



Escola de Talentos

**A formação de estados de
charmônio na QCD**

The Formation of Charmonium States in QCD

**João Marques Bento P. Neto
Murilo Oliveira Pires
Matheus Roselli Ravani**

Trabalho de Conclusão de Curso

Orientadora Profa. Dra. Arlene Cristina Aguilar

This monograph aims to study the formation of heavy quark bound states, focusing on the charmonium system ($c\bar{c}$), using the Schrödinger equation with the Cornell potential. To this end, a progressive review of fundamental quantum mechanics problems with analytical solutions is carried out, including the infinite potential well, the harmonic oscillator, and the hydrogen atom. These cases provide the necessary conceptual and mathematical foundation for analyzing more complex systems. The Schrödinger equation is then solved numerically for the $c\bar{c}$ system, employing the finite element method via the *NDEigensystem* function in Mathematica. The results obtained show excellent agreement with available experimental data, with a relative error below 3%, indicating that the nonrelativistic treatment, combined with the Cornell potential, is suitable for describing the structure of charmonium bound states. Finally, possible extensions of the model are discussed, such as the inclusion of hyperfine effects and the application of the method to the bottomonium system ($b\bar{b}$).

Resumo

Esta monografia tem como objetivo estudar a formação de estados ligados de quarks pesados, com foco no sistema de charmônio ($c\bar{c}$), utilizando a equação de Schrödinger com o potencial de Cornell. Para isso, é conduzida uma revisão progressiva de problemas fundamentais da Mecânica Quântica que admitem soluções analíticas, como o poço de potencial infinito, o oscilador harmônico e o átomo de hidrogênio. Essas etapas estabelecem a base conceitual e matemática necessária para o estudo de sistemas mais complexos. A equação de Schrödinger é, então, resolvida numericamente para o caso do $c\bar{c}$, empregando-se o método dos elementos finitos por meio da função *NDEigensystem* do software Mathematica. Os resultados obtidos mostram excelente concordância com os dados experimentais disponíveis, com erro relativo inferior a 3%, evidenciando que o tratamento não relativístico, aliado ao potencial de Cornell, é adequado para descrever a estrutura dos estados ligados de charmônio. Por fim, são discutidas possíveis extensões do modelo, como a inclusão de efeitos hiperfinos e a aplicação do método ao sistema de bottomônio ($b\bar{b}$).

Agradecimentos

Aos nossos pais, Andréa, Flávia e Alexandre, Fábio e Lorena, aos familiares e amigos, por verem a educação como um agente transformador, pelo apoio e incentivo incessantes ao longo de todo o desenvolvimento deste projeto e de nossas vidas;

À nossa orientadora, Profa. Dra. Arlene Cristina Aguilar, pela disposição em nos orientar, por todo o valioso conhecimento transmitido a nós ao longo deste último ano, além de sua grande ajuda no desenvolvimento e escrita deste projeto;

Ao diretor da Escola de Talentos, Prof. Dr. Marcelo M. Guzzo, pelo constante apoio e zelo para com todos os participantes, por direcionar com maestria um projeto tão belo quanto é a Escola de Talentos;

Aos nossos tutores, Profs. Drs. André Monteiro Paschoal, Leonardo de Lima, Ricardo D'Elia Matheus, Rickson Coelho Mesquita, bem como nosso monitor, Prof. Dr. Fabrício Marques do Carmo, pelos preciosos ensinamentos e por todas as aulas acerca das mais variadas áreas da física desenvolvidas durante o Projeto Pedagógico;

À equipe da Escola de Talentos, por manter o pleno funcionamento de um projeto tão único, complexo, diverso e especial, fonte de inspiração e promotor de desenvolvimento pessoal e acadêmico para jovens que muito se interessam pela ciência;

Ao Instituto Principia, por ser um importante centro de difusão cultural e científico, pelo apoio financeiro e por organizar os incríveis encontros anuais;

À nossa turma DNHádrons/Leptonspirose, com quem compartilhamos muitos aprendizados e apoios mútuos, pela convivência enriquecedora;

À instituição Stark Bank e toda a sua equipe, pelo financiamento e apoio a todos os projetos, encontros e momentos que tanto agregaram em nossas vidas, permitindo que muitos jovens se aprofundassem no estudo da física.

Conteúdo

Abstract	ii
Resumo	iii
Agradecimentos	iv
Conteúdo	v
1 Introdução	1
2 A Equação de Schrödinger para potenciais centrais	6
2.1 Equação de Schrödinger independente do tempo e a função de onda	6
2.2 Equação de Schrödinger em coordenadas esféricas	8
2.3 A equação radial e os números quânticos	9
2.4 Normalização da função de onda	11
2.4.1 Subníveis de energia e degenerescência	12
2.5 Espectro de energia para diferentes tipos de potenciais	13
2.5.1 O átomo de hidrogênio	14
2.5.2 O oscilador harmônico	15
3 O potencial de Cornell e a formação do charmônio	18
3.1 Linhas de campo e o confinamento	18
3.2 O potencial de Cornell	21
3.3 Interação spin-spin	23
3.4 Notação de números quânticos e notação espectroscópica	24
3.4.1 Notação de números quânticos de spin-paridade-carga . .	24
3.4.2 Notação espectroscópica	26
4 O espectro de massa do charmônio	28
4.1 Solução numérica do problema de autovalor	28
4.2 Espectro de massa e densidades de probabilidade dos charmônios	30
5 Conclusões	34

A Poço de potencial infinito em uma e duas dimensões	37
B Oscilador harmônico unidimensional	40
C Harmônicos esféricos	42
Bibliografia	43

Sabe-se que, na física, todas as forças conhecidas que atuam entre os objetos — sejam eles macroscópicos ou microscópicos — podem ser descritas por quatro interações fundamentais: gravitacional, eletromagnética, forte e fraca. Essas interações governam o comportamento da matéria e da energia em todas as escalas, desde as menores partículas subatômicas até a estrutura do universo como um todo. Cada uma delas desempenha um papel essencial na descrição dos fenômenos naturais [1, 2, 3, 4].

A *interação gravitacional* é responsável por manter os planetas em órbita, formar galáxias e governar a dinâmica do universo, sendo descrita como uma força de atração entre corpos com massa. A gravidade possui alcance infinito e domina em escalas astronômicas, embora seja a mais fraca das quatro interações fundamentais [4].

Já a *interação eletromagnética*, por sua vez, atua entre partículas eletricamente carregadas e é responsável por fenômenos como a eletricidade, o magnetismo e a luz. Trata-se de uma força muito mais intensa que a gravidade, também de alcance infinito e, portanto, que desempenha papel central em processos atômicos, moleculares e na propagação de radiação eletromagnética [4].

A *interação forte*, por outro lado, é a responsável por manter os quarks confinados dentro dos hádrons, como prótons e nêutrons. Seu efeito residual, conhecido como força nuclear forte, mantém os prótons e nêutrons unidos no interior dos núcleos atômicos, superando a repulsão elétrica entre os prótons. É cerca de 100 vezes mais intensa que a interação eletromagnética, porém seu alcance é extremamente curto, limitado ao tamanho de um próton, aproximadamente 10^{-15} m [4].

Por fim, associa-se a *interação fraca* a processos de decaimento radioativo, como o decaimento beta, no qual um nêutron se transforma em um próton, emitindo um elétron e um antineutrino. Essa interação desempenha um papel essencial na geração de energia nas estrelas e na síntese de elementos no universo. Seu alcance é ainda menor que o da interação forte — cerca de mil vezes menor que o raio de um núcleo atômico — e sua intensidade é aproximadamente 10^4 vezes inferior à da interação eletromagnética [4].

Denomina-se *modelo padrão da física de partículas elementares* a teoria que unifica as interações eletromagnética, forte e fraca, deixando de fora somente a força gravitacional. Neste modelo, as partículas fundamentais — aquelas que não

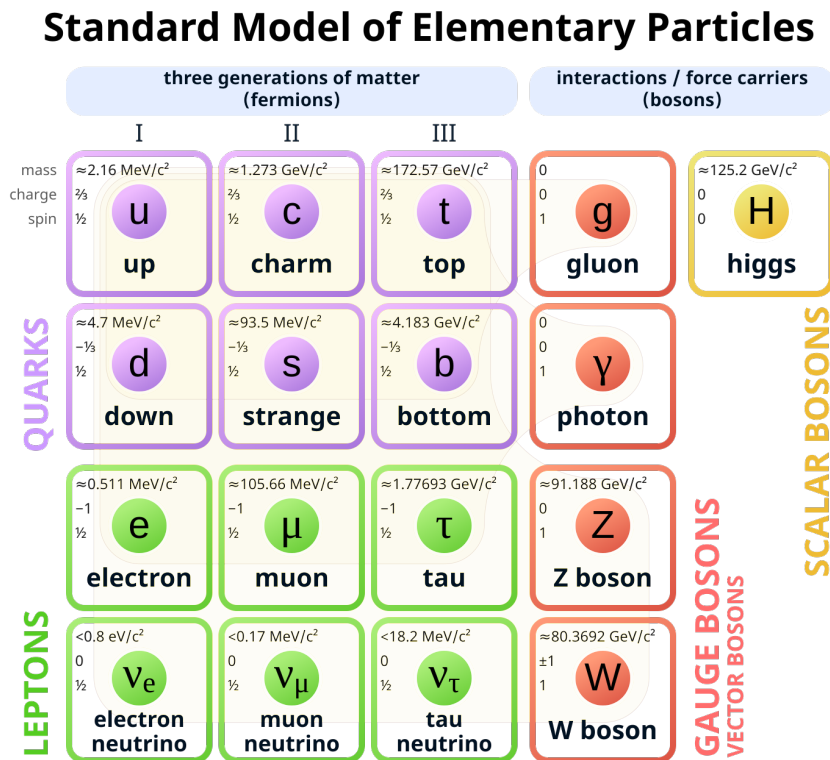


Figura 1.1: O modelo padrão das partículas elementares: composto por doze férmions, seis léptons e seis quarks, e os cinco bósons fundamentais. Fonte: Wikipedia.

possuem estrutura interna — estão agrupadas em dois grandes grupos: as partículas com spin inteiro (como 0, 1 ou 2), conhecidas como *bósons*, e as com spin semi-inteiro (como $1/2$, $3/2$, etc.), conhecidas como *férmions* [1].

O primeiro deles — os *bósons* — são, em sua maioria, responsáveis por mediar as interações fundamentais entre os *férmions*. Nesse grupo do modelo padrão da física de partículas, se fazem presentes os seguintes mediadores: o fóton, que media a interação eletromagnética; o glúon, que carrega a força forte; os bósons $W^\pm$ e Z_0 , que transmitem a força fraca. Além desses, há também o bóson de Higgs, uma partícula escalar (spin 0) que não media interações, mas é fundamental para o mecanismo que confere massa às partículas elementares: o mecanismo de Higgs [1].

Por outro lado, o segundo grupo — *férmions* — obedecem, pela natureza de seu spin, ao princípio da exclusão de Pauli, que estabelece que dois férmions idênticos não podem ocupar simultaneamente o mesmo estado quântico. Entre eles, estão

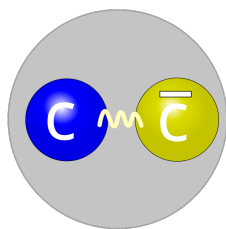


Figura 1.2: Representação pictórica do charmônio, um estado ligado formado pela combinação de quarks e antiquark $c\bar{c}$. Fonte: Wikipedia.

as partículas que constituem a matéria, como os quarks up e down — que, quando combinados, formam os prótons e nêutrons — e o elétron [1].

Além disso, no modelo padrão, os férmions são separados em dois subgrupos: os *léptons* (elétron, múon, tau e seus respectivos neutrinos) e os *quarks* up (u), down (d), charm (c), strange (s), top (t), e bottom (b). Os léptons interagem via força eletromagnética e fraca, enquanto os quarks, via eletromagnética e forte, já que, além de carga elétrica (seja ela positiva ou negativa), também carregam carga de cor: vermelho (R), verde (G), e azul (B). Os glúons, mediadores da força forte, carregam combinações de cor e anticor. Essa característica representa uma diferença fundamental em relação ao eletromagnetismo, cuja partícula mediadora — o fóton — não possui carga elétrica, sendo eletricamente neutro [1, 2, 3, 4].

Um resumo das principais propriedades das partículas que fazem parte do modelo padrão e a forma com que estão organizados em seus blocos (férmions, bósons, léptons e quarks) está esquematizado na Fig. 1.1.

Entretanto, na natureza, somente estados compostos de “cor branca” (ou os chamados singletos de cor) podem existir como partículas físicas observáveis¹ [1, 2, 3].

Desta forma, observa-se na natureza somente a formação de dois tipos de hádrons: (i) *mésons* — compostos por quark + antiquark com, respectivamente, uma cor e sua anticor — e (ii) *bárions* compostos por três quarks com cores diferentes (RGB), sendo que nos dois casos, a combinação da cor de seus componentes resulta na cor branca, como discutido acima. Isso se deve à propriedade do confinamento, que pode ser compreendida, de forma simplificada, por meio do comportamento do potencial entre quarks. Sabe-se que esse potencial cresce linearmente com a

¹ Note que essa nomenclatura estabelece um paralelismo intencional com o sistema de cores aditivas RGB, visando facilitar a compreensão das interações e justificar por que certas combinações de quarks são permitidas enquanto outras não. No final, a combinação de cores deve resultar em uma cor neutra (branca ou nula), mas é importante destacar que os quarks não são “coloridos” no sentido literal.

distância, o que implica que os quarks não podem ser separados livremente. Ao tentar isolar um quark de outro, a energia necessária se torna tão elevada que, em vez de libertá-lo, torna-se energeticamente mais favorável criar um novo par quark-antiquark, dando origem a novos hádrons — impedindo, assim, a existência de quarks livres na natureza [1, 2].

Neste trabalho, investiga-se a formação, particularmente, de mésons pesados compostos por um quark charm c e seu antiquark correspondente $\bar{c}$ ², que são representados de forma esquemática na Fig. 1.2 [1, 2].

O estado de charmônio mais conhecido e abundante é a partícula J/ψ que — desde sua descoberta, em 1974 [5, 6] — representou um marco fundamental para a Cromodinâmica Quântica (QCD), por diversas razões, entre elas: (i) forneceu a primeira evidência direta da existência de quarks pesados, em particular do quark charm (c); (ii) reforçou a interpretação dos quarks como constituintes elementares da matéria e consolidou a QCD como a teoria correta para descrever a força forte; (iii) possibilitou, por meio do estudo de seu espectro e de seus estados excitados, a investigação detalhada do potencial de interação quark-antiquark em curtas distâncias, aprofundando a compreensão geral da comunidade científica sobre o confinamento de quarks e a liberdade assintótica [7, 8].

Uma das vantagens de se estudar o espectro dos estados de charmônio é que esses sistemas podem ser descritos, em boa aproximação, por uma abordagem não relativística [9, 10, 11, 12]. A justificativa para tal aproximação reside no fato de que a massa do quark charm é significativamente maior que a escala típica da QCD, caracterizada por $\Lambda_{QCD} \approx 200$ MeV. Isso significa que o quark c não é acelerado com a mesma intensidade que quarks leves pela interação forte, resultando em velocidades médias moderadas no referencial do centro de massa do sistema ligado.

Em termos quantitativos, sua velocidade relativa satisfaz $v \approx p/m_c \ll 1$, onde m_c é a massa do quark c , e p o momento relativo entre os quarks. Essa condição justifica o uso da equação de Schrödinger com potenciais efetivos para descrever o espectro dos estados $c\bar{c}$ [1, 2, 11].

Um dos potenciais efetivos mais amplamente utilizados na QCD para esse fim é o *potencial de Cornell*, desenvolvido por Estia J. Eichten, Kurt Gottfried, Toichiro Kinoshita, John Kogut, Kenneth Lane e Tung-Mow Yan [9, 10] na Universidade de Cornell, motivo pelo qual recebe esse nome.

O potencial de Cornell é composto pela soma de dois termos principais — veja

² O quark c possui uma massa relativamente elevada, estimada entre 1,4 – 1,5 GeV. Em contraste, os quarks leves u e d e s apresentam massas significativamente menores, com valores típicos de 2,2 MeV, 4,7 MeV e 96 MeV, respectivamente.

Eq. (3.4) — que refletem aspectos fundamentais da força forte em diferentes regimes de distância [9, 10]:

- Um termo Coulombiano, dominante em curtas distâncias, que descreve a interação entre quark e antiquark quando estão muito próximos — análogo ao potencial eletrostático de Coulomb entre cargas elétricas;
- Um termo linear de confinamento, relevante em longas distâncias, que representa o crescimento linear da energia necessária para separar o par $q\bar{q}$, evidenciando o fenômeno do confinamento.

A combinação desses dois termos permite capturar, de forma eficaz, o fenômeno de liberdade assintótica da QCD que deixa os quarks livres em pequenas distâncias e os confinam em grandes distâncias.

O objetivo desta monografia é apresentar um estudo introdutório sobre a formação de estados ligados e a espectroscopia de charmônios, utilizando o potencial efetivo de Cornell como elemento central. Para isso, será resolvida numericamente a equação de Schrödinger radial, com o intuito de determinar os diferentes valores de energia de ligação associados a esses sistemas. A partir dessas energias, serão calculadas as massas dos estados ligados que serão identificados por meio da notação espectroscópica J^{PC} . Por fim, os resultados obtidos serão comparados com os valores experimentais disponíveis na literatura.

Esta monografia está organizada da seguinte forma: no Capítulo 2, apresenta-se a derivação da equação radial unidimensional que será utilizada para descrever os estados ligados do sistema $c\bar{c}$, além da discussão sobre as condições de normalização da função de onda. No Capítulo 3, é introduzido em detalhes o potencial de Cornell, abordando-se suas motivações físicas e estrutura matemática. Apresenta-se também uma breve introdução à notação espectroscópica J^{PC} , empregada para classificar os diferentes estados de charmônio com base em seus números quânticos. O Capítulo 4 é dedicado à descrição da metodologia numérica empregada e à apresentação dos resultados obtidos para o espectro de massas do charmônio. No Capítulo 5, são apresentadas as conclusões do trabalho, bem como discussões sobre possíveis extensões e perspectivas futuras deste estudo. No apêndice A, detalha-se o método utilizado para a obtenção das funções de onda e os respectivos níveis de energia do poço de potencial infinito unidimensional e bidimensional. No apêndice B, é descrito o cálculo dos níveis de energia de um oscilador harmônico quantizado unidimensional, bem como suas respectivas funções de onda com base nos polinômios de Hermite. Por fim, no apêndice C, mostra-se a solução da parte angular da equação de Schrödinger, mostrando a simetria dos harmônicos esféricos resultantes com base nos polinômios associados de Legendre.

Na física clássica, o comportamento futuro de uma partícula pode ser previsto usando as leis de Newton. Conhecendo a força, $\vec{F}$ que atua sobre ela, torna-se possível a resolução da equação da segunda Lei de Newton, em sua forma diferencial,

$$\vec{F} = m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2}, \quad (2.1)$$

para determinar sua posição, $\vec{r}(t)$, e velocidade, $\vec{v}(t)$, em qualquer instante de tempo, t . Apesar das possíveis dificuldades matemáticas, o princípio fundamental é simples: resolver esta equação diferencial e interpretar suas soluções. Um exemplo disso é o movimento de planetas, que, sob a força gravitacional, seguem trajetórias elípticas exatas, ou os cometas que podem seguir trajetórias elípticas, parabólicas ou hiperbólicas. Isto ilustra a natureza determinística da física clássica [13].

Entretanto, as partículas fundamentais, como os elétrons e quarks, não se movem conforme as leis clássicas do movimento descritas pela Mecânica Newtoniana e, tampouco, possuem uma natureza determinística. Em vez disso, essas partículas seguem os princípios da Mecânica Quântica.

Neste Capítulo, há uma breve introdução da Equação de Schrödinger, que será utilizada para descrever o estado ligado $c\bar{c}$, bem como as propriedades principais de sua função de onda.

2.1 Equação de Schrödinger independente do tempo e a função de onda

Devido à dualidade onda-partícula, a caracterização de sistemas quânticos, como o caso de um estado ligado de quarks $c\bar{c}$, pode ser descrito por uma quantidade complexa denominada função de onda, representada pelo símbolo $\psi(x, y, z)$, em que (x, y, z) são as coordenadas espaciais [14].

Como ocorre no caso das ondas clássicas, a função de onda é a solução de uma equação diferencial parcial conhecida como *Equação de Schrödinger* independente do tempo, que foi proposta em 1926 pelo físico austríaco Erwin Schrödinger. Ele postulou que uma partícula quântica de massa m , movendo-se sob a influência de

um potencial $V(x, y, z)$, satisfaz a seguinte equação diferencial parcial [14, 15]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x, y, z) + V(x, y, z)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z), \quad (2.2)$$

em que $\hbar = h/2\pi$, sendo h a constante Planck, E é a energia total do sistema quântico. Já ∇^2 é o operador laplaciano, que em coordenadas cartesianas é definido como

$$\nabla^2\psi(x, y, z) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z). \quad (2.3)$$

Percebe-se que a Eq. (2.2) representa, em essência, a conservação de energia, onde o primeiro termo do lado esquerdo corresponde à energia cinética da partícula³, enquanto que o segundo é a energia potencial. Logo sua soma produz a energia total, E , do sistema.

Já a função de onda, $\psi(x, y, z)$, por ser uma quantidade complexa, não pode ser medida diretamente, e, portanto, não se pode atribuir nenhuma interpretação física para esta função. Ela nada mais é do que uma representação matemática abstrata do estado do sistema, tendo significado somente no contexto da teoria quântica [14, 15].

Entretanto, a densidade de probabilidade — $\rho(x, y, z)$ — de encontrar a partícula na posição (x, y, z) , poderia ser obtida a partir da função de onda pela relação [15],

$$\rho(x, y, z) = |\psi(x, y, z)|^2 = \psi^*(x, y, z)\psi(x, y, z). \quad (2.4)$$

Desta forma, a probabilidade de encontrar a partícula em uma região R é dada por

$$P = \iiint_R dx dy dz |\psi(x, y, z)|^2, \quad (2.5)$$

e portanto — ao normalizar — a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer região do espaço deve ser igual a 1 [14, 15]

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz |\psi(x, y, z)|^2 = 1. \quad (2.6)$$

³ Lembre-se que em mecânica quântica, estabelece-se a correspondência entre o momento da partícula e o operador diferencial $\hat{p} \rightarrow i\hbar\nabla$. Desta forma, o operador energia cinética é dado por $\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$.

2.2 Equação de Schrödinger em coordenadas esféricas

Nesta seção, considera-se que o potencial que atua no sistema ligado de quarks $c\bar{c}$ tem simetria esférica, *i.e.*, depende da variável radial r . Como mostrado na Fig. 2.1, considere que o anticharm $\bar{c}$ está em repouso na origem, enquanto o quark c está a uma distância r da origem, movendo-se sob a ação do potencial $V(r)$ e com energia cinética, $p^2/(2\mu)$. Nesse caso μ é a massa reduzida definida como

$$\mu = \frac{m_c m_{\bar{c}}}{m_c + m_{\bar{c}}} = \frac{m_c}{2}, \quad (2.7)$$

já que partícula e antipartícula possuem a mesma massa, $m_c = m_{\bar{c}}$.

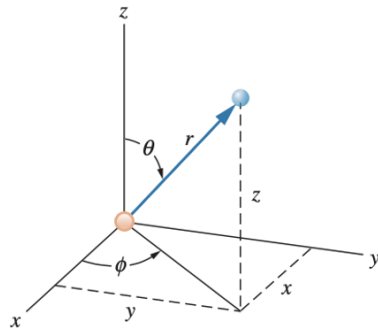


Figura 2.1: Coordenadas esféricas polares para o charmônio. O antiquark $\bar{c}$ está na origem e o quark c em um raio r na direção determinada pelos ângulos polar θ e azimutal ϕ . Fonte: Figura original modificada da Ref. [13].

É importante frisar que em um sistema de duas partículas, o movimento interno dessas duas partículas em torno de seu centro de massa é equivalente ao movimento de uma única partícula com uma massa reduzida.

A Equação de Schrödinger independente do tempo, em três dimensões, para uma partícula de massa μ assume — em coordenadas esféricas — a forma [13, 15, 16]

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi + V(r) \psi = E \psi. \quad (2.8)$$

Note que para manter a notação compacta, foram omitidas as dependências funcionais da função de onda $\psi := \psi(r, \theta, \phi)$ e ∇^2 e as componentes do Laplaciano em

coordenadas esféricas, que são dadas por

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2}. \quad (2.9)$$

A dificuldade em resolver a Eq. (2.8) está relacionada à forma específica do potencial $V(r)$ considerado. Para alguns casos simples, é possível obter soluções analíticas; no entanto, na maioria das situações, a equação requer um tratamento numérico. Antes de aplicar métodos numéricos, porém, é necessário reescrever essa equação diferencial parcial em três dimensões como um conjunto de equações diferenciais ordinárias. Ao fazer este procedimento, através do método de separação de variáveis, são introduzidos naturalmente três números quânticos, que emergem das condições de contorno impostas à solução da equação de onda [13, 16]. Dessa forma, espera-se que a Eq. (2.8) apresente três números quânticos associados às diferentes direções do espaço.

2.3 A equação radial e os números quânticos

Nesta seção, a equação que descreve a parte radial do estado ligado $c\bar{c}$ é derivada a partir da aplicação do método de separação de variáveis. Neste processo, a quantização tanto da energia quanto do momento angular surge naturalmente das condições de aceitabilidade impostas à função de onda. Além disso será discutida a origem e o significado físico dos números quânticos n, ℓ, m que emergem como consequências diretas da estrutura matemática da equação.

O primeiro passo na solução de uma equação diferencial parcial, como a Eq. (2.8) é buscar soluções separáveis, escrevendo a função de onda como uma função de cada variável individual [13, 15, 16]. Escrevemos

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi), \quad (2.10)$$

onde R depende apenas da coordenada radial r , Θ depende apenas de θ , e Φ depende apenas de ϕ .

Substituindo essa forma na equação na Eq. (2.8) e reorganizando os termos, a equação diferencial parcial se separa em três equações diferenciais ordinárias, uma para cada coordenada: radial ($R(r)$), azimutal ($\Theta(\theta)$) e polar ($\Phi(\phi)$). As expressões finais para as três equações diferenciais obtidas são dadas abaixo.

A equação associada à coordenada ϕ é

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + m^2\Phi(\phi) = 0, \quad (2.11)$$

Ela tem como soluções funções periódicas do tipo $\Phi(\phi) = e^{im\phi}$, com o número quântico magnético $m \in \mathbb{Z}$, exigido pela condição de periodicidade $\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$.

Já a equação associada à coordenada θ

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] \Theta(\theta) = 0 \quad (2.12)$$

Esta equação define os polinômios associados de Legendre, e os números quânticos ℓ e m surgem da exigência de soluções regulares e normalizáveis em $\theta \in [0, \pi]$.

A equação radial resulta da parte dependente de r

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] R(r) + \left[V(r) - E + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R(r) = 0, \quad (2.13)$$

Essa equação contém o potencial $V(r)$ e leva à quantização da energia por meio do número quântico principal n . O termo com $\ell(\ell+1)/r^2$ representa a barreira centrífuga associada ao momento angular orbital.

Desta forma, a equação para $\Phi(\phi)$ leva à quantização do momento angular em torno do eixo z , introduzindo o *número quântico magnético* m , enquanto a equação para $\Theta(\theta)$ envolve os polinômios associados de Legendre e define o *número quântico azimutal* ℓ . Por fim, a equação radial depende de r e contém o potencial efetivo, resultando na quantização da energia e na introdução do *número quântico principal* n .

Assim, os três números quânticos (n, ℓ, m) surgem naturalmente como consequência das condições de contorno e da normalização da função de onda. Cada um possui um papel físico bem definido: n determina os níveis de energia permitidos, ℓ está associado ao módulo do momento angular orbital, e m à sua projeção ao longo do eixo de quantização. Na Tabela 2.1 é apresentado um resumo dos números quânticos introduzidos, os valores que cada um pode assumir e seus significados físicos.

Para derivar a versão final da equação radial que será resolvida, será adotado o sistema de unidades naturais, onde $\hbar = c = 1$, e a seguinte substituição será implementada na Eq. (2.13)

$$u(r) = rR(r), \quad (2.14)$$

Número Quântico	Símbolo	Valores Possíveis	Significado Físico
Principal	n	$n = 1, 2, 3, \dots$	Determina os níveis de energia permitidos para o sistema.
Azimutal (ou orbital)	ℓ	$\ell = 0, 1, \dots, n - 1$	Relacionado ao momento angular orbital.
Magnético	m	$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$	Representa a projeção do momento angular ao longo do eixo z .

Tabela 2.1: Números quânticos associados à solução da equação de Schrödinger em coordenadas esféricas.

resultando na forma

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] u(r) = Eu(r), \quad (2.15)$$

que é a equação principal deste trabalho e será resolvida numericamente no Capítulo 4.

2.4 Normalização da função de onda

Normalizar a função de onda é uma etapa fundamental em mecânica quântica, pois garante a validade da interpretação probabilística da função de onda. Para estados ligados, a função de onda deve ser quadrado-integrável, ou seja, a integral do módulo ao quadrado da função de onda sobre todo o espaço deve ser finita. Escrevendo a função de onda como

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad (2.16)$$

onde $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$, são os chamados harmônicos esféricos [veja Apêndice C].

Neste caso a condição de normalização expressa pela Eq. (2.6) se torna

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |R_{n\ell}(r)|^2 |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi = 1, \quad (2.17)$$

onde a parte angular já está normalizada a 1 sobre a integração do ângulo sólido

$$\int |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1, \quad (2.18)$$

a condição de normalização simplifica para

$$\int_0^\infty |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr = 1, \quad \text{ou} \quad \int_0^\infty |u_{n\ell}(r)|^2 dr = 1. \quad (2.19)$$

Definindo

$$A = \int_0^\infty |u_{n\ell}(r)|^2 dr. \quad (2.20)$$

a constante de normalização N será dada por

$$N = \frac{1}{\sqrt{A}}, \quad (2.21)$$

o que produz a função normalizada, $\bar{u}_{n\ell}(r)$

$$\bar{u}_{n\ell}(r) = N u_{n\ell}(r). \quad (2.22)$$

2.4.1 Subníveis de energia e degenerescência

O princípio de exclusão de Pauli estabelece que dois férmions não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente. Se todos os elétrons de um átomo estivessem no mesmo nível de energia do estado fundamental, *e.g.*, todos os átomos seriam idênticos e não haveria a formação de ligações químicas. Isso porque são os elétrons da camada de valência que determinam as propriedades químicas das moléculas.

Assim, os números quânticos n , ℓ e m , definem subníveis de energia, cada um com capacidade para acomodar até $2(2\ell + 1)$ elétrons, levando em conta também o número quântico de spin [13].

Com isso, é possível organizar a distribuição eletrônica de um átomo em seu estado ligado segundo o *princípio de Aufbau*, preenchendo os subníveis de energia em ordem crescente da soma $n + \ell$. Quando dois subníveis possuem o mesmo valor de $n + \ell$, ocupa-se primeiro aquele conforme estabelece a *regra de Madelung*.

O número quântico ℓ designa as denominações dos estados s (*sharp*), p (*principal*), d (*diffuse*) e f (*fundamental*), que correspondem, respectivamente, aos valores

$\ell = 0, 1, 2, 3$. Essas designações têm origem histórica na análise espectroscópica dos átomos e são amplamente utilizadas para descrever a distribuição eletrônica nos orbitais atômicos.

A Tabela 2.2 mostra os valores de n e ℓ que determinam os estados dos subníveis de energia. Note que a capacidade de cada subnível não depende de n , mas sim de ℓ . Isso ocorre porque é ℓ e determina a degenerescência espacial do subnível, ou seja, a quantidade de orbitais disponíveis, e, conseqüentemente, o número máximo de elétrons que ele pode acomodar.

n	ℓ	Subnível	Capacidade $2(2\ell + 1)$
1	0	1s	2
2	0	2s	2
2	1	2p	6
3	0	3s	2
3	1	3p	6
4	0	4s	2
3	2	3d	10

Tabela 2.2: Subníveis de energia para alguns estados de n e ℓ .

Por definição, dois ou mais estados são degenerados quando diferentes combinações de números quânticos resultam em estados com a mesma energia. Esse fenômeno, conhecido como *degenerescência*, torna-se mais evidente à medida que aumenta o número de dimensões do sistema, refletindo a maior diversidade de configurações possíveis que compartilham a mesma energia [13].

2.5 Espectro de energia para diferentes tipos de potenciais

Nesta seção, avalia-se os comportamentos previstos pela equação de Schrödinger na presença de dois tipos de potenciais. O primeiro é o potencial coulombiano, que descreve a interação eletrostática entre o elétron e o próton no átomo de hidrogênio.

Em seguida, analisa-se o potencial do oscilador harmônico tridimensional. Ambos os potenciais são exemplos fundamentais em mecânica quântica, amplamente utilizados devido à sua relevância teórica e variedade de aplicações em diferentes áreas da física.

2.5.1 O átomo de hidrogênio

O átomo de hidrogênio é composto por um próton e um elétron e, como ambas as partículas possuem carga elétrica, estão sujeitas à interação eletromagnética descrita pelo potencial coulombiano expresso por

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}, \quad (2.23)$$

em que e é a carga elementar, ϵ_0 é a permissividade elétrica do vácuo e r é o raio entre o próton e o elétron.

Para determinar o espectro de energia do átomo de hidrogênio, deve-se, primeiro, resolver a parte radial da equação de Schrödinger dada pela Eq. (2.15). Para isso, substitui-se o potencial da Eq. (2.23) na Eq. (2.15), o que resulta na seguinte equação de autovalor

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] u(r) = Eu(r). \quad (2.24)$$

onde E é a energia do estado ligado do átomo de hidrogênio e μ é a massa reduzida do sistema.

A partir da resolução da equação acima, é possível encontrar as funções de onda mostradas na Fig. 2.2 e suas respectivas energias — dependentes apenas de n — que são dadas por

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.25)$$

Na Tabela 2.1, apresentamos as combinações possíveis dos números quânticos n e ℓ , considerando seus respectivos valores permitidos.

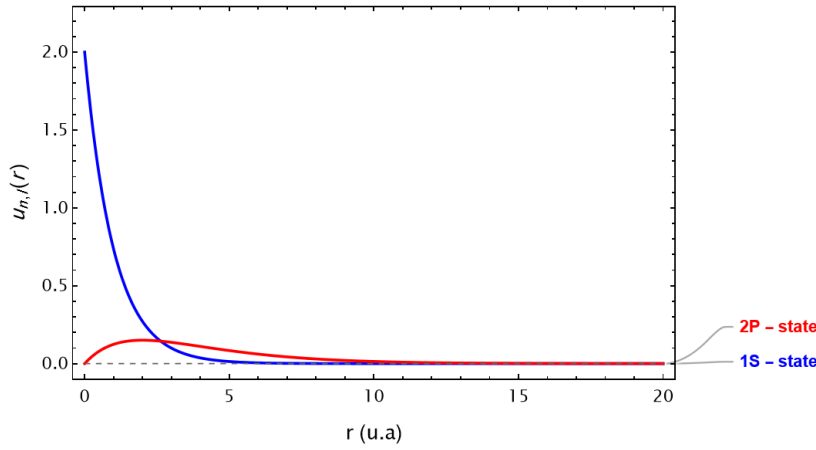


Figura 2.2: Funções de onda $u_{n,\ell}(r)$ do átomo de hidrogênio para os estados caracterizados pelos números quânticos $n = 1$ e $\ell = 0$ (curva em azul) e $n = 2$ e $\ell = 1$ (curva em vermelho). Note que, para obter a solução da Eq. (2.15), toma-se $\hbar = 1$.

2.5.2 O oscilador harmônico

Considera-se, outro exemplo de um sistema tridimensional, onde a partícula de massa m está sujeita a um potencial do tipo de um oscilador harmônico

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2, \quad \omega = \sqrt{k/m}, \quad (2.26)$$

onde ω é a frequência angular, k é a constante da mola.

O procedimento é muito similar ao do átomo de hidrogênio. Substituindo o potencial da Eq. (2.26) na Eq. (2.15), obtém-se

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + m^2\omega^2 r^2 + 2mE \right] u(r) = 0, \quad (2.27)$$

onde substituímos $\mu = m$. Após a solução, encontramos que a expressão das energias quantizadas do oscilador tridimensional é dada por

$$E_n = \left(2n + \ell + \frac{3}{2} \right) \omega, \quad N = 2n + \ell, \quad (2.28)$$

onde n é o número quântico radial (número de nós na parte radial da função de onda) e N é o número quântico total.

Na Fig. 2.3 mostramos as funções de onda $u_{1,0}(r)$ e $u_{2,1}(r)$ para o oscilador harmônico.

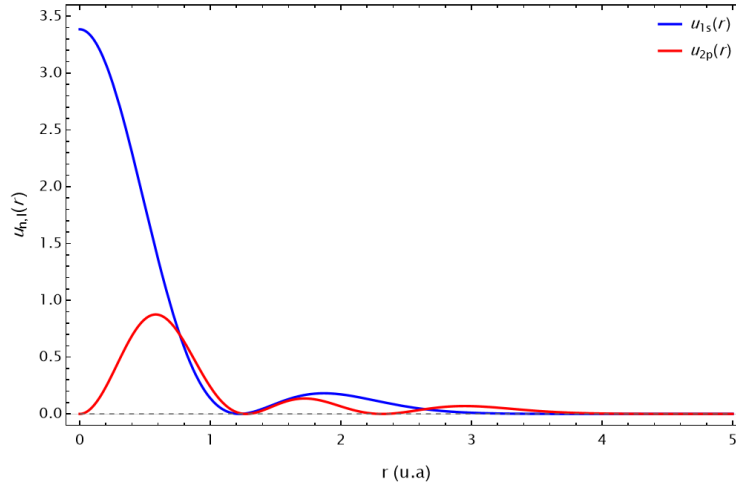


Figura 2.3: Funções de onda $u_{n,\ell}(r)$ do oscilador harmônico para os estados caracterizados pelos números quânticos $n = 1$ e $\ell = 0$ (curva em azul) e $n = 2$ e $\ell = 1$ (curva em vermelho). Note que utilizamos $\hbar = 1$ para obter a solução da Eq. (2.15).

Dessa forma, ao comparar as Eqs. (2.25) e (2.28), observa-se que, no caso particular de um potencial do tipo coulombiano, as energias dependem apenas do número quântico principal n . No entanto, para outras dependências funcionais do potencial em r , essa degenerescência é quebrada. Isso é ilustrado no exemplo do oscilador harmônico tridimensional, em que a energia passa a depender tanto de n quanto de ℓ , ou equivalentemente de $N = 2n + \ell$.

Na Fig. 2.4, são comparados os espectros de energia dos estados s e p resultantes do potencial coulombiano, $V(r) \propto 1/r$, com aqueles obtidos para o potencial do oscilador harmônico, $V(r) \propto r^2$. Observa-se, nesse caso, que a degenerescência presente átomo de hidrogênio é quebrada quando se considera um potencial com dependência quadrática em r [2].

No caso do potencial de Cornell, que será utilizado para descrever o estado ligado $c\bar{c}$, é natural esperar que o espectro de energia apresente dependência tanto no número quântico principal n quanto no número quântico orbital ℓ . Essa característica reflete a quebra da degenerescência observada em potenciais mais simples, como o coulombiano, sendo essencial para reproduzir adequadamente a estrutura fina dos níveis do sistema de charmônio.

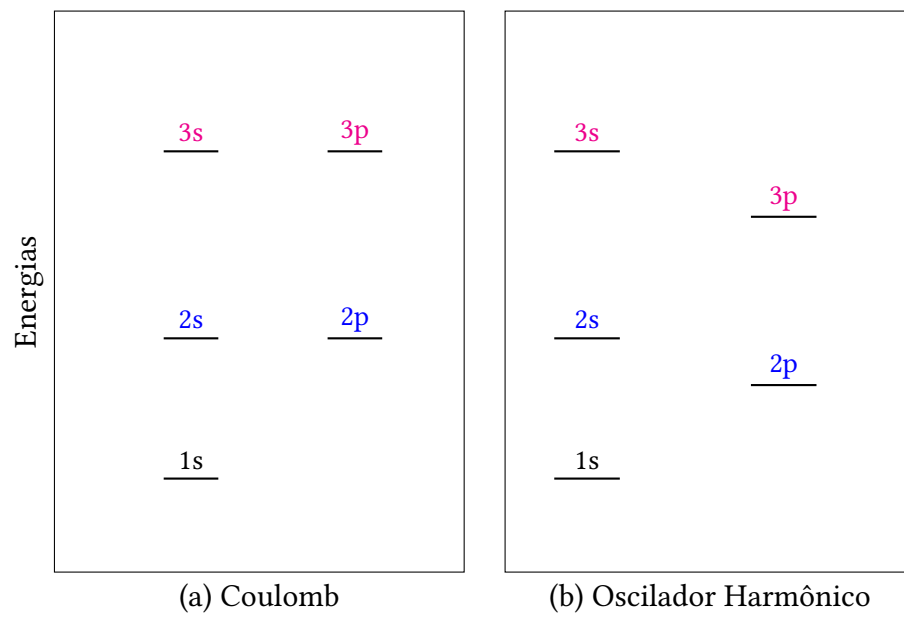


Figura 2.4: Níveis de energia dos estados s e p para (a) um potencial de Coulomb ($1/r$) e (b) o oscilador harmônico (r^2) para valores de $n = 1, 2, 3$ e $\ell = 0, 1$. Fonte: Adaptado da Ref. [2].

Foi apresentado no capítulo anterior, ao estudar o átomo de hidrogênio, o conceito de estado ligado, que — para a mecânica quântica — é caracterizado como um sistema onde a solução da equação de Schrödinger indica um confinamento de suas partículas à uma região do espaço devido à ação de um potencial atrativo. Nesses casos, a energia total do sistema é negativa, o que significa que ele é mais estável unido do que separado. Essa diferença entre a energia dos constituintes livres e a energia do estado ligado é chamada de energia de ligação.

Embora esta monografia se concentre na descrição de estados ligados utilizando, como principal ferramenta, a equação de Schrödinger, é importante destacar que essa não é a única abordagem possível. Na verdade, ao aplicar a equação de Schrödinger para descrever estados ligados, esta se limita a situações em que o regime é não relativístico — ou seja, é necessário garantir que as partículas que formam os mésons tenham velocidades muito menores que a da luz ($v \ll c$).

Para sistemas em que os efeitos relativísticos são relevantes, como mésons formados por quarks leves ou estados altamente excitados, é necessário recorrer a abordagens mais sofisticadas baseadas na teoria quântica de campos, que fornecem uma descrição consistente mesmo quando as partículas se movimentam a velocidades próximas à da luz.

Neste capítulo, será apresentado em detalhes o potencial de Cornell, que modela a interação forte entre o quark c e o antiquark $\bar{c}$, possibilitando a formação do estado ligado $c\bar{c}$.

Também será incluído o termo de interação spin-spin, fundamental para reproduzir corretamente o espectro de massas do charmônio. Por fim, será feita uma breve introdução às notações de números quânticos J^{PC} e espectroscópica, úteis para classificar e distinguir a ampla variedade de estados ligados $c\bar{c}$ que podem ser formados.

3.1 Linhas de campo e o confinamento

Infelizmente, para o caso da QCD, não se sabe derivar qual é o potencial que descreve a interação dos quarks dentro dos mésons. Na tentativa de descrever

esta interação, foram desenvolvidos modelos fenomenológicos ⁴ que capturam os principais aspectos da força forte.

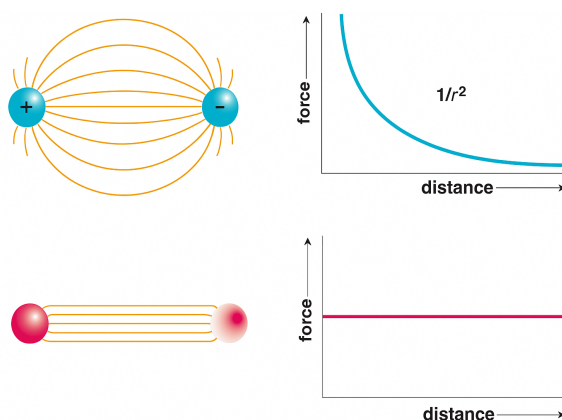


Figura 3.1: As linhas de campo elétrico que conectam duas partículas com cargas elétricas opostas. A intensidade da força é dada pela lei de Coulomb (parte superior). As linhas de campo de cargas de cor permanecem confinadas no tubo de fluxo, resultando em uma força praticamente constante, independentemente da separação entre os quarks (parte inferior). Fonte: Figura obtida na Ref. [17]

Para compreender a construção do modelo que descreve a interação entre quarks dentro dos mésons, é útil comparar o comportamento das linhas de fluxo elétrico ou — geradas por cargas elétricas ou ímãs — com as linhas de *fluxo cromomagnéticas*, que seriam geradas pelas cargas de cor dos quarks.

É possível visualizar as linhas de campo elétrico por meio de um experimento em que um fluido, como um óleo que contém partículas eletricamente carregadas, é submetido a um campo elétrico gerado entre duas placas condutoras. Nesse arranjo, as partículas se alinham seguindo a direção do campo, tornando visível o padrão das linhas de campo elétrico, que se assemelha à configuração mostrada na parte superior da Fig. 3.1. O espalhamento dessas linhas está associado à conhecida força de Coulomb, cuja intensidade decai com o inverso do quadrado da distância à carga.

No caso da QCD, entretanto, a estrutura não trivial do vácuo da teoria altera significativamente o comportamento das linhas de fluxo — neste caso, as chamadas linhas de fluxo cromomagnéticas. Ao contrário do eletromagnetismo, essas linhas não se espalham livremente, mas tendem a se atrair e a se confinar em

⁴ Modelos fenomenológicos são descrições teóricas que buscam representar o comportamento observado de um sistema físico com base em dados experimentais, sem necessariamente derivar todos os resultados a partir dos princípios fundamentais da teoria.

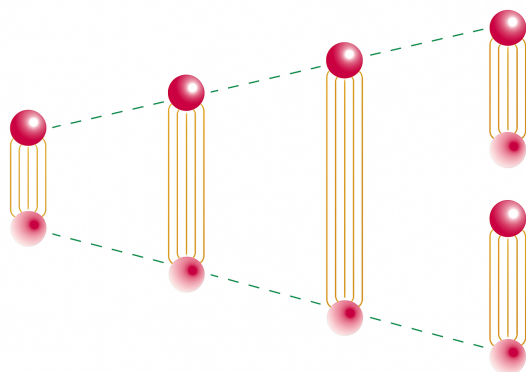


Figura 3.2: Confinamento das cargas de cor na QCD. Ao tentar separar duas cargas de cor (quark e antiquark) há um acúmulo de energia no tubo de fluxo e torna-se energeticamente mais favorável criar um novo par quark-antiquark, em vez de permitir a separação completa dos quarks originais. Fonte: Figura obtida na Ref. [17].

uma região estreita, formando um tubo de fluxo, como ilustrado na parte inferior da Fig. 3.1. Como resultado, a força entre um quark e um antiquark permanece aproximadamente constante à medida que a distância entre eles aumenta. Essa força é conhecida como tensão da corda, pois o tubo de fluxo comporta-se como um fio elástico que exerce sempre a mesma força, independentemente de quanto seja esticado [17].

Devido à força forte que mantém o quark e o antiquark unidos, a tensão da corda corresponde a uma força de ligação extremamente intensa — da ordem de $F = 16.000 \text{ kg} \times g$, ou cerca de 157 mil Newtons [17]. Conforme o par é separado, mais energia é acumulada no sistema, até que o tubo de fluxo se rompe no meio. Nesse ponto, o vácuo da QCD responde criando espontaneamente um novo par quark-antiquark, que se combina com os quarks originais para formar dois novos mésons, como ilustrado na Fig. 3.2. Portanto, é nesse sentido que se diz que a carga de cor permanece confinada, uma vez que os quarks nunca aparecem isoladamente, pois o próprio campo que os liga produz novas partículas antes que isso possa acontecer.

Por outro lado, quando os quarks estão extremamente próximos uns dos outros, a interação entre eles se torna surpreendentemente fraca. Esse fenômeno é conhecido como *liberdade assintótica*: a força forte diminui com o aumento da energia (ou, equivalentemente, com a diminuição da distância entre os quarks) [7]. Assim, em escalas muito pequenas, os quarks se comportam quase como partículas livres,

interagindo fracamente entre si. Esse comportamento é uma das marcas mais notáveis da QCD.

Com base nessas duas propriedades fundamentais da QCD - confinamento e liberdade assintótica - foram desenvolvidos modelos fenomenológicos de potencial para descrever a interação entre os quarks dentro dos mésons. O mais famoso desses modelos foi proposto em 1974 por pesquisadores da Universidade de Cornell [9, 10] e é especialmente relevante para o estudo dos quarkônios, que são mésons formados por um quark pesado c ou b e seu antiquark correspondente $\bar{c}$ ou $\bar{b}$.

As altas massas dos quarks c ou b tornam mais adequados as aproximações não relativísticas, em comparação com os quarks leves. Por isso, os quarkônios constituem sistemas ideais para testar modelos de potencial quark-antiquark e investigar as propriedades da interação forte em regimes intermediários de energia.

3.2 O potencial de Cornell

Como visto, a força no fluxo de tubos entre dois quarks interagindo em longas distâncias é uma constante, que será denotada como $-\sigma$. Já para curtas distâncias, quando quark e antiquark estão muito próximos e livres da força forte, interagem de forma análoga à força eletrostática de Coulomb entre cargas elétricas. Como consequência, a equação que descreve o comportamento dessa força será:

$$F(r) = - \left(\frac{\kappa}{r^2} + \sigma \right), \quad (3.1)$$

onde κ é a constante de acoplamento efetivo da interação de curto alcance (parte Coulombiana) e r a distância entre quark e antiquark. Como a força é menos o gradiente do potencial, podemos escrever que

$$V(r) = - \int F(r) dr + C, \quad (3.2)$$

o que resultará

$$V(r) = -\frac{\kappa}{r} + \sigma r. \quad (3.3)$$

que é exatamente a forma do potencial de Cornell ⁵.

⁵ A constante, C , que aparece na Eq. (3.2) é uma constante arbitrária, normalmente definida de modo que o potencial tenha um valor de referência em uma certa distância, por exemplo, $V(r_0) = 0$, ou, $V(\infty) = 0$.

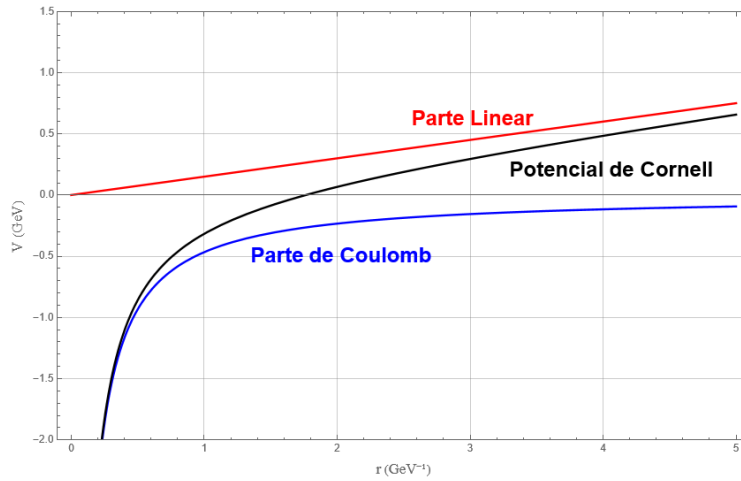


Figura 3.3: Gráfico do potencial de Cornell dado pela Eq. (3.4) para $\alpha_s = 0.350$ e $\sigma = 0.15$ (curva em preto). Note que para pequenos valores de r a parte de Coulomb (curva em azul) é dominante, já para grandes r , a parte linear (curva em vermelho) é que possui a contribuição mais relevante.

Sendo assim, o potencial de Cornell é composto pela soma de dois termos principais que incorporam aspectos fundamentais da força forte nos regimes de curta e longa distâncias [9, 10]:

- O termo coulombiano, dominante em curtas distâncias, que descreve a interação entre quark e antiquark quando estão muito próximos — análogo ao potencial eletrostático de Coulomb entre cargas elétricas;
- O termo linear de confinamento, relevante em longas distâncias, que representa o crescimento linear da energia necessária para separar o par $q\bar{q}$, evidenciando o fenômeno do confinamento.

Na parte coulombiana do potencial de Cornell, o fator κ reflete a natureza da interação de cor entre um quark e um antiquark, sendo proporcional a α_s , a constante de acoplamento forte. Diferentemente do eletromagnetismo, em que a força entre cargas é proporcional ao produto das cargas elétricas, na QCD a interação depende da estrutura do grupo de simetria $SU(3)$, responsável pela dinâmica da cor. Os quarks pertencem à representação fundamental desse grupo e a intensidade da interação entre eles é determinada pelo chamado fator de Casimir, denotado por C_F . No caso da representação fundamental de $SU(3)$, esse fator assume o valor $C_F = 4/3$, resultado do produto dos geradores do grupo t^a associados à troca de glúons entre os quarks [2, 3].

Assim, o potencial de Cornell assume a forma

$$V(r) = -\frac{4}{3} \frac{\alpha_s}{r} + \sigma r. \quad (3.4)$$

Como mencionado anteriormente, a combinação desses dois termos presentes na Eq. (3.4) permite capturar, de forma eficaz, tanto o comportamento assintoticamente livre da QCD em pequenas distâncias quanto o confinamento dos quarks em grandes distâncias. Isto está ilustrado na Fig. 3.3, que mostra separadamente as contribuições da parte coulombiana (curva azul), dominante em curtas distâncias ($r \rightarrow 0$), e da parte linear (curva vermelha), que prevalece em grandes distâncias ($r \rightarrow \infty$). A combinação dessas duas componentes dá origem ao potencial de Cornell completo (curva preta), que reproduz de forma qualitativa os principais aspectos da interação quark-antiquark previstos pela QCD.

Por fim, vale destacar que, por se tratar de uma modelagem fenomenológica, a literatura apresenta diferentes propostas para o termo de confinamento no potencial quark-antiquark. Algumas abordagens consideram formas alternativas, como um termo quadrático, $V(r) \sim r^2$, ou logarítmico, $V(r) \sim \ln(r)$. No entanto, neste trabalho será adotada a forma linear, $V(r) = \sigma r$, por ser a mais amplamente utilizada e bem estabelecida em estudos de espectroscopia de hádrons pesados. Ressalta-se que, no intervalo de distâncias acessível experimentalmente, essas diferentes formas de potenciais confinantes não produzem distinções significativas nas configurações físicas relevantes [1].

3.3 Interação spin-spin

O potencial de Cornell, expresso pela Eq. (3.4), descreve bem os níveis de energia principais do sistema $c\bar{c}$, mas ignora os efeitos do spin. Em outras palavras, ele não diferencia estados com o mesmo número quântico orbital, ℓ , mas com diferentes acoplamentos de spin. Para corrigir este fato, a interação entre os spins dos quarks constituintes deve ser considerada, adicionando ao potencial o seguinte termo de interação spin-spin [18]

$$V_{ss}(r) = \frac{16\pi\alpha_s}{9m_c^2} \delta^3(r) \left[S(S+1) - \frac{3}{2} \right], \quad (3.5)$$

em que

$$\delta^3(r) = \left(\frac{\kappa_1}{\sqrt{\pi}} \right)^3 e^{-\kappa_1^2 r^2}. \quad (3.6)$$

Assim, o potencial total $V_T(r)$ que será considerado neste estudo é a soma do potencial de Cornell, expresso pela Eq. (3.4), com o termo de interação spin-spin dado pela Eq. (3.5), *i.e.*,

$$V_T(r) = V(r) + V_{ss}(r). \quad (3.7)$$

A inclusão da interação spin-spin atua de forma significativa em estados de onda s devido à sua natureza local (proporcional a $[\delta^3(r)]$), permitindo explicar, por exemplo, a diferença de massa entre as partículas J/ψ (vetor 1^{--}) e η_c (pseudoescalar 0^{-+}), estados com a mesma estrutura orbital, mas com spins acoplados de maneira distinta. Assim, esse termo é essencial para reproduzir corretamente o espectro observado do charmônio.

3.4 Notação de números quânticos e notação espectroscópica

3.4.1 Notação de números quânticos de spin-paridade-carga

Uma maneira conveniente para descrever e nomear estados quânticos é usar a notação de números quânticos, representada como J^{PC} , que é composta por três números quânticos: J , P , e C [3].

O momento angular total do sistema, J , combina o momento angular orbital, L , com o momento angular de spin, S , e seus valores permitidos variam dentro do intervalo

$$J \in \{|L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S\}. \quad (3.8)$$

Já a paridade, P , é uma simetria discreta associada com a inversão espacial da função de onda de uma partícula através da origem (espelhamento), $r \rightarrow -r$ [3]. Atuando o operador paridade, $\hat{P}$, sobre a função de onda, $\psi(r, t)$, obtemos

$$\hat{P}\psi(r, t) = P_a\psi(-r, t), \quad (3.9)$$

onde P_a é um fator de fase constante e a identifica o tipo de partícula [2]. Para recu-

perar a função de onda original, pode-se atuar o operador $\hat{P}$ duas vezes sucessivas de forma, ou seja,

$$\hat{P}\hat{P}\psi(r, t) = \psi(r, t), \quad (3.10)$$

o que nos leva a concluir que $P_a = \pm 1$.

Quando a partícula está em repouso, isto é, seu momento linear p é igual a zero, a função de onda associada a ela é um autoestado da paridade P com autovalor $P_a(-1)^L$ [2]. Com isso, P_a é chamado de paridade intrínseca da partícula a , ou seja, é a propriedade dessa partícula que contribui, juntamente com a paridade das demais partículas e o momento angular orbital, para determinar a paridade total do sistema. Na QCD, as interações sempre conservam paridade.

Por convenção, quarks têm paridade intrínseca igual a $(+1)$ e anti-quarks têm paridade intrínseca igual a (-1) , de modo que a paridade total de um méson, nesse caso o charmônio, será dada pela seguinte expressão

$$P_{c\bar{c}} = P_c P_{\bar{c}} (-1)^L = (-1)^{L+1}, \quad (3.11)$$

sendo L o momento angular orbital do par charm-anticharm [2].

A conjugação de carga, C , é uma simetria discreta que permite a conversão de partículas em suas antipartículas, alterando os sinais da carga elétrica e de outros números quânticos, enquanto conserva propriedades como momento e spin.

Utilizando a notação *bra-ket*, representa-se a ação do operador conjugação de carga $\hat{C}$ sobre uma partícula a com [1]

$$\hat{C} |a\rangle = C_a |a\rangle = |\bar{a}\rangle, \quad (3.12)$$

em que C_a é um fator de fase, semelhante ao da paridade. Assim como em P , a aplicação do operador $\hat{C}$ duas vezes sucessivas reestabelece a partícula original

$$\hat{C}\hat{C} |a\rangle = |a\rangle, \quad (3.13)$$

onde a partícula a é um autoestado da conjugação de carga C com autovalores $C_a = \pm 1$. As interações na QCD também conservam a conjugação de carga.

No caso dos quarks, C é composta por dois fatores: $(-1)^{S+1}$, derivado da mudança das funções de onda pós-troca partícula-antipartícula, e (-1) , derivado da troca entre férmions e antiférmions. Portanto, a conjugação de carga C associada ao charmônio [2] é

$$C_{c\bar{c}} = (-1)^{L+S}, \quad (3.14)$$

em que L é o momento angular orbital do par charm-anticharm e S é o spin do méson $c\bar{c}$, que assume valores inteiros.

Combinando as Eqs. (3.11) e (3.14), a partir da notação J^{PC} , podemos escrever, de forma geral

$$J^{PC} = J^{(-1)^{L+1}, (-1)^{L+S}}. \quad (3.15)$$

Por exemplo, para um estado em que $L = 0$, $S = 0$, e $J = 0$, expressamos a notação como

$$J^{PC} = 0^{(-1)^{0+1}(-1)^{0+0}} = 0^{-+}, \quad (3.16)$$

e para um estado em que $L = 1$, $S = 0$ e $J = 1$, como

$$J^{PC} = 1^{(-1)^{1+1}(-1)^{1+0}} = 1^{+-}. \quad (3.17)$$

Os estados em que $L = 0$ são chamados de estados-S e os em que $L = 1$, chamados de estados-P. Os estados representados pelas notações das Eqs. (3.16) e (3.17) são os estados S e P, respectivamente [2, 3, 19].

3.4.2 Notação espectroscópica

A notação espectroscópica foi originalmente desenvolvida para descrever estados eletrônicos em átomos, onde os momentos angulares orbital (L) e de spin (S) se acoplam primeiro para formar o momento total (J), especialmente em átomos leves:

$$n^{2S+1}L_J, \quad (3.18)$$

onde

- n : número quântico principal (1, 2, 3, ...),
- S : spin total do sistema (0 ou 1),
- L : momento angular orbital (representado por uma letra maiúscula: S, P, D, ...),
- J : momento angular total (resultante da combinação de L e S).

Na Tabela 3.1 são listados os principais estados do espectro do charmônio ($c\bar{c}$), mostrando a correspondência entre as notações espectroscópica $n^{2S+1}L_J$ e de números quânticos J^{PC} . Também está indicado na tabela o nome da partícula associada a cada estado.

Notação $n^{2S+1}L_J$	J^{PC}	Nome da partícula
1^1S_0	0^{-+}	$\eta_c(1S)$
1^3S_1	1^{--}	J/ψ
2^1S_0	0^{-+}	$\eta_c(2S)$
2^3S_1	1^{--}	$\psi(2S) \psi'$
1^3P_0	0^{++}	$\chi_{c0}(1P)$
1^3P_1	1^{++}	$\chi_{c1}(1P)$
1^3P_2	2^{++}	$\chi_{c2}(1P)$
1^1P_1	1^{+-}	$h_c(1P)$
1^3D_1	1^{--}	$\psi(3770)$

Tabela 3.1: Estados do espectro do charmônio ($c\bar{c}$), com notação espectroscópica, números quânticos J^{PC} e nome da partícula.

Neste capítulo, são apresentados os detalhes do tratamento numérico adotado para determinar o espectro de massas do charmônio utilizando a abordagem não relativística da equação de Schrödinger na presença de um potencial de Cornell suplementado por um termo de interação spin-spin.

Além de descrever o método numérico empregado, também são discutidos os parâmetros utilizados no potencial, exibindo uma tabela com os valores das massas obtidas e comparando-os com os dados experimentais disponíveis no Particle Data Group (PDG) [20].

Por fim, mostra-se os gráficos das funções de onda radiais $u_n(r)$ e de suas respectivas densidades de probabilidade $|u_n(r)|^2$ para os estados S e P do charmônio.

4.1 Solução numérica do problema de autovalor

O objetivo será resolver numericamente a Eq. (2.15), que, por conveniência, está reproduzida aqui

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V_T(r) \right] u_n(r) = E_{n,\ell} u_n(r), \quad (4.1)$$

com o potencial $V_T(r)$ dado por [veja as Eqs. (3.4) e (3.7)]

$$V_T(r) = -\frac{4}{3} \frac{\alpha_s}{r} + \sigma r + V_{ss}(r), \quad (4.2)$$

onde $V_{ss}(r)$ foi definido na Eq. (3.5) e os parâmetros utilizados no potencial foram fixados com base nos valores fornecidos em [18] e estão apresentados na Tabela 4.1.

A Eq. (4.1) é um problema de autovalor e autovetor do tipo

$$\hat{H}u_n(r) = E_{n,\ell} u_n(r), \quad (4.3)$$

onde $\hat{H}$ denota o operador Hamiltoniano, representado por um operador diferencial que expressa a soma dos termos de energia cinética e potencial do sistema. A

Parâmetros	Valores	Unidades
α_s	0.35	adimensional
σ	0.15	GeV ²
m_c	1.408	GeV
κ_1	4.0	GeV

Tabela 4.1: Parâmetros utilizados no potencial de Cornell com interação spin-spin dado pela Eq. (4.2) foram fixados com base nos valores fornecidos em [18].

função $u_n(r)$ corresponde à autofunção do operador $\hat{H}$, enquanto $E_{n,\ell}$ representa o respectivo autovalor — interpretado como a energia do estado quântico descrito por $u_n(r)$. A determinação dessas duas grandezas — $u_n(r)$ e $E_{n,\ell}$ — constitui o objetivo principal da análise.

Os valores numéricos de $u_n(r)$ e $E_{n,\ell}$ foram determinados utilizando a função NDEigensystem do software Mathematica, projetada para resolver problemas de autovalores e autovetores associados a operadores diferenciais parciais. A estratégia central desse algoritmo consiste em discretizar o problema contínuo, convertendo-o em um sistema algébrico que pode ser resolvido por métodos da álgebra linear.

O Mathematica emprega o método dos elementos finitos para realizar essa discretização. Nesse procedimento, o operador diferencial é aproximado por uma matriz que atua sobre um espaço vetorial finito, resultando em um problema discreto de autovalores e autovetores.

Na implementação, foram impostas condições de contorno do tipo Dirichlet, exigindo que $u_n(r) = 0$ para $r \leq 10^{-3} \text{ GeV}^{-1}$, o que assegura tanto a regularidade quanto a normalização das soluções. Essa escolha evita a imposição direta da condição em $r = 0$, onde a parte coulombiana do potencial pode apresentar singularidades. Além disso, do ponto de vista físico, essa condição reflete que a função de onda radial $u_n(r)$ deve ser regular na origem, ou seja, finita e sem divergências, como exige a normalizabilidade da solução.

Os autovalores obtidos por meio dos resultados computacionais correspondem às energias dos estados ligados do sistema $c\bar{c}$ na presença do potencial adotado. A partir desses valores, é possível estimar a massa do charmônio por meio da seguinte relação

$$M = 2m_c + E_{n,\ell}, \quad (4.4)$$

onde m_c representa a massa do quark charm e $E_{n,\ell}$ é o autovalor associado ao estado ligado considerado. Essa fórmula assume que a massa total do méson resulta da

contribuição das massas dos quarks constituintes somada à energia de interação entre eles.

4.2 Espectro de massa e densidades de probabilidade dos charmônios

A Fig. 4.1 apresenta o principal resultado deste estudo: os valores das massas obtidas numericamente por meio da solução da equação de Schrödinger para os estados S e P do charmônio. Na mesma figura, são incluídos, para fins de comparação, os valores experimentais reportados pelo PDG [20] para os estados em que há dados disponíveis.

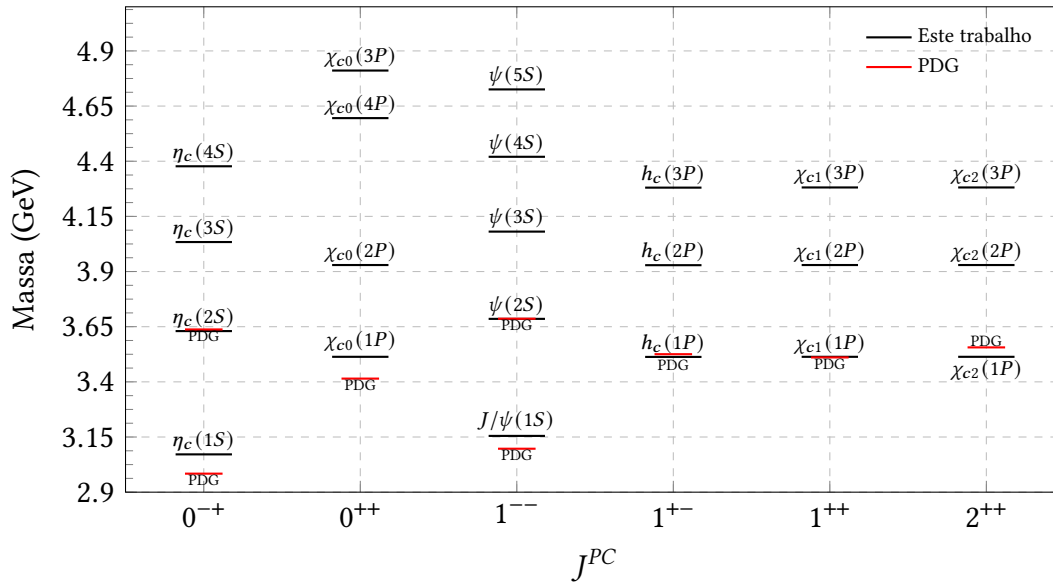


Figura 4.1: Espectro de massas do charmônio em GeV. No eixo horizontal estão indicados os números quânticos J^{PC} dos estados considerados. As previsões teóricas obtidas neste trabalho, com base no potencial de Cornell acrescido de um termo de interação spin-spin, estão representadas por linhas contínuas na cor preta. As massas experimentais, conforme reportadas pelo PDG [20], são indicadas pelas linhas vermelhas.

Com o objetivo de facilitar a comparação, a Tabela 4.2 apresenta os valores numéricos encontrados para o espectro de massa teórico para os estados S e P do charmônio, que foram obtidos neste trabalho, em comparação com os dados

Notação	J^{PC}	Méson	Massas do charmônio em GeV	
			Este trabalho	PDG [20]
1^1S_0	0^{-+}	$\eta_c(1S)$	3.0713	2.9839
2^1S_0	0^{-+}	$\eta_c(2S)$	3.6301	3.6375
3^1S_0	0^{-+}	$\eta_c(3S)$	4.0337	–
4^1S_0	0^{-+}	$\eta_c(4S)$	4.3771	–
1^3S_1	1^{--}	$J/\psi(1S)$	3.1550	3.0969
2^3S_1	1^{--}	$\psi(2S)$	3.6855	3.6861
3^3S_1	1^{--}	$\psi(3S)$	4.0810	–
4^3S_1	1^{--}	$\psi(4S)$	4.4201	–
5^3S_1	1^{--}	$\psi(5S)$	4.7255	–
1^1P_1	1^{+-}	$h_c(1P)$	3.5130	3.5254
2^1P_1	1^{+-}	$h_c(2P)$	3.9288	–
3^1P_1	1^{+-}	$h_c(3P)$	4.2803	–
1^3P_0	0^{++}	$\chi_{c0}(1P)$	3.5135	3.4147
2^3P_0	0^{++}	$\chi_{c0}(2P)$	3.9295	–
3^3P_0	0^{++}	$\chi_{c0}(3P)$	4.811	–
4^3P_0	0^{++}	$\chi_{c0}(4P)$	4.5954	–
1^3P_1	1^{++}	$\chi_{c1}(1P)$	3.5135	3.5107
2^3P_1	1^{++}	$\chi_{c1}(2P)$	3.9295	–
3^3P_1	1^{++}	$\chi_{c1}(3P)$	4.2811	–
1^3P_2	2^{++}	$\chi_{c2}(1P)$	3.5135	3.5562
2^3P_2	2^{++}	$\chi_{c2}(2P)$	3.9295	–
3^3P_2	2^{++}	$\chi_{c2}(3P)$	4.2811	–

Tabela 4.2: Espectro de massas (em GeV) para os estados S e P do charmônio, obtido através da solução da equação de Schrödinger com o potencial de Cornell acrescido de um termo de interação spin-spin (quarta coluna). A primeira coluna traz a notação espectroscópica $n^{2S+1}L_J$, a segunda, os números quânticos J^{PC} e a terceira, os nomes dos mésons correspondentes. Para fins de comparação, a quinta coluna exibe os valores experimentais para oito estados disponíveis no PDG [20].

experimentais disponíveis [20]. Também são mostrados nas outras colunas as notações $n^{2S+1}L_J$ (primeira), J^{PC} (segunda) e os nomes dos mésons correspondentes (terceira).

Comparando os valores teóricos, m_{teo} , com os dados experimentais, m_{exp} , disponíveis para os oito estados do charmônio reportados pelo PDG, observa-se que o maior erro relativo, ε_{rel} , - definido como

$$\varepsilon_{\text{rel}} = \frac{|m_{\text{exp}} - m_{\text{teo}}|}{m_{\text{exp}}}, \quad (4.5)$$

ocorre no estado 0^{++} , que é um méson escalar (spin nulo), denominado $\chi_{c0}(1P)$, sendo da ordem de $\varepsilon_{\text{rel}} = 2,893 \times 10^{-2}$. Dessa forma, pode-se concluir que os resultados obtidos neste trabalho mostram-se bastante próximos dos valores experimentais reportados pelo PDG [20].

Por fim, na Fig 4.2 estão dispostas as funções de onda radiais, $u_n(r)$ (painéis superiores) e as densidades de probabilidade, $|u_n(r)|^2$, (painéis inferiores) associadas aos estados 0^{-+} (partícula η_c) (esquerda) e 1^{+-} (partícula h_c) (direita) para valores de $n = 1, 2, 3, 4$.

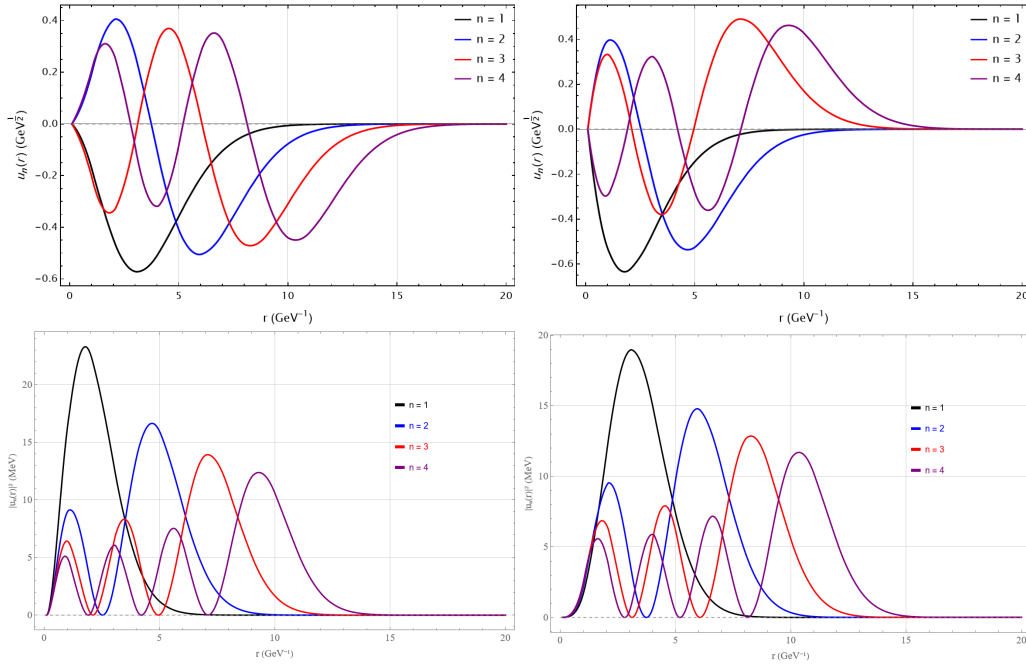


Figura 4.2: Funções de onda $u_n(r)$ (painéis superiores) e densidades de probabilidade $|u_n(r)|^2$ (painéis inferiores) associadas aos estados 0^{-+} (η_c) (esquerda) e 1^{+-} (h_c), (direita) para valores de $n = 1, 2, 3, 4$.

É observável que, para valores de $r \approx 15 \text{ GeV}^{-1}$, a densidade de probabilidade $|u_n(r)|^2$ torna-se praticamente nula. Isso indica que é altamente improvável que o

sistema de charmônio possua um raio superior a 3,5 fm, considerando a conversão $1 \text{ GeV}^{-1} \approx 0,197 \text{ fm}$. Esse comportamento reflete a natureza compacta do sistema $c\bar{c}$, cuja distribuição espacial é bem confinada [18].

Uma medida quantitativa dessa extensão é fornecida pelo raio médio, dado por

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r |u_n(r)|^2 dr. \quad (4.6)$$

No caso do méson J/ψ , o valor encontrado para o $\langle r \rangle = 0,456 \text{ fm}$ resultando em um valor que é abaixo de 1 fm, que é o tamanho típico de sistemas hadrônicos compostos por quarks pesados.

Com o objetivo de estabelecer a base conceitual necessária para o estudo da formação de estados ligados do sistema $c\bar{c}$, este trabalho iniciou com uma revisão preliminar de tópicos fundamentais em Mecânica Quântica, com ênfase nas aplicações da equação de Schrödinger. A abordagem começou pela análise de um sistema unidimensional, modelado pelo poço de potencial infinito, cuja solução analítica foi obtida. Nessa configuração, observou-se que o número quântico principal n surge naturalmente da imposição das condições de contorno nas extremidades do poço, onde a partícula encontra-se confinada. Como consequência, os níveis de energia e as funções de onda assumem formas quantizadas, sendo expressos por múltiplos de constantes que dependem do valor inteiro de n .

Na sequência, o problema foi generalizado para o contexto bidimensional. Essa extensão evidenciou o surgimento de dois números quânticos, n_x e n_y , demonstrando que a dimensionalidade do sistema determina o número de parâmetros quânticos necessários para descrever seus estados. Além da quantização da energia, esse modelo introduziu o conceito de degenerescência: diferentes combinações de n_x e n_y podem resultar no mesmo valor energético, indicando que distintos estados quânticos podem compartilhar o mesmo nível de energia. Um resumo das soluções para os casos unidimensional e bidimensional encontra-se no Apêndice A.

Posteriormente, foi analisado o oscilador harmônico quântico unidimensional, conforme resumido no Apêndice B. Para esta situação, a equação de Schrödinger foi formulada para uma partícula de massa m sujeita a um potencial harmônico do tipo $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$, onde ω é a frequência angular do sistema. Por meio de uma mudança de variável adequada, a equação diferencial resultante pôde ser resolvida em termos dos polinômios de Hermite, que determinam as funções de onda normalizáveis do sistema.

Após isso, com o intuito de estudar a formação de um estado ligado com solução analítica, foi investigado o átomo de hidrogênio em três dimensões. Este sistema, composto por um próton e um elétron ligados pela interação eletromagnética, foi modelado assumindo o próton fixo na origem, que é possível pois sua massa é significativamente maior que a do elétron. A equação de Schrödinger tridimensional foi expressa em coordenadas esféricas, e o método de separação de variáveis permitiu convertê-la em um sistema de três equações diferenciais ordinárias para as coordenadas r , θ e ϕ . A equação radial levou aos polinômios de Laguerre, enquanto

as equações angulares geraram os harmônicos esféricos $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$, que descrevem a dependência angular do sistema. As propriedades relevantes desses harmônicos estão sumarizadas no Apêndice C.

De forma análoga ao átomo de hidrogênio, foi estudado o positrônio, um sistema ligado formado por um elétron (e^-) e um pósitron (e^+), unidos pela interação eletromagnética. A massa total do positrônio é aproximadamente a soma das massas dos dois constituintes ($m_e = 0,511$ MeV), acrescida da energia de ligação. Esta última é da ordem de $E_{\text{lig}} = \frac{1}{2} \times (-13,6 \text{ eV}) = -6,8 \text{ eV}$, valor inferior ao do hidrogênio pois sua massa reduzida é a metade da do átomo de hidrogênio. Assim, a massa total do positrônio é aproximadamente 1,0219 MeV [1].

Com essa base, o estudo voltou-se à investigação da formação do estado ligado $c\bar{c}$. Para isso, partiu-se da equação radial do átomo de hidrogênio, substituindo-se o potencial de Coulomb pelo potencial de Cornell, acrescido de um termo de interação spin-spin, conforme descrito no Capítulo 3. Essa modificação inviabiliza soluções analíticas, exigindo métodos numéricos para a determinação dos autovalores de energia E_{nl} e das funções de onda radiais $u_n(r)$.

A resolução numérica foi realizada com o auxílio do software Mathematica, por meio da função *NDEigensystem*, que implementa o Método dos Elementos Finitos. Os detalhes da metodologia e os resultados obtidos — incluindo o espectro de massa dos estados ligados do charmônio — encontram-se no Capítulo 4.

Ao se comparar as massas calculadas com os oito valores experimentais disponíveis no Particle Data Group (PDG), observou-se que o erro relativo máximo é $\varepsilon_{\text{rel}} \leq 2,893 \times 10^{-2}$. Esse resultado sugere que tanto o tratamento não relativístico baseado na equação de Schrödinger quanto a escolha do potencial de Cornell são apropriados para descrever a estrutura dos estados de charmônio.

É importante ressaltar que, nesta análise, não foram considerados outros efeitos de estrutura fina e hiperfina no potencial, tais como o acoplamento spin-órbita (LS) e o operador tensorial, conforme discutido em [19]. A inclusão desses termos permitiria um detalhamento adicional da estrutura fina do espectro, possibilitando uma descrição mais precisa das diferenças entre estados com mesmo número quântico principal, mas diferentes combinações de spin e momento angular. A consideração desses efeitos representa uma continuação natural e relevante para estudos futuros.

Embora a análise tenha se concentrado na formação dos estados $c\bar{c}$, o mesmo formalismo pode ser estendido para sistemas ligados formados por outros quarks pesados, como o bottomônio ($b\bar{b}$). Nesse caso, seria necessário ajustar os parâmetros livres do potencial para refletir adequadamente a dinâmica associada à maior massa do quark bottom. Além disso, como os efeitos relativísticos nesse sistema são ainda menos significativos do que no charmônio, o tratamento não relativístico torna-se ainda mais justificado.

Por fim, a Fig. 5.1 apresenta um gráfico comparativo das massas totais e das energias de ligação do positrônio, do hidrogênio, do charmônio (J/ψ) e do bottomônio (Υ). O gráfico evidencia, de forma clara, a diferença de escalas entre as interações eletromagnéticas e a interação forte, tanto em termos de massa quanto de energia de ligação. Enquanto positrônio e hidrogênio possuem energias de ligação da ordem de eV — refletindo-se em massas totais significativamente menores — os estados ligados de quarks pesados apresentam energias de ligação da ordem de centenas de MeV, demonstrando a intensidade da força forte (QCD) atuante nesses sistemas.

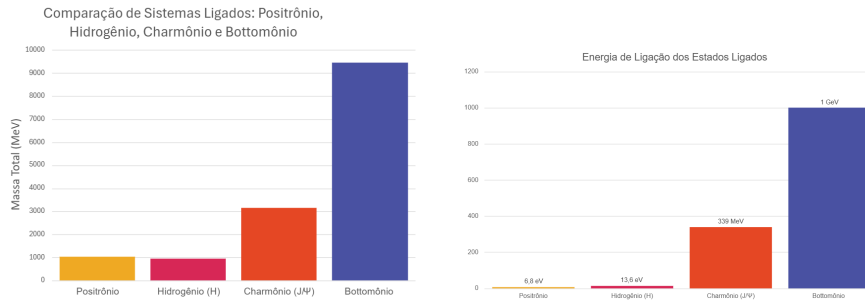


Figura 5.1: Comparação das massas totais (painel da esquerda) e energias de ligação (painel da direita) entre os sistemas ligados: positrônio, hidrogênio, charmônio (J/ψ) e bottomônio (Υ), destacando a diferença de escalas entre as interações eletromagnética e forte.

Em síntese, este trabalho proporcionou uma trajetória gradual e fundamentada, desde sistemas quânticos com soluções analíticas até a aplicação de métodos numéricos no estudo de hádrons pesados. A análise da formação do estado ligado $c\bar{c}$ demonstrou que a equação de Schrödinger, mesmo em sua formulação não relativística, combinada com o potencial de Cornell, fornece uma descrição consistente do espectro do charmônio. Os resultados reforçam a relevância dos modelos potenciais no contexto da QCD não perturbativa, destacando sua utilidade como ferramenta acessível e eficaz na compreensão qualitativa e quantitativa da estrutura dos hádrons. Extensões naturais deste estudo incluem a incorporação de efeitos finos e hiperfinos e a aplicação do mesmo formalismo a outros sistemas ligados, consolidando o papel dos métodos numéricos no avanço da física de partículas e de sistemas fortemente interagentes.

A

Poço de potencial infinito em uma e duas dimensões

O poço de potencial infinito é um modelo teórico em que uma partícula se move livremente — isto é, sem influência de energia potencial — dentro de uma região limitada, geralmente definida por $0 < x < L$ no caso unidimensional. Fora dessa região, a partícula é submetida a um potencial infinitamente alto, o que a impede de existir fora dos limites do poço [13].

Para que o termo $U(x)\psi(x)$ presente na equação de Schrödinger [veja Eq. (2.8)] não se torne infinito, o que impediria qualquer possibilidade de encontrar uma solução fisicamente aceitável, deve-se impor que $x \leq 0 \vee x \geq L \Rightarrow \psi(x) = 0$. Para preservar a continuidade da função de onda, deve-se assumir que seus valores externos e internos ao poço coincidam nas fronteiras, implicando as condições de contorno $x = 0 \vee x = L \Rightarrow \psi(x) = 0$.

Em uma dimensão quando $U(x) = 0$ a equação de Schrödinger, Eq. (2.8), pode ser facilmente resolvida, e sua solução é dada por

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}, \quad (\text{A.1})$$

em que A e B são constantes de normalização.

Para satisfazer a condição de contorno, $\psi(0) = 0$, é necessário impor que $B = 0$. Já para $\psi(L) = 0$ é necessário que $kL = n\pi$, $n = 1, 2, 3, \dots$

Assim, a função de onda após o processo de normalização, que define o valor de A , é expressa da seguinte forma,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (\text{A.2})$$

onde cada estado quantizado n adquire um valor de energia dado por

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}. \quad (\text{A.3})$$

As funções de onda, $\psi_n(x)$ e suas respectivas densidades de probabilidades, $|\psi(x)|^2$ para $n = 1, 2, 3, 4$, para $L = 1$ u.a. são mostradas na Fig. A.1.

De forma análoga ao caso unidimensional, no poço de potencial infinito bidi-

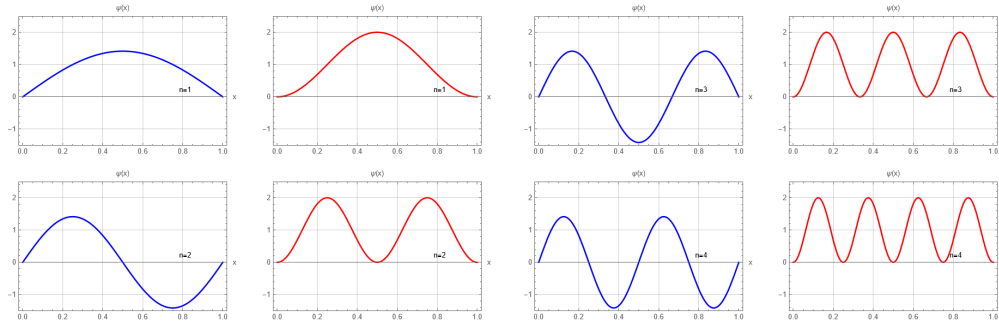


Figura A.1: As funções de onda, $\psi_n(x)$ (em azul) e as respectivas densidades de probabilidade, $|\psi_n(x)|^2$, (em vermelho) para o poço de potencial infinito unidimensional, para os estados com $n = 1, 2, 3$ e 4 .

mensional é necessário impor condições de contorno tanto na direção x quanto na direção y , restringindo a partícula à região $0 \leq x \leq L$ e $0 \leq y \leq L$. Considerando soluções separáveis da forma $\psi(x, y) = X(x)Y(y)$, a equação de Schrödinger pode ser resolvida em cada direção independentemente, resultando em uma função de onda normalizada para o sistema bidimensional [13].

$$\psi_{n_x, n_y}(x, y) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right), \quad (\text{A.4})$$

onde a expressão da energia quantizada é dada por

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2). \quad (\text{A.5})$$

Observe, por exemplo, que os estados onde $n_x = 1; n_y = 2$ e $n_x = 2; n_y = 1$ possuem energias degeneradas.

As densidades de probabilidades, $|\psi_{n_x, n_y}(x, y)|^2$ para as seguintes combinações de estados $n_x = 1, n_y = 1$; $n_x = 2, n_y = 1$; $n_x = 1, n_y = 2$; $n_x = 2, n_y = 2$, são mostradas na Fig. A.2.

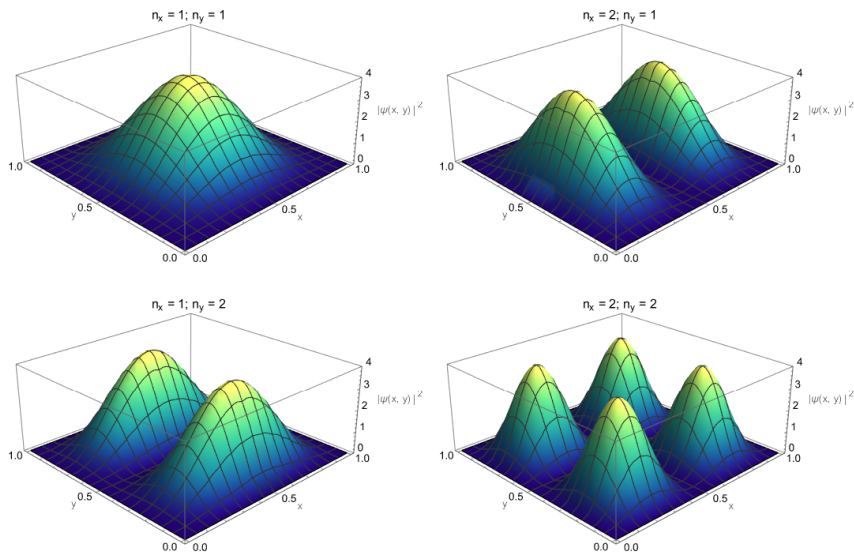


Figura A.2: Densidades de probabilidade $|\psi_{n_x, n_y}(x, y)|^2$ para o poço de potencial infinito bidimensional para os estados: $n_x = 1, n_y = 1$; $n_x = 2, n_y = 1$; $n_x = 1, n_y = 2$; $n_x = 2, n_y = 2$.

Oscilador harmônico unidimensional

B

Neste Apêndice apresenta-se um resumo dos principais conceitos envolvidos na solução do oscilador harmônico em uma dimensão.

O oscilador harmônico quântico constitui uma primeira aproximação para o estudo do movimento vibracional de moléculas diatômicas. Nesse modelo, considera-se que o sistema oscila em torno de um ponto de equilíbrio, e que, para pequenas oscilações, o potencial é aproximadamente quadrático — e, portanto, harmônico.

Como já mencionado no Capítulo 2, o potencial do oscilador harmônico, $(1/2)m\omega x^2$ torna a resolução da equação de Schrödinger um pouco complexa, pois envolve o uso dos polinômios de Hermite.

Após resolver a Equação de Schrödinger, é possível mostrar que a função de onda normalizada para o oscilador assume a forma [21, 22]

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}} e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n(\xi), \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (\text{B.1})$$

onde $\xi = \sqrt{(m\omega/\hbar)}x$ e $H_n(\xi)$ são os polinômios de Hermite.

Em particular, o estado fundamental, $n = 0$, tem sua função de onda dada por [13]

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-(\sqrt{km}/2\hbar)x^2}.$$

Cada estado quantizado n tem um valor de energia que é dado por

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (\text{B.2})$$

Interessante notar que a menor energia (energia do estado fundamental) para o oscilador não é zero, mas sim $\hbar\omega/2$. Considerando, para o estado fundamental, a variação da posição como $\Delta x = \sqrt{\hbar/2m\omega}$ e a variação do momento como $\Delta p = \sqrt{\hbar m\omega/2}$, quando fazemos o produto $\Delta x \Delta p$, obtemos [22]

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \quad (\text{B.3})$$

que é o valor mínimo permitido pelo princípio da incerteza de Heisenberg.

As funções de onda $\psi_n(x)$ e as respectivas densidades de probabilidade $|\psi_n(x)|^2$ para os estados com n variando de 0 – 5 estão mostradas na Fig. B.1.

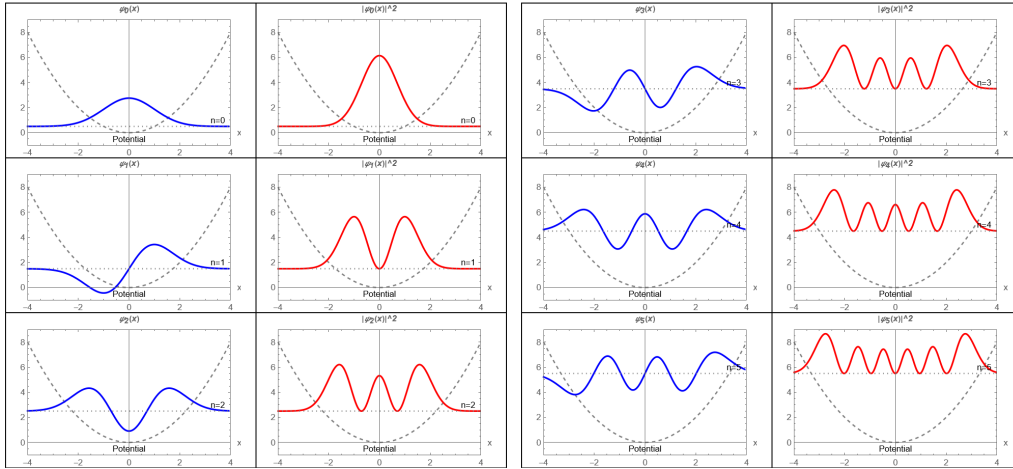


Figura B.1: Funções de onda $\psi_n(x)$ (em azul) e densidades de probabilidade $|\psi_n(x)|^2$ (em vermelho) para o oscilador com n variando de 0 – 5.

Os harmônicos esféricos determinam a estrutura angular da função de onda do átomo de hidrogênio, ou seja, definem a forma e a orientação espacial dos orbitais, como a forma esférica do orbital s e a lobular do orbital p . Já a parte radial se restringe a determinar o espectro de energias do átomo de hidrogênio.

Os harmônicos esféricos surgem como resultado da implementação da separação de variáveis [veja Eq.(2.16)] na equação de Schrödinger tridimensional em coordenadas esféricas expressa pela Eq. (2.8). Eles são funções de onda angulares normalizadas e definidos por [15]

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{4\pi(\ell+|m|)!}} e^{im\phi} P_{\ell,m}(\cos \theta), \quad (\text{C.1})$$

em que $\epsilon = (-1)^m$ para $m \geq 0$ e $\epsilon = 1$ para $m \leq 0$, e $P_{\ell,m}$ são os polinômios associados de Legendre.

A Fig. C.1 mostra algumas densidades de probabilidade angulares $|Y_{\ell,m}(\theta, \phi)|^2$ derivadas da resolução das Eqs. (2.11) e (2.12) para certos valores de ℓ e m .

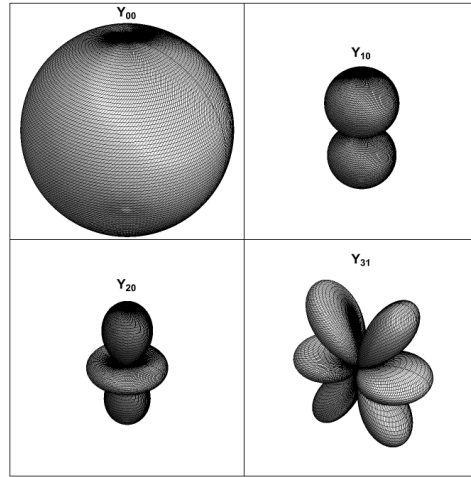


Figura C.1: Densidades de probabilidade angulares $|Y_{\ell,m}(\theta, \phi)|^2$ derivadas da resolução das Eqs. (2.11) e (2.12) para alguns valores de ℓ e m . Os harmônicos $Y_{0,0}$, $Y_{1,0}$, $Y_{2,0}$ e $Y_{3,1}$ determinam a forma dos orbitais S , P , D e F , respectivamente.

Bibliografia

- [1] D. J. Griffiths e D. F. Schroeter. **Introduction to elementary particles**. 2008. ISBN: 978-3-527-40601-2 (ver pp. 1–4, 23, 25, 35).
- [2] Brian Robert Martin e Graham Shaw. **Particle physics**. 2008. ISBN: 978-0-470-03294-7 (ver pp. 1, 3, 4, 16, 17, 22, 24–26).
- [3] Mark Thomson. **Modern particle physics**. New York: Cambridge University Press, out. de 2013. ISBN: 978-1-107-03426-6, 978-1-139-52536-7. DOI: 10.1017/CBO9781139525367 (ver pp. 1, 3, 22, 24, 26).
- [4] J. Cham e D. Whiteson. **We Have No Idea: A Guide to the Unknown Universe**. John Murray Press, 2017. ISBN: 9781473660182. URL: <https://books.google.com.br/books?id=KL72DQAAQBAJ> (ver pp. 1, 3).
- [5] J. J. Aubert et al. **Experimental Observation of a Heavy Particle** *J. Phys. Rev. Lett.* 33 (1974), 1404–1406 (ver p. 4).
- [6] J. E. Augustin et al. **Discovery of a Narrow Resonance in e^+e^- Annihilation**. *Phys. Rev. Lett.* 33 (1974), 1406–1408 (ver p. 4).
- [7] David J. Gross e Frank Wilczek. **Ultraviolet Behavior of Nonabelian Gauge Theories**. *Phys. Rev. Lett.* 30 (1973). Ed. por J. C. Taylor, 1343–1346. DOI: 10.1103/PhysRevLett.30.1343 (ver pp. 4, 20).
- [8] H. David Politzer. **Reliable Perturbative Results for Strong Interactions?** *Phys. Rev. Lett.* 30 (1973). Ed. por J. C. Taylor, 1346–1349. DOI: 10.1103/PhysRevLett.30.1346 (ver p. 4).
- [9] E. Eichten, K. Gottfried, T. Kinoshita, John B. Kogut, K. D. Lane e Tung-Mow Yan. **The Spectrum of Charmonium**. *Phys. Rev. Lett.* 34 (1975). [Erratum: *Phys. Rev. Lett.* 36, 1276 (1976)], 369–372. DOI: 10.1103/PhysRevLett.34.369 (ver pp. 4, 5, 21, 22).
- [10] E. Eichten, K. Gottfried, T. Kinoshita, K. D. Lane e Tung-Mow Yan. **Charmonium: The Model**. *Phys. Rev. D* 17 (1978). [Erratum: *Phys. Rev. D* 21, 313 (1980)], 3090. DOI: 10.1103/PhysRevD.17.3090 (ver pp. 4, 5, 21, 22).
- [11] C. Quigg e Jonathan L. Rosner. **Quantum Mechanics with Applications to Quarkonium**. *Phys. Rept.* 56 (1979), 167–235. DOI: 10.1016/0370-1573(79)90095-4 (ver p. 4).

- [12] Estia Eichten, Stephen Godfrey, Hanna Mahlke e Jonathan L. Rosner. **Quarkonia and their transitions**. *Rev. Mod. Phys.* 80 (2008), 1161–1193. DOI: [10.1103/RevModPhys.80.1161](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.80.1161). arXiv: [hep-ph/0701208](https://arxiv.org/abs/hep-ph/0701208) (ver p. 4).
- [13] K.S. Krane. **Modern Physics, 3rd Edition**. Wiley, 2012. ISBN: 9781118210093. URL: <https://books.google.com.br/books?id=3tobAAAAQBAJ> (ver pp. 6, 8, 9, 12, 13, 37, 38, 40).
- [14] Rodrigo Barbosa Donangelo Raul José; Capaz. **Introdução à Mecânica Quântica**. Rio de Janeiro: Consórcio CEDERJ Fundação CECIERJ, jul. de 2010 (ver pp. 6, 7).
- [15] David Griffiths. **Introduction to Quantum Mechanics**. 3rd ed. Cambridge University Press, 2018. ISBN: 978-3-527-40601-2 (ver pp. 7–9, 42).
- [16] P.A. Tipler e R. Llewellyn. **Modern Physics**. W. H. Freeman, 2012. ISBN: 9781429250788. URL: <https://books.google.com.br/books?id=221tzWEACAAJ> (ver pp. 8, 9).
- [17] A R Dzierba. **The search for QCD exotica**. *Bulletin of the American Physical Society* 40:10 (out. de 1995). URL: <https://www.osti.gov/biblio/255416> (ver pp. 19, 20).
- [18] I. S. Alam e S. B. Maywenson. **Revisiting the charmonium spectra within the non-relativistic framework using the Matrix Numerov method**. *J. Phys. Conf. Ser.* 2498:1 (2023), 012013. DOI: [10.1088/1742-6596/2498/1/012013](https://doi.org/10.1088/1742-6596/2498/1/012013) (ver pp. 23, 28, 29, 33).
- [19] Tarek Abdelwahab Nahool, Yasser Mostafa, Muhammad Anwar e Gamal A. Yahya. **Charmonium Properties**. *East Eur. J. Phys.* 2020:3 (2020), 31–38. DOI: [10.26565/2312-4334-2020-3-04](https://doi.org/10.26565/2312-4334-2020-3-04) (ver pp. 26, 35).
- [20] R. L. Workman e others (Particle Data Group). **Review of Charmonium**. *Prog. Theor. Exp. Phys.* 2024:8 (2024), 083C01. DOI: [10.1093/ptep/ptae070](https://doi.org/10.1093/ptep/ptae070). URL: <https://pdg.lbl.gov/2025/reviews/rpp2024-rev-charmonium.pdf> (ver pp. 28, 30–32).
- [21] George B. Arfken e Hans J. Weber. **Física Matemática: Métodos Matemáticos para Engenharia e Física**. 7ª ed. Tradução da edição original em inglês: Mathematical Methods for Physicists. Elsevier, 2007. ISBN: 978-85-352-2050-6 (ver p. 40).
- [22] L. D. Landau e E. M. Lifshitz. **Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory**. 2nd, revised and enlarged. Vol. 3. Course of Theoretical Physics. First published in English 1958; Institute of Physical Problems USSR, Academy of Sciences. Oxford: Pergamon Press, 1965 (ver p. 40).