



Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Centro de Tecnologia e Ciências

Instituto de Física Armando Dias Tavares

Felipe Carvalho Rodrigues da Silveira

**Estudo sobre as interações atômicas e moleculares em
configurações planares**

Rio de Janeiro

2022

Felipe Carvalho Rodrigues da Silveira

Estudo sobre as interações atômicas e moleculares em configurações planares



Tese apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Física, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. Dr. Vitor Oguri
Coorientador: Prof. Dr. Francisco Caruso

Rio de Janeiro

2022

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ/ REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/D

S587e Silveira, Felipe Carvalho Rodrigues da.
Estudo sobre as interações atômicas e moleculares em
configurações planares / Felipe Carvalho Rodrigues da
Silveira. – 2022.
72 f. : il.

Orientador: Vitor Oguri.
Coorientador: Francisco Caruso.
Tese (doutorado) - Universidade do Estado do Rio de
Janeiro, Instituto de Física Armando Dias Tavares.

1. Interação partícula-partícula – Teses. 2. Partículas
(Física nuclear) – Teses. 3. Múons – Teses. 4. Schrodinger,
Equação de – Soluções numéricas – Teses. 5. Equações
diferenciais ordinárias – Soluções numéricas – Teses.
I. Oguri, Vitor. II. Caruso, Francisco. III. Universidade do
Estado do Rio de Janeiro. Instituto de Física Armando Dias
Tavares. IV. Título.

CDU 539.125

Bibliotecária: Teresa da Silva CRB7/5209

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta tese, desde que citada a fonte.

Assinatura

Data

Felipe Carvalho Rodrigues da Silveira

Estudo sobre as interações atômicas e moleculares em configurações planares

Tese apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Física, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovada em 29 de Julho de 2022.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Vitor Oguri (Orientador)
Instituto de Física Armando Dias Tavares – UERJ

Prof. Dr. Francisco Caruso (Coorientador)
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas – CBPF
Instituto de Física Armando Dias Tavares – UERJ

Prof. Dr. Amós Troper
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas – CBPF

Prof. Dr. José Abdalla Helayël-Neto
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas – CBPF

Prof. Dr. Helio da Motta Filho
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas – CBPF

Prof. Dr. Cesar Augusto Linhares da Fonseca Jr.
Instituto de Física Armando Dias Tavares – UERJ

Prof. Dr. José Roberto Pinheiro Mahon
Instituto de Física Armando Dias Tavares – UERJ

Prof. Dr. Nilson Antunes de Oliveira
Instituto de Física Armando Dias Tavares – UERJ

Rio de Janeiro

2022

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho aos meu pais, Claudio e Paula, aos meu orientadores Francisco, Vitor e Amós, à minha noiva Luiza e a todos os amigos e professores que contribuíram para minha formação.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ) por todo o conhecimento adquirido e trajetória que tive a honra de trilhar. Agradeço também aos meus professores pelo apoio, dedicação e ensinamentos passados.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

Nunca liguei muito para o lugar
em que nasci, cresci e vivi.
Vou para onde a vida me levar,
e, algumas vezes, creio, revivi (...).

Francisco Caruso

RESUMO

SILVEIRA, F. C. R. *Estudo sobre as interações atômicas e moleculares em configurações planares*. 2022. 72 f. Tese (Doutorado em Física) – Instituto de Física Armando Dias Tavares, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2022.

Diferentes tipos de potenciais de interação entre partículas portadoras de cargas que formam átomos e moléculas, limitadas a uma região planar, são estudados, dentre eles: o usual potencial coulombiano $1/r$, o potencial do tipo $\ln(r)$, o potencial de Chern-Simons assim como os potenciais compostos pelos dois primeiros ($1/r$ e $\ln(r)$) acrescidos de um potencial externo harmônico simples de frequência Ω capaz de descrever um modelo para um *quantum dot*. A partir deles, são desenvolvidos os cálculos necessários para a solução da equação de Schrödinger referente a diferentes átomos e moléculas. Todos os casos foram resolvidos numericamente utilizando o método de Numerov, com o qual foram obtidas diversas funções de onda e seus respectivos autovalores de energia. Tais resultados têm como objetivo fornecer previsões teóricas capazes de lançar luz sobre qual seria a efetiva forma da interação entre as partículas carregadas em duas dimensões, uma vez que possam ser comparadas com futuros dados experimentais. Em especial, tratamos com mais detalhes de como estes resultados podem influenciar a fusão catalisada por múons, e encontramos estimativas promissoras que sugerem que este tipo de fusão pode se beneficiar caso consiga ser executada em uma configuração planar. Espera-se que as conclusões obtidas nesta tese possam servir de motivação para que físicos experimentais busquem por diferentes formas de interações entre partículas quando situadas em regiões planares.

Palavras-chave: Física atômica e molecular. Física Planar. Física Muônica.
Dimensionalidade do espaço.

ABSTRACT

SILVEIRA, F. C. R. *Study on the form of atomic and molecular interactions in two-dimensions..* 2022. 72 f. Tese (Doutorado em Física) – Instituto de Física Armando Dias Tavares, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2022.

Different types of interaction potentials between charged particles that form atoms and molecules, limited to a planar region, are studied, among them: the usual Coulomb potential $1/r$, the potential of the type $\ln(r)$, the Chern-Simons potential as well as the potentials composed of the first two ($1/r$ and $\ln(r)$) plus a simple harmonic external potential of frequency Ω capable of describing a model for a quantum dot. From them, the necessary calculations for the solution of the Schrödinger equation referring to different atoms and molecules are developed. All cases were numerically solved using the Numerov method, with which several wave functions and their respective energy eigenvalues were obtained. Such results aim to provide theoretical predictions capable of shedding light on what would be the effective form of interaction between charged particles in two dimensions, once they can be compared with future experimental data. In particular, we look in more detail at how these results can influence muon-catalyzed fusion, and we find promising estimates that suggest that this type of fusion can benefit if it can be performed in a planar configuration. It is expected that the conclusions obtained in this thesis can serve as a motivation for experimental physicists to search for different forms of interactions between particles when located in planar regions.

Keywords: Atomic and molecular physics. Planar physics. Muonic physics. Space dimensionality.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Função de onda do estado fundamental para $p\mu$, linha contínua, e para o pe linha tracejada, para o potencial coulombiano $1/r$, em unidades arbitrárias.	27
Figura 2 - Função de onda do estado fundamental para $p\mu$, linha contínua, e para o pe linha tracejada, para o potencial do tipo logarítmico, em unidades arbitrárias.	28
Figura 3 - Função de onda do estado fundamental para $p\mu$, linha contínua, e para o pe linha tracejada, para o potencial de Chern–Simons, em unidades arbitrárias.	28
Figura 4 - Funções de onda radiais u_ρ , em unidades arbitrárias, para o potencial $1/r$ referentes aos autovalores de energia da tabela 6.	30
Figura 5 - Funções de onda radiais u_ρ , em unidades arbitrárias, para o potencial $\ln(\rho)$ referentes aos autovalores de energia da tabela 6.	30
Figura 6 - Comparação entre a função analítica e os pontos numéricos.	39
Figura 7 - Comparação da função W_+ analítica (linha contínua), com os valores numéricos.	55
Figura 8 - Funções de onda para o estado fundamental das moléculas dde e $dd\mu$ com potencial de Chern-Simons, para dois valores de λ diferentes. As curvas contínuas correspondem a $\lambda = 0,2 \times 10^{-3}$ e as tracejadas a $\lambda = 0,2 \times 10^{-5}$ em unidades arbitrárias.	59
Figura 9 - Funções de onda para o estado fundamental, em unidades arbitrárias, das moléculas (a) ppe e (b) $pp\mu$. As curvas correspondentes ao potencial de Chern-Simons correspondem a escolha de $\lambda = 0,2 \times 10^{-5}$	60
Figura 10 - Funções de onda para o estado fundamental, em unidades arbitrárias, das moléculas (a) dde e (b) $dd\mu$. As curvas correspondentes ao potencial de Chern-Simons correspondem a escolha de $\lambda = 0,2 \times 10^{-5}$	61
Figura 11 - Potencial efetivo da equação (35) para diferentes valores de ζ	65

LISTA DE TABELAS

Tabela	1 - Tabela de massas em unidades da massa do elétron	25
Tabela	2 - Valores de m_γ para diferentes sistemas	26
Tabela	3 - Valores do parâmetro ζ para diferentes átomos	26
Tabela	4 - Energias dos estados fundamentais ($\ell = 0$) para os seis átomos com diferentes potenciais. Sendo ε as energias correspondentes ao potencial do tipo $1/r$, β , correspondentes ao potencial logarítmico e, por último, η as energias para o potencial de Chern-Simons para $\lambda = 0,2 \times 10^{-5}$, $\lambda = 0,2 \times 10^{-4}$ e $\lambda = 0,2 \times 10^{-3}$ respectivamente	27
Tabela	5 - Raio médio (em unidades do raio de Bohr a_B) para alguns dos átomos dispostos na tabela 4 além do átomo tridimensional dado pela primeira coluna. A terceira coluna, referente ao potencial de Chern-Simons foi calculada para $\lambda = 0,2 \times 10^{-4}$	29
Tabela	6 - comparação entre as energias numéricas e analíticas para $l = 0$, $\omega = 0,01$ Ha e diferentes valores de n	29
Tabela	7 - Valores de ζ e m_3 Para serem utilizados no cálculo das moléculas governadas pelo potencial de Chern-Simons	58
Tabela	8 - Valores das energias dos estados fundamentais de diferentes moléculas (em hartree). As primeiras duas colunas representam as energias para o potencial de Chern-Simons com dois valores diferentes de λ , a terceira coluna são os valores para o potencial $\ln(r)$, a quarta coluna os valores para o potencial $1/r$ e a quinta e última coluna as energias para as moléculas tridimensionais	58
Tabela	9 - Valores do raio médio $\langle \rho \rangle$ para diferentes moléculas dados em unidades do raio de Bohr. As primeiras duas colunas representam os valores para o potencial de Chern-Simons correspondendo a duas diferentes escolhas do parâmetro λ . A terceira coluna o potencial do tipo logarítmico, a quarta o potencial $1/r$ e a quinta e última representa também potencial $1/r$, porém para o caso tridimensional.	59
Tabela	10 - probabilidade de encontrar os dois núcleos das diferentes moléculas a uma distancia igual ou menor que 10 fm, para o potencial $\ln(r)$ e para o caso tridimensional	64
Tabela	11 - probabilidade de encontrar os dois núcleos das diferentes moléculas a uma distância igual ou menor que 10 fm para o potencial de Chern-Simons e para as moléculas tridimensionais	65

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	11
1	A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM DUAS DIMENSÕES PARA UM ÁTOMO	16
1.1	Potencial do tipo $1/r$	20
1.2	Potencial do tipo $\ln(r)$	20
1.3	Potencial do tipo Chern-Simons	21
1.4	<i>Quantum Dot</i>	22
2	SOLUÇÕES NUMÉRICAS PARA OS SISTEMAS ATÔMICOS	25
3	MODELO PARA UMA MOLÉCULA EM DUAS DIMENSÕES	31
3.1	Aproximação adiabática em 2D	31
3.2	Equação para o potencial $\ln(r)$	34
3.3	Cálculo de W_{\pm} para o potencial $\ln(r)$	35
3.4	Cálculo numérico do fator W_{+}	55
3.5	Equação para o potencial Chern-Simons	55
3.6	Cálculo de W_{\pm} para o potencial de Chern-Simons	56
4	SOLUÇÕES NUMÉRICAS PARA OS SISTEMAS MOLECULARES	58
5	RESULTADOS E CONSIDERAÇÕES FINAIS	62
5.1	O potencial $1/r$	63
5.2	O potencial $\ln(r)$	63
5.3	O potencial de Chern-Simons	64
5.4	Considerações finais	66
	REFERÊNCIAS	67
	APÊNDICE A – Trabalhos produzidos durante o doutorado	71

INTRODUÇÃO

Em 1884, o escritor e professor da Universidade de Cambridge Edwin Abbott escreveu um romance denominado *Flatland* que, como o nome sugere, trata de um mundo bidimensional habitado por linhas e formas geométricas. O autor explica toda a hierarquia das formas geométricas e como elas se formam e evoluem de geração em geração, se tornando polígonos com cada vez mais lados até que possuam tantos lados, que se tornam indistinguíveis e atingem a mais alta ordem, a ordem circular. Em um determinado momento, o personagem quadrado sonha com um outro mundo, chamado *Lineland*, habitado somente por linhas, e, em seu contato com esse novo mundo, tenta, sem sucesso, explicar para uma linha que existe algo afora os pontos que ela consegue enxergar e outras “direções” além das duas “para frente” e “para trás”. Ao acordar do sonho, o quadrado se depara com um círculo que possui uma habilidade única: ele é capaz de alterar o seu diâmetro e vemos mais uma vez um diálogo muito semelhante com o que aconteceu no sonho, no qual descobrimos que o círculo é, na verdade, uma esfera que habita a *Spaceland*, e tenta convencer o quadrado da existência de novas direções até então inimagináveis para ele (ABBOT, 1884).

Este livro, apesar de se tratar de uma obra de ficção, traz à tona, de uma forma lúdica, uma questão muito importante para a Física (TANGHERLINI, 1963; BARROW, 1983; CALLENDER, 2005; BIANCHI; WELLS, 2015; BALBIANI; FERNÁNDEZ-DUQUE; LORINI, 2017; FLETCHER *et al.*, 2018): seria possível estabelecer a existência de um objeto verdadeiramente bidimensional dentro de um universo tridimensional? Inicialmente, pode parecer uma pergunta muito fácil de ser respondida de forma negativa, já que um objeto desta natureza precisaria ser infinitamente fino em uma de suas dimensões. No entanto, como vivemos em um mundo formado por átomos, será que um objeto que tenha uma de suas dimensões da espessura de um átomo, poderia ser chamado de bidimensional? Este objeto se comportaria, em última análise, segundo as mesmas equações que descrevem um mundo em três dimensões? Estas questões, recentemente, ganharam muita força com a descoberta de novos materiais que possuem apenas um átomo de espessura.

O estudo destes novos materiais planares teve seu início a partir da descoberta do grafeno mono- (GEIM; NOVOSELOV, 2007; GEIM, 2009) e bi-camadas (ZHANG, 2009). Desde então, foram descobertas centenas de outros materiais (CHEON *et al.*, 2017) cujas propriedades físicas diferem de seus análogos “tridimensionais”, possibilitando o desenvolvimento de novas tecnologias (BARAKAT *et al.*, 2021). Assim como a criação de regiões tão compactas que abrem a discussão sobre a validade das usuais equações tridimensionais (CARUSO; OGURI; SILVEIRA, 2019a).

Todas as tentativas de fixar ou entender a dimensionalidade do espaço (PETKOV, 2007), que dependem da forma do potencial físico de interação entre os corpos, têm que

enfrentar o mesmo problema epistemológico, na medida em que são considerados espaços com dimensões superiores (D), como sugerido por muitas teorias unificadas. Isto porque não somos capazes de sondar tais dimensões extras e, portanto, não podemos inferir ou mesmo justificar a fórmula matemática generalizada do potencial a partir da experiência neste espaço generalizado (CARUSO; XAVIER, 1987).

Para estudar um determinado sistema físico em espaços com D dimensões, quando $D > 3$, deve-se postular a validade da mesma equação que o descreve em $D = 3$. A única justificativa para isso recai, em última análise, na expectativa de que alguma versão do princípio antrópico ainda seja válida em dimensões superiores. Isso significa que, se a vida depende de uma lei física particular em $D = 3$, admite-se que ela possa e deva continuar existindo em dimensões superiores com dependência semelhante desta lei, a qual, no fundo, assegura a existência do próprio cientista nesses espaços (CARUSO, 2016).

Para $D > 3$, o caso específico do potencial coulombiano depende de dois Ansätze. A primeira hipótese (e mais geral), inspirada em uma proposta inicial de Ehrenfest (EHRENFEST, 1917; EHRENFEST, 1920), é admitir a validade da equação de Poisson para o potencial gravitacional (em nível clássico, que tem a mesma estrutura do potencial eletrostático de Coulomb) em qualquer dimensão superior, associada à ideia de que tal validade deve ser uma exigência para assegurar a estabilidade planetária necessária à manutenção da vida como a conhecemos. No quadro da Relatividade Geral, este problema foi tratado em (TANGHERLINI, 1963), e o átomo de hidrogênio quântico em dimensões superiores foi discutido, por exemplo, em (TANGHERLINI, 1963; CARUSO; MARTINS; OGURI, 2013). Dentro dessa suposição, ainda temos que introduzir outro Ansatz referente à forma matemática do potencial. Para isso, podemos admitir que o comportamento $1/r$ do potencial coulombiano tridimensional ainda é o mesmo, não importa o número de dimensões do espaço considerado (NIETO, 1979; NIETO, 2002; SHAQQOR; AL-JABER, 2009), ou podemos supor que o potencial depende da dimensionalidade D como $1/r^{D-2}$ (EHRENFEST, 1917; EHRENFEST, 1920; ANDREW; SUPPLEE, 1990; GUREVICH; MOSTEPANENKO, 2013; CARUSO *et al.*, 2013), para $D \geq 3$, e como $\ln r$, para $D = 2$. A primeira opção tem a vantagem de dar origem a alguns problemas analiticamente solucionáveis. No entanto, a segunda, apesar de uma dificuldade matemática intrínseca, tem a vantagem de garantir, pelo menos no nível clássico, a conservação da carga elétrica (e) (ANDREW; SUPPLEE, 1990). De fato, nas dimensões D , da equação de Poisson para o campo elétrico, $\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi$, segue a forma integral da lei de Gauss

$$\int(\vec{\nabla} \cdot \vec{E})dV = \int(-\nabla^2\varphi)dV \sim e \Rightarrow \varphi \sim \frac{e}{r^{D-2}} \quad (1)$$

Claramente, no caso $2D$, a validade da equação de Poisson não precisa ser postulada, removendo a barreira epistemológica mencionada no início desta seção. Além

disso, para essa dimensionalidade do espaço, pode-se justificar o uso do potencial $1/r$ argumentando que o conjunto experimental é de qualquer forma tridimensional, mesmo que algumas de suas dimensões sejam muito pequenas. No entanto, em vez de supor a validade da usual dependência $3D$ em sistemas planares, nos perguntamos também, qual seria a forma do potencial coulombiano em um espaço puramente bidimensional?

Para responder a esta pergunta, vamos inicialmente partir da suposição de que o eletromagnetismo clássico não se modifica em duas dimensões (GARON, 2011; EVEKER *et al.*, 1990). Em um mundo bidimensional, a superfície gaussiana utilizada para envolver uma carga pontual com carga elétrica e é um círculo imaginário de raio r . De fato, partindo para a lei de Gauss envolvendo o campo elétrico

$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{a} = \frac{q_{env}}{\epsilon_0} \implies \vec{E}(r) = \frac{e}{2\pi\epsilon'_0 r} \hat{r} \quad (2)$$

na qual ϵ'_0 é o valor de ϵ_0 em duas dimensões e q_{env} é a carga envolvida pela superfície gaussiana. Se olharmos para a dimensão da solução, percebemos que ϵ'_0 não possui a mesma dimensão de ϵ_0 . Como queremos manter o valor e a dimensão das constantes inalterados vamos fazer $\epsilon'_0 = \xi\epsilon_0$ em que ξ tem dimensão de comprimento. Assim,

$$\vec{E}(r) = \frac{e}{2\pi\xi\epsilon_0 r} \hat{r} \quad (3)$$

Desse modo, temos da relação entre o potencial elétrico e o campo $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$

$$V(r) = \frac{-e}{2\pi\epsilon_0\xi} \int_{r_0}^r \frac{1}{r} dr \quad (4)$$

medindo o potencial a partir de um ponto finito r_0 pois o logaritmo diverge no infinito. Assim, resolvendo a integral da equação (4), temos que a energia potencial para o elétron é

$$V(r) = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0\xi} \ln\left(\frac{r}{r_0}\right) \quad (5)$$

É importante ressaltar a diferença de sinal: no caso $2D$ que apresenta um potencial positivo e, no caso $3D$, um potencial negativo. Para simplificar, vamos fazer $V_0 = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0\xi}$, com V_0 tendo dimensão de energia e, portanto,

$$V(r) = V_0 \ln \left(\frac{r}{r_0} \right) \quad (6)$$

Além disso, se investigarmos as propriedades de Mecânica Estatística de um gás coulombiano bidimensional, devemos realmente considerar um potencial logarítmico para que seu espectro de energia seja puramente discreto. A dependência $1/r$ não é compatível com este resultado (DEUTSCH; LAVAUD, 1974; CORNU; JANCOVICI, 1987; CARUSO; OGURI; SILVEIRA, 2019a).

Agora que somos capazes de realizar experimentos altamente precisos com sistemas genuinamente planares, buscar uma compreensão mais profunda das propriedades matemáticas e características físicas de outras formas do potencial coulombiano em $2D$ é uma tarefa relevante.

É importante ressaltar que os cálculos realizados neste trabalho podem ajudar a responder à pergunta que Ehrenfest se fez em 1920: “Welche Rolle spielt die Dreidimensionalität des Raumes in den Grundgesetzen der Physik?” (EHRENFEST, 1920), que pode ser traduzida como: Que papel a tridimensionalidade do espaço desempenha nas leis básicas da física? Seguindo essa ideia geral, o matemático alemão H. Weyl também fez as seguintes indagações: “que peculiaridades internas distinguem o caso $n = 3$ entre todos os outros?”, e “Se Deus, ao criar o mundo, escolheu tornar o espaço tridimensional, uma explicação “razoável” deste fato pode ser dada pela divulgação de tais peculiaridades?” (WEYL, 1949).

A comparação entre a previsão teórica para diferentes potenciais e valores experimentais permite examinarmos outra questão importante: se há uma determinada escala espacial associada a uma determinada dimensão (um limite fenomenológico) para a qual o sistema quântico pode, de fato, ser considerado como efetivamente um sistema $2D$, embora imerso em um espaço $3D$, ou se apenas sistemas estritamente bidimensionais devem ser descritos por um novo tipo de potencial, como o $\ln r$, por exemplo, no caso da interação eletrostática.

Apesar de não existirem, atualmente, experimentos que possam ser comparados com os resultados teóricos obtidos nesta tese, espera-se que as conclusões obtidas possam servir de motivação para que físicos experimentais busquem diferentes formas de interações entre partículas quando situadas em regiões planares.

No que se refere à fusão nuclear, um método desenvolvido pela colaboração canadense *TRIUMF Muonic Hydrogen Collaboration* (FUJIWARA *et al.*, 2001) pode ser a chave para que se abram mais portas para este tipo de discussão. Ele consiste em utilizar um filme fino como alvo de um bombardeamento de múons para a produção de átomos muônicos. De acordo com o número de camadas que este filme possui, pode-se formar moléculas muônicas capazes de realizar a fusão catalisada por múons (MARSHALL *et al.*,

2001). Espera-se que, no futuro, este método sirva para uma verificação dos resultados aqui dispostos.

Os resultados apresentados nesta tese foram fruto de oito artigos científicos, dos quais sete deles já estão publicados (CARUSO et al., 2017; CARUSO; OGURI; SILVEIRA, 2019b; CARUSO; OGURI; SILVEIRA, 2019a; CARUSO *et al.*, 2019c; CARUSO *et al.*, 2020; CARUSO et al., 2021; CARUSO et al., 2022) e o último já foi submetido (CARUSO *et al.*, 2022).

Como já antecipado, o objetivo desse conjunto de trabalhos é lançar luz sobre as questões levantadas no início desta Introdução, a partir de uma série de diferentes modelos bidimensionais que descrevem as interações atômicas e moleculares.

No Capítulo 1, descrevemos a equação de Schrödinger para a interação entre um átomo, formado por duas partículas, em uma região planar, e definimos esta equação para diferentes tipos de potencial de interação: o usual potencial coulombiano $1/r$, o já apresentado nesta introdução, o potencial do tipo $\ln r$, e o potencial deduzido a partir da teoria de Maxwell-Chern-Simons, além de dois potenciais compostos dos dois primeiros ($1/r$ e $\ln(r)$) acrescidos de um potencial externo harmônico simples de frequência Ω capaz de descrever um modelo de *quantum dot*.

No Capítulo 2, obtemos as soluções numéricas para todos os sistemas atômicos descritos no Capítulo 1 usando o método Numerov (NUMEROV, 1924; NUMEROV, 1927; BLATT, 1967; ALLISON, 1970; LEROY; WALLACE, 1985).

No Capítulo 3, assim como fizemos para os átomos, desenvolvemos a equação geral para as moléculas formada por alguns dos átomos descritos no Capítulo 1 e estudamos novamente diferentes tipos de potenciais de interação.

No Capítulo 4, calculamos as soluções numéricas das respectivas equações de Schrödinger que descrevem diferentes moléculas eletrônicas e muônicas.

Ao final, discutiremos todos os resultados obtidos, focando principalmente em uma possível aplicação destes resultados, que é a fusão catalisada por múons em duas dimensões.

1 A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM DUAS DIMENSÕES PARA UM ÁTOMO

Neste capítulo, será apresentada em detalhes a equação de Schrödinger em duas dimensões, para um átomo, com um potencial qualquer e, em seguida, consideraremos diferentes potenciais a saber: o potencial coulombiano $1/r$, o potencial logarítmico $\ln r$, o potencial de Chern–Simons e o potencial para um *quantum dot*.

A equação de Schrödinger, que descreve um átomo semelhante ao de hidrogênio, é:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \vec{\nabla}_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_T \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (7)$$

Inicialmente, devemos escrever a equação (7) em termos das coordenadas do centro de massa ($\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$) e relativa ($\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$), entre as partículas 1 e 2 de massas iguais a m_1 e m_2 , que compõem o átomo. Para isso é preciso, primeiro, expressar os operadores laplacianos $\vec{\nabla}_1^2$ e $\vec{\nabla}_2^2$ em função das novas coordenadas.

Sabendo que as componentes de \vec{r}_i ($i = 1, 2$) podem ser expressas nas coordenadas x_i e y_i , as componentes de \vec{r} , nas coordenadas x e y , e as de \vec{R} , nas coordenadas X e Y , temos, em duas dimensões, que:

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \quad ; \quad \nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \quad (8)$$

Logo, é preciso determinar as segundas derivadas em função das novas variáveis x_1, y_1, x_2 e y_2 , ou seja,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} \\ \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + 2 \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial x \partial X} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial y_1} = \frac{\partial y}{\partial y_1} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial Y}{\partial y_1} \frac{\partial}{\partial Y} = \frac{\partial}{\partial y} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial Y} \\ \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} = \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + 2 \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial y \partial Y} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial x}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial X} = -\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} \\ \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - 2 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial x \partial X} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial y_2} = \frac{\partial y}{\partial y_2} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial Y}{\partial y_2} \frac{\partial}{\partial Y} = -\frac{\partial}{\partial y} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial Y} \\ \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} = \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial Y^2} - 2 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial y \partial Y} \end{array} \right.$$

Portanto, levando esses resultados na equação (8) e dividindo os operadores ∇_1^2 e ∇_2^2 por m_1 e m_2 , respectivamente, obtemos

$$\frac{\nabla_1^2}{m_1} = \frac{1}{m_1} \nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{m_1}{(m_1 + m_2)^2} \nabla_{\vec{R}}^2 + \frac{2}{m_1 + m_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x \partial X} + \frac{\partial^2}{\partial y \partial Y} \right) \quad (9)$$

$$\frac{\nabla_2^2}{m_2} = \frac{1}{m_2} \nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{m_2}{(m_1 + m_2)^2} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{2}{m_1 + m_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x \partial X} + \frac{\partial^2}{\partial y \partial Y} \right) \quad (10)$$

Substituindo ∇_1^2 e ∇_2^2 pelos seus novos valores nas coordenadas escolhidas, dados pelas equações (9) e (10), na equação (7), obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{m_1 + m_2}{(m_1 + m_2)^2} \nabla_{\vec{R}}^2 + V(r) \right] \Psi = E_T \Psi \quad (11)$$

Para simplificar, definimos a massa reduzida $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$ e a massa total $M = m_1 + m_2$. Assim, a equação (11) se torna

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 \right] \Psi + V(r) \Psi = E_T \Psi \quad (12)$$

Se a energia potencial é uma função do tipo $V = V(r)$, podemos separar as variáveis fazendo $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \chi(\vec{R})\psi(\vec{r})$ e a equação (12) pode ser desmembrada nas seguintes equações:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\vec{R}}^2\chi(\vec{R}) = E_{CM}\chi(\vec{R}) \quad (13)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}^2 + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (14)$$

sendo $E_T = E_{CM} + E$ a energia total do sistema.

A equação (13) mostra que o centro de massa do sistema tem o comportamento de uma partícula livre com massa igual à massa total do sistema, $M = m_1 + m_2$, e energia E_{CM} .

Já a equação (14) descreve o movimento relativo das partículas, a partir do comportamento de uma partícula de massa reduzida $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$, e energia E , em um campo com simetria radial. Toda a dinâmica está contida nessa equação.

No caso do átomo de hidrogênio, uma vez que a massa do próton é muito maior que a massa do elétron, a massa reduzida é praticamente a massa do elétron, ou seja, $\mu \simeq m_e$. Note que essa aproximação deixa de ser válida no átomo muônico, como veremos mais adiante.

Portanto, agora é preciso reescrever a equação (14), explicitando as dependências nas coordenadas polares r e θ . Para o caso bidimensional, o operador laplaciano em duas dimensões, em termos dessas coordenadas, é escrito como

$$\nabla_{\vec{r}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (15)$$

Assim, a equação (14) se torna

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (16)$$

que pode ser reagrupada da forma

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + [E - V(r)] \right\} \psi(r, \theta) = -\frac{1}{r^2} \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \psi(r, \theta) \quad (17)$$

Admitindo que a solução seja da forma $\psi(r, \theta) = R(r)e^{\pm i\ell\theta}$, da equação (17), obtém-se

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + [E - V(r)] - \frac{\ell^2 \hbar^2}{r^2 2\mu} \right\} R(r) = 0 \quad (18)$$

$$-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} e^{\pm i\ell\theta} = \ell^2 e^{\pm i\ell\theta} \quad (19)$$

Em que o inteiro ℓ é o número quântico associado ao momento angular de um sistema bidimensional. O termo proporcional à derivada primeira na equação (18) pode ser eliminado fazendo-se a transformação $R(r) = r^{-\frac{1}{2}}u(r)$. Feitas as derivadas de $R(r)$ para serem substituídas na equação (18), obtemos

$$\frac{dR}{dr} = -\frac{1}{2}r^{-\frac{3}{2}}u(r) + r^{-\frac{1}{2}}\frac{du}{dr} \quad (20)$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} = \frac{3}{4}r^{-\frac{5}{2}}u(r) - \frac{1}{2}r^{-\frac{3}{2}}\frac{du}{dr} + r^{-\frac{1}{2}}\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{1}{2}r^{-\frac{3}{2}}\frac{du}{dr} \quad (21)$$

Multiplicando-se agora a primeira equação por $1/r$ e somando com a segunda, resulta em

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} = \frac{1}{4}r^{-2}r^{-\frac{1}{2}}u(r) + r^{-\frac{1}{2}}\frac{d^2u}{dr^2} \quad (22)$$

Substituindo a equação (22) em (18), lembrando que $R(r) = r^{-\frac{1}{2}}u(r)$, obtém-se

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{4}r^{-2}r^{-\frac{1}{2}}u(r) + r^{-\frac{1}{2}}\frac{d^2u}{dr^2} \right] + [E - V(r)]r^{-\frac{1}{2}}u(r) - \frac{\ell^2 \hbar^2}{r^2 2\mu}r^{-\frac{1}{2}}u(r) = 0 \quad (23)$$

Eliminando o fator $r^{-\frac{1}{2}}$, que aparece em todos os termos da equação e multiplicando tudo por $\frac{2\mu}{\hbar^2}$, podemos reescrever a equação (23) sem o termo da derivada de primeira ordem, obtendo a equação de Schrödinger, para um potencial qualquer, em duas dimensões:

$$\boxed{\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{(\ell^2 - \frac{1}{4})}{r^2} \right] u(r) = 0} \quad (24)$$

Em sequência, vamos substituir na equação (24) os potenciais de interação do tipo

$1/r$, $\ln(r)$, o potencial de Chern-Simons e por fim uma combinação dos potenciais $1/r$ e $\ln(r)$ com um potencial externo harmônico simples para descrever um modelo de *quantum dot*. Para todos os casos, mostraremos as operações necessárias para escrevê-las em suas formas adimensionais. Este passo é de suma importância para o desenvolvimento dos cálculos numéricos que serão realizados futuramente.

1.1 Potencial do tipo $1/r$

Introduzindo o usual potencial coulombiano $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ na equação (24), obtemos:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2 (\ell^2 - \frac{1}{4})}{2\mu r^2} \right] u(r) = 0 \quad (25)$$

e fazendo a transformação $r = \rho\rho_0$ com $\rho_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu e^2}$, resulta

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left[\frac{E}{e^2/(\rho_0)} + \frac{1}{\rho} - \frac{(\ell^2 - \frac{1}{4})}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0 \quad (26)$$

Obtemos, assim, a equação de Schrödinger em duas dimensões para duas partículas interagindo por meio do potencial coulombiano:

$$\boxed{\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left[\varepsilon - V_{eff}(\rho) \right] u(\rho) = 0} \quad (27)$$

com $\varepsilon = \frac{E}{e^2/\rho_0}$ e $V_{eff}(\rho) = -\frac{1}{\rho} + \frac{(\ell^2 - \frac{1}{4})}{\rho^2}$.

1.2 Potencial do tipo $\ln(r)$

Como já foi mostrado na Introdução, em duas dimensões, temos que o potencial coulombiano não mais é dado pelo tradicional termo coulombiano $-\frac{e^2}{r}$, mas sim por um potencial logarítmico do tipo

$$V(r) = V_0 \ln\left(\frac{r}{L}\right)$$

sendo L um fator de escala, visto que o logaritmo só é definido para quantidades adimensionais e V_0 é um fator que dá a devida dimensão de energia potencial. Assim, partindo da equação (24), obtemos:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V_0 \ln\left(\frac{r}{L}\right) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{(\ell^2 - \frac{1}{4})}{r^2} \right] u(r) = 0 \quad (28)$$

e fazendo agora $r = \rho\rho_1$, com $\rho_1^2 = \frac{\hbar^2}{2V_0\mu}$ e $L = \rho_1$, obtemos

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left[\frac{E}{V_0} - \ln(\rho) - \frac{(\ell^2 - \frac{1}{4})}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0 \quad (29)$$

Portanto, a equação de Schrödinger, em duas dimensões, que descreve duas partículas interagindo com o potencial logarítmico é dada por:

$$\boxed{\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left[\beta - V_{eff}(\rho) \right] u(\rho) = 0} \quad (30)$$

com, $\beta = \frac{E}{V_0}$ e $V_{eff}(\rho) = \ln(\rho) + \frac{(\ell^2 - \frac{1}{4})}{\rho^2}$

1.3 Potencial do tipo Chern-Simons

A Eletrodinâmica de Maxwell-Chern-Simons em (1+2) dimensões pode ser obtida introduzindo o termo de Chern-Simons, que é de natureza topológica, na lagrangiana que descreve a teoria usual de Maxwell na mesma dimensão (MOURA-MELO; HELAYËL-NETO, 2001). Em particular, podemos obter a seguinte relação entre os campos magnético e elétrico de uma carga pontual e (no sistema de unidades gaussianas):

$$E = -\nabla\phi = \frac{\hbar}{m_\gamma c} \nabla B \quad ; \quad B = -V_0 \frac{m_\gamma c e}{2\pi\hbar} K_0(m_\gamma c r / \hbar) \quad (31)$$

sendo K_0 a função de Bessel modificada do segundo tipo e m_γ a massa topológica efetiva do fóton; V_0 é um fator que ajusta a dimensão da energia em $2D$ para o potencial elétrico. Da equação (31) é simples obter a expressão para o potencial elétrico de uma carga pontual (e) dada por

$$\phi(r) = \frac{eV_0}{2\pi} K_0 \left(\frac{m_\gamma c}{\hbar} r \right) \quad (32)$$

Introduzindo o potencial dado pela equação (32) com $V(r) = -e\phi(r)$ na equação (24), obtemos:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2 V_0}{2\pi} K_0 \left(\frac{m_\gamma c}{\hbar} r \right) - \frac{\hbar^2 (\ell^2 - \frac{1}{4})}{2\mu r^2} \right] u(r) = 0 \quad (33)$$

fazendo, $m_\gamma = \lambda m_e$, $\mu = \zeta m_e$, $r = \frac{\rho \rho_3}{\sqrt{\zeta}}$ e $\rho_3^2 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2 V_0}$

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left[\rho_3^2 \frac{2m_e}{\hbar^2} E + \frac{1}{\pi} K_0 \left(\frac{\lambda m_e c \rho \rho_3}{\hbar \sqrt{\zeta}} \right) - \frac{(\ell^2 - \frac{1}{4})}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0 \quad (34)$$

Enfim, usando as unidades atômicas, nas quais $\hbar = m_e = e = V_0 = 1$ e $c = \alpha^{-1} \simeq 137,0356$, com α representando a constante de estrutura fina, podemos escrever a equação de Schrödinger para um átomo formado por duas partículas governadas pela interação de Chern–Simons:

$$\boxed{\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left[\eta - V_{eff}(\rho) \right] u(\rho) = 0} \quad (35)$$

com $\eta = 2E$ e $V_{eff} = -\frac{1}{\pi} K_0 \left(\frac{\lambda \rho}{\alpha \sqrt{\zeta}} \right) - \frac{(\ell^2 - \frac{1}{4})}{\rho^2}$

1.4 *Quantum Dot*

Recentes avanços na fabricação de semicondutores permitiram a criação de estruturas que possuem um comportamento similar a átomos e, ao mesmo tempo, similar a um semicondutor. Essas estruturas são criadas depositando-se uma camada atômica de cada vez, cada qual com diferentes tipos de semicondutores, que permitem a criação de um poço capaz de confinar estes elétrons. Chamamos estas estruturas de *quantum dots* (CARUSO; OGURI; SILVEIRA, 2019b; LIU *et al.*, 2021). São consideradas átomos artificiais, por se tratar de elétrons confinados espacialmente, que apresentam um comportamento semelhante ao de um átomo. Um bom modelo para este caso é obtido impondo uma frequência harmônica externa que faz o papel de manter os elétrons confinados de forma

semelhante ao que ocorre em um átomo devido à força do núcleo sobre os elétrons.

A capacidade de criar poços de potencial de diferentes tamanhos, alterando os materiais utilizados na construção destes semicondutores, pode ser entendida teoricamente como a possibilidade de ter átomos artificiais confinados com diferentes frequências harmônicas. Estas frequências geram *quantum dots* de diferentes tamanhos que possuem características próprias. Uma das principais aplicações para *quantum dot* hoje em dia é a criação de dispositivos emissores de luz, cuja a frequência é dependente do tamanho do *quantum dot* (WOGGON, 1958).

Nesta seção, iremos, a partir da equação (24), construir dois modelos para um *quantum dot*, o primeiro utilizando o usual potencial coulombiano $1/r$ e o segundo com o potencial do tipo $\ln(r)$. Em ambos os casos também consideramos um potencial externo harmônico simples com frequência Ω que é responsável pelo confinamento destas duas partículas.

Introduzindo o potencial

$$V(r) = \frac{\mu}{2}\Omega^2 r + \frac{e^2}{r} \quad (36)$$

na equação (24), obtemos:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} E - \frac{\mu^2}{\hbar^2} \Omega^2 r^2 - \frac{2\mu e^2}{\hbar^2 r} - \frac{(l^2 - \frac{1}{4})}{r^2} \right] u(r) = 0 \quad (37)$$

Considerando as unidade atômicas $\hbar = e = m_1 = m_2 = V_0 = 1$, com $\mu = \frac{1}{2}$, $\Omega = 2\omega$, e fazendo $r = \rho\rho_0$ com $\rho_0^2 = \frac{\hbar^2}{2V_0\mu}$, temos

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left[E - \omega^2 \rho^2 - \frac{1}{\rho} - \frac{(l^2 - \frac{1}{4})}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0 \quad (38)$$

Já, para o potencial

$$V(r) = \frac{\mu}{2}\Omega^2 r + V_0 \ln\left(\frac{r}{L}\right) \quad (39)$$

temos que a equação (24), utilizando as mesmas unidades atômicas da equação (38), com $L = \rho_0^2$ pode ser escrita como

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left[E - \omega^2 \rho^2 - \ln(\rho) - \frac{(l^2 - \frac{1}{4})}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0 \quad (40)$$

Assim, temos a equação (38) que descreve um modelo de *quantum dot* em duas dimensões, considerando que a interação coulombiana não se altera quando mudamos de $3D$ para $2D$ e a equação (40) que considera, como dito na Introdução, o potencial do tipo $\ln(r)$ para descrever este mesmo modelo.

2 SOLUÇÕES NUMÉRICAS PARA OS SISTEMAS ATÔMICOS

Neste capítulo, para evitar uma repetição desnecessária, condensamos todas as soluções numéricas obtidas nos diferentes artigos em um só lugar. Inicialmente, vamos apresentar as soluções numéricas para as três equações que foram desenvolvidas nas Seções 1.1, 1.2 e 1.3 e, em seguida, apresentaremos os resultados para as equações referentes ao modelo de *quantum dot* apresentadas na Seção 1.4. Para isso, iremos utilizar uma versão do método numérico de Numerov desenvolvida na linguagem de programação *C++* utilizando o pacote CERN/ROOT (CARUSO; OGURI, 2014; CARUSO; OGURI; SILVEIRA, 2022).

Todos os resultados deste capítulo serão devidamente discutidos no último capítulo desta tese.

Para cada uma das três equações (27), (30) e (35), iremos utilizar seis diferentes átomos com um núcleo formado por próton (p), dêuteron (d que consiste de um próton e um nêutron) ou trítion (t que consiste de um próton e dois nêutrons). Utilizaremos tanto elétrons (e) como múons (μ) orbitando esses núcleos, formando assim os átomos: pe , de , te , $p\mu$, $d\mu$ e $t\mu$. As massas de cada elemento que formam esses átomos estão dispostas na tabela 1.

Tabela 1 - Tabela de massas em unidades da massa do elétron

Particle	Mass (m_e)
e	1
μ	206,7682830
p	1836,15267343
d	3670,48296788
t	5496,92153573

Legenda: Dêuteron e Trítion são respectivamente os núcleos do Deutério e do Trítio

Fonte: CARUSO *et al.*, 2021, p.2.

Para os potenciais $1/r$ e $\ln(r)$, já possuímos todos os requisitos necessários para encontrar as soluções numéricas; no entanto, para o potencial de Chern-Simons ainda precisamos conhecer os valores de γ e ζ . Como não existe um valor definido para a massa topológica do fóton m_γ , precisamos considerar um certo intervalo de valores plausíveis. Na tabela 2, temos os valores de m_γ que são esperados em diferentes sistemas. No decorrer desta tese, utilizaremos $m_\gamma = 1$ eV, 10 eV e 100 eV com intuito de tentar abranger diferentes ordens de grandezas de um parâmetro para o qual não há consenso na literatura.

Já a constante ζ é bem definida para cada átomo, sendo proporcional à sua massa reduzida, como mostra a tabela 3.

Tabela 2 - Valores de m_γ para diferentes sistemas

Supercondutor	m_γ (eV)
Convencional tipo I (Al, In, Sn, Pb, Nb)	0,1 – 1
Convencional tipo I (Pb-In, Nb-Ti, Nb-N, Pb-Bi)	2 – 10
Alta temperatura tipo II	10 – 20

Fonte: CARUSO *et al.*, 2021, p.1.

Tabela 3 - Valores do parâmetro ζ para diferentes átomos

Átomos	ζ	$\sqrt{\zeta}$
pe	0,99946	0,999730
de	0,99973	0,999865
te	0,99982	0,999910
$p\mu$	185,84083	13,632345
$d\mu$	195,74163	13,990769
$t\mu$	199,27259	14,116394

Fonte: CARUSO *et al.*, 2021, p.3.

Possuímos agora, todos os dados necessários para solucionar numericamente as equações (27), (30) e (35). Em todos os cálculos dispostos neste capítulo, utilizaremos o número quântico $\ell = 0$, com objetivo de comparar somente as funções de onda do estado fundamental; no entanto, é importante deixar claro que o método utilizado é capaz de encontrar soluções para diferentes valores de ℓ .

Como foi dito no início deste capítulo, na tabela 4 temos todos os resultados numéricos para os autovalores de energia (em rydberg) dos artigos (CARUSO *et al.*, 2020; CARUSO *et al.*, 2021; CARUSO *et al.*, 2022; CARUSO *et al.*, 2022) condensados em um só lugar. Para o potencial de Chern–Simons, apresentamos três diferentes valores correspondentes as escolhas de $\lambda = 0,2 \times 10^{-5}$, $\lambda = 0,2 \times 10^{-4}$ e $\lambda = 0,2 \times 10^{-3}$ respectivamente.

Podemos observar que as moléculas eletrônicas possuem todas as mesmas energias para cada tipo de potencial, isso se deve ao fato de a massa reduzida de todas elas ser praticamente igual à massa do elétron.

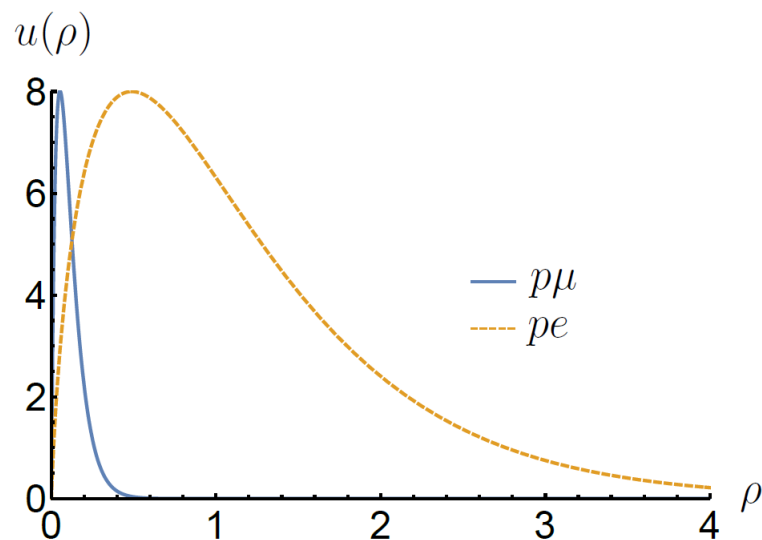
Tabela 4 - Energias dos estados fundamentais ($\ell = 0$) para os seis átomos com diferentes potenciais. Sendo ε as energias correspondentes ao potencial do tipo $1/r$, β , correspondentes ao potencial logarítmico e, por último, η as energias para o potencial de Chern-Simons para $\lambda = 0,2 \times 10^{-5}$, $\lambda = 0,2 \times 10^{-4}$ e $\lambda = 0,2 \times 10^{-3}$ respectivamente

Átomos	ε	β	η		
pe	-2,1	0,7103	-2,2417	-1,5083	-0,775
de	-2,1	0,7103	-2,2417	-1,5083	-0,775
te	-2,1	0,7103	-2,2417	-1,5083	-0,775
$p\mu$	-401,88	154,56	-3,0667	-2,3333	-1,6
$d\mu$	-411,47	162,80	-3,0750	-2,3417	-1,6083
$t\mu$	-410,28	151,82	-3,0833	-2,35	-1,6167

Fonte: O autor, 2022.

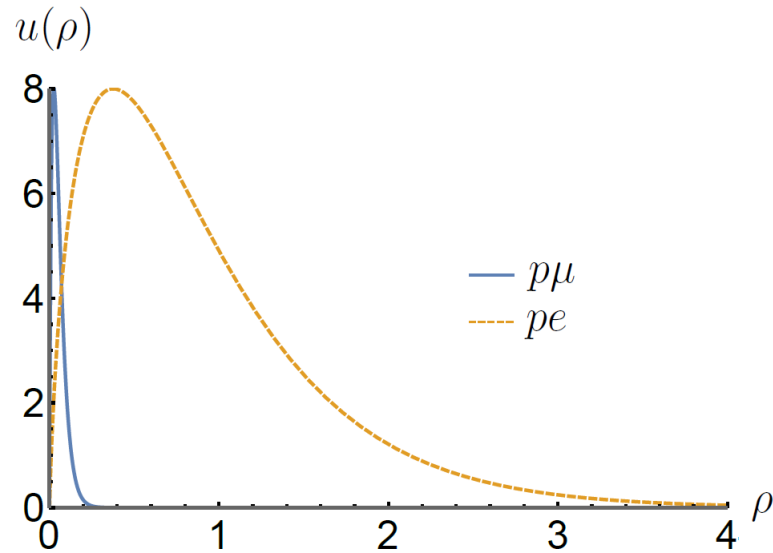
Nos gráficos a seguir, apresentamos funções de onda referentes a alguns dos valores de energia da tabela 4.

Figura 1 - Função de onda do estado fundamental para $p\mu$, linha contínua, e para o pe linha tracejada, para o potencial coulombiano $1/r$, em unidades arbitrárias.



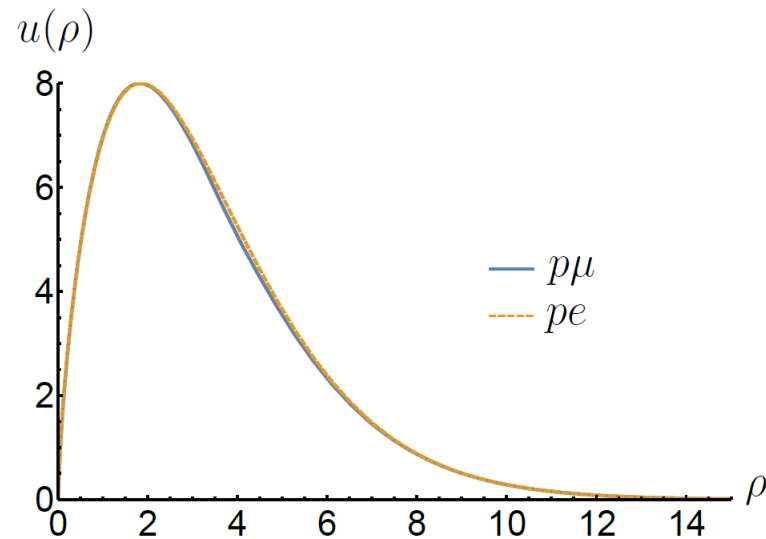
Fonte: CARUSO *et al.*, 2021, p.5.

Figura 2 - Função de onda do estado fundamental para $p\mu$, linha contínua, e para o pe linha tracejada, para o potencial do tipo logarítmico, em unidades arbitrárias.



Fonte: O autor, 2022.

Figura 3 - Função de onda do estado fundamental para $p\mu$, linha contínua, e para o pe linha tracejada, para o potencial de Chern–Simons, em unidades arbitrárias.



Fonte: CARUSO *et al.*, 2021, p.5.

Vamos agora, calcular para alguns átomos da tabela 4 os raios médios, em termos do raio de Bohr, utilizando a fórmula:

$$\langle r \rangle = \frac{\int r^D R_{\ell=0}^2(r) dr}{\int r^{D-1} R_{\ell=0}^2(r) dr}$$

Sendo D a dimensão espacial, no nosso caso $D = 2$, e $R_{\ell}(r)$ é a função de onda radial referente a solução das equações (27), (30) e (35). Os valores obtidos pela equação acima, estão dispostos na tabela 5.

Tabela 5 - Raio médio (em unidades do raio de Bohr a_B) para alguns dos átomos dispostos na tabela 4 além do átomo tridimensional dado pela primeira coluna. A terceira coluna, referente ao potencial de Chern-Simons foi calculada para $\lambda = 0,2 \times 10^{-4}$

Átomos	$\langle r \rangle / a_B$			
	3D	1/r	ln(r)	CS
pe	1,5	1,2	0,8331	2,58107
$p\mu$	0,00807	0,00797	0,0044	0,188879
$t\mu$	0,00753	0,00653	0,0042	0,184474

Fonte: O autor, 2022.

Já para os dois modelos de *quantum dot*, precisamos primeiro definir o valor da frequência externa Ω ($\Omega = 2\omega$), para prosseguirmos com a solução numérica. Podemos usar valores no intervalo $0,01 \text{ Ha} < \Omega < 0,1 \text{ Ha}$ (CARUSO; OGURI; SILVEIRA, 2019b). Apresentamos somente os autovalores de energia para $\omega = 0,01 \text{ Ha}$ e $\ell = 0$. Para o caso $1/r$, comparamos também com os resultados analíticos obtidos em (CARUSO; OGURI; SILVEIRA, 2019b) como podemos ver na tabela 6

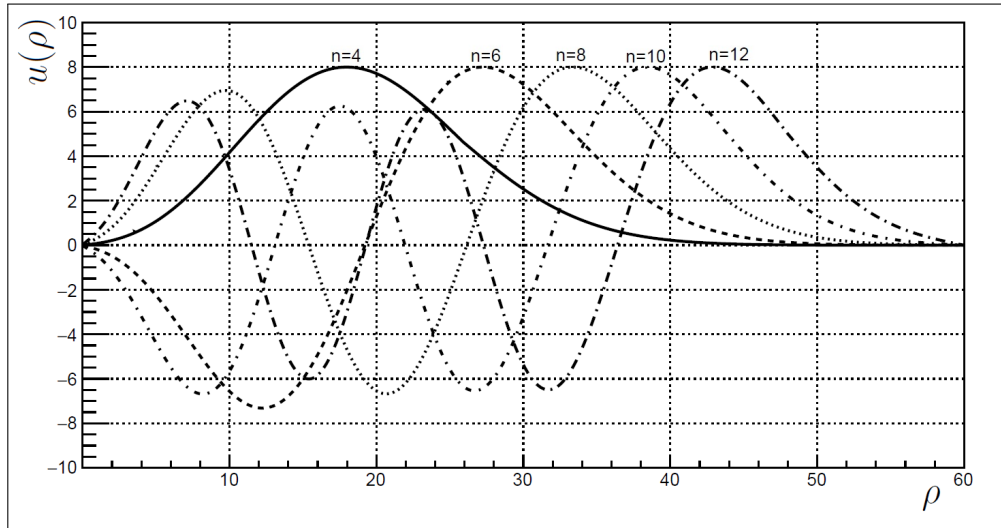
Tabela 6 - comparação entre as energias numéricas e analíticas para $l = 0$, $\omega = 0,01 \text{ Ha}$ e diferentes valores de n

n	$E \text{ (Ha)}$		
	(1/r) analítico	(1/r) numérico	ln(r)
4	0,1	0,1053	0,7107
6	0,14	0,1404	1,725
8	0,18	0,1767	-
10	0,2	0,2136	-
12	0,26	0,2511	-

Fonte: CARUSO; OGURI; SILVEIRA, 2019b, p.6.

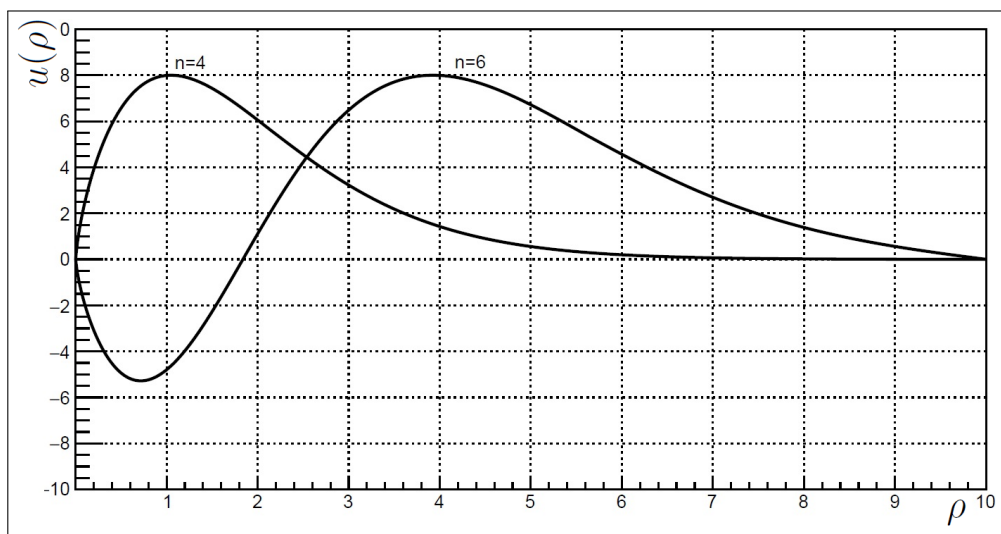
Observa-se que para o caso do potencial logarítmico só fomos capazes de obter soluções para os valores do número quântico $n = 4$ e $n = 6$. Nas figuras 4 e 5, temos diferentes funções de onda encontradas para cada um dos casos.

Figura 4 - Funções de onda radiais u_ρ , em unidades arbitrárias, para o potencial $1/r$ referentes aos autovalores de energia da tabela 6.



Fonte: CARUSO; OGURI; SILVEIRA, 2019b, p.5.

Figura 5 - Funções de onda radiais u_ρ , em unidades arbitrárias, para o potencial $\ln(\rho)$ referentes aos autovalores de energia da tabela 6.



Fonte: CARUSO; OGURI; SILVEIRA, 2019b, p.6.

3 MODELO PARA UMA MOLÉCULA EM DUAS DIMENSÕES

Neste capítulo, seguimos os passos do primeiro e apresentamos o formalismo geral de uma aproximação adiabática (PARK, 2005; CARUSO *et al.*, 2020) para descrever a equação de Schrödinger para uma molécula bidimensional considerando um potencial qualquer. Em seguida, definiremos essa equação para o potencial do tipo $\ln(r)$ e, a partir de uma aproximação adiabática, vamos expor todos os cálculos analíticos necessários para a obtenção de uma equação de Schrödinger capaz de descrever a interação entre os núcleos de uma molécula governada pelo potencial do tipo $\ln(r)$.

Na Seção 3.4, assim como foi feito em (CARUSO *et al.*, 2020), demonstramos que somos capazes de obter soluções numéricas equivalentes à analítica, portanto, não necessitamos desenvolver os cálculos analíticos novamente para outros potenciais. Na última seção deste capítulo, iremos apresentar o potencial que descreve efetivamente o comportamento dos núcleos de uma molécula, obtido numericamente, para a interação de Chern-Simons.

3.1 Aproximação adiabática em 2D

A equação de Schrödinger para uma molécula composta por três partículas é:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_3} \nabla_3^2 + V(\vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, \vec{r}_{12}) \right] \Psi(\vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, \vec{r}_{12}) = E_T \Psi(\vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, \vec{r}_{12}) \quad (41)$$

Sejam 1 e 2 os índices dos dois núcleos carregados positivamente e 3 denota a partícula negativa que os orbitam; $\vec{r}_{13} = \vec{r}_3 - \vec{r}_1$, $\vec{r}_{23} = \vec{r}_3 - \vec{r}_2$ e $\vec{r}_{12} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$. Vamos reescrever essa equação em relação ao centro de massa das partículas assim. Aemos que

$$\frac{\nabla_1^2}{m_1} = \frac{1}{m_1} \nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{m_1}{(m_1 + m_2)^2} \nabla_{\vec{R}}^2 + \frac{2}{m_1 + m_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x \partial X} + \frac{\partial^2}{\partial y \partial Y} \right) \quad (42)$$

$$\frac{\nabla_2^2}{m_2} = \frac{1}{m_2} \nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{m_2}{(m_1 + m_2)^2} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{2}{m_1 + m_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x \partial X} + \frac{\partial^2}{\partial y \partial Y} \right) \quad (43)$$

Substituindo ∇_1^2 e ∇_2^2 pelos seus novos valores nas coordenadas escolhidas e sepa-

rando o potencial $V(\vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, \vec{r}_{12})$ em 3 partes, temos:

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{m_1 + m_2}{(m_1 + m_2)^2} \nabla_{\vec{R}}^2 \right] + \right. \\ \left. - \frac{\hbar^2}{2m_3} \nabla_{\vec{r}_3}^2 + V(\vec{r}_{13}) + V(\vec{r}_{23}) + V(\vec{r}_{12}) \right\} \Psi = E_T \Psi \quad (44)$$

Para simplificar, define-se a massa reduzida $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$ e a massa total $M = m_1 + m_2$. Assim, a equação (44) se torna

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 \right] \Psi - \frac{\hbar^2}{2m_3} \nabla_{\vec{r}_3}^2 + V(\vec{r}_{13}) + V(\vec{r}_{23}) + V(\vec{r}_{12}) \Psi = E_T \Psi \quad (45)$$

O método escolhido pressupõe que a parte eletrônica dessa equação faça parte da energia potencial entre os átomos no núcleo. Fazendo a mudança $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \chi(\vec{R})\psi(\vec{r})$, podemos separar a equação anterior em duas:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 \chi(\vec{R}) = E_{CM} \chi(\vec{R}) \quad (46)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_3} \nabla_{\vec{r}_3}^2 + V(\vec{r}_{13}) + V(\vec{r}_{23}) + V(\vec{r}_{12}) \right] \psi(r) = E \psi(r) \quad (47)$$

com $E_T = E_{CM} + E$ sendo a energia total do sistema.

A equação (46) mostra que o centro de massa do sistema tem o comportamento de uma partícula livre com massa igual a massa total do sistema, $M = m_1 + m_2$, e energia E_{CM} .

Já a equação (47) descreve o movimento relativo das partículas, a partir do comportamento de uma partícula de massa reduzida $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$, e energia E , em um campo com simetria radial. Toda a dinâmica está contida nessa equação.

Neste modelo, considera-se que o elétron, ou o múon, segue adiabaticamente o movimento dos dois núcleos; isso significa, que, na prática, podemos considerar que os núcleos estão fixos e, assim, desconsiderar suas contribuições cinéticas na equação (47). O que sobra, pode ser escrito como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_3} \nabla_{\vec{r}_3}^2 + V(\vec{r}_{13}) + V(\vec{r}_{23}) \right] \Psi = E \Psi \quad (48)$$

Desse modo, o modelo, presume que a equação (48) faz parte do potencial de

interação entre os dois núcleos de nossa molécula. Logo, a equação (47) pode ser reescrita como:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(\vec{r}_{12}) + W_{\pm} \right\} \psi(r) = E\psi(r) \quad (49)$$

definindo W_{\pm} como o valor esperado da energia da equação (48). Portanto, antes de resolvermos a equação (49), precisamos encontrar o valor de W_{\pm} , e, para isso, mais uma aproximação deve ser feita. Devemos supor que a função de onda da molécula é composta da soma das funções de onda de dois átomos (cada átomo é formado pelo elétron, ou múon, e um dos dois núcleos), assim

$$\psi_{\pm} = N_{\pm} (\psi_{13} \pm \psi_{23}) \quad (50)$$

Portanto, podemos agora encontrar o valor esperado da energia W_{\pm} que pode ser calculado por

$$W_{\pm} = E_0 + \frac{\mathfrak{D} \pm \mathfrak{E}}{1 \pm \Delta} \quad (51)$$

com E_0 representando o valor da energia do estado fundamental do átomo que forma cada molécula. Os valores de E_0 podem ser encontrados na tabela 4 e os fatores \mathfrak{D} and \mathfrak{E} são, respectivamente, conhecidos como *direct* and *exchange integrals*, e definidos por:

$$\mathfrak{D} = \int \left(V(r_{23})\psi_{13}^2 + V(r_{13})\psi_{23}^2 \right) d^{2D}V \quad (52)$$

$$\mathfrak{E} = \int \left(V(r_{13})\psi_{13}\psi_{23} + V(r_{23})\psi_{13}\psi_{23} \right) d^{2D}V \quad (53)$$

O fator de normalização Δ , conhecido como *overlap integral* é definido por:

$$1 \pm \Delta = \frac{|N_{\pm}|^{-2}}{2} = \int \left(|\psi_{13}|^2 + |\psi_{23}|^2 \pm 2\psi_{13}\psi_{23} \right) d^{2D}V \quad (54)$$

Devemos agora, resolver a equação (49) e calcular os valores de W_{\pm} para cada um dos três potenciais, que estamos estudando nesta tese, para que enfim possamos resolver, numericamente, as equações de Schrödinger que descrevem as diferentes moléculas. Por simplicidade, iremos expor aqui somente os cálculos para o potencial $\ln(r)$ e para o potencial de Chern-Simons.

3.2 Equação para o potencial $\ln(r)$

Partimos da equação (47), com

$$V(\vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, \vec{r}_{12}) = V_0 \ln \frac{r_{13}}{r_0} + V_0 \ln \frac{r_{23}}{r_0} - V_0 \ln \frac{r_{12}}{r_0} \quad (55)$$

O fator V_0 dá a devida dimensão para a energia potencial, como já foi mostrado na Introdução. Devemos, então, realizar as devidas transformações com intuito de obter uma equação adimensional, que será necessária futuramente para o cálculo numérico. Reescrevendo a equação (47), temos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\vec{r}_3}^2 + V_0 \ln \frac{r_{13}}{r_0} + V_0 \ln \frac{r_{23}}{r_0} - V_0 \ln \frac{r_{12}}{r_0} \right] \psi(r) = E\psi(r) \quad (56)$$

Multiplicando toda a equação (56) por $\frac{1}{V_0}$ e fazendo $\rho_0^2 = \frac{\hbar^2}{2V_0 m_3}$, obtemos

$$\left[-\frac{m_3}{\mu} \rho_0^2 \nabla_r^2 - \rho_0^2 \nabla_{\vec{r}_3}^2 + \ln \frac{r_{13}}{r_0} + \ln \frac{r_{23}}{r_0} - \ln \frac{r_{12}}{r_0} \right] \psi(r) = \frac{E}{V_0} \psi(r) \quad (57)$$

Fazendo as transformações $\rho_{13} = \frac{r_{13}}{\rho_0}$, $\rho_{23} = \frac{r_{23}}{\rho_0}$, $\rho_{12} = \frac{r_{12}}{\rho_0}$ e $r_0 = \rho_0$

$$\left[-\frac{m_3}{\mu} \nabla_\rho^2 - \nabla_{\rho_3}^2 + \ln \rho_{13} + \ln \rho_{23} - \ln \rho_{12} \right] \psi(\rho) = \frac{E}{V_0} \psi(\rho) \quad (58)$$

podemos reescrever essa equação como

$$\left\{ -\nabla_\rho^2 - \frac{\mu}{m_3} \ln \rho_{12} + \frac{\mu}{m_3} \underbrace{\left[-\nabla_{\rho_3}^2 + \ln \rho_{13} + \ln \rho_{23} \right]}_{W_\pm} \right\} \psi(\rho) = \underbrace{\frac{\mu}{m_3} \frac{E}{V_0}}_\beta \psi(\rho) \quad (59)$$

ou

$$\left\{ -\nabla_\rho^2 + \frac{\mu}{m_3} [-\ln \rho_{12} + W_\pm] \right\} \psi(\rho) = \beta \psi(\rho) \quad (60)$$

Antes de seguirmos para o cálculo do W_\pm vamos explicitar o operador ∇_ρ^2 com o objetivo de reescrever essa equação sem a dependência da derivada de primeira ordem. Isso é importante para facilitar o método numérico que vai ser usado futuramente. Assim:

$$\nabla_{\rho}^2 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (61)$$

donde

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\mu}{m_3} [-\ln \rho + W_{\pm}] \right\} \psi(\rho) = \varepsilon \psi(\rho) \quad (62)$$

Sabendo que o número quântico momento angular de um sistema bidimensional é $-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} = \ell^2$ (sendo ℓ um inteiro)

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\ell^2}{\rho^2} + \frac{\mu}{m_3} [-\ln \rho + W_{\pm}] \right\} \psi(\rho) = \varepsilon \psi(\rho) \quad (63)$$

Admitindo que a solução seja da forma $\psi(\rho, \theta) = R(\rho)e^{\pm i\ell\theta}$, obtemos a seguinte equação radial:

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \varepsilon - \frac{\ell^2}{\rho^2} + \frac{\mu}{m_3} [-\ln \rho + W_{\pm}] \right\} R(\rho) = 0 \quad (64)$$

O termo proporcional à derivada primeira na equação anterior pode ser eliminado fazendo-se a transformação $R(\rho) = \rho^{-\frac{1}{2}} u(\rho)$. Feitas as derivadas de $R(\rho)$ para serem substituídas, chegamos à equação

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \varepsilon - \frac{\mu}{m_3} [-\ln \rho + W_{\pm}] - \frac{(\ell^2 - \frac{1}{4})}{\rho^2} \right\} u(\rho) = 0 \quad (65)$$

Antes de resolver essa equação, precisamos calcular o valor de W_{\pm} (Seção 3.3).

3.3 Cálculo de W_{\pm} para o potencial $\ln(r)$

Inicialmente, vamos calcular o fator de normalização N_{\pm} , dado por:

$$|N_{\pm}|^{-2} = 2 \int |\psi_a + \psi_b|^2 dA = 2 \int (|\psi_a|^2 + |\psi_b|^2 \pm 2\psi_a\psi_b) dA \quad (66)$$

Essa integral, conhecida como *two-center integral*, envolve a integração de duas variáveis referentes a dois pontos fixos a e b . Na prática, esses são os pontos ocupados

pelos prótons, uma vez que se supõe que eles estão em repouso na molécula. Nesse caso, o elétron teria órbitas elípticas e os dois prótons estariam nos focos da elipse. Assim, naturalmente, a integral é mais simples no chamado *prolate spheroidal coordinates*, dado por:

$$\frac{\rho_a + \rho_b}{R/a_0^*} = \xi \quad ; \quad \frac{\rho_a - \rho_b}{R/a_0^*} = \eta$$

com $1 \leq \xi < \infty$ e $-1 \leq \eta \leq +1$. Fazendo $\rho \equiv R/a_0^*$, sendo a_0^* o raio de Bohr dado por $a_0^* \simeq \frac{a_0}{206}$. Neste sistema de coordenadas o elemento de volume em duas dimensões ($d^{2D}V$) pode ser escrito como

$$d^{2D}V = \frac{\rho^2}{4} \frac{(\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \quad (67)$$

Fazendo $a = 13$ e $b = 23$, as duas primeiras integrais de (66) são imediatas e iguais a $1/2$ cada. Logo precisamos agora, conhecer as funções de onda ψ_{13} e ψ_{23} para que possamos substituí-las no termo cruzado. A partir dos resultados do Capítulo 2, utilizamos o software *Mathematica* para realizar um ajuste das funções de onda com o objetivo de encontrar uma expressão analítica para as mesmas; com isso, temos as seguintes funções normalizadas:

$$\psi_{13}(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\rho_{13}} e^{-\rho_{13}} \quad ; \quad \psi_{23}(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\rho_{23}} e^{-\rho_{23}}$$

Assim, substituindo em funções de onda em (66), obtém-se

$$|N_{\pm}|^{-2} = 2 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{8}{\pi} \int \sqrt{\rho_{13}} \sqrt{\rho_{23}} e^{-(\rho_{13} + \rho_{23})} dA$$

temos

$$\begin{aligned} |N_{\pm}|^{-2} &= 2 \pm \frac{8}{\pi} \int_1^{\infty} d\xi \int_{-1}^1 d\eta \left(\frac{R}{2}(\xi + \eta) \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{R}{2}(\xi - \eta) \right)^{\frac{1}{2}} e^{-(\xi R)} \frac{R^2}{4} \frac{(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \\ &= 2 \pm \frac{R^3}{\pi} \int_1^{\infty} d\xi \int_{-1}^1 d\eta (\xi + \eta)^{\frac{1}{2}} (\xi - \eta)^{\frac{1}{2}} e^{-(\xi R)} \frac{(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \end{aligned}$$

ou seja,

$$|N_{\pm}|^{-2} = 2 \pm \frac{R^3}{\pi} \underbrace{\int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} \int_1^{\infty} \frac{(\xi^2 - \eta^2)^{\frac{3}{2}} e^{-\xi R}}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi}_{J_0} \quad (68)$$

ou ainda,

$$|N_{\pm}|^{-2} = 2(1 \pm \Delta) \quad ; \quad \Delta = \frac{R^3}{2\pi} J_0$$

Para resolver a integral J_0 na variável ξ , vamos utilizar a aproximação¹ até $\mathcal{O}(\eta^7)$ a seguir:

$$(\xi^2 - \eta^2)^{\frac{3}{2}} \simeq \xi^3 - \frac{3}{2}\xi\eta^2 + \frac{3}{8}\frac{\eta^4}{\xi} + \frac{1}{16}\frac{\eta^6}{\xi^3} \quad (69)$$

Assim, temos:

$$J_0 = \int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} \left[\underbrace{\int_1^{\infty} \frac{\xi^3 e^{-\xi R}}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi}_{j_1} - \frac{3\eta^2}{2} \underbrace{\int_1^{\infty} \frac{\xi e^{-\xi R}}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi}_{j_2} \right] +$$

$$+ \int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} \left[\frac{3\eta^4}{8} \underbrace{\int_1^{\infty} \frac{e^{-\xi R}}{\xi \sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi}_{j_3} + \frac{\eta^6}{16} \underbrace{\int_1^{\infty} \frac{e^{-\xi R}}{\xi^3 \sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi}_{j_4} \right]$$

Conhecendo o valor de $j = \int_1^{\infty} d\xi \frac{e^{-\xi R}}{\sqrt{\xi^2 - 1}}$, podemos calcular as duas integrais j_1 e j_2 ,

pois $j_1 = -\frac{d^3}{dR^3}j$ e $j_2 = -\frac{d}{dR}j$. Portanto,

$$j = K_0(R)$$

e

¹ Verificamos a acurácia dessa aproximação resolvendo numericamente no software *Mathematica* a integral dupla com e sem a aproximação (fixando $R = 1$). Os valores encontrados foram 5,74427 (sem aproximação) e 5,57732 (com a aproximação), que corresponde a um erro de $\simeq 2,9\%$.

$$j_1 = -\frac{d^3}{dR^3}K_0(R) = \frac{1}{4}[3K_1(R) + K_3(R)]$$

e

$$j_2 = -\frac{d}{dR}K_0 = K_1(R)$$

em que $K_n(x)$ é a função de Bessel modificada de segunda espécie. Logo,

$$\begin{aligned} J_0 &= \frac{1}{4}[3K_1(R) + K_3(R)] \overbrace{\int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}}}^{\pi} - \frac{3}{2}K_1(R) \overbrace{\int_{-1}^1 \frac{\eta^2 d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}}}^{\pi/2} + \\ &+ \frac{3}{8} \int_1^\infty \frac{e^{-\xi R}}{\xi \sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi \overbrace{\int_{-1}^1 \frac{\eta^4 d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}}}^{3\pi/8} + \frac{1}{16} \int_1^\infty \frac{e^{-\xi R}}{\xi^3 \sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi \overbrace{\int_{-1}^1 \frac{\eta^6 d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}}}^{5\pi/16} \end{aligned}$$

ou

$$J_0 = \pi \left\{ \frac{K_3(R)}{4} + \frac{1}{64} \left[9j_3 + \frac{5}{4}j_4 \right] \right\}$$

Para resolvermos as duas integrais j_3 e j_4 usaremos a expansão em série de Laurent, em torno de $\xi = \infty$, dada pela equação (70) conforme o *Mathematica*.

$$\frac{1}{\sqrt{\xi^2 - 1}} \simeq \frac{1}{\xi} + \frac{1}{2\xi^3} + \frac{3}{8\xi^5} + \frac{5}{16\xi^7} + \mathcal{O}((1/\xi)^9) \quad (70)$$

Assim, colocando fatores constantes em evidência, temos:

$$\begin{aligned} J_0 &= \frac{\pi}{4}K_3(R) + \frac{\pi}{64} \left[9 \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi} d\xi}{\xi^2} + \frac{9}{2} \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi} d\xi}{\xi^4} + \frac{27}{8} \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi} d\xi}{\xi^6} + \frac{45}{16} \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi} d\xi}{\xi^8} \right. \\ &+ \left. \frac{5}{4} \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi} d\xi}{\xi^4} + \frac{5}{8} \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi} d\xi}{\xi^6} + \frac{15}{32} \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi} d\xi}{\xi^8} + \frac{25}{64} \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi} d\xi}{\xi^{10}} \right] \end{aligned}$$

As integrais em ξ da equação anterior podem ser escritas em termos das funções Gamma incompletas, definidas como

$$\Gamma(s, x) = \int_x^\infty t^{s-1} e^{-t} dt$$

Desse modo, a função J_0 se escreve como:

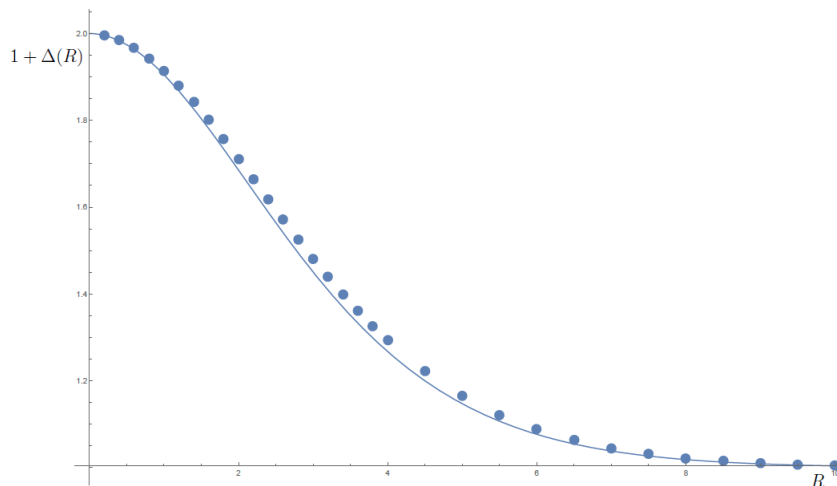
$$J_0 = \frac{\pi}{4}K_3(R) + \frac{\pi}{64} \left[9R\Gamma(-1, R) + \frac{9R^3}{2}\Gamma(-3, R) + \frac{27R^5}{8}\Gamma(-5, R) + \frac{45R^7}{16}\Gamma(-7, R) + \right. \\ \left. + \frac{5R^3}{4}\Gamma(-3, R) + \frac{5R^5}{8}\Gamma(-5, R) + \frac{15R^7}{32}\Gamma(-7, R) + \frac{25R^9}{68}\Gamma(-9, R) \right]$$

ou, agrupando os termos semelhantes, temos

$$\Delta = \frac{R^3}{2\pi} \left\{ \frac{\pi}{4}K_3(R) + \frac{\pi}{64} \left[9R\Gamma(-1, R) + \frac{23}{4}R^3\Gamma(-3, R) + \frac{32}{8}R^5\Gamma(-5, R) + \right. \right. \quad (71) \\ \left. \left. + \frac{105}{32}R^7\Gamma(-7, R) + \frac{25}{68}R^9\Gamma(-9, R) \right] \right\}$$

A comparação entre o nosso resultado analítico e os pontos obtidos fazendo as integrais numericamente, sem aproximação, é mostrada na figura 6, indicando um ótimo resultado.

Figura 6 - Comparação entre a função analítica e os pontos numéricos.



Legenda: Na linha contínua, temos o *plot* da função $1 + \Delta$ em 2D calculada analiticamente, equação (71), comparado com os pontos obtidos da integração numérica feita no *Mathematica* da função $1 + \Delta$.

Fonte: O autor, 2022.

O valor esperado da energia a ser calculado e substituído na equação (65) é

$$W_{\pm} = |N_{\pm}|^2 \int (\psi_{13} \pm \psi_{23}) (-\nabla^2 + \ln(\rho_{13}) + \ln(\rho_{23})) (\psi_{13} \pm \psi_{23}) d^{2D}V \quad (72)$$

mas

$$\nabla^2 \psi_{13} - \ln(\rho_{13}) \psi_{13} = -E_0 \psi_{13}; \quad \nabla^2 \psi_{23} - \ln(\rho_{23}) \psi_{23} = -E_0 \psi_{23} \quad (73)$$

Assim, substituindo a equação (73) na equação (72), temos

$$\begin{aligned} W_{\pm} &= -|N_{\pm}|^2 \int (\psi_{13} \pm \psi_{23}) [(-E_0 - \ln(\rho_{23}))\psi_{13} \pm (-E_0 - \ln(\rho_{13}))\psi_{23}] d^{2D}V \\ &= -|N_{\pm}|^2 \int (\psi_{13} \pm \psi_{23}) [(-E_0)(\psi_{13} \pm \psi_{23}) + (-\ln(\rho_{23})\psi_{13}) \pm (-\ln(\rho_{13})\psi_{23})] d^{2D}V \end{aligned}$$

o que pode ser escrito como

$$W_{\pm} = E_0 - |N_{\pm}|^2 \int [-\ln(\rho_{23})\psi_{13}^2 - \ln(\rho_{13})\psi_{23}^2 \pm (-\ln(\rho_{23})\psi_{13}\psi_{23} - \ln(\rho_{13})\psi_{13}\psi_{23})] d^{2D}V$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} W_{\pm} &= E_0 + |N_{\pm}|^2 \underbrace{\int (\ln(\rho_{23})\psi_{13}^2 + \ln(\rho_{13})\psi_{23}^2) d^{2D}V}_{\mathfrak{D}} + \\ &\pm |N_{\pm}|^2 \underbrace{\int (\ln(\rho_{13})\psi_{13}\psi_{23} + \ln(\rho_{23})\psi_{13}\psi_{23}) d^{2D}V}_{\mathfrak{E}} \end{aligned} \quad (74)$$

Ainda falta incluir o fator 2 nas definições de \mathfrak{D} e \mathfrak{E} na equação (74) para levar em conta a integração em todo o espaço 2D causado pela escolha das coordenadas elípticas, assim:

$$\begin{aligned} W_{\pm} &= E_0 + 2|N_{\pm}|^2 \underbrace{\int (\ln(\rho_{23})\psi_{13}^2 + \ln(\rho_{13})\psi_{23}^2) d^{2D}V}_{\mathfrak{D}} + \\ &\pm 2|N_{\pm}|^2 \underbrace{\int (\ln(\rho_{13})\psi_{13}\psi_{23} + \ln(\rho_{23})\psi_{13}\psi_{23}) d^{2D}V}_{\mathfrak{E}} \end{aligned} \quad (75)$$

Como $2|N_{\pm}|^2 = \frac{1}{1 \pm \Delta}$, temos

$$\boxed{W_{\pm} = E_0 + \frac{\mathfrak{D} \pm \mathfrak{E}}{1 \pm \Delta}} \quad (76)$$

e com os seguintes termos:

$$\mathfrak{D} = \int (\ln(\rho_{23})\psi_{13}^2 + \ln(\rho_{13})\psi_{23}^2) d^{2D}V \quad (77)$$

$$\mathfrak{E} = \int (\ln(\rho_{13})\psi_{13}\psi_{23} + \ln(\rho_{23})\psi_{13}\psi_{23}) d^{2D}V \quad (78)$$

Para o cálculo analítico de \mathfrak{E} dado pela equação (78), temos

$$\mathfrak{E} = J_3 + J_4$$

com

$$J_3 = \int \ln(\rho_{13})\psi_{13}\psi_{23} dA \quad ; \quad J_4 = \int \ln(\rho_{23})\psi_{13}\psi_{23} dA$$

Vamos, assim, calcular inicialmente a soma J_3 , que nas mesmas coordenadas utilizadas anteriormente, é

$$J_3 = \int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} \int_1^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2-1}} \ln\left(\frac{R}{2}(\xi+\eta)\right) \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sqrt{R(\xi+\eta)/2} \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sqrt{R(\xi-\eta)/2} \times \\ \times e^{-R\xi} \times \frac{R^2}{4}(\xi^2-\eta^2)$$

que é igual a

$$J_3 = \frac{R^3}{4\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} \int_1^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2-1}} [\ln(R/2) + \ln(\xi+\eta)] (\xi^2-\eta^2)^{3/2} e^{-R\xi}$$

ou ainda

$$J_3 = \frac{R^3}{4\pi} \left\{ \ln\left(\frac{R}{2}\right) \overbrace{\int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} \int_1^\infty \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2-1}} (\xi^2 - \eta^2)^{3/2} e^{-R\xi}}^{J_0} + \int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} \int_1^\infty \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2-1}} \ln(\xi + \eta) (\xi^2 - \eta^2)^{3/2} e^{-R\xi} \right\}$$

Analogamente,

$$J_4 = \frac{R^3}{4\pi} \left\{ \ln\left(\frac{R}{2}\right) J_0 + \int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} \int_1^\infty \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2-1}} \ln(\xi - \eta) (\xi^2 - \eta^2)^{3/2} e^{-R\xi} \right\}$$

donde,

$$J_3 + J_4 = \frac{R^3}{4\pi} \left\{ 2 \ln\left(\frac{R}{2}\right) J_0(R) + \int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} \left[\int_1^\infty d\xi \frac{\ln(\xi + \eta) (\xi^2 - \eta^2)^{\frac{3}{2}} e^{-R\xi}}{\sqrt{\xi^2-1}} + \int_1^\infty d\xi \frac{\ln(\xi - \eta) (\xi^2 - \eta^2)^{\frac{3}{2}} e^{-R\xi}}{\sqrt{\xi^2-1}} \right] \right\} \quad (79)$$

As duas integrais podem ser expandidas em série de Taylor em torno de $\eta = 0$, utilizando o *Software Maple 17*, obtendo

$$\int_1^\infty \frac{\ln(\xi \pm \eta) (\xi^2 - \eta^2)^{\frac{3}{2}} e^{-R\xi}}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi \simeq \int_1^\infty \frac{\ln(\xi) e^{-R\xi} \xi^3}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi + \mp g_1 \eta + g_2 \eta^2 \mp g_3 \eta^3 + g_4 \eta^4 \pm g_5 \eta^5 + \mathcal{O}(\eta^6) \quad (80)$$

em que:²

$$g_1 = \frac{1}{R} G_{1,3}^{2,1} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 1 \end{matrix} \right)$$

$$g_2 = -\frac{1}{2} \int_1^\infty \left[\frac{3 \ln(\xi) e^{-R\xi} \xi}{\sqrt{\xi^2-1}} + \frac{e^{-R\xi} \xi}{\sqrt{\xi^2-1}} \right] d\xi$$

$$g_3 = \frac{7}{6} K_0(R)$$

² Verificamos numericamente que, usando essas expressões na equação (80), obtemos praticamente o mesmo resultado da integral sem aproximação (expansão em η).

$$g_4 = \frac{1}{2} \int_1^\infty \left[\frac{3 \ln(\xi) e^{-R\xi}}{4\xi \sqrt{\xi^2 - 1}} + \frac{e^{-R\xi}}{\xi \sqrt{\xi^2 - 1}} \right] d\xi$$

$$g_5 = \frac{3R^3}{640} G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2} \end{matrix} \right)$$

e $G_{p,q}^{m,n} \left(z \middle| \begin{matrix} a_1, \dots, a_n \\ b_1, \dots, b_n \end{matrix} \right)$ são as funções de Meijer-G.

Assim, utilizando a expansão (80), a soma das duas integrais em ξ , da equação (79), resulta em

$$\int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} \left[2 \int_1^\infty \frac{\ln(\xi) e^{-R\xi} \xi^3}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi + 2g_2\eta^2 + 2g_4\eta^4 \right] \quad (81)$$

Então, podemos escrever

$$J_3 + J_4 = \frac{R^3}{4\pi} \left\{ 2 \ln \left(\frac{R}{2} \right) J_0 + 2 \int_1^\infty \frac{\ln(\xi) e^{-R\xi} \xi^3}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi \overbrace{\int_{-1}^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}}}^{\pi} + \right. \\ \left. - \left[3 \int_1^\infty \frac{\ln(\xi) e^{-R\xi} \xi}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi + \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi} \xi}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi \right] \underbrace{\int_{-1}^1 \frac{d\eta \eta^2}{\sqrt{1-\eta^2}}}_{\frac{\pi}{2}} + \right. \\ \left. + \left[\frac{3}{4} \int_1^\infty \frac{\ln(\xi) e^{-R\xi}}{\xi \sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi + \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi}}{\xi \sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi \right] \underbrace{\int_{-1}^1 \frac{d\eta \eta^4}{\sqrt{1-\eta^2}}}_{\frac{3\pi}{8}} \right\}$$

O cálculo da função J_0 foi feito na Seção 3.1. Logo,

$$\mathfrak{E} = (J_3 + J_4) = \frac{R^3}{4\pi} \left\{ 2 \ln \left(\frac{R}{2} \right) J_0 + 2\pi \int_1^\infty \frac{\ln(\xi) e^{-R\xi} \xi^3 d\xi}{\sqrt{\xi^2 - 1}} + \right. \\ \left. - \frac{3\pi}{2} \int_1^\infty \frac{\ln(\xi) e^{-R\xi} \xi d\xi}{\sqrt{\xi^2 - 1}} - \underbrace{\frac{\pi}{2} \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi} \xi d\xi}{\sqrt{\xi^2 - 1}}}_{K_1(R)} + \frac{9\pi}{32} \int_1^\infty \frac{\ln(\xi) e^{-R\xi} d\xi}{\xi \sqrt{\xi^2 - 1}} + \frac{3\pi}{8} \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi} d\xi}{\xi \sqrt{\xi^2 - 1}} \right\}$$

ou ainda (substituindo J_0 e colocando o fator 2π em evidência)

$$\begin{aligned}
\mathfrak{E}(R) &= \overbrace{\frac{R^3}{2}}^{\frac{R^3}{2}} (2\pi) \left\{ -\frac{K_1(R)}{4} + \frac{K_3(R)}{4} \ln\left(\frac{R}{2}\right) + \frac{1}{64} \left[9R\Gamma(-1, R) + \frac{23}{4}R^3\Gamma(-3, R) + \right. \right. \\
&+ \frac{32}{8}R^5\Gamma(-5, R) + \frac{105}{32}R^7\Gamma(-7, R) + \left. \frac{25}{68}R^9\Gamma(-9, R) \right] \ln\left(\frac{R}{2}\right) \\
&- \frac{3}{4} \int_1^\infty \frac{\ln(\xi)e^{-R\xi\xi}}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi + \int_1^\infty \frac{\ln(\xi)e^{-R\xi\xi^3}}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi + \\
&+ \left. \frac{9}{64} \int_1^\infty \frac{\ln(\xi)e^{-R\xi}}{\xi\sqrt{\xi^2-1}} d\xi + \frac{3}{16} \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi}}{\xi\sqrt{\xi^2-1}} d\xi \right\} \tag{82}
\end{aligned}$$

Para resolvermos as três primeiras integrais do lado direito da equação (82) vamos usar a seguinte expansão generalizada de Puiseux, em torno de $\xi = \infty$, de acordo com *Mathematica*:

$$\frac{1}{\sqrt{\xi^2-1}} = \frac{1}{\xi} + \frac{1}{2\xi^3} + \frac{3}{8\xi^5} + \frac{5}{16\xi^7} + \mathcal{O}(1/\xi^9) \tag{83}$$

Dessa forma, temos:

$$\begin{aligned}
\int_1^\infty \frac{\ln(\xi)e^{-R\xi\xi}}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi &\simeq G_{1,2}^{2,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -1, -1 \end{array} \right. \right) + \frac{1}{2} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 2, 2 \\ 0, 1, 1 \end{array} \right. \right) + \\
&+ \frac{3}{8} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 4, 4 \\ 0, 3, 3 \end{array} \right. \right) + \frac{5}{16} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 6, 6 \\ 0, 5, 5 \end{array} \right. \right)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\int_1^\infty \frac{\ln(\xi)e^{-R\xi\xi^3}}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi &\simeq \frac{R+3}{R^3} e^{-R} - \left(\frac{2}{R^3} + \frac{1}{2R} \right) \text{Ei}(-R) + \\
&+ \frac{3}{8} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 2, 2 \\ 0, 1, 1 \end{array} \right. \right) + \frac{5}{16} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 4, 4 \\ 0, 3, 3 \end{array} \right. \right) \tag{84}
\end{aligned}$$

e ainda

$$\begin{aligned}
\int_1^\infty \frac{\ln(\xi)e^{-R\xi}}{\xi\sqrt{\xi^2-1}} d\xi &\simeq G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 2, 2 \\ 0, 1, 1 \end{array} \right. \right) + \frac{1}{2} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 4, 4 \\ 0, 3, 3 \end{array} \right. \right) + \\
&+ \frac{3}{8} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 6, 6 \\ 0, 5, 5 \end{array} \right. \right) + \frac{5}{16} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 8, 8 \\ 0, 7, 7 \end{array} \right. \right)
\end{aligned}$$

A quarta e última integral da equação (82) pode ser resolvida analiticamente, lembrando que:

$$-\frac{\partial}{\partial R} \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi}}{\xi\sqrt{\xi^2-1}} d\xi = \int_1^\infty \frac{e^{-R\xi}}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi = K_0(R)$$

segue-se que

$$\int_1^\infty \frac{e^{-R\xi}}{\xi\sqrt{\xi^2-1}} d\xi = - \int K_0(R) dR = -\frac{\pi}{2} R [L_{-1}(R)K_0(R) + L_0(R)K_1(R)] + \text{const.}$$

sendo $K_n(z)$ as funções modificadas de Bessel de segunda espécie e $L_n(z)$ as funções modificadas de Struve, dadas por:

$$L_n(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^{n+1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(1/2z)^{2k}}{\Gamma(k+3/2)\Gamma(k+n+3/2)}$$

O valor da constante é determinado comparando-se o resultado da integral definida (para $R = 1$) com o resultado encontrado para o mesmo valor de R . Assim,

$$0,328286 = -1,2425098 + \text{const.} \quad \Rightarrow \quad \text{const.} = 1,5707958$$

Com isso,

$$\int_1^\infty \frac{e^{-R\xi}}{\xi\sqrt{\xi^2-1}} d\xi = 1,5707958 - \frac{\pi}{2} R [L_{-1}(R)K_0(R) + L_0(R)K_1(R)]$$

Finalmente, podemos escrever a expressão da equação (82) em termos de funções conhecidas de R como se segue:

$$\begin{aligned}
\mathfrak{E}(R) \simeq & \frac{R^3}{2} \left\{ -\frac{K_1(R)}{4} + \frac{K_3(R)}{4} \ln\left(\frac{R}{2}\right) + \frac{1}{64} \left[9R\Gamma(-1, R) + \frac{23}{4}R^3\Gamma(-3, R) + \right. \right. \\
& + \left. \frac{105}{32}R^7\Gamma(-7, R) + \frac{25}{68}R^9\Gamma(-9, R) \right] \ln\left(\frac{R}{2}\right) - \frac{3}{4} \left[G_{1,2}^{2,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 0 \\ -1, -1 \end{array} \right) + \right. \\
& + \left. \frac{1}{2}G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 2, 2 \\ 0, 1, 1 \end{array} \right) + \frac{3}{8}G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 4, 4 \\ 0, 3, 3 \end{array} \right) + \frac{5}{16}G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 6, 6 \\ 0, 5, 5 \end{array} \right) \right] + \\
& + \frac{R+3}{R^3}e^{-R} - \left(\frac{2}{R^3} + \frac{1}{2R} \right) \text{Ei}(-R) + \frac{3}{8}G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 2, 2 \\ 0, 1, 1 \end{array} \right) + \\
& + \frac{5}{16}G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 4, 4 \\ 0, 3, 3 \end{array} \right) + \frac{9}{64} \left[G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 2, 2 \\ 0, 1, 1 \end{array} \right) + \frac{1}{2}G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 4, 4 \\ 0, 3, 3 \end{array} \right) + \right. \\
& + \left. \frac{3}{8}G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 6, 6 \\ 0, 5, 5 \end{array} \right) + \frac{5}{16}G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 8, 8 \\ 0, 7, 7 \end{array} \right) \right] + \\
& + \left. \frac{3}{16} \left[1, 5708 - \frac{\pi}{2}R(L_{-1}(R) + K_0(R) + L_0(R) + K_1(R)) \right] \right\}
\end{aligned}$$

que, agrupando os termos semelhantes, pode ser simplificado como

$$\begin{aligned}
\mathfrak{E}(R) = & \frac{R^3}{2048} \left\{ 768 \frac{\Gamma(0, R)}{R} + 144 G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 2, 2 \\ 0, 1, 1 \end{array} \right) + 104 G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 4, 4 \\ 0, 3, 3 \end{array} \right) + \right. \\
& + \left. 186 G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 6, 6 \\ 0, 5, 5 \end{array} \right) + 45 G_{2,3}^{3,0} \left(R \middle| \begin{array}{c} 8, 8 \\ 0, 7, 7 \end{array} \right) \right\}
\end{aligned}$$

Para o cálculo analítico de \mathfrak{D} , Vimos que $\mathfrak{D} = (J_1 + J_2)$, com

$$J_1 = \int \ln \rho_{23} |\psi_{13}|^2 d^{2D}V \quad ; \quad J_2 = \int \ln \rho_{13} |\psi_{23}|^2 d^{2D}V$$

É possível verificar numericamente que $j_1 = j_2$, assim precisamos somente calcular J_2 .

$$J_2 = \ln \frac{R}{2} \underbrace{\int |\psi_{13}|^2 d^{2D}V}_{=1/2} + \int_{-1}^1 \int_1^\infty \ln(\xi + \eta) \frac{2}{\pi} \frac{R}{2} (\xi - \eta) e^{-R(\xi - \eta)} \frac{R^2}{4} \frac{(\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta}{\sqrt{\xi^2 - 1} \sqrt{1 - \eta^2}} \quad (85)$$

ou

$$J_2 = \frac{1}{2} \ln \frac{R}{2} + \frac{R^3}{4\pi} \int_{-1}^1 \frac{e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1 - \eta^2}} \int_1^\infty \ln(\xi + \eta) e^{-R\xi} \frac{(\xi - \eta)(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi$$

Como no caso anterior, vamos expandir em série a segunda integral em torno

de η usando o *software Maple 17*. Devido à lenta convergência dessa expansão, para que tenhamos uma boa aproximação no intervalo desejado, vamos precisar, nesse caso, expandir o integrando até $O(\eta^{17})$. Como praticamente todos os termos já estão definidos como funções conhecidas, só precisamos calcular as sete integrais restantes que aparecem na expressão seguinte:

$$\begin{aligned}
& \int_1^\infty \ln(\xi + \eta) e^{-R\xi} \frac{(\xi - \eta)(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi = \int_1^\infty \frac{\ln(\xi) e^{-R\xi} \xi^3}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi + \\
& + \eta \int_1^\infty \frac{(-\ln(\xi) e^{-R\xi} + e^{-R\xi}) \xi^2}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi + \eta^2 \int_1^\infty \frac{-\ln(\xi) \xi e^{-R\xi} - \frac{3}{2} \xi e^{-R\xi}}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi + \\
& + \eta^3 \int_1^\infty \frac{\ln(\xi) e^{-R\xi} - \frac{1}{6} e^{-R\xi}}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi + \frac{11\eta^4 R^2}{96} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -1 \end{array} \right. \right) + \\
& - \frac{23\eta^5 R^3}{960} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2} \end{array} \right. \right) + \frac{13\eta^6 R^4}{1920} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -2 \end{array} \right. \right) + \\
& - \frac{59\eta^7 R^5}{26880} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -2, -\frac{5}{2} \end{array} \right. \right) + \frac{83\eta^8 R^6}{107520} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{5}{2}, -3 \end{array} \right. \right) + \\
& - \frac{37\eta^9 R^7}{129024} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -3, -\frac{7}{2} \end{array} \right. \right) + \frac{143\eta^{10} R^8}{1290240} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{7}{2}, -4 \end{array} \right. \right) + \\
& - \frac{179\eta^{11} R^9}{4055040} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -4, -\frac{9}{2} \end{array} \right. \right) + \frac{73\eta^{12} R^{10}}{4055040} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{9}{2}, -5 \end{array} \right. \right) + \\
& - \frac{263\eta^{13} R^{11}}{35143680} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -5, -\frac{11}{2} \end{array} \right. \right) + \frac{311\eta^{14} R^{12}}{98402304} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{11}{2}, -6 \end{array} \right. \right) + \\
& - \frac{121\eta^{15} R^{13}}{89456640} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -6, -\frac{13}{2} \end{array} \right. \right) + \frac{419\eta^{16} R^{14}}{715653120} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{13}{2}, -7 \end{array} \right. \right) + \\
& - \frac{479\eta^{17} R^{15}}{1871708160} G_{1,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -7, -\frac{15}{2} \end{array} \right. \right)
\end{aligned}$$

A partir de agora vamos resolver cada uma das sete integrais que faltam. A primeira integral já foi resolvida na seção anterior, que é a equação (84). Para as demais integrais vamos utilizar a expansão da equação (83). Assim, como foi feito anteriormente, utilizaremos o *Mathematica* para encontrar a solução. Logo:

$$\begin{aligned}
\int_1^\infty \frac{-\ln(\xi) e^{-R\xi} \xi^2}{\sqrt{\xi^2 - 1}} d\xi &= -G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} -1, -1 \\ -2, -2, 0 \end{array} \right. \right) - \frac{1}{2} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 1, 1 \\ 0, 0, 0 \end{array} \right. \right) + \\
&- \frac{3}{8} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 3, 3 \\ 0, 2, 2 \end{array} \right. \right) - \frac{5}{16} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 5, 5 \\ 0, 4, 4 \end{array} \right. \right)
\end{aligned}$$

$$\int_1^\infty \frac{e^{-R\xi\xi^2}}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi = K_0(R) + \frac{K_1(R)}{R}$$

$$\begin{aligned} \int_1^\infty \frac{-\ln(\xi)e^{-R\xi\xi}}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi &= -G_{1,2}^{2,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -1, -1 \end{array} \right. \right) - \frac{1}{2} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 2, 2 \\ 0, 1, 1 \end{array} \right. \right) + \\ &- \frac{3}{8} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 4, 4 \\ 0, 3, 3 \end{array} \right. \right) - \frac{5}{16} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 6, 6 \\ 0, 5, 5 \end{array} \right. \right) \end{aligned}$$

$$\int_1^\infty \frac{-\frac{3}{2}\xi e^{-R\xi}}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi = -\frac{3}{2} K_1(R)$$

$$\begin{aligned} \int_1^\infty \frac{\ln(\xi)e^{-R\xi}}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi &= G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 1, 1 \\ 0, 0, 0 \end{array} \right. \right) + \frac{1}{2} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 3, 3 \\ 0, 2, 2 \end{array} \right. \right) + \\ &+ \frac{3}{8} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 5, 5 \\ 0, 4, 4 \end{array} \right. \right) + \frac{5}{16} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 7, 7 \\ 0, 6, 6 \end{array} \right. \right) \end{aligned}$$

$$\int_1^\infty \frac{-\frac{1}{6}e^{-R\xi}}{\sqrt{\xi^2-1}} d\xi = -\frac{1}{6} K_0(R)$$

Agora, na equação (85) precisamos resolver as integrais em η , que são do tipo

$$\int_{-1}^1 \frac{\eta^\alpha e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}}$$

com α variando de 0 a 17. Assim, temos:

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 \frac{e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \pi I_0(R) \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \pi I_1(R) \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^2 e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \pi \left(\frac{I_1(R)}{R} + I_2(R) \right) \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^3 e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \pi \left(\frac{3I_2(R)}{R} + I_3(R) \right) \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^4 e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi (R^2 + 3) I_2(R)}{R^2} \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^5 e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^2} [(R^2 + 15) I_3(R) + 2RI_4(R)] \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^6 e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^3} [5(R^2 + 3) I_3(R) + R(R^2 + 5) I_4(R)] \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^7 e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^3} [3(3R^2 + 35) I_4(R) + R(R^2 + 15) I_5(R)] \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^8 e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^4} [4R^3 I_5(R) + (R^4 + 42R^2 + 105) I_4(R)] \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^9 e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^4} [4R(2R^2 + 21) I_6(R) + (R^4 + 98R^2 + 945) I_5(R)] \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^{10} e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^5} [(13R^4 + 378R^2 + 945) I_5(R) + R(R^4 + 42R^2 + 189) I_6(R)] \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^{11} e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^5} [(19R^4 + 1170R^2 + 10395) I_6(R) + R(R^4 + 94R^2 + 945) I_7(R)] \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^{12} e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^6} [12(R^2 + 27) R^3 I_7(R) + \\
&\quad + (R^6 + 189R^4 + 4455R^2 + 10395) I_6(R)] \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^{13} e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^6} [18R(R^4 + 60R^2 + 495) I_8(R) + \\
&\quad + (R^6 + 345R^4 + 16335R^2 + 135135) I_7(R)]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 \frac{\eta^{14} e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^7} [5(5R^6 + 561R^4 + 11583R^2 + 27027) I_7(R) + \\
&+ R(R^6 + 183R^4 + 4455R^2 + 19305) I_8(R)] \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^{15} e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^7} [33(R^6 + 191R^4 + 7735R^2 + 61425) I_8(R) + \\
&+ R(R^6 + 333R^4 + 15675R^2 + 135135) I_9(R)] \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^{16} e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^8} [24(R^4 + 110R^2 + 2145) R^3 I_9(R) + \\
&+ (R^8 + 564R^6 + 47190R^4 + 900900R^2 + 2027025) I_8(R)] \\
\int_{-1}^1 \frac{\eta^{17} e^{R\eta} d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} &= \frac{\pi}{R^8} [8R(4R^6 + 753R^4 + 30030R^2 + 225225) I_{10}(R) + \\
&+ (R^8 + 900R^6 + 123942R^4 + 4504500R^2 + 34459425) I_9(R)]
\end{aligned}$$

Finalmente, podemos escrever a expressão completa para o fator \mathfrak{D} .

$$\begin{aligned}
\mathfrak{D}(R) &= \ln\left(\frac{R}{2}\right) + \frac{R^3}{2} I_0(R) \left[\frac{1}{2} G_{1,2}^{2,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -1, -1 \end{array} \right. \right) + G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} -2, -2 \\ -3, -3, 0 \end{array} \right. \right) + \right. \\
&+ \left. \frac{3}{8} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 2, 2 \\ 0, 1, 1 \end{array} \right. \right) + \frac{5}{16} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 4, 4 \\ 0, 3, 3 \end{array} \right. \right) \right] + \\
&- \frac{R^3}{2} I_1(R) \left[G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} -1, -1 \\ -2, -2, 0 \end{array} \right. \right) + \frac{1}{16} \left(8G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 1, 1 \\ 0, 0, 0 \end{array} \right. \right) + \right. \right. \\
&+ \left. \left. 6G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 3, 3 \\ 0, 2, 2 \end{array} \right. \right) + 5G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 5, 5 \\ 0, 4, 4 \end{array} \right. \right) \right) \right] + \\
&+ \frac{I_1(R)}{2} [R^3 K_0(R) + R^2 K_1(R)] - \frac{3}{4} R^2 [I_1(R) + R I_2(R)] K_1(R) + \\
&- \frac{R^2}{2} [I_1(R) + R I_2(R)] \left[G_{1,2}^{2,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 0 \\ -1, -1 \end{array} \right. \right) + \frac{1}{16} \left(8G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 2, 2 \\ 0, 1, 1 \end{array} \right. \right) + \right. \right. \\
&+ \left. \left. 6G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 4, 4 \\ 0, 3, 3 \end{array} \right. \right) + 5G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 6, 6 \\ 0, 5, 5 \end{array} \right. \right) \right) \right] + \\
&+ \frac{R^2}{2} [3I_2(R) + R I_3(R)] \left[\frac{1}{16} \left(16G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 1, 1 \\ 0, 0, 0 \end{array} \right. \right) + 8G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 3, 3 \\ 0, 2, 2 \end{array} \right. \right) + \right. \right. \\
&+ \left. \left. 6G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 5, 5 \\ 0, 4, 4 \end{array} \right. \right) + 5G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} 7, 7 \\ 0, 6, 6 \end{array} \right. \right) \right) \right] +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{R^2}{12} [3I_2(R) + RI_3(R)] K_0(R) + \frac{11}{192} R^3 (R^2 + 3) I_2(R) G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -1 \end{matrix} \right) + \\
& - \frac{23}{960} \frac{R^4}{2} [(R^2 + 15) I_3(R) + 2RI_4(R)] G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2} \end{matrix} \right) + \\
& + \frac{13}{1920} \frac{R^4}{2} [5(R^2 + 3) I_3(R) + (R^2 + 5) RI_4(R)] G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -2 \end{matrix} \right) + \\
& - \frac{59}{26880} \frac{R^5}{2} [3(3R^2 + 35) I_4(R) + (R^2 + 15) RI_5(R)] G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -2, -\frac{5}{2} \end{matrix} \right) + \\
& + \frac{83}{107520} \frac{R^5}{2} [4R^3 I_5(R) + (R^4 + 42R^2 + 105) I_4(R)] \times \\
& \times G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{5}{2}, -3 \end{matrix} \right) - \frac{37}{129024} \frac{R^6}{2} (4(2R^2 + 21) RI_6(R) + \\
& + [R^4 + 98R^2 + 945] I_5(R)) G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -3, -\frac{7}{2} \end{matrix} \right) + \\
& + \frac{143}{1290240} \frac{R^6}{2} [(13R^4 + 378R^2 + 945) I_5(R) + (R^4 + 42R^2 + 189) RI_6(R)] \times \\
& \times G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{7}{2}, -4 \end{matrix} \right) + \\
& - \frac{179}{4055040} \frac{R^7}{2} [(19R^4 + 1170R^2 + 10395) I_6(R) + R(R^4 + 94R^2 + 945) I_7(R)] \times \\
& \times G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -4, -\frac{9}{2} \end{matrix} \right) + \\
& + \frac{73}{4055040} \frac{R^7}{2} [12(R^2 + 27) R^3 I_7(R) + (R^6 + 189R^4 + 4455R^2 + 10395) I_6(R)] \times \\
& \times G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{9}{2}, -5 \end{matrix} \right) + \\
& - \frac{263}{35143680} \frac{R^8}{2} [18R(R^4 + 60R^2 + 495) I_8(R) +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (R^6 + 345R^4 + 16335R^2 + 135135) I_7(R) \times G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -5, -\frac{11}{2} \end{matrix} \right) + \\
& + \frac{311}{98402304} \frac{R^8}{2} [5 (5R^6 + 561R^4 + 11583R^2 + 27027) I_7(R) + \\
& + R (R^6 + 183R^4 + 4455R^2 + 19305) I_8(R)] G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{11}{2}, -6 \end{matrix} \right) + \\
& - \frac{121}{89456640} \frac{R^9}{2} [33 (R^6 + 191R^4 + 7735R^2 + 61425) I_8(R) + \\
& + R (R^6 + 333R^4 + 15675R^2 + 135135) I_9(R)] G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -6, -\frac{13}{2} \end{matrix} \right) + \\
& + \frac{419}{715653120} \frac{R^9}{2} [24 (R^4 + 110R^2 + 2145) R^3 I_9(R) + \\
& + (R^8 + 564R^6 + 47190R^4 + 900900R^2 + 2027025) I_8(R)] G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{13}{2}, -7 \end{matrix} \right) + \\
& - \frac{479}{1871708160} \frac{R^{10}}{2} [(R^8 + 900R^6 + 123942R^4 + 4504500R^2 + 34459425) I_9(R) + \\
& + 8R (4R^6 + 753R^4 + 30030R^2 + 225225) I_{10}(R)] G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -7, -\frac{15}{2} \end{matrix} \right) + \\
& + \frac{181}{1604321280} \frac{R^{10}}{2} [(41R^8 + 12324R^6 + 859950R^4 + 15315300R^2 + 34459425) I_9(R) + \\
& + R (R^8 + 548R^6 + 45630R^4 + 900900R^2 + 3828825) I_{10}(R)] \times \\
& \times G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{15}{2}, -8 \end{matrix} \right) + \\
& - \frac{611}{12192841728} \frac{R^{11}}{2} [3 (17R^8 + 7756R^6 + 870870R^4 + 29238300R^2 + 218243025) I_{10}(R) + \\
& + R (R^8 + 876R^6 + 119574R^4 + 4340700R^2 + 34459425) I_{11}(R)] \times \\
& \times G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -8, -\frac{17}{2} \end{matrix} \right) + \\
& + \frac{683}{30482104320} \frac{R^{11}}{2} [(17403750R^4 + 297604125R^2 + 654729075 + \\
& + R^{10} + 1335R^8 + 282450R^6) I_{10}(R) \\
& + 40R^3 (R^6 + 297R^4 + 20475R^2 + 348075) I_{11}(R)] \times \\
& \times G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \middle| \begin{matrix} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{17}{2}, -9 \end{matrix} \right)
\end{aligned}$$

Agrupando os termos semelhantes e escrevendo em termos dos fatores g_n e h_n , o fator $\mathfrak{D}(R)$ pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned}
\mathfrak{D}(R) &= g_0 + g_1 \frac{\Gamma(0, R)}{R} + g_2 G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} -1, -1 \\ -2, -2, 0 \end{array} \right. \right) + g_3 G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} -2, -2 \\ -3, -3, 0 \end{array} \right. \right) + \\
&+ \sum_{n=1}^7 g_{n+3} G_{2,3}^{3,0} \left(R \left| \begin{array}{c} n, n \\ 0, n-1, n-1 \end{array} \right. \right) + \\
&+ \sum_{n=0}^{17} (-1)^n h_n G_{1,3}^{3,0} \left(\frac{R^2}{4} \left| \begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2}, -\frac{(1+n)}{2}, -\frac{(2+n)}{2} \end{array} \right. \right)
\end{aligned}$$

Precisamos agora explicitar quem são os fatores g_n e h_n :

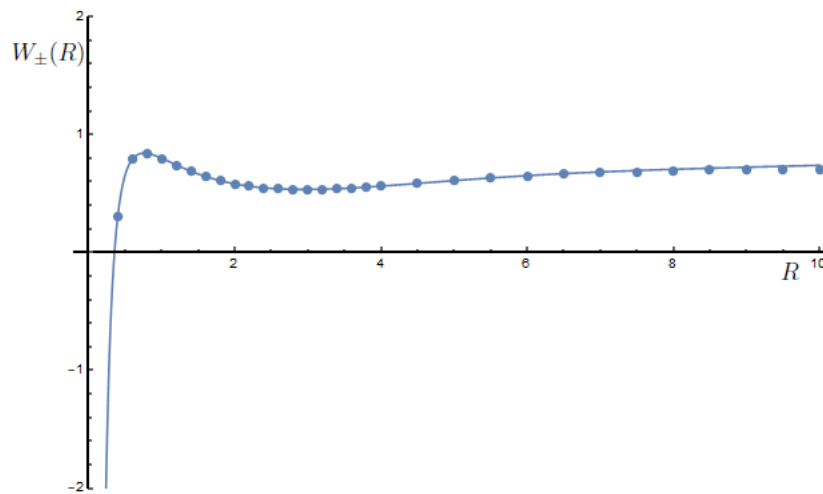
$$\begin{aligned}
g_0 &= \ln \left(\frac{R}{2} \right) + \frac{R^3}{2} \left[(K_0(R) + K_1(R)) I_1(R) - \frac{1}{6} K_0(R) I_3(R) - \frac{3}{2} K_1(R) I_2(R) \right] + \\
&- \frac{3}{4} (K_1(R) I_1(R) + \frac{1}{3} K_0(R) I_2(R)) \\
g_1 &= -\frac{R^3}{4} I_2(R) \\
g_2 &= -\frac{R^3}{2} I_1(R) \\
g_3 &= \frac{R^3}{2} I_0(R) \\
g_4 &= \frac{R^2}{4} (R I_1(R) - 2 I_2(R)) \\
g_5 &= -\frac{R^2}{16} (R I_0(R) - 4 I_1(R)) \\
g_6 &= \frac{R^3}{16} I_3(R) \\
g_7 &= -\frac{R}{32} (R I_0(R) - 6 I_1(R)) \\
g_8 &= \frac{R^2}{32} (R I_1(R) - 6 I_2(R)) \\
g_9 &= -5 R^2 (I_1 + R I_2) \\
g_{10} &= \frac{5 R^2}{32} (3 I_2 + R I_3)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
h_0 &= \frac{11}{192} R^3 (R^2 + 3) I_2(R) \\
h_1 &= \frac{23}{960} \frac{R^4}{2} [(R^2 + 15) I_3(R) + 2RI_4(R)] \\
h_2 &= \frac{13}{1920} \frac{R^4}{2} [5 (R^2 + 3) I_3(R) + (R^2 + 5) RI_4(R)] \\
h_3 &= \frac{59}{26880} \frac{R^5}{2} [3 (3R^2 + 35) I_4(R) + (R^2 + 15) RI_5(R)] \\
h_4 &= \frac{83}{107520} \frac{R^5}{2} [4R^3 I_5(R) + (R^4 + 42R^2 + 105) I_4(R)] \\
h_5 &= \frac{37}{129024} \frac{R^6}{2} (4 (2R^2 + 21) RI_6(R) + [R^4 + 98R^2 + 945] I_5(R)) \\
h_6 &= \frac{143}{1290240} \frac{R^6}{2} [(13R^4 + 378R^2 + 945) I_5(R) + (R^4 + 42R^2 + 189) RI_6(R)] \\
h_7 &= \frac{179}{4055040} \frac{R^7}{2} [(19R^4 + 1170R^2 + 10395) I_6(R) + R (R^4 + 94R^2 + 945) I_7(R)] \\
h_8 &= \frac{73}{4055040} \frac{R^7}{2} [12 (R^2 + 27) R^3 I_7(R) + (R^6 + 189R^4 + 4455R^2 + 10395) I_6(R)] \\
h_9 &= \frac{263}{35143680} \frac{R^8}{2} [18R (R^4 + 60R^2 + 495) I_8(R) + \\
&\quad + (R^6 + 345R^4 + 16335R^2 + 135135) I_7(R)] \\
h_{10} &= \frac{311}{98402304} \frac{R^8}{2} [5 (5R^6 + 561R^4 + 11583R^2 + 27027) I_7(R) + \\
&\quad + R (R^6 + 183R^4 + 4455R^2 + 19305) I_8(R)] \\
h_{11} &= \frac{121}{89456640} \frac{R^9}{2} [33 (R^6 + 191R^4 + 7735R^2 + 61425) I_8(R) + \\
&\quad + R (R^6 + 333R^4 + 15675R^2 + 135135) I_9(R)] \\
h_{12} &= \frac{419}{715653120} \frac{R^9}{2} [24 (R^4 + 110R^2 + 2145) R^3 I_9(R) + \\
&\quad + (R^8 + 564R^6 + 47190R^4 + 900900R^2 + 2027025) I_8(R)] \\
h_{13} &= \frac{479}{1871708160} \frac{R^{10}}{2} [(R^8 + 900R^6 + 123942R^4 + 4504500R^2 + \\
&\quad + 34459425) I_9(R) + 8R (4R^6 + 753R^4 + 30030R^2 + 225225) I_{10}(R)] \\
h_{14} &= \frac{181}{1604321280} \frac{R^{10}}{2} [(41R^8 + 12324R^6 + 859950R^4 + 15315300R^2 + \\
&\quad + 34459425) I_9(R) + R (R^8 + 548R^6 + 45630R^4 + 900900R^2 + 3828825) I_{10}(R)] \\
h_{15} &= \frac{611}{12192841728} \frac{R^{11}}{2} [3 (17R^8 + 7756R^6 + 870870R^4 + 29238300R^2 + \\
&\quad + 218243025) I_{10}(R) + R (R^8 + 876R^6 + 119574R^4 + 4340700R^2 + \\
&\quad + 34459425) I_{11}(R)] \\
h_{16} &= \frac{683}{30482104320} \frac{R^{11}}{2} [(17403750R^4 + 297604125R^2 + 654729075 + \\
&\quad + R^{10} + 1335R^8 + 282450R^6) I_{10}(R) + \\
&\quad + 40R^3 (R^6 + 297R^4 + 20475R^2 + 348075) I_{11}(R)]
\end{aligned}$$

3.4 Cálculo numérico do fator W_+

Nas seções anteriores, mostramos os cálculos dos fatores Δ , \mathfrak{E} e \mathfrak{D} respectivamente. Agora, vamos usar esses dados para fazer o cálculo numérico de W_+ e assim, confirmar que para os próximos potenciais, podemos partir direto para o cálculo numérico sem a necessidade de desenvolver todo o potencial analiticamente.

Figura 7 - Comparação da função W_+ analítica (linha contínua), com os valores numéricos.



Fonte: CARUSO *et al.*, 2020, p.4.

A figura 7 mostra que, de fato, não necessitamos realizar estes extensos cálculos analíticos para outros potenciais, uma vez que se observa uma boa concordância entre os pontos gerados numericamente e a curva analítica. Com esta confirmação, podemos, então, prosseguir com os cálculos numéricos para o potencial de Chern-Simons.

3.5 Equação para o potencial Chern-Simons

Partindo da equação (47), com o potencial de interação de Chern-Simons

$$\begin{aligned}
 V(\vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, \vec{r}_{12}) &= -\frac{Z_1 e^2 V_0}{2\pi} K_0\left(\frac{m_\gamma c}{\hbar} r_{13}\right) + \\
 &- \frac{Z_2 e^2 V_0}{2\pi} K_0\left(\frac{m_\gamma c}{\hbar} r_{23}\right) + \frac{Z_1 Z_2 e^2 V_0}{2\pi} K_0\left(\frac{m_\gamma c}{\hbar} r_{12}\right)
 \end{aligned} \tag{86}$$

obtemos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{r_{12}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_3}\nabla_{r_3}^2 - \frac{Z_1 e^2 V_0}{2\pi} K_0\left(\frac{m_\gamma c}{\hbar} r_{13}\right) + \right. \\ \left. - \frac{Z_2 e^2 V_0}{2\pi} K_0\left(\frac{m_\gamma c}{\hbar} r_{23}\right) + \frac{Z_1 Z_2 e^2 V_0}{2\pi} K_0\left(\frac{m_\gamma c}{\hbar} r_{12}\right) \right] \psi(r) = E\psi(r) \quad (87)$$

E, fazendo as transformações, $m_\gamma = \lambda m_e$, $\mu = \zeta m_e$, $r_{12} = \frac{\rho_{12}\rho_0}{\sqrt{\zeta}}$, $r_{13} = \rho_{13}\rho_0$, $r_{23} = \rho_{23}\rho_0$, $r_3 = \rho_3\rho_0$, $\rho_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{m_e e^2 V_0}}$ e considerando as unidades atômicas (em Hartree), $\hbar = m_e = e = 1$, $c = \frac{1}{\alpha} = 137,0356$ e $V_0 = 1$, temos

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_{\rho_{12}}^2 - \frac{1}{2m_3}\nabla_{\rho_3}^2 - \frac{Z_1}{2\pi} K_0\left(\frac{\lambda}{\alpha}\rho_{13}\right) + \right. \\ \left. - \frac{Z_2}{2\pi} K_0\left(\frac{\lambda}{\alpha}\rho_{23}\right) + \frac{Z_1 Z_2}{2\pi} K_0\left(\frac{\lambda}{\alpha}\frac{\rho_{12}}{\sqrt{\zeta}}\right) \right] \psi = E\psi \quad (88)$$

a qual pode ser reagrupada como:

$$\left\{ -\nabla_{\rho_{12}}^2 + \frac{1}{m_3} \left[\frac{Z_1 Z_2 m_3}{\pi} K_0\left(\frac{\lambda}{\alpha}\frac{\rho_{12}}{\sqrt{\zeta}}\right) + W_{\pm} \right] \right\} \psi = \eta\psi \quad (89)$$

com $\eta = 2E$ e, assim como na seção anterior, W_{\pm} é o valor esperado da energia η_e da equação que descreve somente o movimento do elétron, ou do múon, dada por:

$$\eta_e\psi = \left[-\nabla_{\rho_3}^2 - \frac{Z_1 m_3}{\pi} K_0\left(\frac{\lambda}{\alpha}\rho_{13}\right) - \frac{Z_2 m_3}{\pi} K_0\left(\frac{\lambda}{\alpha}\rho_{23}\right) \right] \psi \quad (90)$$

Para simplificar, vamos chamar $\rho_{12} = \rho$. Assim, podemos finalmente escrever a equação (89), que descreve a interação entre os núcleos da molécula governada pelo potencial de Chern-Simons, com $\psi(\rho, \theta) = \frac{u(\rho)}{\sqrt{\rho}} e^{\pm i\ell\theta}$ como

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \varepsilon - \frac{1}{m_3} \left[\frac{Z_1 Z_2 m_3}{\pi} K_0\left(\frac{\lambda}{\alpha}\frac{\rho}{\sqrt{\zeta}}\right) + W_{\pm} \right] - \frac{\ell^2 - 0,25}{\rho^2} \right\} u(\rho) = 0 \quad (91)$$

3.6 Cálculo de W_{\pm} para o potencial de Chern-Simons

Seguindo os passos da seção anterior, vamos encontrar a expressão para W_{\pm} . No entanto, como dito anteriormente, não encontraremos a solução analítica para este potencial, pois já provamos que a solução numérica é capaz de reproduzir o resultado analítico, assim:

$$W_{\pm} = |N_{\pm}|^2 \int (\psi_{13} \pm \psi_{23}) \varepsilon_{\epsilon} (\psi_{13} \pm \psi_{23}) d^{2D}V \quad (92)$$

Substituindo o valor de η_{ϵ} dado pela equação (90), obtemos

$$\begin{aligned} W_{\pm} &= E_0 + |N_{\pm}|^2 \int \left[-\frac{m_3}{\pi} K_0 \left(\frac{\lambda}{\alpha} \rho_{23} \right) \psi_{13}^2 - \frac{m_3}{\pi} K_0 \left(\frac{\lambda}{\alpha} \rho_{13} \right) \psi_{23}^2 \right] d^{2D}V + \\ &\mp |N_{\pm}|^2 \int \left[\frac{m_3}{\pi} K_0 \left(\frac{\lambda}{\alpha} \rho_{23} \right) \psi_{13} \psi_{23} + \frac{m_3}{\pi} K_0 \left(\frac{\lambda}{\alpha} \rho_{13} \right) \psi_{23} \psi_{13} \right] d^{2D}V \end{aligned}$$

Logo, como já sabemos:

$$W_{\pm} = \eta + \frac{\mathfrak{D} \pm \mathfrak{E}}{1 \pm \Delta}$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} 1 \pm \Delta &= \frac{1}{2|N_{\pm}|^2} = 2 \int |\psi_{13} + \psi_{23}|^2 d^{2D}V \\ \mathfrak{D} &= \int \left[-\frac{m_3}{\pi} K_0 \left(\frac{\lambda}{\alpha} \rho_{23} \right) \psi_{13}^2 - \frac{m_3}{\pi} K_0 \left(\frac{\lambda}{\alpha} \rho_{13} \right) \psi_{23}^2 \right] d^{2D}V \\ \mathfrak{E} &= \int \left[\frac{m_3}{\pi} K_0 \left(\frac{\lambda}{\alpha} \rho_{23} \right) \psi_{13} \psi_{23} + \frac{m_3}{\pi} K_0 \left(\frac{\lambda}{\alpha} \rho_{13} \right) \psi_{23} \psi_{13} \right] d^{2D}V \end{aligned}$$

Dessa forma, como fizemos para o caso do potencial $\ln(r)$, utilizamos o software *Mathematica* para determinar as funções de onda ψ_{13} e ψ_{23} que são dadas por:

$$\begin{aligned} \psi_{13} &= 0,353501 \sqrt{\rho_{13} \rho_0} e^{-\rho_{13} \rho_0 / 1,72068} \\ \psi_{23} &= 0,353501 \sqrt{\rho_{23} \rho_0} e^{-\rho_{23} \rho_0 / 1,72068} \end{aligned}$$

Desse modo, podemos escrever a equação

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \eta - V_{eff}(\rho) \right\} u(\rho) = 0 \quad (93)$$

com

$$V_{eff}(\rho) = \frac{1}{m_3} \left[\frac{Z_1 Z_2 m_3}{\pi} K_0 \left(\frac{\lambda}{\alpha} \frac{\rho_{12}}{\sqrt{\zeta}} \right) + W_{\pm} \right] + \frac{\ell^2 - 0,25}{\rho^2} \quad (94)$$

4 SOLUÇÕES NUMÉRICAS PARA OS SISTEMAS MOLECULARES

Assim como foi feito no Capítulo 2, condensaremos aqui resultados de diferentes trabalhos. Estes resultados serão devidamente discutidos no Capítulo final.

Utilizamos também o método de Numerov para encontrar as autofunções de energias e as funções de onda do estado fundamental ($\ell = 0$) de diferentes moléculas. Vale ressaltar que somente mostraremos as soluções para W_+ , visto que o termo W_- não gera soluções para o caso tridimensional impossibilitando uma comparação.

Primeiro, precisamos conhecer os valores de ζ para as moléculas com o potencial de Chern-Simons, dados pela tabela 7

Tabela 7 - Valores de ζ e m_3 Para serem utilizados no cálculo das moléculas governadas pelo potencial de Chern-Simons

Moléculas	ζ	m_3
<i>ppe</i>	918,076336715	1
<i>dde</i>	1835,24148394	1
<i>ppμ</i>	918,076336715	206,7682830
<i>ddμ</i>	1835,24148394	206,7682830

Fonte: CARUSO *et al.*, 2022, p.3

Na Tabela 8, apresentamos as energias dos estados fundamentais para diferentes moléculas.

Tabela 8 - Valores das energias dos estados fundamentais de diferentes moléculas (em hartree). As primeiras duas colunas representam as energias para o potencial de Chern-Simons com dois valores diferentes de λ , a terceira coluna são os valores para o potencial $\ln(r)$, a quarta coluna os valores para o potencial $1/r$ e a quinta e última coluna as energias para as moléculas tridimensionais

Moléculas	$\lambda = 0,2 \times 10^{-3}$	$\lambda = 0,2 \times 10^{-5}$	$\ln(r)$	$1/r$	$3D$
<i>ppe</i>	52,2987	5,5253	0,08835	-1,3254	-0,6067
<i>dde</i>	57,9003	5,5117	0,01619	-2,888	-1,2797
<i>ppμ</i>	62,9664	6,8929	18,5543	-195,363	-129,3342
<i>ddμ</i>	63,6303	6,8760	3,1897	-420,200	-261,1241

Fonte: O autor, 2022.

Calculamos também o raio médio ($\langle \rho \rangle$) entre as duas partículas que formam o núcleo como mostra a tabela 9, usando a definição

$$\langle \rho \rangle = \int_0^{\infty} |\psi(\rho)|^2 \rho^2 d\rho$$

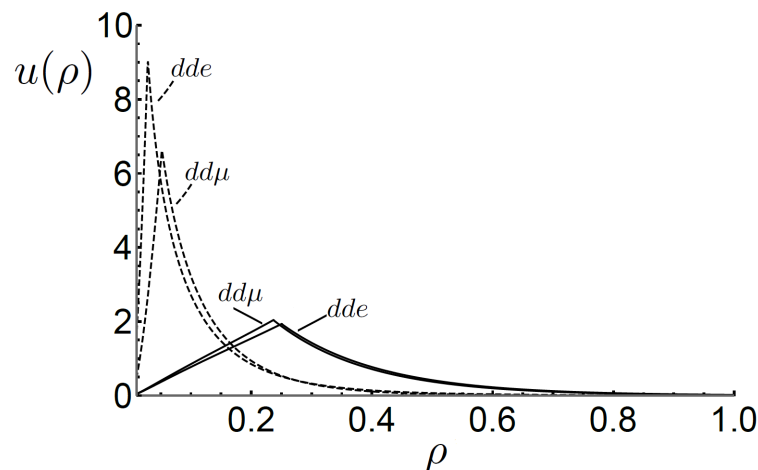
Tabela 9 - Valores do raio médio $\langle \rho \rangle$ para diferentes moléculas dados em unidades do raio de Bohr. As primeiras duas colunas representam os valores para o potencial de Chern-Simons correspondendo a duas diferentes escolhas do parâmetro λ . A terceira coluna o potencial do tipo logarítmico, a quarta o potencial $1/r$ e a quinta e última representa também potencial $1/r$, porém para o caso tridimensional.

Molécula	$(\lambda = 0,2 \times 10^{-3})$	$(\lambda = 0,2 \times 10^{-5})$	$\ln(\rho)$	$1/r$	$3D$
<i>ppe</i>	0,5308	0,0636	2,0087	1,9441	2,0632
<i>dde</i>	0,3795	0,0436	1,4332	1,4169	1,742
<i>ppμ</i>	0,4917	0,0537	0,0105	0,0101	0,0112
<i>ddμ</i>	0,3432	0,0355	0,0076	0,0073	0,0089

Fonte: O autor, 2022.

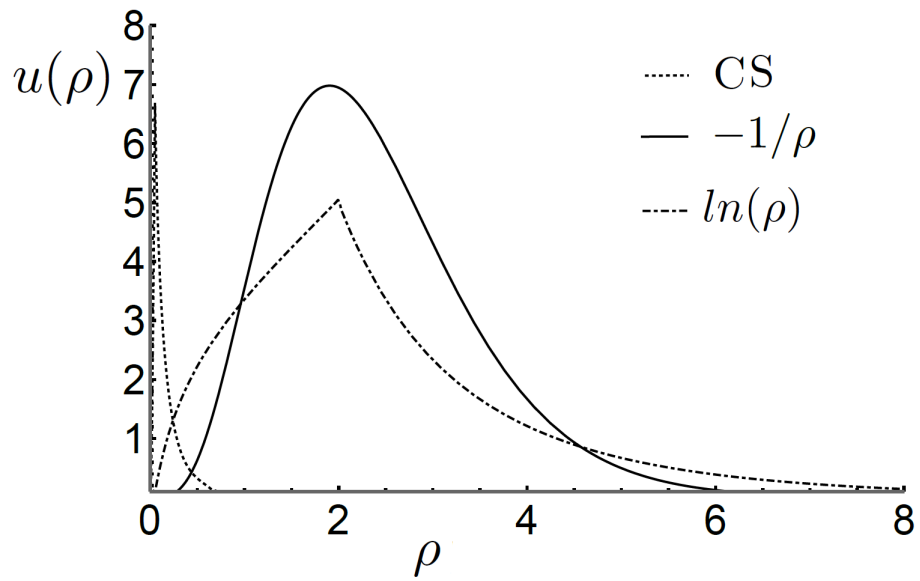
As funções de onda para algumas das moléculas estão dispostas nas figuras 8, 9 e 10.

Figura 8 - Funções de onda para o estado fundamental das moléculas *dde* e *ddμ* com potencial de Chern-Simons, para dois valores de λ diferentes. As curvas contínuas correspondem a $\lambda = 0,2 \times 10^{-3}$ e as tracejadas a $\lambda = 0,2 \times 10^{-5}$ em unidades arbitrárias.

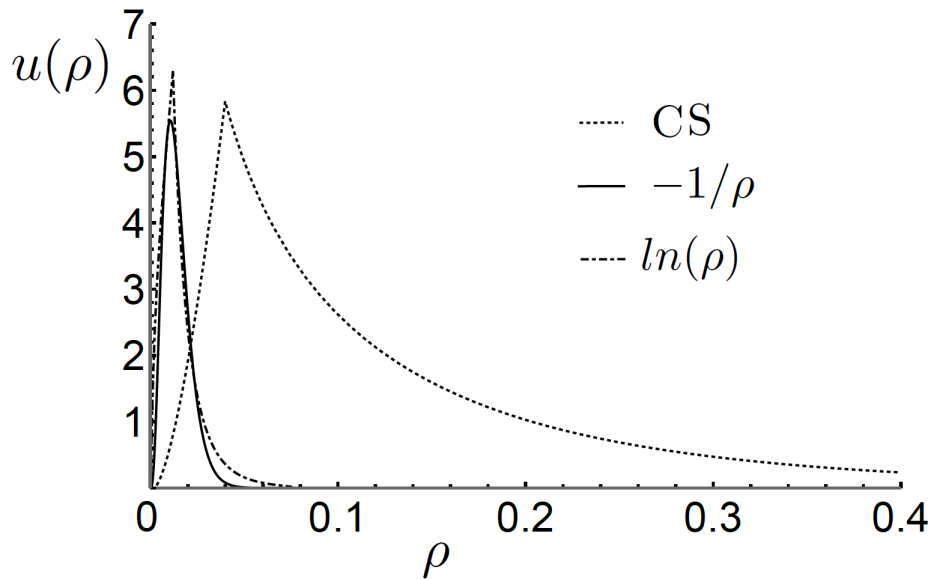


Fonte: CARUSO *et al.*, 2022, p.10.

Figura 9 - Funções de onda para o estado fundamental, em unidades arbitrárias, das moléculas (a) *ppe* e (b) *ppμ*. As curvas correspondentes ao potencial de Chern-Simons correspondem a escolha de $\lambda = 0,2 \times 10^{-5}$.



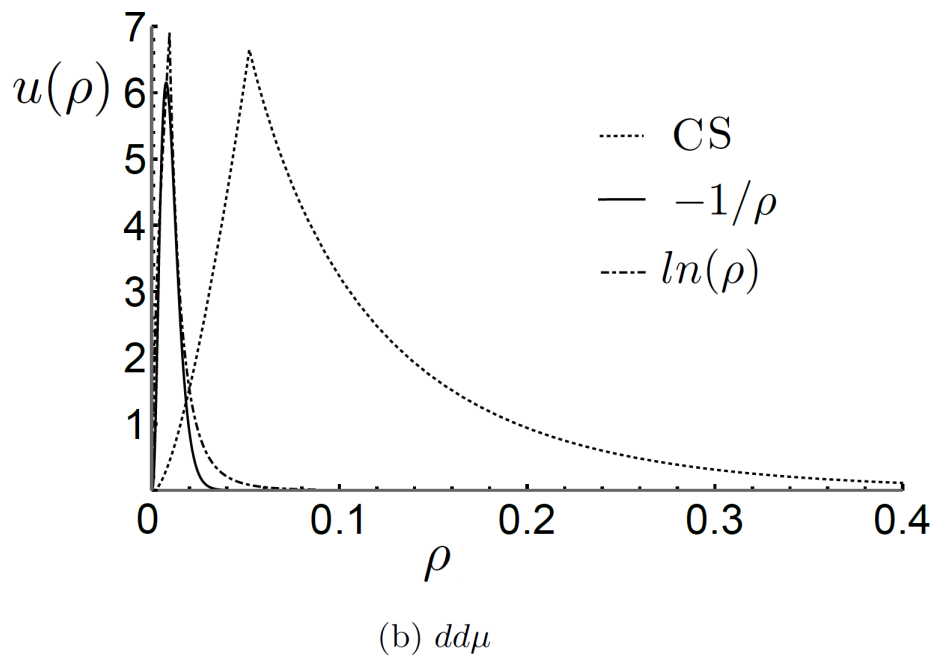
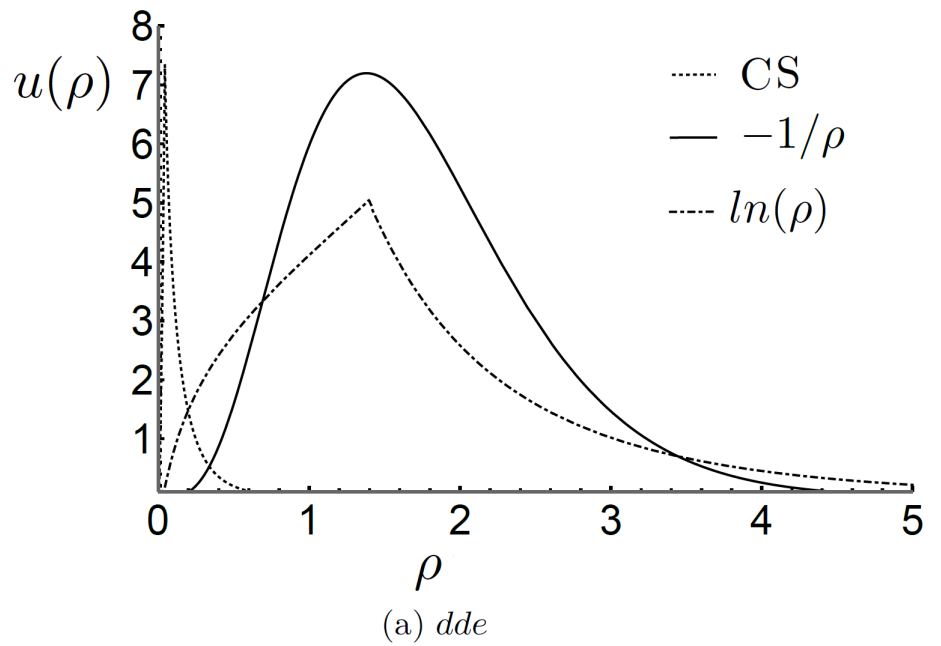
(a) *ppe*



(b) *ppμ*

Fonte: CARUSO *et al.*, 2022, p.11.

Figura 10 - Funções de onda para o estado fundamental, em unidades arbitrárias, das moléculas (a) dde e (b) $dd\mu$. As curvas correspondentes ao potencial de Chern-Simons correspondem a escolha de $\lambda = 0,2 \times 10^{-5}$.



Fonte: CARUSO *et al.*, 2022, p.12.

5 RESULTADOS E CONSIDERAÇÕES FINAIS

No decorrer deste trabalho, mostramos que é possível encontrar as soluções não relativísticas para diferentes átomos e moléculas, em duas dimensões, para alguns tipos de potenciais: o potencial coulombiano $1/r$, o potencial logarítmico $\ln(r)$, o potencial de Chern-Simons e dois potenciais para um modelo de *quantum dot*. Estes estudos têm como objetivo lançar luz sobre a questão de qual seria o potencial de interação entre duas partículas portadoras de carga em um sistema puramente (ou quase) bidimensional. Para isso, como já foi dito na Introdução, partimos de dois principais Ansätze: um referente à forma da equação de Schrödinger e outro referente à forma matemática do potencial de interação entre as partículas constituintes.

De fato, quando analisamos a tabela 4, podemos observar que, para os seis átomos estudados nesta tese, os autovalores de energia demonstram que a física em duas dimensões é qualitativamente diferente daquela em três, quando utilizamos o potencial logarítmico. Ao alterarmos somente a forma da equação de Schrödinger, mantendo o usual potencial $1/r$, obtemos energias negativas, assim como para o átomo de hidrogênio em três dimensões. Mas quando utilizamos o potencial do tipo $\ln(r)$ passamos a obter energias positivas. Este fato não se repete quando utilizamos o potencial de Chern-Simons, dentro dos valores da massa efetiva do fóton estudados, como podemos observar nas últimas três colunas da tabela. De acordo com o resultado encontrado em (CARUSO *et al.*, 2013), as energias para um átomo governado pelo potencial de Chern-Simons também apresentam valores negativos.

Já na tabela 8, observamos esta mesma troca no sinal das energias quando estudamos as moléculas, mas diferentemente do caso atômico, este fato ocorre também para o potencial de Chern-Simons. Somente este fato já demonstra que devemos esperar alguma mudança nos sistemas físicos quando estudados em duas dimensões.

Na tabela 6, podemos observar que para ambos os potenciais o *quantum dot*, de acordo com o nosso modelo, possui energias positivas. No entanto, o potencial do tipo $\ln(r)$ apresenta energias chegando a ser até uma ordem de grandeza maior. Fato este que também pode implicar em alterações no comportamento físico de tais sistemas.

No entanto, a obtenção destes valores teóricos sozinhos não nos ajuda a chegar a uma conclusão. Necessitamos também de resultados experimentais para que possamos validar ou eliminar nossas previsões.

Com isso em mente, procuramos, nesta tese, utilizar a fusão catalisada por muóns como esta ponte entre o teórico e o experimental, excetuando-se para o caso do *quantum dot*, de modo que nossos resultados sirvam de motivação para uma investigação mais profunda desse tema. De fato, como descreveremos a seguir, observamos que, em suma, este tipo de fusão se beneficiaria muito se for capaz de ocorrer em uma região na qual as

leis da física apresentem um comportamento bidimensional.

Vale ressaltar que todas as análises feitas aqui para a fusão catalisada por muóns representam somente estimativas, visto que o nosso modelo não contempla a totalidade dos processos que estão envolvidos, principalmente os coletivos e os efeitos de temperatura. Em seguida discutiremos, caso a caso, como estes potenciais podem influenciar neste tipo de fusão.

5.1 O potencial $1/r$

Para o átomo bidimensional governado pelo potencial $1/r$, obtemos um resultado semelhante ao que acontece com um átomo tridimensional do mesmo tipo: o fato de seu raio médio ser cerca de 200 vezes menor quando comparamos o átomo muônico com seu análogo eletrônico, como podemos ver na tabela 5. Na tabela 4, vemos também que seu autovalor de energia do estado fundamental também é aproximadamente 200 vezes maior para o átomo muônico em comparação com o eletrônico.

Como este é o potencial que descreve as interações entre partículas portadoras de carga em três dimensões, é comum que se considere que ele também seria válido em uma configuração planar, já que podemos partir do princípio que ainda estaríamos trabalhando em um espaço tridimensional. Mesmo que este fato seja verdadeiro, ainda assim, vemos pela tabela 5 que, em duas dimensões, os átomos apresentam um raio médio cerca de 10% menor que o caso tridimensional. Mas para saber se esse aprimoramento é importante para o processo de fusão, precisamos estudar como este comportamento afeta as moléculas.

Assim, levando este cálculo para a molécula bidimensional, também observamos o mesmo comportamento na redução do raio médio e no aumento da energia. De fato, uma inspeção na tabela 9 mostra que a diferença nos raios médios é menor para a molécula que para o átomo, quando comparadas com o caso tridimensional. Essa diferença pode mostrar que este tipo de fusão pode se beneficiar de ser executada em uma região planar, mesmo que o potencial permaneça inalterado.

5.2 O potencial $\ln(r)$

Como já foi discutido na Introdução, este potencial tem a vantagem de satisfazer as equações de Maxwell em duas dimensões. Portanto, é um bom candidato a ser estudado. E, de fato, apresentou resultados motivadores quando o assunto é fusão, visto que tanto para os átomos (tabela 5), quanto para as moléculas (tabela 9), ele não só foi capaz de reproduzir o raio médio cerca de 200 vezes menor quando utilizamos sistemas muônicos como também apresentou raios médios significativamente menores que o caso $1/r$. Fato

este que indica um significativo favorecimento do processo de fusão.

Seguindo os passos da referência (CARUSO *et al.*, 2020; CARUSO *et al.*, 2022), precisamos, além do raio médio, analisar outros fatores para estudar melhor como este potencial afeta a fusão. Um desses fatores é a chamada taxa de fusão, que é a probabilidade de os dois núcleos que formam a molécula estarem a uma distancia de 10 fm ou menos. Como podemos ver na tabela 10, fazemos a comparação desta taxa com as moléculas análogas tridimensionais.

Tabela 10 - probabilidade de encontrar os dois núcleos das diferentes moléculas a uma distancia igual ou menor que 10 fm, para o potencial $\ln(r)$ e para o caso tridimensional

Molécula	$\ln(r)$	$3D$
<i>ppe</i>	$7,23 \times 10^{-6}$	$2,4 \times 10^{-84}$
<i>dde</i>	$4,56 \times 10^{-6}$	$1,7 \times 10^{-88}$
<i>pp\mu</i>	$9,3 \times 10^{-3}$	$2,9 \times 10^{-9}$
<i>dd\mu</i>	$1,6 \times 10^{-2}$	$1,2 \times 10^{-10}$

Fonte: O autor, 2022.

De fato, podemos ver na tabela 10 que a probabilidade dos núcleos estarem bem próximos um do outro é significativamente maior para o caso do potencial $\ln(r)$ do que o caso tridimensional.

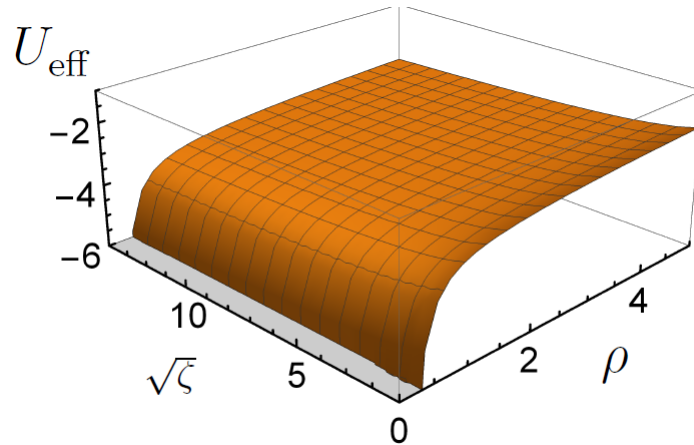
5.3 O potencial de Chern-Simons

Enfim, tanto para os átomos como para as moléculas governadas por este potencial, não fomos capazes de observar uma mudança significativa no raio médio quando passamos de um sistema eletrônico para um muônico. Para entender melhor este fato, vamos construir uma figura mostrando como o potencial efetivo da equação (35) se comporta com diferentes valores ζ .

De fato, a figura 11 mostra que o potencial efetivo pouco se altera quando mudamos o valor de ζ . E como já foi visto anteriormente, esse valor é proporcional à massa reduzida da molécula. Logo, observa-se uma dependência pequena da massa reduzida da molécula na forma do potencial efetivo. Isso se deve ao fato de a massa topológica do fóton exercer uma influência maior na forma do potencial do que a massa das partículas que compõem o átomo.

Apesar do potencial de Chern-Simons não apresentar essa importante característica para a fusão, analisando a tabela 9, verificamos que para as moléculas eletrônicas este potencial apresenta um raio médio inferior até mesmo ao potencial logarítmico.

Figura 11 - Potencial efetivo da equação (35) para diferentes valores de ζ .



Fonte: CARUSO *et al.*, 2021, p.6.

Analisaremos agora as taxas de fusão para este potencial em comparação com o caso tridimensional, como mostra a tabela 11.

Tabela 11 - probabilidade de encontrar os dois núcleos das diferentes moléculas a uma distância igual ou menor que 10 fm para o potencial de Chern-Simons e para as moléculas tridimensionais

Molécula	$\lambda = 0.2 \times 10^{-3}$	$\lambda = 0.2 \times 10^{-5}$	3D
<i>ppe</i>	$3,47 \times 10^{-6}$	$2,68 \times 10^{-5}$	$2,4 \times 10^{-84}$
<i>dde</i>	$2,27 \times 10^{-6}$	$1,6 \times 10^{-5}$	$1,7 \times 10^{-88}$
<i>pp\mu</i>	$2,98 \times 10^{-6}$	$2,42 \times 10^{-5}$	$2,9 \times 10^{-9}$
<i>dd\mu</i>	$9,54 \times 10^{-5}$	$8,97 \times 10^{-4}$	$1,2 \times 10^{-10}$

Fonte: O autor, 2022.

Percebemos que este potencial também pode oferecer uma grande vantagem para este tipo de fusão. E melhor ainda, não precisaríamos mais trabalhar com moléculas muônicas, já que as eletrônicas apresentam resultados tão bons quanto.

5.4 Considerações finais

Nossos resultados servem o propósito de mostrar que existem sistemas físicos que podem de fato se beneficiar de uma interação bidimensional. No entanto, como já foi dito anteriormente, para isso esperamos que nossos estudos motivem a realização de experimentos que sejam capazes de comparar seus dados com as previsões teóricas aqui feitas.

O fato de termos indícios de que um potencial governado pelo termo de Chern-Simons seria capaz de aumentar a probabilidade de fusões nucleares sem a necessidade de substituir o elétron pelo muón mostra o quão importante é prosseguir com pesquisas deste tipo. Uma vez que consigamos demonstrar, empiricamente, que algum desses sistemas obedece a essas equações bidimensionais, certamente desdobraremos um novo ramo da Física.

REFERÊNCIAS

- ABBOT, E. *Flatland: a romance of many dimensions*. London: Seeley, 1884. Domínio público.
- ALLISON, A. C. *The numerical solution of coupled differential equations arising from the Schrödinger equation*. *Jour. Comput. Phys.*, [S.l.], n. 6, p. 378, 1970.
- ANDREW, K.; SUPPLEE, J. *A confined Hydrogen Atom in higher space Dimensions*. *Am. J. Phys.*, [S.l.], n. 61, p. 1177, 1990.
- BALBIANI, P.; FERNÁNDEZ-DUQUE, D.; LORINI, E. *Exploring the bidimensional space: a dynamic logic point of view*. *arXiv preprint arXiv:1702.01601*, 2017.
- BARAKAT *et al.*, F. *Structural and optical behaviors of 2d-layered molybdenum disulfide thin film: Experimental and ab-initio insights*. *Journal of Materials Research and Technology*, [S.l.]: Elsevier, v. 14, p. 780–796, 2021.
- BARROW, J. D. *Dimensionality*. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, Londres: The Royal Society London, v. 310, n. 1512, p. 337–346, 1983.
- BIANCHI, S. D.; WELLS, J. *Explanation and the dimensionality of space*. *Synthese*, [S.l.]: Springer, v. 192, n. 1, p. 287–303, 2015.
- BLATT, J. M. *Practical points concerning the solution of the Schrödinger equation*. *Jour. Comput. Phys.*, [S.l.], n. 1, p. 382, 1967.
- CALLENDER, C. *Answers in search of a question: ‘proofs’ of the tri-dimensionality of space*. *Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, [S.l.]: Elsevier, v. 36, n. 1, p. 113–136, 2005.
- CARUSO, F. *Life and space dimensionality: A brief review of old and new entangled arguments*. *Jour. of Astrobiology & Outreach*, [S.l.], n. 3, p. 152, 2016.
- CARUSO, F. *et al.* *Solving two-dimensional non-relativistic electronic and muonic atoms governed by Chern-Simons potential*. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, [S.l.]: Elsevier, v. 127, p. 114521, 2021.
- CARUSO, F.; MARTINS, J.; OGURI, V. *On the existence of hydrogen atoms in higher dimensional euclidean spaces*. *Phys. Lett. A*, [S.l.], n. 377, p. 694, 2013.

- CARUSO, F. et al. *Corrigendum to: "solving a two-electron quantum dot model in terms of polynomial solutions of a biconfluent heun equation"*[ann. phys. 347 (2014) 130-140]. *Annals of Physics*, [S.l.], v. 377, p. 518–519, 2017.
- CARUSO, F.; OGURI, V. *O método numérico de Numerov aplicado à equação de Schrödinger*. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, [S.l.], v. 36, n. 2, p. 2310, 2014.
- CARUSO, F.; OGURI, V.; SILVEIRA, F. *How the inter-electronic potential ansätze affect the bound state solutions of a planar two-electron quantum dot model*. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, [S.l.]: Elsevier, v. 105, p. 182–185, 2019a.
- _____. *Numerical solutions for a two-dimensional quantum dot model*. *Brazilian Journal of Physics*, [S.l.]: Springer, v. 49, n. 3, p. 432–437, 2019b.
- _____. *Applications of the numerov method to simple quantum systems using python*. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, [S.l.], v. 44, p. e20220098, 2022.
- CARUSO, F. et al. *Non-relativistic solutions for three-body molecules within a chern–simons model*. *Annals of Physics*, [S.l.]: Elsevier, p. 168943, 2022.
- CARUSO, F.; XAVIER, R. M. *On the physical problem of spatial dimensions: an alternative procedure to stability arguments*. *Fund. Sci.*, [S.l.], n. 8, p. 73, 1987.
- CARUSO et al. *Effects on the non-relativistic dynamics of a charged particle interacting with a Chern-Simons potential*. *Europ. Phys. Journ. B*, [S.l.], n. 86, p. 324, 2013.
- CARUSO et al. *A planar model for the muon-catalyzed fusion*. *EPL (Europhysics Letters)*, [S.l.]: IOP Publishing, v. 128, n. 2, p. 22001, 2019c.
- CARUSO et al. *A bidimensional quasi-adiabatic model for muon-catalyzed fusion in muonic hydrogen molecules*. *The European Physical Journal D*, [S.l.]: Springer, v. 74, n. 12, p. 1–11, 2020.
- CARUSO et al. *On the influence of maxwell–chern–simons electrodynamics in nuclear fusion*. *Submetido a publicação*, 2022.
- CHEON et al., G. *Data mining for new two-and one-dimensional weakly bonded solids and lattice-commensurate heterostructures*. *Nano letters*, [S.l.]: ACS Publications, v. 17, n. 3, p. 1915–1923, 2017.
- CORNU, F.; JANCOVICI, B. *On the two-dimensional coulomb gas*. *Journal of statistical physics*, [S.l.]: Springer, v. 49, n. 1, p. 33–56, 1987.
- DEUTSCH, C.; LAVAUD, M. *Equilibrium properties of a two-dimensional coulomb gas*. *Physical Review A*, [S.l.]: APS, v. 9, n. 6, p. 2598, 1974.

- EHRENFEST, P. *In what Way does it Become manifest in the fundamental laws of physics that Space has Three Dimensions?* *Proc. Amst. Acad.*, [S.l.], n. 20, p. 200, 1917.
- _____. *Welche Rolle spielt die Dreidimensionalität des Raumes in den Grundgesetzen der Physik?* *Ann. Phys.*, [S.l.], n. 61, p. 440, 1920.
- EVEKER *et al.*, K. *The two-dimensional hydrogen atom with a logarithmic potential energy function.* *Am. J. Phys.*, [S.l.], n. 58, p. 1183, 1990.
- FLETCHER *et al.*, S. C. *Would two dimensions be world enough for spacetime? Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, [S.l.]: Elsevier, v. 63, p. 100–113, 2018.
- FUJIWARA *et al.*, M. *Using thin film targets for muonic atoms and muon catalyzed fusion studies.* In: _____. *High Intensity Muon Sources*. [S.l.]: World Scientific, 2001. p. 291–298.
- GARON, T. S. *The Two-Dimensional Hydrogen Atom*. 2011. 57 f. Bachelor (Arts) — Reed College, Portland, Oregon, 2011.
- GEIM, A. K. *Graphene: Status and prospects.* *Nature*, [S.l.], n. 324, p. 1530, 2009.
- GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. *The Rise of Graphene.* *Nature*, [S.l.], n. 6, p. 183, 2007.
- GUREVICH, L.; MOSTEPANENKO, V. *On the existence of atoms in n-dimensional space.* *Phys. Lett. A*, [S.l.], n. 35, p. 201, 2013.
- LEROY, J. P.; WALLACE, R. *Renormalized Numerov method applied to eigenvalue equations: extension to include single derivative terms and a variety of boundary conditions.* *Jour. Phys. Chem.*, [S.l.], n. 89, p. 1928, 1985.
- LIU *et al.* *Colloidal quantum dot electronics.* *Nature Electronics*, [S.l.]: Nature Publishing Group, v. 4, n. 8, p. 548–558, 2021.
- MARSHALL *et al.*, G. *Advantages and limitations of solid layer experiments in muon catalyzed fusion.* *Hyperfine interactions*, [S.l.]: Springer, v. 138, n. 1, p. 203–211, 2001.
- MOURA-MELO, W. A.; HELAYËL-NETO, J. *Remarks on dirac-like monopoles, maxwell and maxwell-chern-simons electrodynamics in $d= 2+ 1$ dimensions.* *Physical Review D*, [S.l.]: APS, v. 63, n. 6, p. 065013, 2001.

NIETO, M. M. *Hydrogen atom and relativistic pi-mesic atom in N-space dimensions. Am. J. Phys.*, [S.l.], n. 47, p. 1067, 1979.

_____. *Existence of bound states in continuous $0 < d < \infty$ dimensions. Phys. Lett. A*, [S.l.], n. 293, p. 10, 2002.

NUMEROV, B. V. *A Method of Extrapolation of Perturbations. Month. Not. Roy. Astro. Soc.*, [S.l.], n. 84, p. 592, 1924.

_____. *Note on the numerical integration of $d^2x/dt^2 = f(x, t)$. Astronomische Nach.*, [S.l.], n. 230, p. 359, 1927.

PARK, D. *Introduction to the Quantum Theory*. 3. ed. Mineola, NY: Dover, 2005.

PETKOV, V. (Ed.). *Relativity and the Dimensionality of the World*. [S.l.]: Springer, 2007.

SHAQQOR, M. A.; AL-JABER, S. M. *A confined Hydrogen Atom in higher space Dimensions. Int. J. Theor. Phys.*, [S.l.], n. 48, p. 2462, 2009.

TANGHERLINI, F. R. *Schwarzschild field inn dimensions and the dimensionality of space problem. Il Nuovo Cimento (1955-1965)*, [S.l.]: Springer, v. 27, n. 3, p. 636–651, 1963.

WEYL, H. *Philosophy of Mathematics and Natural Science*. [S.l.]: Princeton University Press, 1949.

WOGGON, U. *Optical Properties of Semiconductor Quantum Dots*. Germany: Springer, 1958. 254 p.

ZHANG, Y. *Direct Observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene. Nature*, [S.l.], n. 459, p. 820, 2009.

APÊNDICE A – Trabalhos produzidos durante o doutorado

Neste apêndice, elenco, não só os trabalhos que já foram citados ao longo do texto, mas também todos os outros produzidos no decorrer do meu processo de doutoramento.

Ao todo, foram publicados 11 artigos, devidamente avaliados pelos pares, em revistas científicas nacionais e internacionais, são eles, em ordem cronológica:

CARUSO, F.; *et al.* *Corrigendum to: “Solving a two-electron quantum dot model in terms of polynomial solutions of a Biconfluent Heun Equation”*[Ann. Phys. 347 (2014) 130-140]. *Annals of Physics*, v. 377, p. 518-519, 2017.

CARUSO, F.; OGURI, V.; SILVEIRA, F. *Calores específicos dos gases ideais degenerados*. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 40, a.n. e2303, 2018.

CARUSO, F.; OGURI, V.; SILVEIRA, F. *Numerical solutions for a two-dimensional quantum dot model*. *Brazilian Journal of Physics*, v. 49, n. 3, p. 432-437, 2019.

CARUSO, F.; OGURI, V.; SILVEIRA, F. *How the inter-electronic potential Ansätze affect the bound state solutions of a planar two-electron quantum dot model*. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 105, p. 182-185, 2019.

CARUSO, F.; *et al.* *A planar model for the muon-catalyzed fusion*. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 128, n. 2, a.n. 22001, 2019.

CARUSO, F.; OGURI, V.; SILVEIRA, F. *On the magnetic field spectrum and its fluctuations in a primeval cold plasma in thermal equilibrium*. *Asian Journal of Research and Reviews in Physics*, v. 3, p. 10-21, 2020.

CARUSO, F.; *et al.* *A bidimensional quasi-adiabatic model for muon-catalyzed fusion in muonic hydrogen molecules*. *The European Physical Journal D*, v. 74, n. 12, p. 1-11, 2020.

CARUSO, F.; OGURI, V.; SILVEIRA, F. *On new approximations for the modified Bessel function of the second kind ($K_0(x)$)*. *Open Journal of Mathematical Sciences*, v. 5, n. 1, p. 11, 2021.

CARUSO, F.; *et al.* *Solving two-dimensional non-relativistic electronic and muonic atoms governed by Chern-Simons potential*. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 127, a.n. 114521, 2021.

CARUSO, F.; OGURI, V.; SILVEIRA, F. *Applications of the Numerov method to simple quantum systems using Python*. Revista Brasileira de Ensino de Física v. 44, a.n. e20220098, 2022.

CARUSO, Francisco et al. *Non-relativistic solutions for three-body molecules within a Chern–Simons model*. Annals of Physics, a.n. 168943, 2022.

Além desses, 2 artigos foram submetidos à publicação:

CARUSO, F.; OGURI, V.; SILVEIRA, F. *Study of hydrogen atom described by a generalized wave equation: what can we still learn about space*.

CARUSO, F.; OGURI, V.; SILVEIRA, F. *On the influence of Maxwell–Chern–Simons electrodynamics in nuclear fusion*. Submetido a publicação.

E por fim, três livros, nos quais dois participando com coautor e o terceiro como editor e revisor.

CARUSO, F.; OGURI, V.; SILVEIRA, F. *Física Moderna: Exercícios Resolvidos*, (segunda edição), Livraria da Física, 2019. 304 p.

CARUSO, F.; HELAYËL J.A.; SILVEIRA, F.(Orgs.), *As interações fracas: uma introdução*. São paulo: Livraria da Física, 2020. 242 p.

CARUSO, F.; et al. *Tirinhas de Física: uma abordagem para sala de aula*, Livraria da Física, 2021 128 p.