2\pi}{\hbar}\left[\sum_{k=0}^{n-1}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2k+2}\delta^{(2n-2k-2)}(x)\right] \\
&= \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2(n+1)} I_2^0(x) - \frac{2\pi}{\hbar}\left[\sum_{k=0}^{n}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2k+2}\delta^{(2n-2k-2)}(x)\right],
\end{aligned}$$

e, desta forma, temos provado (A.42).

O caso ímpar, isto é, $m = 2n+1$, para $n = 0, 1, 2, \ldots$ é análogo, diferindo em apenas alguns detalhes técnicos. Assim, mostra-se a partir do mesmo raciocínio que

$$I_2^{2n+1}(x) = \left(\frac{\hbar}{\lambda}\right)^{2n} I_2^1(x) + I_{sing}^{2n+1}(x), \qquad \text{(A.44)}$$

com $I_2^1(x)$ dada por (A.38) e a parte singular dada por

$$I_{sing}^{2n+1}(x) = \begin{cases} 0, & n = 0, \\ -\dfrac{2\pi}{\hbar}\displaystyle\sum_{k-0}^{n-1}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{2k}\delta^{(2n-1-2k)}(x), & n = 1, 2, 3, \ldots. \end{cases} \qquad \text{(A.45)}$$

Substituindo as expressões de $I_2^0(x)$ e $I_2^1(x)$, podemos unir as duas expressões em uma única, obtendo

$$I_2^m(x) = \frac{\pi}{\hbar}\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{m-1}\left[(-1)^m e^{-\lambda x/\hbar}H(x) + e^{\lambda x/\hbar}H(-x)\right] + I_{sing}^m(x), \qquad \text{(A.46)}$$

sendo $H(x)$ a função degrau. O resultado em (3.41) segue da parte regular de $I_2^m(x)$.

APÊNDICE B

Cálculo das integrais em (4.104)

Consideremos agora a integral

$$J_\alpha^n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^n \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{|p|^\alpha - \lambda^\alpha}\, dp, \tag{B.1}$$

com $1 < \alpha \leqslant 2$ e $n = 0, 1, 2, \ldots$. Reescrevendo a exponencial complexa na forma trigonométrica, isto é, $e^{i\phi} = \cos\phi + i\,\mathrm{sen}\,\phi$, a expressão em (B.1) pode ser reescrita como

$$J_\alpha^n(x) = \begin{cases} 2\left(\dfrac{i}{\hbar}\right)^n \displaystyle\int_0^{\infty} \frac{p^n \cos\left(\frac{px}{\hbar}\right)}{p^\alpha - \lambda^\alpha}\, dp, \text{ se } n \text{ é par;} \\ 2i\left(\dfrac{i}{\hbar}\right)^n \displaystyle\int_0^{\infty} \frac{p^n\, \mathrm{sen}\left(\frac{px}{\hbar}\right)}{p^\alpha - \lambda^\alpha}\, dp, \text{ se } n \text{ é ímpar.} \end{cases} \tag{B.2}$$

De modo similar ao feito no Apêndice A, definiremos funções auxiliares, através das mudanças de variáveis $p = \lambda y$, com $\lambda > 0$. Começando pelo caso par, temos

$$\int_0^{\infty} \frac{p^n \cos\left(\frac{px}{\hbar}\right)}{p^\alpha - \lambda^\alpha}\, dp = \lambda^{n-\alpha+1} \lim_{R\to\infty} \int_0^R \frac{y^n \cos\left(\frac{\lambda x}{\hbar} y\right)}{y^\alpha - 1}\, dy. \tag{B.3}$$

Vamos definir a seguinte integral

$$J_C^{\alpha,\nu}(\omega; R) = \frac{1}{\pi} \int_0^R \frac{y^{\nu-1} \cos\omega y}{y^\alpha - 1}\, dy, \tag{B.4}$$

para $\omega \geqslant 0$ e $R > 0$.

Para $\omega = 0$, obtemos

$$J_C^{\alpha,\nu}(0; R) = \frac{1}{\pi} \int_0^R \frac{y^{\nu-1}}{y^\alpha - 1}\, dy. \tag{B.5}$$

Procedendo de modo similar ao feito no Apêndice A, isto é, tomando a mudança de variáveis $t = (y/R)^\alpha$ na integral (B.5) e utilizando a representação (A.7) para a função hipergeométrica, obtemos

$$J_C^{\alpha,\nu}(0; R) = -\frac{R^\nu}{\pi\nu}\, {}_2F_1\left(1, \frac{\nu}{\alpha}; \frac{\nu}{\alpha} + 1; R^\alpha\right). \tag{B.6}$$

Utilizando a equação **15.3.7** da referência (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1972), as propriedades $z\Gamma(z) = \Gamma(z+1)$ e reflexão da função gama (ARFKEN; WEBER, 2005), temos

$$J_C^{\alpha,\nu}(0;R) = -\frac{1}{\alpha}\,\mathrm{cotg}\,\frac{\pi\nu}{2} + \frac{R^{\nu-\alpha}}{\pi(\nu-\alpha)}\,{}_2F_1\left(1, 1-\frac{\nu}{\alpha}; 2-\frac{\nu}{\alpha}; \frac{1}{R^\alpha}\right). \tag{B.7}$$

A seguir, verificaremos que o lado direito da expressão (B.7) pode divergir no limite $R \to \infty$ para alguns valores de ν. Utilizando a representação em série para a função hipergeométrica (ARFKEN; WEBER, 2005), podemos escrever:

$$\frac{R^{\nu-\alpha}}{\nu-\alpha}\,{}_2F_1\left(1, 1-\frac{\nu}{\alpha}; 2-\frac{\nu}{\alpha}; \frac{1}{R^\alpha}\right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{R^{\nu-(k+1)\alpha}}{\nu-(k+1)\alpha}. \tag{B.8}$$

Para verificar a convergência desta série, iremos utilizar o teste da razão:

$$\lim_{k\to\infty}\left|\frac{R^{\nu-\alpha(k+2)}}{R^{\nu-\alpha(k+1)}}\right|\left|\frac{\nu-\alpha(k+1)}{\nu-\alpha(k+2)}\right| = \lim_{k\to\infty} R^{-\alpha}\left|\frac{\nu-\alpha(k+1)}{\nu-\alpha(k+2)}\right| = 0, \text{ para } |R| > 1. \tag{B.9}$$

Contudo, os termos k tais que $\nu-(k+1)\alpha \geqslant 0$ explodem para $R \to \infty$, fazendo com que a série seja divergente. Para contornar este problema, utilizaremos uma estratégia de *regularização* (ZEIDLER, 2009) que consiste em remover os termos divergentes e assim garantir a convergência da série (B.8), fazendo com que o lado direito de (B.7) seja convergente.

Neste trabalho, estamos interessados apenas nos casos $n = 0$ e $n = 2$. Levando em consideração que $\nu = n+1$, a regularização é necessária apenas para $n = 2$, sendo suficiente remover apenas seu primeiro termo, ou seja, $k = 0$. Tomando o limite $R \to \infty$, os termos não-divergentes zeram, e assim temos

$$J_C^{\alpha,1}(0) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{dy}{y^\alpha - 1} = -\frac{1}{\alpha}\,\mathrm{cotg}\,\frac{\pi}{\alpha}, \tag{B.10}$$

$$J_C^{\alpha,3}(0)\big|_{\mathrm{reg}} = \frac{1}{\pi}\lim_{R\to\infty}\left\{\int_0^R \frac{y^2}{y^\alpha-1}\,dy - \frac{R^{3-\alpha}}{3-\alpha}\right\} = -\frac{1}{\alpha}\,\mathrm{cotg}\,\frac{3\pi}{\alpha}, \tag{B.11}$$

e deste modo obtemos

$$J_\alpha^0(0) = 2\lambda^{1-\alpha}\pi \lim_{R\to\infty} J_c^{\alpha,1}(0) = -\frac{2\pi}{\alpha}\lambda^{1-\alpha}\,\mathrm{cotg}\,\frac{\pi}{\alpha}, \tag{B.12}$$

$$J_\alpha^2(0)\big|_{\mathrm{reg}} = 2\lambda^{3-\alpha}\pi \lim_{R\to\infty} J_c^{\alpha,3}(0) = \frac{2\pi}{\alpha}\lambda^{3-\alpha}\,\mathrm{cotg}\,\frac{3\pi}{\alpha}. \tag{B.13}$$

Vamos agora avaliar a integral dada por (B.4). Seguindo o mesmo procedimento feito na equação (A.16) do Apêndice A, após aplicar transformada de Mellin e tomar a mudança de variáveis $t = (y/R)^\alpha$ na integral resultante, obtemos

$$\begin{aligned}\mathcal{M}\left[J_C^{\alpha,\nu}\right](z) &= \frac{\Gamma(z)\cos\pi z/2}{\pi}\int_0^R \frac{y^{\nu-1-z}}{y^\alpha - 1}\,dy \\ &= \frac{\Gamma(z)\cos\pi z/2}{\pi}\frac{R^{\nu-z}}{\alpha}\int_0^1 t^{\frac{\nu-z}{\alpha}-1}(1-tR^\alpha)^{-1}\,dt \\ &= -\frac{\Gamma(z)\cos\pi z/2}{\pi}\frac{R^{\nu-z}}{\nu-z}\,{}_2F_1\left(1,\frac{\nu-z}{\alpha};\frac{\nu-z}{\alpha}+1,R^\alpha\right).\end{aligned} \tag{B.14}$$

No Apêndice A, utilizamos a relação **15.3.7** da referência (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1972). Entretanto, esta relação só é válida para $|\arg(-R)| < \pi$ e assim não pode ser aplicada diretamente no caso $R > 0$. Para contornar esta dificuldade, utilizaremos o conceito de hiperfunções (GRAF, 2010).

Para os cálculos a seguir, consideraremos números complexos cuja parte real é negativa, dada por $-R^\alpha$, e parte imaginária não-nula, de modo que esses números estejam na área de definição em que a relação seja válida e próximos à linha de corte, que neste caso é dada pelo semieixo real negativo do plano complexo.

Vamos começar escrevendo $s_{\epsilon-} \equiv -R^\alpha + i\epsilon$. Utilizando mais uma vez a relação **15.3.7** da referência (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1972), obtemos

$$\begin{aligned}{}_2F_1\left(1,\frac{\delta}{\alpha};\frac{\delta}{\alpha}+1;s_{\epsilon+}\right) =& \frac{\Gamma\left(\delta/\alpha+1\right)\Gamma\left(\delta/\alpha-1\right)}{\left(\Gamma\left(\delta/\alpha+1\right)\right)^2}s_{\epsilon+}^{-1}\,{}_2F_1\left(1,1-\frac{\delta}{\alpha};2-\frac{\delta}{\alpha};s_{\epsilon+}\right) \\ &+\frac{\Gamma\left(\delta/\alpha+1\right)\Gamma\left(\delta/\alpha-1\right)}{(\Gamma(1))^2}s_{\epsilon+}^{-\delta/\alpha}\,{}_2F_1\left(\frac{\delta}{\alpha},0;\frac{\delta}{\alpha};s_{\epsilon+}\right),\end{aligned} \tag{B.15}$$

Usando a propriedade $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ da função Gama e o fato de que que ${}_2F_1(a,0;c;z) = 1$, obtemos

$$\begin{aligned}{}_2F_1\left(1,\frac{\delta}{\alpha};\frac{\delta}{\alpha}+1;s_{\epsilon+}\right) =& \frac{\delta}{\delta-\alpha}s_{\epsilon+}^{-1}\,{}_2F_1\left(1,1-\frac{\delta}{\alpha};2-\frac{\delta}{\alpha};s_{\epsilon+}\right) \\ &+\frac{\delta}{\alpha}\Gamma\left(\delta/\alpha\right)\Gamma\left(1-\delta/\alpha\right)s_{\epsilon+}^{-\delta/\alpha}.\end{aligned} \tag{B.16}$$

O termo $s_{\epsilon+}$ se aproxima da linha de corte, localizada no semieixo real positivo, pelo lado de "cima", de modo que o argumento de $s_{\epsilon+}$ se aproxima de π para $\epsilon \to 0$, ou seja

$$s_{0+} \equiv \lim_{\epsilon\to 0+} s_{\epsilon+} = R^\alpha e^{i\pi}. \tag{B.17}$$

Utilizando a propriedade da reflexão da função Gama, obtemos

$${}_2F_1\left(1,\frac{\delta}{\alpha};\frac{\delta}{\alpha}+1;s_{0+}\right) = -\frac{\delta R^{-\alpha}}{\delta-\alpha}\,{}_2F_1\left(1,1-\frac{\delta}{\alpha};2-\frac{\delta}{\alpha};R^{-\alpha}\right)+\frac{\pi\delta}{\alpha}\frac{e^{-i\pi\delta/\alpha}R^{-\delta}}{\operatorname{sen}(\pi\delta/\alpha)}. \tag{B.18}$$

Por fim, escrevendo a exponencial complexa em sua forma trigonométrica,

$$
\begin{aligned}
{}_2F_1\left(1, \frac{\delta}{\alpha}; \frac{\delta}{\alpha}+1; s_{0+}\right) = -\frac{\delta R^{-\alpha}}{\delta-\alpha}\, {}_2F_1\left(1, 1-\frac{\delta}{\alpha}; 2-\frac{\delta}{\alpha}; R^{-\alpha}\right) + \\
+\frac{\pi\delta}{\alpha}\operatorname{cotg}\left(\frac{\pi\delta}{\alpha}\right) R^{-\delta} - \frac{i\pi\delta}{\alpha} R^{-\delta}.
\end{aligned} \tag{B.19}
$$

Agora, escrevemos $s_{\epsilon-} \equiv -R^{\alpha} - i\epsilon$, com $R > 0$ e $\epsilon > 0$ e seguimos os mesmos passos do caso $s_{\epsilon+}$ até obter

$$
\begin{aligned}
{}_2F_1\left(1, \frac{\delta}{\alpha}; \frac{\delta}{\alpha}+1; s_{\epsilon-}\right) = & \frac{\delta}{\delta-\alpha} s_{\epsilon-}^{-1}\, {}_2F_1\left(1, 1-\frac{\delta}{\alpha}; 2-\frac{\delta}{\alpha}; s_{\epsilon-}\right) \\
& + \frac{\delta}{\alpha}\Gamma\left(\delta/\alpha\right)\Gamma\left(1-\delta/\alpha\right) s_{\epsilon-}^{-\delta/\alpha}.
\end{aligned} \tag{B.20}
$$

O termo $s_{\epsilon-}$, diferente de $s_{\epsilon+}$, se aproxima da linha de corte "por baixo", ou seja, seu argumento aproxima-se de $-\pi$ no limite $\epsilon \to 0$, isto é

$$
s_{0-} \equiv \lim_{\epsilon \to 0-} s_{\epsilon-} = R^{\alpha} e^{-i\pi}, \tag{B.21}
$$

e assim segue que

$$
{}_2F_1\left(1, \frac{\delta}{\alpha}; \frac{\delta}{\alpha}+1; s_{0-}\right) = -\frac{\delta R^{-\alpha}}{\delta-\alpha}\, {}_2F_1\left(1, 1-\frac{\delta}{\alpha}; 2-\frac{\delta}{\alpha}; R^{-\alpha}\right) + \frac{\pi\delta}{\alpha}\frac{e^{i\pi\delta/\alpha} R^{-\delta}}{\operatorname{sen}(\pi\delta/\alpha)}, \tag{B.22}
$$

de onde obtemos, por fim,

$$
\begin{aligned}
{}_2F_1\left(1, \frac{\delta}{\alpha}; \frac{\delta}{\alpha}+1; s_{0-}\right) = -\frac{\delta R^{-\alpha}}{\delta-\alpha}\, {}_2F_1\left(1, 1-\frac{\delta}{\alpha}; 2-\frac{\delta}{\alpha}; R^{-\alpha}\right) + \\
+\frac{\pi\delta}{\alpha}\operatorname{cotg}\left(\frac{\pi\delta}{\alpha}\right) R^{-\delta} + \frac{i\pi\delta}{\alpha} R^{-\delta}.
\end{aligned} \tag{B.23}
$$

Assim, para $R > 0$, temos

$$
\begin{aligned}
{}_2F_1\left(1, \frac{\delta}{\alpha}; \frac{\delta}{\alpha}+1; R^{\alpha}\right) &= \lim_{\epsilon \to 0+} \frac{{}_2F_1\left(1, \frac{\delta}{\alpha}; \frac{\delta}{\alpha}+1; s_{\epsilon+}\right) + {}_2F_1\left(1, \frac{\delta}{\alpha}; \frac{\delta}{\alpha}+1; s_{\epsilon-}\right)}{2} \\
&= -\frac{\delta}{\delta-\alpha} R^{-\alpha}\, {}_2F_1\left(1, 1-\frac{\delta}{\alpha}; 2-\frac{\delta}{\alpha}; R^{-\alpha}\right) + \frac{\pi\delta}{\alpha}\operatorname{cotg}\left(\frac{\pi\delta}{\alpha}\right),
\end{aligned} \tag{B.24}
$$

e assim podemos expressar a equação (B.14) da seguinte forma

$$
\begin{aligned}
\mathcal{M}\left[J_C^{\alpha,\nu}\right](z) = \frac{\Gamma(z)\cos(\pi z/2)}{\pi(\nu-z)} R^{\nu-z} \Bigg[\frac{\nu-z}{\nu-z-\alpha} R^{-\alpha}\, {}_2F_1\left(1, 1-\frac{\nu-z}{\alpha}; 2-\frac{\nu-z}{\alpha}; R^{-\alpha}\right) - \\
-\frac{\pi(\nu-z)}{\alpha}\operatorname{cotg}\pi\left(\frac{\nu-z}{\alpha}\right)\Bigg].
\end{aligned} \tag{B.25}
$$

Usando as seguintes relações:

- $\operatorname{sen}\dfrac{(1-z)\pi}{2} = \cos\dfrac{\pi z}{2}$;
- $2\cos\dfrac{\pi z}{2}\cos\dfrac{(1-\nu)\pi}{2} = \operatorname{sen}\left[\dfrac{(\nu-z)}{\alpha} + \dfrac{(1-z)}{2}\right] - \operatorname{sen}\left[\dfrac{(\nu-z)}{\alpha} - \dfrac{(1-z)}{2}\right]$;
- $\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \dfrac{\pi}{\operatorname{sen}\pi z}$;

podemos escrever (B.14) na forma

$$\mathcal{M}\left[J_C^{\alpha,\nu}\right](z) = G_c(z) + G_R(z), \tag{B.26}$$

com as funções G_c e G_R definidas por

$$\begin{aligned} G_c(z) =& \frac{\Gamma(z)}{2\alpha}\frac{\Gamma(\nu/\alpha - z/\alpha)\Gamma(1-\nu/\alpha+z/\alpha)}{\Gamma((2\nu-\alpha)/2\alpha-(2-\alpha)z/2\alpha)\Gamma(1-(2\nu-\alpha)/2\alpha+(2-\alpha)z/2\alpha)} \\ &-\frac{\Gamma(z)}{2\alpha}\frac{\Gamma(\nu/\alpha - z/\alpha)\Gamma(1-\nu/\alpha+z/\alpha)}{\Gamma((2\nu+\alpha)/2\alpha-(2+\alpha)z/2\alpha)\Gamma(1-(2\nu+\alpha)/2\alpha+(2+\alpha)z/2\alpha)}, \end{aligned} \tag{B.27}$$

$$G_R(z) = \frac{R^{\nu-\alpha-z}}{\nu-\alpha-z}\frac{\Gamma(z)}{\Gamma\left((1-z)/2\right)\Gamma\left(1-(1-z)/2\right)}\,{}_2F_1\left(1, 1-\frac{\nu-z}{\alpha}; 2-\frac{\nu-z}{\alpha}; R^{-\alpha}\right). \tag{B.28}$$

Aplicando a transformada de Mellin inversa às equações (B.27) e (B.28), obtemos as expressões

$$\begin{aligned} \mathcal{M}^{-1}\left[G_c\right](\omega) =& -\frac{1}{\alpha}H_{2,3}^{2,1}\left[\omega\left|\begin{matrix}\left(1-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(1-\frac{1}{2}-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{2}\right)\\ (0,1),\left(1-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(1-\frac{1}{2}-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{2}\right)\end{matrix}\right.\right] \\ &+\frac{1}{\alpha}H_{2,3}^{2,1}\left[\omega\left|\begin{matrix}\left(1-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(1+\frac{1}{2}-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}-\frac{1}{2}\right)\\ (0,1),\left(1-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(1+\frac{1}{2}-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}-\frac{1}{2}\right)\end{matrix}\right.\right], \end{aligned} \tag{B.29}$$

e

$$\mathcal{M}^{-1}\left[G_R\right](\omega) = \frac{1}{2\pi i}\int_{C-i\infty}^{C+i\infty}\omega^{-z}\frac{R^{\nu-\alpha-z}}{\nu-\alpha-z}\frac{\Gamma(z)\,{}_2F_1\left(1,1-\frac{\nu-z}{\alpha};2-\frac{\nu-z}{\alpha};R^{-\alpha}\right)}{\Gamma(\frac{1}{2}-\frac{z}{2})\Gamma(\frac{1}{2}+\frac{z}{2})}\,d\omega. \tag{B.30}$$

O próximo passo é tomar o limite $R \to \infty$. A discussão que se segue é exatamente a mesma que foi feita no Apêndice A, portanto não a repetiremos aqui. Segue-se, por fim, que o resultado da integral dada por (B.4) é dado em termos de funções H de Fox, conforme a seguinte expressão

$$\begin{aligned} J_C^{\alpha,\nu}(\omega) &= \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{y^{\nu-1}\cos\omega y}{y^\alpha - 1}dy \\ &= -\frac{1}{2\alpha}H_{2,3}^{2,1}\left[\omega\left|\begin{matrix}\left(1-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(1-\frac{1}{2}-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{2}\right)\\ (0,1),\left(1-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(1-\frac{1}{2}-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{2}\right)\end{matrix}\right.\right] \\ &\quad +\frac{1}{2\alpha}H_{2,3}^{2,1}\left[\omega\left|\begin{matrix}\left(1-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(1+\frac{1}{2}-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}-\frac{1}{2}\right)\\ (0,1),\left(1-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(1+\frac{1}{2}-\frac{\nu}{\alpha},\frac{1}{\alpha}-\frac{1}{2}\right)\end{matrix}\right.\right]. \end{aligned} \tag{B.31}$$

Para avaliar corretamente o valor da integral (B.1), é importante observar que a utilização da técnica da transformada de Mellin faz com que o resultado seja válido apenas para valores positivos de x. No entanto, levando em conta a paridade de $J^{2m}(x)$, este resultado pode ser estendido ao conjunto dos reais negativos utilizando o valor absoluto e, deste modo, obtemos

$$\begin{aligned} J_\alpha^{2m}(x) = \frac{(-1)^m\pi}{\alpha\hbar^{2m}\lambda^{\alpha-(2m+1)}}\Bigg\{ &-H_{2,3}^{2,1}\left[|x|\left|\begin{matrix}\left(1-\frac{2m+1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(\frac{1}{2}-\frac{2m+1}{\alpha},\frac{2+\alpha}{2\alpha}\right)\\ (0,1),\left(1-\frac{2m+1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(\frac{1}{2}-\frac{2m+1}{\alpha},\frac{2+\alpha}{2\alpha}\right)\end{matrix}\right.\right] \\ &+H_{2,3}^{2,1}\left[|x|\left|\begin{matrix}\left(1-\frac{2m+1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(\frac{3}{2}-\frac{2m+1}{\alpha},\frac{2-\alpha}{2\alpha}\right)\\ (0,1),\left(1-\frac{2m+1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),\left(\frac{3}{2}-\frac{2m+1}{\alpha},\frac{2-\alpha}{2\alpha}\right)\end{matrix}\right.\right]\Bigg\}. \end{aligned} \tag{B.32}$$

Utilizando as propriedades (1.39) e (1.38), apresentadas na Seção 1.3, podemos reescrever os termos dados pelas funções H de Fox, obtendo

$$\begin{aligned} J_\alpha^{2m}(x) = \frac{(-1)^m\pi\hbar}{\lambda^\alpha|x|^{2m+1}}\Bigg\{ &-H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha\left|\begin{matrix}(1,1),\left(1-m,\frac{2+\alpha}{2}\right)\\ (2m+1,\alpha),(1,1),\left(1+m,\frac{2+\alpha}{2}\right)\end{matrix}\right.\right]+ \\ &+H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha\left|\begin{matrix}(1,1),\left(1-m,\frac{2-\alpha}{2}\right)\\ (2m+1,\alpha),(1,1),\left(1-m,\frac{2-\alpha}{2}\right)\end{matrix}\right.\right]\Bigg\}. \end{aligned} \tag{B.33}$$

Agora iremos avaliar a integral (B.1) para o caso ímpar. Novamente tomando a mudança de variáveis $p = \lambda y$, com $\lambda > 0$, obtemos

$$\int_0^\infty \frac{p^n \operatorname{sen}\left(\frac{px}{\hbar}\right)}{p^\alpha - \lambda^\alpha}\, dp = \lambda^{n-\alpha+1} \lim_{R\to\infty} \int_0^R \frac{y^n \operatorname{sen}\left(\frac{\lambda x}{\hbar} y\right)}{y^\alpha - 1}\, dy, \tag{B.34}$$

e a partir daí definimos a integral

$$J_S^{\alpha,\nu}(\omega; R) = \frac{1}{\pi} \int_0^R \frac{y^{\nu-1} \operatorname{sen} \omega y}{y^\alpha - 1}\, dy, \tag{B.35}$$

para $\omega \geqslant 0$. Segue-se de imediato da definição de (B.2) que $J_S^{\alpha,2k}(0; R) = 0$.

Aplicando transformada de Mellin à equação (B.35) e seguindo os mesmos passos do cálculo para o caso par, chegamos até a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}\mathcal{M}\left[J_S^{\alpha,\nu}\right](z) = \frac{\Gamma(z)\operatorname{sen}(\pi z/2)}{\pi(\nu - z)} R^{\nu-z} \Bigg[&\frac{\nu - z}{\nu - z - \alpha} R^{-\alpha}\, {}_2F_1\left(1, 1 - \frac{\nu - z}{\alpha}; 2 - \frac{\nu - z}{\alpha}; R^{-\alpha}\right) \\ &- \frac{\pi(\nu - z)}{\alpha} \operatorname{cotg} \pi \left(\frac{\nu - z}{\alpha}\right)\Bigg].\end{aligned} \tag{B.36}$$

Utilizando a relação $2\cos\alpha \operatorname{sen}\beta = \operatorname{sen}(\alpha + \beta) - \operatorname{sen}(\alpha - \beta)$, segue

$$\begin{aligned}\mathcal{M}\left[J_S^{\alpha,\nu}\right](z) =& \frac{R^{\nu-\alpha-z}}{\nu - \alpha - z} \frac{\Gamma(z)}{\Gamma(z/2)\,\Gamma(1 - z/2)}\, {}_2F_1\left(1, 1 - \frac{\nu - z}{\alpha}; 2 - \frac{\nu - z}{\alpha}; R^{-\alpha}\right) \\ &- \frac{\Gamma(z)}{2\alpha} \frac{\Gamma(\nu/\alpha - z/\alpha)\Gamma(1 - \nu/\alpha + z/\alpha)}{\Gamma(\nu/\alpha - (2 - \alpha)z/2\alpha)\Gamma(1 - \nu/\alpha + (2 - \alpha)z/2\alpha)} \\ &+ \frac{\Gamma(z)}{2\alpha} \frac{\Gamma(\nu/\alpha - z/\alpha)\Gamma(1 - \nu/\alpha + z/\alpha)}{\Gamma(\nu/\alpha - (2 + \alpha)z/2\alpha)\Gamma(1 - \nu/\alpha + (2 + \alpha)z/2\alpha)}.\end{aligned} \tag{B.37}$$

O procedimento todo do cálculo da integral é idêntico ao do caso par e por este motivo seguiremos diretamente ao resultado, já tomando o limite $R \to \infty$, ou seja,

$$\begin{aligned}\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{y^{\nu-1} \operatorname{sen} \omega y}{y^\alpha - 1} dy =& -\frac{1}{2\alpha} H_{2,3}^{2,1}\left[\omega \,\middle|\, \begin{array}{c} \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right), \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{2}\right) \\ (0, 1), \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right), \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{2}\right) \end{array}\right] \\ &+ \frac{1}{2\alpha} H_{2,3}^{2,1}\left[\omega \,\middle|\, \begin{array}{c} \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right), \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha} - \frac{1}{2}\right) \\ (0, 1), \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right), \left(1 - \frac{\nu}{\alpha}, \frac{1}{\alpha} - \frac{1}{2}\right) \end{array}\right].\end{aligned} \tag{B.38}$$

Novamente, o fato de havermos utilizado a técnica das transformadas de Mellin torna os resultados, a princípio, válidos apenas para $x > 0$. Contudo, observando que $J_\alpha^{2m+1}(x)$ é uma função ímpar, podemos estender este resultado ao domínio $x < 0$ por meio da função sinal. Segue-se das propriedades (1.39), (1.38) e (1.41) do Seção 1.3 que

$$J_\alpha^{2m+1}(x) = -\frac{\pi\hbar\,\mathrm{sgn}(x)}{\lambda^\alpha |x|^{2m+2}} \left\{ -H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), \left(1+m, \dfrac{2+\alpha}{2}\right) \\ (2m+2,\alpha), (1,1), \left(1+m, \dfrac{2+\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right] + H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), \left(1-m, \dfrac{2-\alpha}{2}\right) \\ (2m+2,\alpha), (1,1), \left(1-m, \dfrac{2-\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right] \right\}. \tag{B.39}$$

Por fim, vamos encontrar a expressão de (B.1) para $n = 0$ e $n = 1$, que utilizaremos para encontrar as soluções de espalhamentos para os potenciais delta e derivada da função delta.

$$J_\alpha^0(x) = 2\int_0^\infty \frac{\cos(px/\hbar)}{p^\alpha - \lambda^\alpha}\, dp = \frac{\pi\hbar}{\lambda^\alpha |x|} \left\{ -H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), \left(1, \dfrac{2+\alpha}{2}\right) \\ (1,\alpha), (1,1), \left(1, \dfrac{2+\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right] + H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), \left(1, \dfrac{2-\alpha}{2}\right) \\ (1,\alpha), (1,1), \left(1, \dfrac{2-\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right] \right\}. \tag{B.40}$$

$$J_\alpha^1(x) = -2\int_0^\infty \frac{\mathrm{sen}(px/\hbar)}{p^\alpha - \lambda^\alpha}\, dp = \frac{\pi\hbar}{\lambda^\alpha |x|^2} \left\{ H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), \left(1, \dfrac{2+\alpha}{2}\right) \\ (2,\alpha), (1,1), \left(1, \dfrac{2+\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right] - H_{2,3}^{2,1}\left[\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (1,1), \left(1, \dfrac{2-\alpha}{2}\right) \\ (2,\alpha), (1,1), \left(1, \dfrac{2-\alpha}{2}\right) \end{matrix} \right] \right\}. \tag{B.41}$$

Para o caso particular em que $\alpha = 2$ e $D_2 = 1/2m$, utilizando as (1.39) e (1.41) do Apêndice 1.3 e a identidade **1.136** da referência (MATHAI; SAXENA; HAUBOLD, 2009), obtemos

$$H_{2,3}^{2,1}\left[\omega^2 \left| \begin{array}{c} (1,1),(1,2) \\ (1,2),(1,1),(1,2) \end{array} \right. \right] = \omega^2 H_{1,2}^{1,1}\left[\omega^2 \left| \begin{array}{c} (0,1) \\ (0,1),(-1,2) \end{array} \right. \right] = \omega^2 E_{2,2}\left(-\omega^2\right) = \omega \operatorname{sen}\omega,$$

$$H_{2,3}^{2,1}\left[\omega^2 \left| \begin{array}{c} (1,1),(1,2) \\ (2,2),(1,1),(1,2) \end{array} \right. \right] = \omega^2 H_{1,2}^{1,1}\left[\omega^2 \left| \begin{array}{c} (0,1) \\ (0,1),(0,2) \end{array} \right. \right] = \omega^2 E_{2,1}\left(-\omega^2\right) = \omega^2 \cos\omega,$$

sendo $E_{\alpha,\beta}(z)$ a função de Mittag-Leffler de dois parâmetros.

Além disso, os polos da função da Gama fazem com que

$$H_{2,3}^{2,1}\left[\omega^2 \left| \begin{array}{c} (1,1),(1,0) \\ (1,2),(1,1),(1,0) \end{array} \right. \right] = 0, \tag{B.42}$$

$$H_{2,3}^{2,1}\left[\omega^2 \left| \begin{array}{c} (1,1),(1,0) \\ (2,2),(1,1),(1,0) \end{array} \right. \right] = 0. \tag{B.43}$$

Substituindo essas expressões, recuperamos os resultados já estabelecidos na literatura

$$J_2^0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{p^2 - \lambda^2}\, dp = -\frac{\pi}{\lambda} \operatorname{sen}\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right), \tag{B.44}$$

$$J_2^1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{ip}{\hbar}\right) \frac{\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)}{p^2 - \lambda^2}\, dp = \frac{\pi}{\hbar} \cos\left(\frac{\lambda|x|}{\hbar}\right). \tag{B.45}$$

APÊNDICE C

Cálculo dos coeficientes da aproximação para λ no caso $1 < \alpha < 1.5$

Na subseção 4.1.3, buscamos uma aproximação para os autovalores λ do problema de estado ligado, dados pela equação (4.40), a partir de uma expansão em série de potências em torno de $\alpha = 4/3$. Para fins de completeza, iremos repetir aqui alguns resultados já deduzidos na subseção 4.1.3.

Escrevendo $\alpha = 4/3 - \epsilon$, sendo ϵ um valor real, a equação (4.40) toma a seguinte forma:

$$\lambda^{1/3}(1 + B_0\lambda^{4/3+2\epsilon}) + A_0\lambda^{\epsilon} = 0, \tag{C.1}$$

conforme visto na equação (4.74). Substituindo as expressões (4.72), (4.73), (4.59), (4.60), (4.75) e (4.76) na equação (4.74) e agrupando os termos de mesma ordem, obtemos uma equação na forma

$$\Lambda_0 + \Lambda_1\epsilon + \Lambda_2\epsilon^2 + \Lambda_3\epsilon^3 + \Lambda_4\epsilon^4 + \mathcal{O}(\epsilon^5), \tag{C.2}$$

de onde segue-se que:

$$0 = \Lambda_0 = \frac{3a_0}{2\sqrt{2}} + \lambda_0^{1/3} - \frac{9b_0^2\lambda_0^{5/3}}{8}, \tag{C.3}$$

$$\begin{aligned} 0 = \Lambda_1 = {} & \frac{27a_0}{32\sqrt{2}}\left(\frac{4}{3} + \pi\right) + \frac{\lambda_1}{3\lambda_0^{2/3}}\left(1 - \frac{9b_0^2\lambda_0^{4/3}}{8}\right) + \frac{3a_0\ln\lambda_0}{2\sqrt{2}} \\ & - \frac{3b_0^2\lambda_0^{2/3}\lambda_1}{2} + \lambda_0^{5/3}\left[\frac{162b_0^2}{128}\left(-\frac{4}{3} + \pi\right) - \frac{9b_0^2\ln\lambda_0}{4}\right], \end{aligned} \tag{C.4}$$

$$
\begin{aligned}
0 = \Lambda_2 = {} & \frac{27a_0(32 + 48\pi + 27\pi^2)}{1024\sqrt{2}} + \frac{3\lambda_1}{\lambda_0} - \frac{(-8 + 9b_0^2)(\lambda_1^2 + 6\lambda_0\lambda_2)}{36\lambda_0^{2/3}} + \frac{9\ln^2\lambda_0}{2} \\
& + \frac{\lambda_0^{1/3}\lambda_1[27b_0^2(-4 + 3\pi) + 128\ln\lambda_0]}{48} \\
& + \frac{\lambda_0^{1/3}[-243b_0^2(4 - 6\pi + 9\pi^2)\lambda_0 + 1024\lambda_1 + 1024\lambda_0\ln^2\lambda_0]}{512}
\end{aligned}
\tag{C.5}
$$

$$
\begin{aligned}
0 = \Lambda_3 = {} & \frac{1}{2654208}\left\{\frac{243\sqrt{2}a_0[27(128 + 288\pi + 324\pi^2 + 99\pi^3)\lambda_0^2 - 4096\lambda_1^2}{\lambda_0^2}\right. \\
& + \frac{512\lambda_0(3(4 + 3\pi)\lambda_1 + 16\lambda_2)]}{\lambda_0^2} + \frac{4[8192(5\lambda_1^3 - 18\lambda_0\lambda_1\lambda_2 + 27\lambda_0^2\lambda_3)}{\lambda_0^{8/3}} \\
& + \frac{9b_0^2\lambda_0^{4/3}(2187(-64 + 144\pi(-432)\pi^2 + 261\pi^3)\lambda_0^3 + 5120\lambda_1^3}{\lambda_0^{8/3}} \\
& + \frac{1152\lambda_0\lambda_1(3(-7615\pi)\lambda_1 - 80\lambda_2) - 432\lambda_0^2(9(124 - 138\pi\lambda_1 + 135\pi^2)}{\lambda_0^{8/3}} \\
& + \frac{864\lambda_2 - 360\pi\lambda_2 + 320\lambda_3))]}{\lambda_0^{8/3}} + \frac{1296[3\sqrt{2}a_0(9(32 + 48\pi 27\pi^2)\lambda_0}{\lambda_0} \\
& + \frac{27\pi^2)\lambda_0 + 512\lambda_1) - 8b_0^2\lambda_0^{2/3}(243(4 - 6\pi + 9\pi^2)\lambda_0^2 216(12 - 5\pi)\lambda_0\lambda_1}{\lambda_0} \\
& + 62208[3\sqrt{2}a_0(4 + 3\pi) - 4b_0^2\lambda_0^{2/3}(9(4 - 3\pi)\lambda_0 - 40\lambda_1)]\log^2\lambda_0 \\
& \left. + 331776(\sqrt{2}a_0 - 12b_0^2\lambda_0^{5/3})\log^3\lambda_0\right\},
\end{aligned}
\tag{C.6}
$$

$$
\begin{aligned}
0 = \Lambda_4 = {} & \frac{a_0}{1048576\sqrt{2}\lambda_0^3}\big\{243(2048 + 6144\pi + 10368\pi^2 + 6336\pi^3 + 1539\pi^4)\lambda_0^3 \\
& + \ 524288\lambda_1^3 - 49152\lambda_0\lambda_1\left[(-4 + 9\pi)\lambda_1 + 32\lambda_2\right] + 3072\lambda_0^2\left[9(32 + 48\pi\right. \\
& \left. + \ 27\pi^2)\lambda_1 + 96(4 + 3\pi)\lambda_2 + 512\lambda_3\right]\big\} + \frac{10\lambda_1^4 - 45\lambda_0\lambda_1^2\lambda_2 + 54\lambda_0^2\lambda_1\lambda_3}{243\lambda_0^{11/3}} \\
& + \frac{27\lambda_0^2(\lambda_2^2 - 3\lambda_0\lambda_4)}{243\lambda_0^{11/3}} - \frac{98415b_0^2\lambda_0^4(16 - 48\pi + 216\pi^2 - 261\pi^3 + 162\pi^4)}{884736\lambda_0^{7/3}} \\
& - \frac{20480b_0^2\lambda_1^4 + 4608b_0^2\lambda_0\lambda_1^2[(4 + 15\pi)b_0^2\lambda_1 - 40\lambda_2]}{884736\lambda_0^{7/3}} \\
& + \frac{1728b_0^2\lambda_0^2}{884736\lambda_0^{7/3}}[9(412 - 258\pi + 135\pi^2)\lambda_1^2 - 48(-76 + 15\pi)\lambda_1\lambda_2 + 320\lambda_2^2 \\
& + 640\lambda_1\lambda_3] - \frac{324b_0^2\lambda_0^3}{884736\lambda_0^{7/3}}\left[27(-704 + 1296\pi - 3024\pi^2 + 1305\pi^3)\lambda_1\right] \\
& - \frac{16b_0^2}{884736\lambda_0^{7/3}}[9(124\lambda_3 - 138\pi + 135\pi^2)\lambda_2 + 864\lambda_3 - 360\pi\lambda_3 + 320\lambda_4] \\
& + \frac{\ln\lambda_0}{294912}\Big\{27\sqrt{2}a_0[27(128 + 288\pi + 324\pi^2 + 99\pi^3)\lambda_0^2 - 4096\lambda_1^2 \\
& + 512\lambda_0(3(4 + 3\pi)\lambda_1 + 16\lambda_2)] + 8b_0^2\lambda_0^{2/3}[2187(-64 + 144\pi - 432\pi^2 \\
& + 261\pi^3)\lambda_0^3 + 5120\lambda_1^3 + 1152\lambda_0\lambda_1(3(-76 + 15\pi)\lambda_1 - 80\lambda_2) \\
& -432\lambda_0^2(9(124 - 138\pi + 135\pi^2)\lambda_1 + 864\lambda_2 - 360\pi\lambda_2 + 320\lambda_3)]\Big\} \\
& + \frac{\ln^2\lambda_0}{4096\lambda_0}\Big\{3\sqrt{2}a_0[9(32 + 48\pi + 27\pi^2)\lambda_0 + 512\lambda_1] - 16b_0^2\lambda_0^{2/3}[243(4 \\
& - 6\pi + 9\pi^2)\lambda_0^2 + 216(12 - 5\pi)\lambda_0\lambda_1 + 320\lambda_1^2 + 960\lambda_0\lambda_2]\Big\} \\
& + \frac{\ln^3\lambda_0}{128}\Big\{3\sqrt{2}a_0(4 + 3\pi) + 8b_0^2\lambda_0^{2/3}[9(-4 + 3\pi)\lambda_0 - 40\lambda_1]\Big\} \\
& + \frac{\ln^4\lambda_0}{32}(\sqrt{2}a_0 - 24b_0^2\lambda_0^{5/3}).
\end{aligned}
\tag{C.7}
$$

A equação (C.3) fornece o valor de λ_0; substituindo o valor encontrado na equação (C.4), determinamos o valor de λ_1, e assim sucessivamente nas equações subsequentes até determinar os valores de todos os coeficientes λ_i, para $i = 1, 2, 3, 4$. Devemos observar, entretanto, que a equação (C.3) é polinomial de quinto grau na variável $\lambda_0^{1/3}$, o que inviabiliza a obtenção de uma expressão fechada para o coeficiente λ_0 em termos os parâmetros a_0 e b_0. Ainda assim, é possível verificar a existência de soluções positivas para

$\lambda_0^{1/3}$ na equação. Tomando $\omega = \lambda_0^{1/3}$, obtemos:

$$-\frac{9b_0^2}{8}\omega^5 + \omega + \frac{3a_0}{2\sqrt{2}} = 0. \tag{C.8}$$

Do teorema fundamental da álgebra, segue-se que pelo menos uma de suas raízes é real. Usando a relação de Girard a seguir, obtemos

$$\omega_1\ \omega_2\ \omega_3\ \omega_4\ \omega_5 = \frac{4a_0}{3\sqrt{2}b_0^2}. \tag{C.9}$$

Desta relação segue que o produto entre suas raízes acompanha o sinal do parâmetro a_0; assim, se $a_0 > 0$, ao menos uma de suas raízes é positiva. Logo, para $a_0 > 0$ sempre existe um valor positivo para $\lambda_0 = \omega^3$.

Os demais coeficientes λ_1, λ_2, λ_3 e λ_4 serão calculados em função dos parâmetros a_0, b_0 e λ_0. Segue-se, então, que

$$\lambda_0 = \left[\frac{2(4 + 3\sqrt{2}a_0)}{-8 + 9b_0^2}\right]^{3/4}, \tag{C.10}$$

$$\lambda_1 = \frac{9\lambda_0^{2/3}[3\sqrt{2}a_0(4 + 3\pi) + 9b_0^2(-4 + 3\pi)\lambda_0^{5/3} + 16(\sqrt{2}a_0 - 3b_0^2\lambda_0^{5/3})\ln\lambda_0]}{8(-8 + 45b_0^2\lambda_0^{4/3})} \tag{C.11}$$

$$\begin{aligned}
\lambda_2 = {} & \frac{9\lambda_0^{1/3}}{256\left(8 - 45b_0^2\lambda_0^{4/3}\right)^3}\Big\{9[24a_0^2(4 + 3\pi)(160 - 540b_0^2\lambda_0^{4/3} + 3\pi(8 + 45b_0^2\lambda_0^{4/3})) \\
& + \ 36b_0^2\lambda_0^2(256 + 960b_0^2\lambda_0^{4/3} - 9180b_0^4\lambda_0^{8/3} + 6\pi(-64 - 48b_0^2\lambda_0^{4/3} + 1215b_0^4\lambda_0^{8/3}) \\
& + \ 9\pi^2(64 - 576b_0^2\lambda_0^{4/3} + 1485b_0^4\lambda_0^{8/3})) - \sqrt{2}a_0\lambda_0^{1/3}(48\pi(8 - 45b_0^2\lambda_0^{4/3})^2 \\
& + \ 32(64 + 1440b_0^2\lambda_0^{4/3} - 6885b_0^4\lambda_0^{8/3}) + 27\pi^2(64 - 1392b_0^2\lambda_0^{4/3} + 3645b_0^4\lambda_0^{8/3})] \\
& + \ 96[-\sqrt{2}a_0\lambda_0^{1/3}(256 + 9792b_0^2\lambda_0^{4/3} - 37260b_0^4\lambda_0^{8/3} + 3\pi(8 - 45b_0^2\lambda_0^{4/3})^2) \\
& + \ 72a_0^2(32 - 60b_0^2\lambda_0^{4/3} + \pi(8 + 45b_0^2\lambda_0^{4/3})) + 6b_0^2\lambda_0^2(4(64 + 432b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
& - \ 2835b_0^4\lambda_0^{8/3}) - 3\pi(64 + 144b_0^2\lambda_0^{4/3} - 1215b_0^4\lambda_0^{8/3}))]\ln\lambda_0 \\
& + \ 256[24a_0^2(8 + 45b_0^2\lambda_0^{4/3}) + 6b_0^2\lambda_0^2(64 + 144b_0^2\lambda_0^{4/3} - 1215b_0^4\lambda_0^{8/3}) \\
& + \sqrt{2}a_0\lambda_0^{1/3}(-64 - 1296b_0^2\lambda_0^{4/3} + 2835b_0^4\lambda_0^{8/3})]\ln\lambda_0^2\Big\},
\end{aligned} \tag{C.12}$$

$$
\begin{aligned}
\lambda_3 =& \frac{3}{4096\lambda_0^{2/3}(-8+45b_0^2\lambda_0^{4/3})^4}\Big\{81[48\sqrt{2}a_0^3(4+3\pi)(16(4288-15840b_0^2\lambda_0^{4/3}\\
&+\ 2025b_0^4\lambda_0^{8/3})-480\pi(-32-612b_0^2\lambda_0^{4/3}+2025b_0^4\lambda_0^{8/3})+9\pi^2(64\\
&+\ 5760b_0^2\lambda_0^{4/3}+14175b_0^4\lambda_0^{8/3}))-24a_0^2\lambda_0^{1/3}(-768\pi(-704+3312b_0^2\lambda_0^{4/3}\\
&-\ 9315b_0^4\lambda_0^{8/3}+18225b_0^6\lambda_0^4)+81\pi^3(512-10944b_0^2\lambda_0^{4/3}-29160b_0^4\lambda_0^{8/3}\\
&+\ 127575b_0^6\lambda_0^4)+512(640+11808b_0^2\lambda_0^{4/3}-96390b_0^4\lambda_0^{8/3}+164025b_0^6\lambda_0^4)\\
&-\ 36\pi^2(-8704+160704b_0^2\lambda_0^{4/3}-515160b_0^4\lambda_0^{8/3}+236925b_0^6\lambda_0^4))\\
&+\ 12b_0^2\lambda_0^{7/3}(3456\pi^2(-512+4800b_0^2\lambda_0^{4/3}-15336b_0^4\lambda_0^{8/3}+1215b_0^6\lambda_0^4\\
&+\ 54675b_0^8\lambda_0^{16/3})+144\pi(4096+33792b_0^2\lambda_0^{4/3}-210816b_0^4\lambda_0^{8/3}\\
&-\ 719280b_0^6\lambda_0^4+3225825b_0^8\lambda_0^{16/3})-64(4096+55296b_0^2\lambda_0^{4/3}-235008b_0^4\lambda_0^{8/3}\\
&-2021760b_0^6\lambda_0^4+7490475b_0^8\lambda_0^{16/3})+9\pi^3(118784-1677312b_0^2\lambda_0^{4/3}\\
&+\ 9030528b_0^4\lambda_0^{8/3}-20645280b_0^6\lambda_0^4+17878725b_0^8\lambda_0^{16/3}))\\
&+\ \sqrt{2}a_0\lambda_0^{2/3}(-576\pi(-2048+57600b_0^2\lambda_0^{4/3}+35424b_0^4\lambda_0^{8/3}-1958580b_0^6\lambda_0^4\\
&+\ 4319325b_0^8\lambda_0^{16/3})-324\pi^2(-4096+19456b_0^2\lambda_0^{4/3}+850176b_0^4\lambda_0^{8/3}\\
&-\ 5851440b_0^6\lambda_0^4+101513325b_0^8\lambda_0^{16/3})+256(2048+135936b_0^2\lambda_0^{4/3}\\
&+\ 189216b_0^4\lambda_0^{8/3}-7741980b_0^6\lambda_0^4+19190925b_0^8\lambda_0^{16/3})-9\pi^3(-45056\\
&-\ 728064b_0^2\lambda_0^{4/3}+7029504b_0^4\lambda_0^{8/3}-32484240b_0^6\lambda_0^4+40514175b_0^8\lambda_0^{16/3}))]\\
&+\ 432[144\sqrt{2}a_0^3(29696+46080b_0^2\lambda_0^{4/3}-421200b_0^4\lambda_0^{8/3}+9\pi^2(64\\
&+\ 5760b_0^2\lambda_0^{4/3}+14175b_0^4\lambda_0^{8/3})-24\pi(-448-10080b_0^2\lambda_0^{4/3}+22275b_0^4\lambda_0^{8/3}))\\
&-\ 24a_0^2\lambda_0^{1/3}(-96\pi(-1280+2304b_0^2\lambda_0^{4/3}-21060b_0^4\lambda_0^{8/3}+54675b_0^6\lambda_0^4)\\
&+\ 32(4096+96192b_0^2\lambda_0^{4/3}-537840b_0^4\lambda_0^{8/3}+564975b_0^6\lambda_0^4)\\
&+\ 9\pi^2(2560-38592b_0^2\lambda_0^{4/3}-119880b_0^4\lambda_0^{8/3}+564975b_0^6\lambda_0^4))\\
&+\ 72b_0^2\lambda_0^{7/3}(9\pi^2(-4096+18432b_0^2\lambda_0^{4/3}+93312b_0^4\lambda_0^{8/3}-933120b_0^6\lambda_0^4\\
&+\ 1804275b_0^8\lambda_0^{16/3})+6\pi(4096+73728b_0^2\lambda_0^{4/3}-383616b_0^4\lambda_0^{8/3}-466560b_0^6\lambda_0^4\\
&+\ 2788425b_0^8\lambda_0^{16/3})-4(4096+110592b_0^2\lambda_0^{4/3}-438912b_0^4\lambda_0^{8/3}-2410560b_0^6\lambda_0^4
\end{aligned}
\tag{C.13}
$$

$$
\begin{aligned}
&+\ 8912025b_0^8\lambda_0^{16/3})) + \sqrt{2}a_0\lambda_0^{2/3}(-192\pi(-1024 + 35712b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&+\ 198288b_0^4\lambda_0^{8/3} - 1917270b_0^6\lambda_0^4 + 3116475b_0^8\lambda_0^{16/3}) \\
&+ 128(1024 + 148608b_0^2\lambda_0^{4/3} + 289008b_0^4\lambda_0^{8/3} - 7064010b_0^6\lambda_0^4 + 14926275b_0^8\lambda_0^{16/3}) \\
&-\ 27\pi^2(-4096 - 101376b_0^2\lambda_0^{4/3} + 2778624b_0^4\lambda_0^{8/3} - 12655440b_0^6\lambda_0^4 \\
&+\ 15910425b_0^8\lambda_0^{16/3}))] \ln\lambda_0 + 2304[144\sqrt{2} + a_0^3(1792 + 40320b_0^2\lambda_0^{4/3} - \ 89100b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&+ 3\pi(64 + 5760b_0^2\lambda_0^{4/3} + 14175b_0^4\lambda_0^{8/3})) - 216a_0^2\lambda_0^{1/3}(2048 + 45312b_0^2\lambda_0^{4/3} - 82080b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&-\ 170100b_0^6\lambda_0^4 + \pi(512 + 5184b_0^2\lambda_0^{4/3} - 3240b_0^4\lambda_0^{8/3} + 54675b_0^6\lambda_0^4)) \\
&+\ 12b_0^2\lambda_0^{7/3}(3\pi(4096 + 73728b_0^2\lambda_0^{4/3} - 300672b_0^4\lambda_0^{8/3} - 233280b_0^6\lambda_0^4 + 1476225b_0^8\lambda_0^{16/3}) \\
&-\ 4(4096 + 129024b_0^2\lambda_0^{4/3} - 549504b_0^4\lambda_0^{8/3} - 1283040b_0^6\lambda_0^4 + 5412825b_0^8\lambda_0^{16/3})) \\
&+\ \sqrt{2}a_0\lambda_0^{2/3}(3\pi(4096 - 156672b_0^2\lambda_0^{4/3} - 1078272b_0^4\lambda_0^{8/3} + 5890320b_0^6\lambda_0^4 - 6725025b_0^8\lambda_0^{16/3}) \\
&+\ 4(4096 + 820224b_0^2\lambda_0^{4/3} + 1181952b_0^4\lambda_0^{8/3} - 22686480b_0^6\lambda_0^4 + 34609275b_0^8\lambda_0^{16/3}))] \ln\lambda_0^2 \\
&+\ 4096(144\sqrt{2}a_0^3(64 + 5760b_0^2\lambda_0^{4/3} + 14175b_0^4\lambda_0^{8/3}) + 72a_0^2\lambda_0^{1/3}(-512 - 21312b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&-\ 22680b_0^4\lambda_0^{8/3} + 18225b_0^6\lambda_0^4) - 12b_0^2\lambda_0^{7/3}(4096 + 73728b_0^2\lambda_0^{4/3} - 300672b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&-\ 233280b_0^6\lambda_0^4 + 1476225b_0^8\lambda_0^{16/3}) + \sqrt{2}a_0\lambda_0^{2/3}(4096 + 488448b_0^2\lambda_0^{4/3} + 1057536b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&- 6590160b_0^6\lambda_0^4 + 7053075b_0^8\lambda_0^{16/3}))\ln\lambda_0^3\Big\} .
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\lambda_4 = \frac{3}{262144\lambda_0^{1/3}(-8+45b_0^2\lambda_0^{4/3})^7} &\Big\{243[2304a_0^4(4+3\pi)(3645\pi^3(448b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&+\ 9360b_0^4\lambda_0^{8/3} + 14175b_0^6\lambda_0^4) + 240\pi(8192 + 506304b_0^2\lambda_0^{4/3} - 2196720b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&+\ 1439775b_0^6\lambda_0^4) + 64(137216 + 95040b_0^2\lambda_0^{4/3} - 4374000b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&+\ 8110125b_0^6\lambda_0^4) - 36\pi^2(-2048 - 838080b_0^2\lambda_0^{4/3} - 3985200b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&+ 16493625b_0^6\lambda_0^4)) - 864\sqrt{2}a_0^3\lambda_0^{1/3}(-432\pi^2(8 - 45b_0^2\lambda_0^{4/3})^2(-1856 \\
&-\ 7680b_0^2\lambda_0^{4/3} + 31725b_0^4\lambda_0^{8/3}) - 512(-102400 - 1927168b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&+\ 17124480b_0^4\lambda_0^{8/3} - 34020000b_0^6\lambda_0^4 + 7563375b_0^8\lambda_0^{16/3}) + 81\pi^4(4096 \\
&+ 107520b_0^2\lambda_0^{4/3} - 7361280b_0^4\lambda_0^{8/3} - 291600b_0^6\lambda_0^4 + 36358875b_0^8\lambda_0^{16/3}) \\
&+\ 256\pi(348160 + 1022976b_0^2\lambda_0^{4/3} - 8087040b_0^4\lambda_0^{8/3} - 9039600b_0^6\lambda_0^4 \\
&+\ 38545875b_0^8\lambda_0^{16/3}) - 72\pi^3(-118784 + 347136b_0^2\lambda_0^{4/3} + 49662720b_0^4\lambda_0^{8/3}
\end{aligned}
\tag{C.14}
$$

$$
\begin{aligned}
&- 203828400 b_0^6 \lambda_0^4 + 157190625 b_0^8 \lambda_0^{16/3}))\\
&+ 72 a_0^2 \lambda_0^{2/3}(-576\pi^3(8 - 45 b_0^2 \lambda_0^{4/3})^2(-4864 - 34944 b_0^2 \lambda_0^{4/3} + 154980 b_0^4 \lambda_0^{8/3}\\
&+ 6075 b_0^6 \lambda_0^4) + 3072\pi(8 - 45 b_0^2 \lambda_0^{4/3})^2(2048 + 12480 b_0^2 \lambda_0^{4/3} - 114480 b_0^4 \lambda_0^{8/3}\\
&+ 176175 b_0^6 \lambda_0^4) - 2048(-81920 - 4952064 b_0^2 \lambda_0^{4/3} + 3912192 b_0^4 \lambda_0^{8/3}\\
&+ 2883334080 b_0^6 \lambda_0^4 - 12542244500 b_0^8 \lambda_0^{16/3} + 14737646250 b_0^{10} \lambda_0^{20/3})\\
&+ 192\pi^2(2228224 - 29454336 b_0^2 \lambda_0^{4/3} - 350189568 b_0^4 \lambda_0^{8/3} + 3319574400 b_0^6 \lambda_0^4\\
&- 8146137600 b_0^8 \lambda_0^{16/3} + 5882756625 b_0^{10} \lambda_0^{20/3}) + 9\pi^4(2326528 + 16478208 b_0^2 \lambda_0^{4/3}\\
&+ 266664960 b_0^4 \lambda_0^{8/3} + 794551680 b_0^6 \lambda_0^4 - 4719983400 b_0^8 \lambda_0^{16/3}\\
&+ 9381409875 b_0^{10} \lambda_0^{20/3})) - \sqrt{2} a_0 \lambda_0(5184\pi^2(8 - 45 b_0^2 \lambda_0^{4/3})^2(8192 + 422400 b_0^2 \lambda_0^{4/3}\\
&- 847296 b_0^4 \lambda_0^{8/3} - 10034280 b_0^6 \lambda_0^4 + 26116425 b_0^8 \lambda_0^{16/3}) + 81\pi^4(4980736\\
&- 569966592 b_0^2 \lambda_0^{4/3} + 5017227264 b_0^4 \lambda_0^{8/3} - 15430072320 b_0^6 \lambda_0^4\\
&- 2142210240 b_0^8 \lambda_0^{16/3} + 27249145200 b_0^{10} \lambda_0^{20/3} + 9499507875 b_0^{12} \lambda_0^8)\\
&+ 6144\pi(262144 - 13565952 b_0^2 \lambda_0^{4/3} - 178827264 b_0^4 \lambda_0^{8/3} + 1289945088 b_0^6 \lambda_0^4\\
&+ 3231161280 b_0^8 \lambda_0^{16/3} - 31012534800 b_0^{10} \lambda_0^{20/3} + 47231818875 b_0^{12} \lambda_0^8)\\
&- 288\pi^3(-5767168 + 105283584 b_0^2 \lambda_0^{4/3} - 2282287104 b_0^4 \lambda_0^{8/3}\\
&+ 7414944768 b_0^6 \lambda_0^4 + 12068040960 b_0^8 \lambda_0^{16/3} - 68485030200 b_0^{10} \lambda_0^{20/3}\\
&+ 48161840625 b_0^{12} \lambda_0^8) - 4096(-131072 - 17252352 b_0^2 \lambda_0^{4/3} - 229588992 b_0^4 \lambda_0^{8/3}\\
&+ 2017654272 b_0^6 \lambda_0^4 + 4622093280 b_0^8 \lambda_0^{16/3} - 55417486500 b_0^{10} \lambda_0^{20/3}\\
&+ 95017222125 b_0^{12} \lambda_0^8)) + 192 b_0^2 \lambda_0^{8/3}(648\pi^4(327680 - 6930432 b_0^2 \lambda_0^{4/3}\\
&+ 64060416 b_0^4 \lambda_0^{8/3} - 321382080 b_0^6 \lambda_0^4 + 903318480 b_0^8 \lambda_0^{16/3} - 1287760275 b_0^{10} \lambda_0^{20/3}\\
&+ 708588000 b_0^{12} \lambda_0^8) + 216\pi^2(1310720 - 6782976 b_0^2 \lambda_0^{4/3} + 14487552 b_0^4 \lambda_0^{8/3}\\
&- 221958144 b_0^6 \lambda_0^4 + 2068027200 b_0^8 \lambda_0^{16/3} - 7727545800 b_0^{10} \lambda_0^{20/3}\\
&+ 10340956125 b_0^{12} \lambda_0^8) + 48\pi(-1310720 - 28311552 b_0^2 \lambda_0^{4/3} - 995328 b_0^4 \lambda_0^{8/3}\\
&+ 2036441088 b_0^6 \lambda_0^4 - 5523837120 b_0^8 \lambda_0^{16/3} - 12471148800 b_0^{10} \lambda_0^{20/3}\\
&+ 41917408875 b_0^{12} \lambda_0^8) - 9\pi^3(38010880 - 478347264 b_0^2 \lambda_0^{4/3}\\
&+ 2534436864 b_0^4 \lambda_0^{8/3} - 8227878912 b_0^6 \lambda_0^4 + 30155405760 b_0^8 \lambda_0^{16/3}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&- 93698953200b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 1172491706250b_0^{12}\lambda_0^{8}) - 16(-1310720 \\
&- 37748736b_0^2\lambda_0^{4/3} - 92565504b_0^4\lambda_0^{8/3} + 3527442432b_0^6\lambda_0^4 - 5775779520b_0^8\lambda_0^{16/3} \\
&- 46294416000b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 119596368375b_0^{12}\lambda_0^{8}))] \\
&+ 5184[6912a_0^4(1215\pi^3(448b_0^2\lambda_0^{4/3} + 9360b_0^4\lambda_0^{8/3} + 14175b_0^6\lambda_0^4) - 288\pi^2(-64 \\
&- 28080b_0^2\lambda_0^{4/3} - 164025b_0^4\lambda_0^{8/3} + 455625b_0^6\lambda_0^4) + 128(7424 + 109440b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&- 639900b_0^4\lambda_0^{8/3} + 637875b_0^6\lambda_0^4) - 48\pi(-7168 - 561600b_0^2\lambda_0^{4/3} + 1166400b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&+ 1549125b_0^6\lambda_0^4)) - 3456\sqrt{2}a_0^3\lambda_0^{1/3}(-3\pi^2(8 - 45b_0^2\lambda_0^{4/3})^2(-1856 - 46080b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&+ 74925b_0^4\lambda_0^{8/3}) + 18\pi(86016 + 1020928b_0^2\lambda_0^{4/3} - 1555200b_0^4\lambda_0^{8/3} - 8456400b_0^6\lambda_0^4 \\
&+ 3918375b_0^8\lambda_0^{16/3}) + 9\pi^3(2048 + 80640b_0^2\lambda_0^{4/3} - 3149280b_0^4\lambda_0^{8/3} + 72900b_0^6\lambda_0^4 \\
&+ 17222625b_0^8\lambda_0^{16/3}) + 8(192512 + 4758528b_0^2\lambda_0^{4/3} - 21669120b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&- 18370800b_0^6\lambda_0^4 + 99235125b_0^8\lambda_0^{16/3})) + 24a_0^2\lambda_0^{2/3}(9\pi^3(8 - 45b_0^2\lambda_0^{4/3})^2(14848 \\
&+ 497088b_0^2\lambda_0^{4/3} + 463320b_0^4\lambda_0^{8/3} + 18225b_0^6\lambda_0^4) + 192\pi(8 - 45b_0^2\lambda_0^{4/3})^2(7424 \\
&+ 87552b_0^2\lambda_0^{4/3} - 445500b_0^4\lambda_0^{8/3} + 382725b_0^6\lambda_0^4) + 36\pi^2(1605632 - 5124096b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&- 5931325440b_0^4\lambda_0^{8/3} + 2816622720b_0^6\lambda_0^4 - 2449877400b_0^8\lambda_0^{16/3} \\
&- 2029809375b_0^{10}\lambda_0^{20/3}) - 256(-212992 - 18837504b_0^2\lambda_0^{4/3} - 12897792b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&+ 922855680b_0^6\lambda_0^4 - 2869125300b_0^8\lambda_0^{16/3} + 2206956375b_0^{10}\lambda_0^{20/3})) \\
&+ 24b_0^2\lambda_0^{8/3}(864\pi^2(131072 + 1081344b_0^2\lambda_0^{4/3} - 19132416b_0^4\lambda_0^{8/3} + 90326016b_0^6\lambda_0^4 \\
&- 90629280b_0^8\lambda_0^{16/3} - 468455400b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 996451875b_0^{12}\lambda_0^{8}) + 144\pi(-262144 \\
&- 11993088b_0^2\lambda_0^{4/3} - 1437696b_0^4\lambda_0^{8/3} + 647958528b_0^6\lambda_0^4 - 1739102400b_0^8\lambda_0^{16/3} \\
&- 2259608400b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 8436625875b_0^{12}\lambda_0^{8}) + 9\pi^3(-7602176 + 26542080b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&+ 5351546880b_0^4\lambda_0^{8/3} - 5292656640b_0^6\lambda_0^4 + 18511467840b_0^8\lambda_0^{16/3} \\
&- 30870817200b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 21722650875b_0^{12}\lambda_0^{8}) - 64(-262144 - 15335424b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&- 44789760b_0^4\lambda_0^{8/3} + 1279494144b_0^6\lambda_0^4 - 2315770560b_0^8\lambda_0^{16/3} \\
&- 11904278400b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 30757147875b_0^{12}\lambda_0^{8})) \\
&- \sqrt{2}a_0\lambda_0(324\pi^2(8 - 45b_0^2\lambda_0^{4/3})^2(4096 + 645120b_0^2\lambda_0^{4/3} - 291456b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&- 12039840b_0^6\lambda_0^4 + 21013425b_0^8\lambda_0^{16/3}) + 576\pi(131072 - 10272768b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&- 309215232b_0^4\lambda_0^{8/3} + 1660580352b_0^6\lambda_0^4 + 2888589600b_0^8\lambda_0^{16/3}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&- 25030871100 b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 32085750375 b_0^{12}\lambda_0^{8}) - 256(-131072 - 41435136 b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&- 737206272 b_0^4\lambda_0^{8/3} + 5232563712 b_0^6\lambda_0^4 + 10232010720 b_0^8\lambda_0^{16/3} \\
&- 109435511700 b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 166008882375 b_0^{12}\lambda_0^8) + 9\pi^3(2883584 \\
&- 196411392 b_0^2\lambda_0^{4/3} + 4888055808 b_0^4\lambda_0^{8/3} - 26746951680 b_0^6\lambda_0^4 \\
&+ 89256893760 b_0^8\lambda_0^{16/3} - 197766910800 b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 190189447875 b_0^{12}\lambda_0^8))] \ln\lambda_0 \\
&+ 13824[6912 a_0^4(1215\pi^2(448 b_0^2\lambda_0^{4/3} + 9360 b_0^4\lambda_0^{8/3} + 14175 b_0^6\lambda_0^4) - 192\pi(-64 \\
&- 28080 b_0^2\lambda_0^{4/3} - 164025 b_0^4\lambda_0^{8/3} + 455625 b_0^6\lambda_0^4) - 16(-7168 - 561600 b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&+ 1166400 b_0^4\lambda_0^{8/3} + 1549125 b_0^6\lambda_0^4)) - 1152\sqrt{2} a_0^3\lambda_0^{1/3}(9\pi^2(8 - 45 b_0^2\lambda_0^{4/3})^2(64 \\
&+ 5760 b_0^2\lambda_0^{4/3} + 14175 b_0^4\lambda_0^{8/3}) - 3\pi(-176128 - 8137728 b_0^2\lambda_0^{4/3} + 3421440 b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&- 50446800 b_0^6\lambda_0^4 + 225534375 b_0^8\lambda_0^{16/3}) + 2(716800 + 23675904 b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&+ 6220800 b_0^4\lambda_0^{8/3} - 448189200 b_0^6\lambda_0^4 + 542102625 b_0^8\lambda_0^{16/3})) \\
&- 24 a_0^2\lambda_0^{2/3}(144\pi(8 - 45 b_0^2\lambda_0^{4/3})^2(-2048 - 33216 b_0^2\lambda_0^{4/3} + 49680 b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&+ 115425 b_0^6\lambda_0^4) - 64(311296 + 32698368 b_0^2\lambda_0^{4/3} + 75520512 b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&- 1124409600 b_0^6\lambda_0^4 + 1429641900 b_0^8\lambda_0^{16/3} + 863591625 b_0^{10}\lambda_0^{20/3}) \\
&+ 9\pi^2(-425984 - 8294400 b_0^2\lambda_0^{4/3} + 341314560 b_0^4\lambda_0^{8/3} - 470759040 b_0^6\lambda_0^4 \\
&- 1428985800 b_0^8\lambda_0^{16/3} + 1232647875 b_0^{10}\lambda_0^{20/3})) \\
&+ 144 b_0^2\lambda_0^{8/3}(4(262144 + 22216704 b_0^2\lambda_0^{4/3} + 72216576 b_0^4\lambda_0^{8/3} - 1691559936 b_0^6\lambda_0^4 \\
&+ 3740644800 b_0^8\lambda_0^{16/3} + 7471666800 b_0^{10}\lambda_0^{20/3} - 22519812375 b_0^{12}\lambda_0^8) \\
&+ 9\pi^2(262144 + 4128768 b_0^2\lambda_0^{4/3} - 50761728 b_0^4\lambda_0^{8/3} + 216483840 b_0^6\lambda_0^4 \\
&- 119672640 b_0^8\lambda_0^{16/3} - 12518388800 b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 2192194125 b_0^{12}\lambda_0^8) \\
&+ 6\pi(-262144 - 16711680 b_0^2\lambda_0^{4/3} - 9400320 b_0^4\lambda_0^{8/3} + 712157184 b_0^6\lambda_0^4 \\
&- 1814685120 b_0^8\lambda_0^{16/3} - 889671600 b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 4982259375 b_0^{12}\lambda_0^8)) \\
&- \sqrt{2} a_0\lambda_0(27\pi^2(8 - 45 b_0^2\lambda_0^{4/3})^2(4096 + 1069056 b_0^2\lambda_0^{4/3} + 3162240 b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&- 18662400 b_0^6\lambda_0^4 + 20503125 b_0^8\lambda_0^{16/3}) + 96\pi(131072 - 15187968 b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&- 593879040 b_0^4\lambda_0^{8/3} + 2169690624 b_0^6\lambda_0^4 + 4548610080 b_0^8\lambda_0^{16/3} \\
&- 23495597100 b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 22918393125 b_0^{12}\lambda_0^8) - 64(-131072 - 75644928 b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&- 1541431296 b_0^4\lambda_0^{8/3} + 9009833472 b_0^6\lambda_0^4 + 11038226400 b_0^8\lambda_0^{16/3}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&- 111183362100b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 135716745375b_0^{12}\lambda_0^8))] \ln^2 \lambda_0 \\
&+ 49152[6912a_0^4(2048 + 8640b_0^2(104 + 21\pi)\lambda_0^{4/3} + 291600b_0^4(18 + 13\pi)\lambda_0^{8/3} \\
&+ 91125b_0^6(-160 + 63\pi)\lambda_0^4) - 864\sqrt{2}a_0^3\lambda_0^{1/3}(4(28672 + 2282496b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&+ 7672320b_0^4\lambda_0^{8/3} - 20120400b_0^6\lambda_0^4 - 39639375b_0^8\lambda_0^{16/3}) + 3\pi(4096 + 645120b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&+ 3265920b_0^4\lambda_0^{8/3} + 4082400b_0^6\lambda_0^4 + 17222625b_0^8\lambda_0^{16/3})) \\
&- 72a_0^2\lambda_0^{2/3}(\pi(8 - 45b_0^2\lambda_0^{4/3})^2(-3584 - 124992b_0^2\lambda_0^{4/3} - 119880b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&+ 18225b_0^6\lambda_0^4) - 4(229376 + 22130688b_0^2\lambda_0^{4/3} + 127540224b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&- 558472320b_0^6\lambda_0^4 - 52050600b_0^8\lambda_0^{16/3} + 159924375b_0^{10}\lambda_0^{20/3})) \\
&+ 24b_0^2\lambda_0^{8/3}(4(262144 + 24182784b_0^2\lambda_0^{4/3} + 46116864b_0^4\lambda_0^{8/3} - 1243662336b_0^6\lambda_0^4 \\
&+ 2895238080b_0^8\lambda_0^{16/3} + 2102144400b_0^{10}\lambda_0^{20/3} - 8968066875b_0^{12}\lambda_0^8) \\
&+ 3\pi(-262144 - 15925248b_0^2\lambda_0^{4/3} - 15593472b_0^4\lambda_0^{8/3} + 455362560b_0^6\lambda_0^4 \\
&- 1014068160b_0^8\lambda_0^{16/3} - 165337200b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 1793613375b_0^{12}\lambda_0^8)) \\
&- \sqrt{2}a_0\lambda_0(1048576 + 795082752b_0^2\lambda_0^{4/3} + 14511882240b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&- 57575743488b_0^6\lambda_0^4 - 89330376960b_0^8\lambda_0^{16/3} + 467951515200b_0^{10}\lambda_0^{20/3} \\
&- 434453017500b_0^{12}\lambda_0^8 + 3\pi(262144 - 33619968b_0^2\lambda_0^{4/3} - 1360613376b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&+ 19782144400b_0^6\lambda_0^4 + 9126613440b_0^8\lambda_0^{16/3} - 24021133200b_0^{10}\lambda_0^{20/3} \\
&+ 17072542125b_0^{12}\lambda_0^8))] \ln^3 \lambda_0 - 65536[-933120a_0^4(448b_0^2\lambda_0^{4/3} + 9360b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&+ 14175b_0^6\lambda_0^4) + 864\sqrt{2}a_0^3\lambda_0^{1/3}(4096 + 967680b_0^2\lambda_0^{4/3} + 9642240b_0^4\lambda_0^{8/3} \\
&+ 6706800b_0^6\lambda_0^4 + 5740875b_0^8\lambda_0^{16/3}) - 24a_0^2(229376\lambda_0^{2/3} + 33288192b_0^2\lambda_0^2 \\
&+ 313113600b_0^4\lambda_0^{10/3} - 119905920b_0^6\lambda_0^{14/3} - 310991400b_0^8\lambda_0^6 \\
&+ 228814875b_0^{10}\lambda_0^{22/3}) + \sqrt{2}a_0\lambda_0(262144 + 123273216b_0^2\lambda_0^{4/3} \\
&+ 2088529920b_0^4\lambda_0^{8/3} - 3262187520b_0^6\lambda_0^4 - 9298774080b_0^8\lambda_0^{16/3} \\
&+ 24776960400b_0^{10}\lambda_0^{20/3} - 17205402375b_0^{12}\lambda_0^8) + 24b_0^2\lambda_0^{8/3}(-262144 \\
&- 15925248b_0^2\lambda_0^{4/3} - 15593472b_0^4\lambda_0^{8/3} + 455362560b_0^6\lambda_0^4 - 1014068160b_0^8\lambda_0^{16/3} \\
&-165337200b_0^{10}\lambda_0^{20/3} + 1793613375b_0^{12}\lambda_0^8)] \ln \lambda_0^4 \Big\} .
\end{aligned}
$$

APÊNDICE D

Algumas Demonstrações Interessantes

Proposição 1. *Seguem-se algumas propriedades dos coeficientes binomiais:*

(i) $\displaystyle\sum_{j=0}^{s}\binom{2s}{2j} = \begin{cases} 1, & s=0, \\ 2^{2s-1}, & s=1,2,\ldots; \end{cases}$

(ii) $\displaystyle\sum_{j=0}^{s}\binom{2s+2}{2j+1} = 2^{2s+1}, \quad s=0,1,2,\ldots;$

(iii) $\displaystyle\sum_{j=0}^{s}\binom{2s+1}{2j} = \sum_{j=0}^{s}\binom{2s+1}{2j+1} = 2^{2s}, \quad s=0,1,2,\ldots.$

Demonstração. Utilizando o teorema binomial, obtemos

$$\begin{aligned} 2^{2s+2} &= (1+1)^{2s+2} = \sum_{k=0}^{2s+2}\binom{2s+2}{k}, \\ 0 &= (1-1)^{2s+2} = \sum_{k=0}^{2s+2}\binom{2s+2}{k}(-1)^k \end{aligned} \tag{D.1}$$

Separando os termos pares e ímpares, obtemos

$$\begin{aligned} 2^{2s+2} &= \binom{2s+2}{0} + \binom{2s+2}{1} + \binom{2s+2}{2} + \ldots + \binom{2s+2}{2s+1} + \binom{2s+2}{2s+2}, \\ 0 &= \binom{2s+2}{0} - \binom{2s+2}{1} + \binom{2s+2}{2} - \ldots - \binom{2s+2}{2s+1} + \binom{2s+2}{2s+2}, \end{aligned} \tag{D.2}$$

para $s = 0, 1, 2, \ldots$.

Somando as duas equações acima, obtemos

$$2^{2s+2} = 2\sum_{j=0}^{s+1}\binom{2s+2}{2j}. \tag{D.3}$$

Rearranjando os termos e redefinindo os índices da soma como $s \to s-1$, obtemos

$$2^{2s-1} = \sum_{j=0}^{s} \binom{2s}{2j}, \tag{D.4}$$

para $s = 1, 2, 3, \ldots$. Para $s = 0$, temos

$$\sum_{j=0}^{0} \binom{2s}{2j} = \binom{0}{0} = \frac{0!}{0!0!} = 1, \tag{D.5}$$

e assim fica provado (i).

Subtraindo as equações em (D.2) e rearranjando os termos, obtemos

$$2^{2s+1} = \sum_{j=0}^{s} \binom{2s+2}{2j+1}, \tag{D.6}$$

e portanto, prova-se (ii).

Para provar (iii), segue-se o mesmo raciocínio da demonstração de (i) e (ii),

$$\begin{aligned} 2^{2s+1} &= \binom{2s+1}{0} + \binom{2s+1}{1} + \binom{2s+1}{2} + \ldots + \binom{2s+1}{2s} + \binom{2s+1}{2s+1}, \\ 0 &= \binom{2s+1}{0} - \binom{2s+1}{1} + \binom{2s+1}{2} - \ldots + \binom{2s+1}{2s} - \binom{2s+1}{2s+1} \end{aligned} \tag{D.7}$$

Somando e subtraindo as equações acima e rearranjando os termos obtemos, respectivamente,

$$\sum_{j=0}^{s} \binom{2s+1}{2j} = \sum_{j=0}^{s} \binom{2s+1}{2j+1} = 2^{2s}. \tag{D.8}$$

$\square$

Proposição 2. *Valem as seguintes identidades trigonométricas hiperbólicas:*

(i) $\operatorname{senh}(3\theta) = 4\operatorname{senh}^3\theta + 3\operatorname{senh}\theta$;

(ii) $\cosh(3\theta) = 4\cosh^3\theta - 3\cosh\theta$.

Demonstração. Utilizando as identidades

- $\cosh^2 x - \operatorname{senh}^2 x = 1$,
- $\operatorname{senh}(x+y) = \operatorname{senh} x \cosh y + \cosh x \operatorname{senh} y$,
- $\cosh(x+y) = \cosh x \cosh y + \operatorname{senh} x \operatorname{senh} y$,

obtemos:

$$\begin{aligned}
\operatorname{senh}(3\theta) &= \operatorname{senh}(2\theta+\theta) = \operatorname{senh}(2\theta)\cosh\theta + \cosh(2\theta)\operatorname{senh}\theta \\
&= 2\operatorname{senh}\theta\cosh^2\theta + (\cosh^2\theta + \operatorname{senh}^2\theta)\operatorname{senh}\theta \\
&= 2\operatorname{senh}\theta(1+\operatorname{senh}^2\theta) + (1+2\operatorname{senh}^2\theta)\operatorname{senh}\theta \\
&= 4\operatorname{senh}^2\theta + 3\operatorname{senh}\theta.
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\cosh(3\theta) &= \cosh(2\theta+\theta) = \cosh(2\theta)\cosh\theta + \operatorname{senh}(2\theta)\operatorname{senh}\theta \\
&= (\cosh^2\theta + \operatorname{senh}^2\theta)\cosh\theta + 2\cosh\theta\operatorname{senh}^2\theta \\
&= (2\cosh^2\theta - 1)\cosh\theta + 2\cosh\theta(\cosh^2\theta - 1) \\
&= 4\cosh^2\theta - 3\cosh\theta.
\end{aligned}$$

□

Proposição 3. *Valem as seguintes identidades trigonométricas:*

(i) $\operatorname{sen}(3\theta) = -4\operatorname{sen}^3\theta + 3\operatorname{sen}\theta$;

(ii) $\cos(3\theta) = 4\cos^3\theta - 3\cos\theta$.

Demonstração. Utilizando as identidades

- $\cos^2 x + \operatorname{sen}^2 x = 1$,
- $\operatorname{sen}(x+y) = \operatorname{sen} x\cos y + \cos x\operatorname{sen} y$,
- $\cos(x+y) = \cos x\cos y - \operatorname{sen} x\operatorname{sen} y$,

obtemos:

$$\begin{aligned}
\operatorname{sen}(3\theta) &= \operatorname{sen}(2\theta+\theta) = \operatorname{sen}(2\theta)\cos\theta + \cos(2\theta)\operatorname{sen}\theta \\
&= 2\operatorname{sen}\theta\cos^2\theta + (\cos^2\theta - \operatorname{sen}^2\theta)\operatorname{sen}\theta \\
&= 2\operatorname{sen}\theta(1-\operatorname{sen}^2\theta) + (1-2\operatorname{sen}^2\theta)\operatorname{sen}\theta = -4\operatorname{sen}^2\theta + 3\operatorname{sen}\theta.
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\cos(3\theta) &= \cos(2\theta+\theta) = \cos(2\theta)\cos\theta - \operatorname{sen}(2\theta)\operatorname{sen}\theta \\
&= (\cos^2\theta - \operatorname{sen}^2\theta)\cos\theta - 2\cos\theta\operatorname{sen}^2\theta \\
&= (2\cos^2\theta - 1)\cos\theta - 2\cos\theta(1-\cos^2\theta) = 4\cos^2\theta - 3\cos\theta.
\end{aligned}$$

□

Proposição 4. *Para* $x > 1/2$*, vale a seguinte identidade trigonométrica hiperbólica inversa:*

$$3 \text{ arcsenh } \sqrt{\frac{3}{4(2x-1)}} = \text{ arcsenh } \sqrt{\frac{27x^2}{(2x-1)^3}}.$$

Demonstração. Seja

$$\theta = \text{ arcsenh } \sqrt{\frac{3}{4(2x-1)}}.$$

Da Proposição 2 (i), segue que:

$$\operatorname{senh}(3\theta) = 4\operatorname{senh}^3\theta + 3\operatorname{senh}\theta = \frac{3^{3/2}(1+2x-1)}{2(2x-1)^{3/2}} = \sqrt{\frac{27x^2}{(2x-1)^3}}.$$

Aplicando senh à equação acima, obtemos a identidade desejada. □

Proposição 5. *Para* $1/8 < x < 1/2$*, vale a seguinte identidade trigonométrica hiperbólica inversa:*

$$3 \text{ arccosh } \sqrt{\frac{3}{4(1-2x)}} = \text{ arccosh } \sqrt{\frac{27x^2}{(1-2x)^3}}.$$

Demonstração. Seja

$$\theta = \text{ arccosh } \sqrt{\frac{3}{4(1-2x)}}.$$

Da Proposição 2 (ii), segue que:

$$\cosh(3\theta) = 4\cosh^3\theta - 3\cosh\theta = \frac{3^{3/2}(1-1+2x)}{2(1-2x)^{3/2}} = \sqrt{\frac{27x^2}{(1-2x)^3}}.$$

Aplicando cosh à equação acima, obtemos a identidade desejada. □

Proposição 6. *Para* $1/8 < x < 1/2$*, vale a seguinte identidade trigonométrica inversa:*

$$3\arccos\sqrt{\frac{3}{4(1-2x)}} = \arccos\sqrt{\frac{27x^2}{(1-2x)^3}}.$$

Demonstração. Seja

$$\theta = \arccos\sqrt{\frac{3}{4(1-2x)}}.$$

Da Proposição 3 (ii), segue que:

$$\cos(3\theta) = 4\cos^3\theta - 3\cos\theta = \frac{3^{3/2}(1-1+2x)}{2(1-2x)^{3/2}} = \sqrt{\frac{27x^2}{(1-2x)^3}}.$$

Aplicando cos à equação acima, obtemos a identidade desejada. □