

Equações não lineares, método WKB generalizado e aplicação à equação de Thomas-Fermi

(Nonlinear equations, generalized WKB method and application to the Thomas-Fermi equation)

Isabel Tamara Pedron¹ e Renio dos Santos Mendes²

¹Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Marechal Cândido Rondon, PR, Brasil

²Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, PR, Brasil

Recebido em 26/10/2007; Revisado em 28/12/2007; Aceito em 3/1/2008

Uma família de equações diferenciais ordinárias não lineares com ordem arbitrária é obtida no contexto da mecânica estatística não extensiva baseada na entropia de Tsallis. É desenvolvida explicitamente uma extensão do método WKB para equações de segunda ordem a qual é aplicada para resolver aproximadamente uma classe de equações que contém como caso particular a equação de Thomas-Fermi para um átomo livre e para um íon sujeito a um campo magnético intenso. Espera-se que o procedimento apresentado aqui possa ser útil na discussão de outros processos não lineares.

Palavras-chave: entropia de Tsallis, método WKB, equações diferenciais não lineares.

A family of nonlinear ordinary differential equations with arbitrary order is obtained in the non-extensive statistical mechanics scenario based on the Tsallis entropy. It is developed explicitly a WKB-like method for second order equations and it is applied to solve approximately a class of equations that contains as special case the Thomas-Fermi equation for a free neutral atom and heavy ion subjected to a strong magnetic field. It is expected that the procedure presented here can be useful in the discussion of other nonlinear processes.

Keywords: Tsallis entropy, WKB method, nonlinear differential equations.

1. Introdução

Em geral, quando uma nova teoria é empregada para investigar alguma situação física, surgem com ela conceitos que são usados em vários contextos diferentes daquele que ela foi originalmente proposta. Por exemplo, devido a mecânica quântica, idéias relacionadas ao princípio da incerteza foram largamente disseminadas nas mais diversas áreas do conhecimento. Outro exemplo advém dos estudos sobre transições de fase em sistemas termodinâmicos, que conduziu ao uso de conceitos de invariância de escala em inúmeros contextos. Mais recentemente, tem sido explorada uma nova forma entrópica, a entropia de Tsallis [1]

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W (p_i)^q}{q - 1} \quad (q \in \mathcal{R}), \quad (1)$$

que tem como caso limite a entropia de Boltzmann-Gibbs-Shannon (BGS)

$$S_1 = -k \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i, \quad (2)$$

¹E-mail: itpedron@yahoo.com.br.

quando $q \rightarrow 1$. Naturalmente, existem casos que ilustram como podem existir conceitos baseados em S_q que não são necessariamente ligados a mecânica estatística no seu sentido tradicional. Neste trabalho será mostrado detalhadamente como uma dessas situações pode ocorrer.

Uma propriedade curiosa de S_q surge quando dois sistemas independentes (A e B) são considerados. Em tal situação, as probabilidades são decompostas na forma de produto e, daí, verifica-se que

$$\frac{S_q(A+B)}{k} = \frac{S_q(A)}{k} + \frac{S_q(B)}{k} + (1-q) \frac{S_q(A)}{k} \frac{S_q(B)}{k}. \quad (3)$$

Essa relação mostra que o caráter não extensivo de S_q reduz-se ao extensivo no limite $q \rightarrow 1$, assim como é esperado que aconteça com uma mecânica estatística baseada na entropia de Tsallis. Além disso, a propriedade de (pseudo) aditividade (Eq. (3)) permite interpretar o índice entrópico q como um indicador do grau de não extensividade de S_q . Devido a essa propriedade, a mecânica estatística generalizada, que está ba-

seada na entropia de Tsallis, é comumente denominada de mecânica estatística não extensiva. Ela também tem sido referida como mecânica estatística de Tsallis, estatística de Tsallis, mecânica estatística generalizada ou estatística generalizada.

Essa mecânica estatística tem sido aplicada em vários contextos, oferecendo uma possível estrutura teórica para sistemas e situações em que o formalismo da mecânica estatística usual não se mostra adequado. De uma maneira geral, exemplos dessas inadequações ocorrem quando são considerados sistemas de muitas partículas com interação de longo alcance, estados metaestáveis, presença de memória de longo alcance, fractalidade do espaço de fase, sistemas complexos entre outros [2-7]. Do ponto de vista matemático, uma generalização da função exponencial (a q -exponencial) ocupa um papel central na estatística de Tsallis, pois ela está relacionada com a generalização da distribuição de probabilidade canônica (o peso estatístico de Gibbs). Por exemplo, a partir da q -exponencial uma equação do tipo Fokker-Planck não linear tem sido amplamente investigada [8] e conduz a uma generalização da função Gaussiana (a q -Gaussiana). Outro exemplo está relacionado com uma q -álgebra [9] que tem aplicações a uma generalização do teorema do limite central quando há probabilidades altamente correlacionadas [10].

Neste trabalho ilustraremos justamente esse aspecto central desempenhado pelas q -exponenciais via construção de uma família de equações diferenciais não-lineares (seção 2). A seguir, considerando essa família de equações, é desenvolvida uma generalização (extensão) do método WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) para obter soluções aproximadas (seção 3). Como aplicação desse método, é considerada a equação de Thomas-Fermi para um átomo livre e para um íon pesado em campo magnético intenso (seção 4). As considerações finais sobre esses desenvolvimentos que conectam uma família de equações diferenciais ordinárias não lineares e algumas de suas aplicações com a entropia de Tsallis são apresentadas na seção 5.

2. Família de equações diferenciais não lineares

Muitos sistemas em várias áreas do conhecimento são modelados pela equação de decaimento (crescimento) exponencial

$$\frac{dp}{dx} + \lambda p = 0, \quad (4)$$

cujas soluções gerais são

$$p(x) = p_o \exp(-\lambda x), \quad (5)$$

que corresponde à condição inicial $p(0) = p_o$. É interessante observar que essa solução tem uma interpretação entrópica. De fato, se a entropia usual de BGS,

$$S = - \int_a^b p(x) \ln p(x) dx, \quad (6)$$

for maximizada sujeita aos vínculos

$$\alpha = \int_a^b p(x) dx \quad (7)$$

e

$$\beta = \int_a^b x p(x) dx, \quad (8)$$

a solução da Eq. (4) para $a \leq x \leq b$ é obtida novamente. Os parâmetros α e β são ajustados para obter p_o e λ . Se $\alpha = 1$, $p(x)$ pode ser interpretado como uma densidade de probabilidade. Porém, essa escolha para α não é necessária nas discussões deste trabalho.

Visando generalizar a solução (5) e consequentemente a Eq. (4), observemos que a entropia de Tsallis (1), na versão contínua, também pode ser maximizada sujeita ao vínculo da Eq. (7) e com o vínculo da Eq. (8) substituído por

$$\beta = \int_a^b x p(x)^q dx. \quad (9)$$

Esse procedimento resulta em

$$p(x) = p_o [1 - (1 - q) p_o^{q-1} \lambda x]^{1/(1-q)}, \quad (10)$$

que recupera a distribuição exponencial (Eq. (5)) quando $q \rightarrow 1$. Naturalmente, p_o depende de α , β e q . Mais comumente, a função $[1 + (1 - q) x]^{1/(1-q)}$ é chamada de q -exponencial. Para garantir que essa função seja real quando q e x são reais, ela é considerada nula se $1 + (1 - q) x < 0$.

Por inspeção direta, verifica-se que a função q -exponencial (Eq. (10)) satisfaz a equação não linear

$$\frac{dp}{dx} + \lambda p^q = 0, \quad (11)$$

sujeita à condição inicial $p(0) = p_o$. A solução (11) pode ser interpretada como um decaimento com memória (da condição inicial), cujo tempo característico é $\tau = 1/\lambda_{ef}$ com $\lambda_{ef} = \lambda p_o^{q-1}$. Assim, o índice entrópico q dita o grau de memória presente na solução (10).

Por sua vez, a generalização natural da Eq. (4) para equações diferenciais de ordem superior é a família das equações diferenciais lineares de ordem arbitrária com coeficientes constantes. O N -ésimo elemento desta família é dado por

$$\sum_{n=0}^N a_n \frac{d^n p}{dx^n} = 0, \quad (12)$$

e a equação algébrica correspondente para λ é

$$\sum_{n=0}^N a_n (-\lambda)^n = 0, \quad (13)$$

que é obtida usando a exponencial (solução (5)) como *ansatz*. Tendo em vista as colocações anteriores, a generalização da Eq. (12) no contexto não extensivo é escrita como [11]

$$\sum_{n=0}^N a_n \frac{d^n}{dx^n} p^{(N-n)(q-1)+1} = 0. \quad (14)$$

e a generalização correspondente da equação algébrica (13) é

$$a_N (-\lambda)^N \prod_{j=0}^{N-2} [(j+1)q - j] + \sum_{n=1}^{N-1} a_n (-\lambda)^n \prod_{j=N-n-1}^{N-2} [(j+1)q - j] + a_0 = 0. \quad (15)$$

A última equação é aplicável para $N \geq 2$ e quando $N = 1$ ela deve ser substituída por $a_1(-\lambda) + a_0 = 0$. Sem perda de generalidade o N -ésimo termo da Eq. (14) foi considerado linear em $p(x)$. Além disso, devido a não linearidade da Eq. (14), uma combinação linear de suas soluções particulares não é uma nova solução, em contraste com o caso da Eq. (12), o qual obedece o princípio de superposição.

É possível ampliar o domínio de aplicação da Eq. (11) permitindo que λ se torne uma função de x . Nesse caso, a solução é

$$p(x) = p_0 \left[1 - (1-q)p_0^{q-1} \int_0^x \lambda(z) dz \right]^{1/(1-q)}, \quad (16)$$

com $p(0) = p_0$. De forma similar, as constantes a_n na Eq. (14) podem ser funções de x , isto é,

$$\sum_{n=0}^N a_n(x) \frac{d^n}{dx^n} p^{(N-n)(q-1)+1} = 0. \quad (17)$$

Antes de iniciar a próxima seção, ilustraremos três situações relacionadas à Eq. (11). Se uma partícula move-se com velocidade suficientemente alta num fluido, tem-se uma situação com turbulência e a equação de movimento para partícula é $m dv/dt = -\gamma v^2$ [11]. A Eq. (11) também ocorre em cinética química, em que p representa a concentração de um dado reagente [12]. Se $\lambda(x) = bx$, a Eq. (16) conduz a uma q -Gaussiana e a uma Gaussiana se $q \rightarrow 1$.

3. Aproximação WKB generalizada

Como no caso linear ($q = 1$), não existe solução geral para as equações do tipo da Eq. (17). É natural, portanto, levar a efeito um enfoque aproximado para obter alguma informação sobre soluções particulares. No que segue, uma generalização do método WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) para $q \neq 1$ é desenvolvida explicitamente para o caso $N = 2$.

No método WKB usual [13, 14], soluções aproximadas da equação

$$\frac{d^2 p}{dx^2} = f(x) p \quad (18)$$

podem ser obtidas quando $f(x)$ é uma função que varia lentamente com x . Nesse caso, uma função auxiliar $g(x)$ definida pela relação $p(x) = \exp(g(x))$ é empregada. Substituindo-a na Eq. (18) e negligenciando o termo $d^2 g/dx^2$ obtém-se a solução aproximada

$$p(x) \approx \exp\left(\pm \int (f(x))^{1/2} dx\right). \quad (19)$$

No contexto da mecânica quântica, aproximações desse tipo são empregadas, por exemplo, para estudar tunelamento em barreira de potencial e para obter a regra de quantização de Bohr-Sommerfeld.

A partir dos desenvolvimentos anteriores, uma generalização natural desse procedimento é considerar a Eq. (17) com $N = 2$,

$$\frac{d^2 p}{dx^2} = f(x) p^{2q-1}, \quad (20)$$

empregando uma q -exponencial, isto é,

$$p(x) = [1 + (1-q)g(x)]^{1/(1-q)}. \quad (21)$$

Em termos de $g(x)$, a Eq. (20) torna-se

$$[1 + (1-q)g] \frac{d^2 g}{dx^2} + q \left(\frac{dg}{dx}\right)^2 - f = 0. \quad (22)$$

Seguindo o procedimento WKB usual, o termo $d^2 g/dx^2$ é negligenciado na primeira aproximação e obtém-se então

$$g(x) \approx \pm q^{-1/2} \int f(x)^{1/2} dx, \quad (23)$$

e finalmente

$$p(x) \approx \left[1 \pm (1-q) q^{-1/2} \int f(x)^{1/2} dx \right]^{1/(1-q)}. \quad (24)$$

Consistentemente, a condição de validade desta aproximação é

$$\left| \frac{d^2 g}{dx^2} \right| \approx \left| \frac{df/dx}{2q^{1/2} f^{1/2}} \right| \ll \left| \frac{f}{1 + (1-q)g} \right|. \quad (25)$$

O presente desenvolvimento é indicado para casos nos quais alguma solução particular pode ser considerada uma boa aproximação, visto que superposições das soluções não é uma nova solução da Eq. (20), em contraste com o caso linear ($q = 1$). Note também que as soluções (23) podem ser melhoradas por meio de iterações (reescrevendo sucessivamente a solução (23) na Eq. (22)).

4. Aplicação à equação de Thomas-Fermi

A teoria de Thomas-Fermi, publicada independentemente por L.H. Thomas [15] e E. Fermi [16], é uma aproximação baseada em um procedimento semi-clássico. Ela é útil em prover estimativas numéricas e características físicas para muitos problemas e questões fundamentais, por exemplo, em física atômica, em astrofísica e física de plasmas, como fica caracterizado pelos muitos artigos científicos existentes. Considerando um átomo, o principal objetivo do método é obter uma energia potencial efetiva para uma carga infinitesimal e calcular aproximadamente a densidade eletrônica em torno do núcleo atômico. De uma maneira geral, a equação de Thomas-Fermi sem correções relativísticas é [17]

$$\frac{d^2\varphi_n}{dx^2} = \frac{[\varphi_n(x)]^n}{x^{n-1}}. \quad (26)$$

Nesse ponto, seguindo a seção prévia, verifica-se que uma solução particular (aproximada) desta equação pode ser escrita como

$$\varphi_n(x) = \left[1 \pm (1-n) \left(\frac{2}{n+1} \right)^{1/2} \left(\frac{x^{(3-n)/2}}{3-n} + C \right)^{2/(1-n)} \right], \quad (27)$$

em que C é uma constante de integração. Ao comparar essa solução com o resultado da Eq. (24), tem-se que $q = (1+n)/2$ corresponde ao índice que caracteriza a entropia de Tsallis. Deve ser notado ainda que a escolha do sinal na Eq. (27) deve ser regida pela compatibilidade com as condições de contorno.

No caso particular de um átomo livre neutro, os elétrons são confinados sob a ação de um potencial efetivo esfericamente simétrico $\phi(r)$. Supõe-se pequena variação na posição r , de tal forma que o sistema é estudado pela estatística de Fermi-Dirac para partículas livres [13, 18]. É conveniente introduzir a variável adimensional x dada por $r = bx$ com $b = 0,885a_0/Z^{1/3}$ e $a_0 = \hbar^2/me^2$. Efetuando a substituição $\phi(r) = -(Ze^2\varphi(x))/r$, com densidade eletrônica apropriada, na equação de Poisson para $\phi(r)$, obtemos

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = x^{-1/2} \varphi^{3/2}, \quad (28)$$

cujas condições de contorno são $\varphi(0) = 1$ e $\varphi(\infty) = 0$. Neste caso $n = 3/2$ e conseqüentemente $q = 5/4$. Escolhendo a solução particular ajustável a essas condições de contorno, temos

$$\varphi_{3/2}(x) = \left(1 + \frac{2}{3\sqrt{5}} x^{3/4} \right)^{-4}. \quad (29)$$

Neste exemplo, a condição de validade da Eq. (25) é reduzida a $x^{3/4} \gg 3\sqrt{5}/28$.

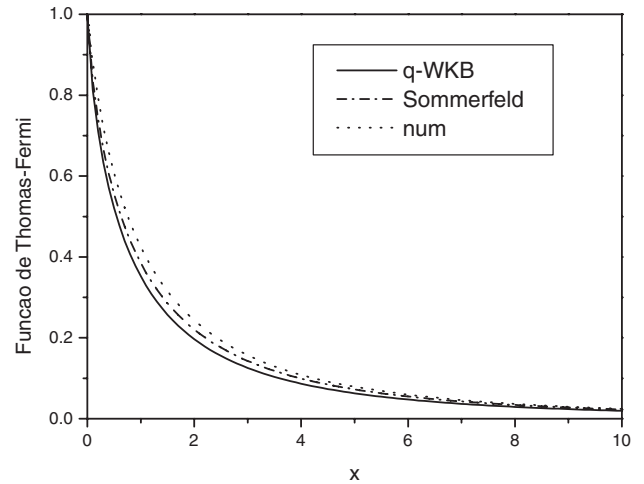


Figura 1 - Solução aproximada da equação de Thomas-Fermi com $n = 3/2$: este trabalho (q-WKB), Sommerfeld e a solução numérica.

A solução da Eq. (28) tem um comportamento assintótico descrito por $\varphi(x) \sim 144 x^{-3}$. Com base nesta forma assintótica, Sommerfeld, em 1932 (veja, por exemplo, a Ref. [19]), obteve uma solução analítica aproximada

$$\varphi(x) = \left[1 + \left(\frac{x}{a} \right)^d \right]^{-c} \quad (30)$$

com $a = 12^{2/3}$, $d = 0,772$, e $c = 3/d = 3,886$.

São comparados na figura Fig. (1) os resultados obtidos neste trabalho (Eq. (29)), a solução de Sommerfeld (30), e a solução numérica. Os resultados estão em bom acordo. Em um contexto geral, quando $f(x)$ é uma função suave, a solução aproximada correspondente torna-se mais acurada. Em particular, quando $f(x)$ é uma constante, nossa solução torna-se exata.

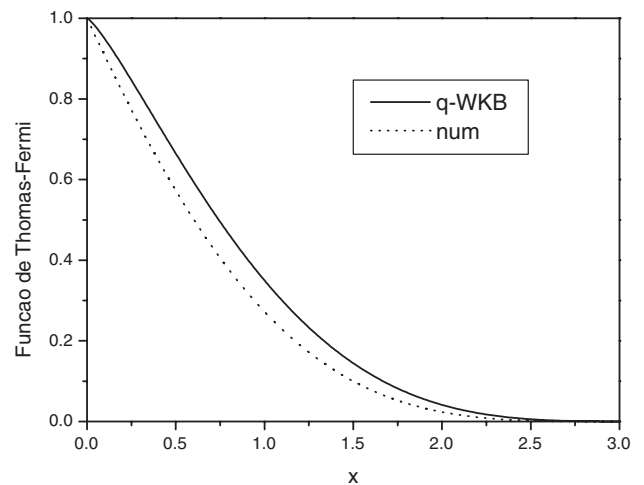


Figura 2 - Solução analítica aproximada da equação de Thomas-Fermi para um íon em campo magnético intenso ($n=1/2$) e a solução numérica.

No contexto astrofísico é comum a presença de campos magnéticos intensos que são relevantes em estudos, por exemplo, da emissão de elétrons e íons de superfícies de pulsares, da abundância de elementos na radiação cósmica e propriedades da matéria que dá forma à crosta exterior de estrelas de nêutrons magnéticas [20, 21]. Nesse sentido, é importante investigar o caso de um íon em um campo magnético intenso. Em tal caso, no modelo estatístico de Thomas-Fermi há a separação do movimento transversal do longitudinal, com respeito à direção do campo magnético, de tal forma que o movimento transversal é determinado apenas pelo campo magnético. Segundo a Ref. [21], a equação de Thomas-Fermi pertinente para esse estudo é

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = x^{1/2} \varphi^{1/2}. \quad (31)$$

Desta forma, $n = 1/2$ e $q = 3/4$. A solução, com a condição de contorno $\varphi(0) = 1$ e limitada na posição x_0 , é

$$\varphi_{1/2}(x) = \left(1 - \frac{2}{5\sqrt{3}}x^{5/4}\right)^4. \quad (32)$$

Nessa solução a variável adimensional x é dada por $r = a_0 2^{-3/5} \pi^{2/5} \alpha^{4/5} Z^{1/5} (eB/m^2)^{-2/5} x$, onde α é a constante de estrutura fina e B o campo magnético externo. A condição de validade é $x^{5/4} \gg 5\sqrt{3}/32$. A função é mostrada na Fig. (2) em que $x_0 = (5/2 \times 3^{1/2})^{4/5}$.

5. Conclusão

Neste trabalho, por meio da aplicação da entropia de Tsallis em substituição a de BGS, é ilustrado como a mudança de algum aspecto básico de uma teoria pode conduzir a cenários completamente novos. Em particular, é visto como conceitos baseados na entropia de Tsallis foram empregados para obter uma família de equações diferenciais ordinárias não lineares. A equação de primeira ordem desta família é uma extensão do decaimento exponencial e apresenta na solução uma componente de memória. Além disso, para equações de segunda ordem foi apresentado um procedimento generalizado para o método de aproximação WKB e obtidas as soluções aproximadas. O procedimento foi aplicado para a equação de Thomas-Fermi para um átomo neutro livre e para um íon sujeito a campo magnético intenso. Os resultados estão em acordo com a literatura mostrando que o procedimento é viável e pode ser aplicado em outros contextos não lineares. De uma maneira geral, poderia se pensar que o procedimento empregado neste trabalho seria apenas uma ferramenta

matemática, mas sua conexão com a entropia de Tsallis amplia as possibilidades de interpretação.

Referências

- [1] C. Tsallis, J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988).
- [2] J.P. Boon and C. Tsallis (eds.), *Nonextensive Statistical Mechanics: New Trends, New Perspectives* (Special issue), Europhysics News, number 6 (2005).
- [3] S.R.A. Salinas and C. Tsallis (eds.), *Nonextensive Statistical Mechanics and Thermodynamics* (Special issue), Brazilian Journal of Physics **29**, number 1 (1999).
- [4] S. Abe and Y. Okamoto (eds.), *Nonextensive Statistical Mechanics and its Applications - Lecture Notes in Physics v. 560* (Springer-Verlag, Berlin, 2001).
- [5] G. Kaniadakis, M. Lissia e A. Rapisarda (eds.), *Nonextensive Statistical Mechanics and Physical Applications* (Special issue), Physica A **305**, numbers 1 and 2 (2002).
- [6] M. Gell-Mann and C. Tsallis (eds.), *Nonextensive Entropy-nterdisciplinary Applications* (Oxford University Press, New York, 2004).
- [7] C. Beck, G. Benedek, A. Rapisarda and C. Tsallis (eds.), *Complexity, Metastability and Nonextensivity* (World Scientific, Singapore, 2005).
- [8] I.T. Pedron e R.S. Mendes, Revista Brasileira de Ensino de Física **27**, 251 (2005).
- [9] E.P. Borges, Physica A **340**, 95 (2004).
- [10] S. Umarov, C. Tsallis, M. Gell-Mann and S. Steinberg, arXiv:cond-mat/0606038v1.
- [11] R.S. Mendes and I.T. Pedron, arXiv:cond-mat/9904023v1.
- [12] F. Brouers and O. Sotolongo-Costa, Physica A **368**, 165 (2006).
- [13] L. Landau and E. Lifshitz, *Mecanique Quantique - Theorie Non Relativiste* (Ed. Mir, Moscou, 1966).
- [14] J. Mathews and R.L. Walker *Mathematical Methods of Physics* (Addison-Wesley, Massachusetts, 1973), p. 27.
- [15] L.H. Thomas, Proc. Cambridge Philos. Soc. **23**, 542 (1927).
- [16] E. Fermi, Rend. Accad. Naz. Lincei **6**, 602 (1927).
- [17] N.H. March and L.M. Nieto, J. Phys. A: Math Gen. **34**, L341 (2001).
- [18] H.A. Bethe and R.W. Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics* (W.A. Benjamin Inc., Massachusetts, 1974), p. 83.
- [19] A.B. Migdal, *Qualitative Methods in Quantum Theory* (W.A. Benjamin Inc., Massachusetts, 1977), p. 30.
- [20] L. Spruch, Rev. Mod. Phys. **63**, 151 (1991).
- [21] B. Banerjee, D. H. Constantinescu and P. Reháč, Phys. Rev D **10**, 2384 (1974).