CURIOSIDADES DA FÍSICA

José Maria Filardo Bassalo
www.bassalo.com.br

Problema de Sturm-Liouville e a Mecânica Quântica.

O Problema de Sturm-Liouvile (PE-L) é um *problema de autovalores*, que significa o seguinte: - Dado um operador $\hat{O}$ aplicado a uma função (F) – *autofunção* -, ele reproduz a função que é multiplicada por um número (o) – *autovalor* - que pode ser real ou imaginário. Desse modo, resulta que: $\hat{O}$F = o F – *equação de autovalores* (EAV). Um dos exemplos mais simples da EAV é dado pela seguinte equação: (d/dx) [exp (a x)] = a exp (a x), sendo a real ou imaginário. Veremos neste verbete que o PE-L representou um papel importante para o desenvolvimento da Mecânica Quântica, a partir de 1926. Vejamos como começou o PE-L. Em 1836 (*Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* 1, p. 106; 373), o matemático francês Charles François Sturm (1803-1855) apresentou o estudo do fluxo de calor em uma barra de densidade variável por intermédio de uma EAV, estudo esse que havia iniciado em 1833. Ainda em 1836 (*Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* 1, p. 252), Sturm e o matemático francês Joseph Liouville (1809-1892), iniciaram o estudo da solução de equações diferenciais ordinárias por intermédio de suas *autofunções* e correspondentes *autovalores*.

A formalização do PE-L só foi apresentado por Sturm e Liouville, erm 1837 (*Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* 2, p. 16; 418), sumarizado da seguinte maneira. Dada a equação diferencial ordinária definida por:

$$A(x)d^2y(x)/dx^2 + B(x)dy(x)/dx + [C(x) + \lambda\ D(x)]\ y(x) = 0 \quad \Leftrightarrow$$

$$Ay'' + By' + (C + \lambda D)y = 0,$$

eles mostraram que ela pode ser escrita na forma:

$$[r(x)\ y']' + [q(x) + \lambda\ p(x)]\ y(x) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{L}[y(x)] = -\lambda\ p(x)\ y(x)\ ,$$

$$r(x) = \exp\left[\int (B/A)dx\right],\ \ q(x) = (C/A)\exp\left[\int (B/A)dx\right],$$

$$p(x) = (\lambda D/A)\exp\left[\int (B/A)dx\right],$$

onde $\hat{L} \equiv$ [r(x) y']' + q(x) y(x) é o operador de Sturm-Liouville, p(x) é a *função peso*, e λ o *autovalor*. A equação diferencial acima é conhecida como Equação de Sturm-Liouville (ES-L), que é uma *equação de autovalores*.

Se, em um dado intervalo fechado (a, b), a função [y(x)] solução dessa equação satisfaz às condições de contorno:

$$a_1y(a) + a_2y'(a) = 0;\quad b_1y(b) + b_2y'(b) = 0,$$

com a_1, a_2, b_1, b_2 constantes reais dadas, então a ES-L, com as condições acima – o referido Problema de Sturm-Liouville - apresenta duas soluções: $y_n(x)$ e $y_m(x)$, linearmente independentes, conhecidas como *autofunções*, e com os respectivos *autovalores* $\lambda_n e \lambda_m$, e que satisfazem a seguinte expressão:

$$(\lambda_n - \lambda_m)\int_a^b p(x)y_n(x)y_m(x)dx = \alpha\delta_{nm}\ ,$$

onde δ_{nm} é a *delta de Kronecker* que vale 0, para n $\neq$ m, e 1, para n = m.

Depois de proposta a ES-L, os matemáticos perceberam que algumas famosas equações obtidas no Século 18 e também no Século 19, poderiam ser escritas na forma de uma ES-L. Vejamos tais equações. Em 1782 [*Mémoires de Mathématique et de Physique Présentés à l´Academie Royale des Sciences, par Divers Sçavans, e Lus dans ses Assemblées* 10 (1782), p. 411, publicado em 1785], o matemático francês Adrien Marie Legendre (1752-1833) escreveu o trabalho intitulado Recherches sur l´attraction des sphéroides ("Pesquisas sobre a atração dos esferóides"), no qual demonstrou o importante Teorema: - *Se a atração de um sólido de revolução é conhecida em cada ponto externo do prolongamento de seu eixo, então ela será conhecida em qualquer ponto externo*. Ainda nesse trabalho, Legendre calculou o componente da força de atração gravitacional exercida por um esferóide de massa (m), por intermédio de sua famosa Equação de Legendre (EL):

$$(1 - x^2)\, y'' - 2\, x\, y' + n\, (n + 1)\, y = 0 \quad \Leftrightarrow \quad [(1- x^2)\, y']' = - n\, (n + 1)\, y,$$

com n = 0, 1, 2, ... , sendo a solução da mesma o Polinômio de Legendre ($y = P_n$), que representa a *autofunção*, e λ = n (n + 1), o *autovalor*. Em 1784 [*Histoire de l´Academie Royale avec les Mémoires de Mathématique et de Physique, Paris* (1782), p. 370, publicado em 1787], Legendre demonstrou a *relação de ortogonalidade* de seus polinômios, ou seja:

$$\int_{-1}^{+1} P_n(x) P_m(x) dx = [2/(2n+1)]\delta_{nm}.$$

Mais tarde, em 1789 (*Histoire de l´Academie Royale avec les Mémoires de Mathématique et de Physique, Paris* (1789), p. 372, publicado em 1793), Legendre trabalhou com a hoje conhecida Equação Associada de Legendre:

$$(1 - x^2)\, y'' - 2\, x\, y' + [n\, (n + 1) - m^2/(1 - x^2)]\, y = 0 \quad \Leftrightarrow$$

$$[(1- x^2)\, y']' - [m^2/(1 - x^2)]\, y = - n\, (n + 1)\, y,$$

onde n, m = 0, 1, 2, ... , λ = n (n + 1), é o seu *autovalor*, e a solução da mesma o Polinômio Associado de Legendre [$y = P_n^m(x)$], que satisfaz a seguinte *relação de ortogonalidade*:

$$\int_{-1}^{+1} P_n^m(x) P_\ell^m(x) dx = [2(n+m)!/(2n+1)(n-m)!]\delta_{n\ell}.$$

É oportuno registrar que P_ℓ^n faz parte da solução da *Equação de Schrödinger* (ES) (vide verbete nesta série) para uma partícula de massa m e energia E, sob a ação de um potencial do tipo central V(r):

$$\Delta\, \psi(r,\theta,\varphi) + (2m/\hbar^2)[E - V(r)]\psi(r,\theta,\varphi) = 0,$$

onde (r,θ,φ) são as coordenadas esféricas, $\hbar = h/2\pi$, sendo h a *constante de Planck*. A solução espacial da ES acima é dada por:

$$\psi(r,\theta,\varphi) \propto P_\ell^n(\cos\theta) \times \exp(in\varphi) \propto Y_l^n(\theta,\varphi),$$

sendo $Y_l^n(\theta,\varphi)$ o *harmônico esférico*, nome cunhado pelo físico inglês William Thomson (Lord Kelvin de Largs) (1824-1907). Nessa expressão, ℓ (= 0, 1, ..., n-1) significa o *número quântico orbital*, m [= $-\ell,\ldots 0,\ldots +\ell$]o *número quântico magnético*, e n o *número quântico principal*. [Lev Davidovich Landau et Evgeny Mikhaillovich Lifc(s)hitz, Mécanique Quantique: Théorie Non Relativiste (Éditions Mir, 1966); A. S. Davydov, Quantum Mechanics (Pergamon Press, 1968)].

Em 1813 (*Commentationes Societatis Regiae Scientiarum Gottingensis Recentiores* 2, p. 123), o matemático alemão Carl Friedrich Gauss (1777-1855) trabalhou com a equação diferencial hipergeométrica, hoje conhecida como Equação de Gauss:

$$x\, (1 - x)\, y'' + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)\, x]\, y' - \alpha\, \beta\, y = 0 \quad \Leftrightarrow$$

cuja solução em forma de série havia sido encontrada pelo matemático suíço Leonhard Euler (1707-1783), em 1769. Na linguagem atual, essa solução apresenta a seguinte notação: ${}_1F_2\,(\alpha, \beta, \gamma;\ x)$. Foi também nesse trabalho que Gauss demonstrou que:

$$ {}_1F_2\,(\alpha, \beta, \gamma;\ x) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)}. $$

Em 1836 (*Journal für die Reine und Angewandte Mathematik* 15, p. 139), o matemático alemão Ernst Eduard Kummer (1810-1893), estendeu o trabalho de Gauss sobre as equações diferenciais hipergeométricas. Estudou um tipo de equação hoje conhecida como equação hipergeométrica confluente ou Equação de Kummer:

$$ x\,y'' + (\gamma - x)\,y' - \alpha\,y = 0, $$

em que uma das soluções é dada por (na linguagem moderna): ${}_1F_1\,(\alpha, \gamma;\ x)$, conhecida como Função de Kummer. [F. G. Tricomi, Funzioni Ipergeometriche Confluents Edizioni Cremonese, 1954)].

Note que a ${}_1F_1$ faz parte da solução radial [$R(\rho)$] da *Equação de Schrödinger* no estudo do espalhamento de um elétron (pósitron) de massa m e carga e^- (e^+) por um potencial coulombiano ($V \propto 1/r$) atrativo (repulsivo): $R(\rho) \propto {}_1F_1(\rho)$, onde $\rho = r/a_0$, sendo $a_0 = \hbar^2/me^2$ (~ 0,5 Å), o *raio de Bohr*. Note que ${}_1F_1$ também faz parte da solução da *Equação de Schrödinger* para o oscilador harmônico esférico, cujo potencial (V) é do tipo central e dado por: $V(r) \propto r^2$. [Landau et Lifc(s)hitz, op. cit.; Davydov, op. cit.].

Em 1864 (*Comptes Rendus de l´Academie des Sciences de Paris* 58, p. 93; 266), o matemático francês Charles Hermite (1822-1901) estudou a solução de equações diferenciais ordinárias com intervalos infinitos. Em consequência desse estudo, apresentou a hoje conhecida Função de Hermite [u(x)], solução da seguinte equação diferencial:

$$ u''(x) + (2\nu + 1 - x^2)\,u(x) = 0. \quad (\nu \in R) $$

Note que, fazendo a mudança de variável: $u(x) = \exp(-x^2/2)\,y(x)$, a equação acima se transforma na hoje conhecida Equação de Hermite:

$$ y'' - 2\,x\,y' + 2\,\nu\,y = 0, $$

cuja solução é o Polinômio de Hermite (H_n).

Destaque que $u(x) = \exp(-x^2/2)\,H_n(x)$, faz parte da solução da *Equação de Schrödinger* para o potencial [V(x)] do oscilador harmônico simples (uma massa m oscilando com frequência angular ω): $V(x) = (1/2)\,k\,x^2$, sendo $k = m\,\omega^2$.

Em 1866 (*Journal für die Reine und Angewandte Mathematik* 66, p. 121), o matemático alemão Immanuel Lazarus Fuchs (1833-1902) estudou as soluções singulares das *equações diferenciais de ordem n*, do tipo (na linguagem de hoje):

$$ P_n(z)\,(d^n w/dz^n) + P_{n-1}(z)\,(d^{n-1} w/dz^{n-1}) + \ldots + P_1(z)\,(dw/dz) + P_0(z) = 0, $$

onde $P_i(z)$ são funções analíticas em torno de z = 0. Se $P_i(z_0) = 0$, então z_0 é denominado de *ponto singular*. Note que Fuchs introduziu o termo *sistema fundamental* para representar as n soluções linearmente independentes da equação acima. [Sir Edmund Taylor Whittaker and George Neville Watson, A Course of Modern Analysis (Cambridge University Press,1969)].

Em 1867, o matemático alemão Carl Gottfried Neumann (1832-1925) preparou o artigo intitulado Theorie der Bessel´schen Functionen ("Teoria da Função de Bessel"), no qual encontrou uma solução linearmente independente de $J_n(x)$, a $N_n(x)$, que é definida por (em notação atual):

$$ N_n(x) = \lim_{\nu \to n} [(d/d\nu) J_\nu(x) - (-1)^n (d/d\nu) J_{-\nu}(x)], $$

função essa denominada de Função de Neumann que é também chamada de Função de Bessel de Segunda Espécie.

Observe que, quando o n^2 da Equação de Bessel é dado por $(\ell+1/2)^2$, com ℓ pertencendo ao conjunto Z, ou seja:

$$x^2 y'' + x y' + [x^2 - (\ell+1/2)^2] y = 0,$$

suas soluções linearmente independentes são representadas por:

$$j_\ell(x) = \sqrt{\pi/(2x)} \times J_{\ell+1/2}(x) \quad \text{e} \quad n_\ell(x) = \sqrt{\pi/(2x)} \times N_{\ell+1/2}(x),$$

e, respectivamente, conhecidas como Função de Bessel Esférica de Primeira Espécie e Função de Bessel Esférica de Segunda Espécie ou Função de Neumann Esférica.

Em 1868, o matemático alemão Eugen Cornelius Joseph von Lommel (1837-1899) escreveu um artigo intitulado Studien über die Bessel´schen Functionen ("Estudos sobre a Função de Bessel"), no qual apresentou uma generalização parcial da Função de Bessel, ou seja: $J_r(z)$, sendo z uma função complexa e r um número real.

Em 1869 (*Mathematische Annalen* 1, p. 1), o matemático alemão Heinrich Weber (1842-1913) integrou a equação $\Delta u + k^2 u = 0$ em um domínio limitado por duas parábolas, e encontrou uma função análoga à Função de Neumann. Em vista disso, esta função é também conhecida como Função de Weber.

Em 1869 (*Mathematische Annalen* 1, p. 467), o matemático alemão Hermann Hankel (1839-1873) fez a generalização completa de Função de Bessel, isto é: $J_\nu(z)$, com z e ν complexos. Ainda nesse artigo, Hankel encontrou duas outras soluções independentes de $J_n(x)$, definidas por:

$$H_n^{(1)} = J_n(x) + iN_n(x)\,;\; H_n^{(2)} = J_n(x) - iN_n(x),$$

conhecidas como Funções de Hankel ou Funções de Bessel de Terceira Espécie.

Em 1874 (*Journal für die Reine und Angewandte Mathematik* 76, p. 214), o matemático alemão Georg Ferdinand Frobenius (1849-1917) estudou as soluções singulares das *equações diferenciais de ordem n*, trabalhadas por Fuchs, em 1866, encontrando uma solução do tipo:

$$w = \sum_{n=1}^{\infty} c_n z^{\rho+n},$$

com ρ e c_n determinados para cada solução em torno de z = 0.

Em 1879 (*Bulletin de la Societé Mathématique de France* 7, p. 72), o matemático francês Edmond Nicolas Laguerre (1834-1886) ao resolver integral $\int_x^\infty [\exp(-x')/x']dx'$, trabalhou com suas duas hoje famosas equações. A primeira (Equação de Laguerre):

$$x y'' + (1 + x) y' + \nu y = 0, \quad (\nu \in R)$$

cuja solução é o Polinômio de Laguerre [$L_n(x)$].

É oportuno destacar que a Equação de Laguerre é um caso particular da Equação de Kummer, vista acima, quando nesta se considera: α = - n, sendo n $\geq$ 0 e γ=1. Portanto: $L_n(x) = {}_1F_1$ (-n, 1; x). [José Maria Filardo Bassalo e Mauro Sérgio Dorsa Cattani, Elementos de Física Matemática 1 (Livraria da Física, 2010)].

A segunda equação (Equação Associada de Laguerre) é dada por:

$$x y'' + (m + 1 - x) y' + (n - m) y = 0, \quad (n \geq m;\; n, m \in I_+)$$

que tem como solução os Polinômios Associados de Laguerre (L_n^m):

$$L_n^m(x) = d^m L_n(x)/dx^m.$$

É interessante registrar que o L_n^m faz parte da solução radial [R (ρ)] da *Equação de Schrödinger* para o átomo de hidrogênio (H), cujo potencial é central e do tipo: V (r) = - e^2/r:

$$R(\rho) \propto L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho),$$

onde ρ = 2 r/(n a_0), sendo a_0 o raio de Bohr, definido acima, e n e ℓ, respectivamente, os números quânticos: *principal* (de *energia*) e *angular*.

Em 1888, o matemático inglês Alfred Barnard Basset (1854-1930) publicou o livro intitulado A Treatise on Hydrodynamics with numerous examples ("Um Tratado sobre Hidrodinâmica com numerosos exemplos"), no qual trabalhou com a Equação de Bessel Modificada:

$$x^2 y'' + x y' - (x^2 - \nu^2)y = 0, \qquad (\nu \text{ é um número complexo})$$

cuja solução é dada pela Função de Bessel Modificada de Primeira Espécie de Ordem ν:

$$I_\nu(x) = i^{-\nu} J_\nu(ix) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(x/2)^{\nu+2r}}{r!(\nu+r)!}.$$

Quando ν = n (inteiro), então: $I_n(x) = I_{-n}(x)$ e são, portanto, linearmente independentes. Em seu livro, Basset apresentou uma solução linearmente independente de $I_n(x)$, definida por:

$$K_n(x) = (1/2)\lim_{\nu \to n}[1/\cos(\nu\pi)](d/d\nu)[I_{-\nu}(x) - I_\nu(x)].$$

Observe que as Funções de Bessel Modificadas aparecem no tratamento quântico schrödingeriano do espalhamento de elétrons por átomos neutros como, por exemplo, no estudo das formas de linhas espectrais, e na excitação coulombiana atômica provocada pela interação de um elétron com um átomo alcalino. [Siegfried Flügge, Practical Quantum Mechanics I, II (Springer-Verlag, 1971); José Maria Filardo Bassalo e Mauro Sérgio Dorsa Cattani, Formas de Linhas Espectrais em Gases Neutros, Plasmas Densos e Estabilidade Quiral (EDUFPA, 2007)].
