

# Teoria de Sturm-Liouville — Funções Ortogonais

No capítulo anterior desenvolvemos duas soluções linearmente independentes da equação diferencial linear homogênea de segunda ordem e provamos que não existia nenhuma terceira solução linearmente independente. Neste capítulo a ênfase passa da solução da equação diferencial para o desenvolvimento e entendimento de propriedades gerais das soluções. Há uma estreita analogia entre os conceitos deste capítulo e os da álgebra linear no Capítulo 3. Aqui, as funções desempenham o papel que os vetores desempenhavam lá, e os operadores lineares desempenham o papel que as matrizes desempenhavam no Capítulo 3. A diagonalização de uma matriz real simétrica no Capítulo 3 corresponde aqui à solução de uma EDO definida por um operador **auto-adjunto**  $\mathcal{L}$  em termos de suas autofunções, que são as análogas “contínuas” dos autovetores no Capítulo 3. As hamiltonianas da Mecânica Quântica e suas autofunções de energia são exemplos da analogia correspondente entre matrizes hermitianas e operadores hermitianos.

Na Seção 10.1 são apresentados os conceitos de operador auto-adjunto, autofunção e autovalor e de operador hermitiano. O conceito de operador auto-adjunto, dado em primeiro lugar em termos de equações diferenciais, é então definido de acordo com a utilização em Mecânica Quântica, em que autofunções assumem valores complexos. As propriedades vitais de realidade de autovalores e ortogonalidade de autofunções são derivadas na Seção 10.2. Na Seção 10.3 discutimos o procedimento de Gram-Schmidt para construir sistematicamente conjuntos de funções ortogonais. Por fim, a propriedade geral de completude de um conjunto de autofunções é explorada na Seção 10.4, e na Seção 10.5 retomamos as funções de

## 10.1 EDO Auto-Adjuntas

No Capítulo 9 estudamos, classificamos e resolvemos EDO lineares de segunda ordem correspondentes a operadores diferenciais lineares de segunda ordem da forma geral

$$\mathcal{L}u(x) = p_0(x) \frac{d^2}{dx^2} u(x) + p_1(x) \frac{d}{dx} u(x) + p_2(x) u(x). \quad (10.1)$$

Os coeficientes  $p_0(x)$ ,  $p_1(x)$  e  $p_2(x)$  são funções reais de  $x$  e, sobre a região de interesse,  $a \leq x \leq b$ , as primeiras  $2 - i$  derivadas de  $p_i(x)$  são contínuas. Referindo-nos à Equação (9.118), vemos que  $P(x) = p_1(x)/p_0(x)$  e  $Q(x) = p_2(x)/p_0(x)$ . Por conseguinte,  $p_0(x)$  não deve desaparecer para  $a < x < b$ . Agora, os zeros de  $p_0(x)$  são pontos singulares (Seção 9.4) e a afirmação precedente significa que nosso intervalo  $[a, b]$  deve ser tal que não haja nele nenhum ponto singular. Pode haver, e muitas vezes há, pontos singulares nas fronteiras.

Para um operador linear  $\mathcal{L}$ , o análogo de uma forma quadrática para uma matriz no Capítulo 3 é a integral

$$\begin{aligned} \langle u | \mathcal{L} | u \rangle &\equiv \langle u | \mathcal{L} u \rangle \equiv \int_a^b u(x) \mathcal{L} u(x) dx \\ &= \int_a^b u \{ p_0 u'' + p_1 u' + p_2 u \} dx, \end{aligned} \quad (10.2)$$

em que as linhas da função real  $u(x)$  denotam derivadas, como sempre, e, por simplicidade, admitimos que  $u(x)$  é real. Se passarmos as derivadas para o primeiro fator,  $u$ , na Equação (10.2) integrando por partes uma vez ou duas

vezes, temos como resultado a expressão equivalente

$$\langle u | \mathcal{L} u \rangle = [u(x)(p_1 - p_0')u(x)]_{x=a}^b + \int_a^b \left\{ \frac{d^2}{dx^2}[p_0 u] - \frac{d}{dx}[p_1 u] + p_2 u \right\} u dx. \quad (10.3)$$

Se exigirmos que as integrais nas Equações (10.2) e (10.3) sejam idênticas para **todas as funções  $u$  (diferenciáveis duas vezes)**, então os integrandos têm de ser iguais. Assim, a comparação resulta em

$$u(p_0'' - p_1')u + 2u(p_0' - p_1)u' = 0,$$

ou

$$p_0'(x) = p_1(x), \quad (10.4)$$

e, como bônus, os termos nas fronteiras  $x = a$  e  $x = b$  na Equação (10.3) também desaparecem.

Por causa da analogia com a matriz transposta no Capítulo 3, é conveniente definir o operador linear na Equação 10.3),

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{L}}u &= \frac{d^2}{dx^2}[p_0 u] - \frac{d}{dx}[p_1 u] + p_2 u \\ &= p_0 \frac{d^2 u}{dx^2} + (2p_0' - p_1) \frac{du}{dx} + (p_0'' - p_1' + p_2)u, \end{aligned} \quad (10.5)$$

como o **operador adjunto**<sup>1</sup>  $\bar{\mathcal{L}}$ . Definimos o operador adjunto  $\bar{\mathcal{L}}$  e mostramos que, se a Equação 10.4) for satisfeita,  $\langle \bar{\mathcal{L}}u | v \rangle = \langle u | \mathcal{L}v \rangle$ . Seguindo o mesmo procedimento, podemos mostrar de um modo mais geral que  $\langle v | \mathcal{L}u \rangle = \langle \mathcal{L}v | u \rangle$ . Quando essa condição é satisfeita,

$$\bar{\mathcal{L}}u = \mathcal{L}u = \frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] + q(x)u(x), \quad (10.6)$$

diz-se que o operador  $\mathcal{L}$  é **auto-adjunto**. Aqui, para o caso auto-adjunto,  $p_0(x)$ , é substituído por  $p(x)$  e  $p_2(x)$  por  $q(x)$ , para evitar índices desnecessários. A forma da Equação (10.6) permite efetuar duas integrações por partes na Equação (10.3) e Equação (10.22) e seguintes sem termos integrados.<sup>2</sup> Note que um dado operador não é inerentemente auto-adjunto; essa sua condição depende das propriedades do espaço funcional no qual ele age e das condições de fronteira.

Em um levantamento das EDO introduzidas na Seção 9.3, a equação de Legendre e a equação do oscilador linear são auto-adjuntas, mas outras, tais como as equações de Laguerre e Hermite, não são. Contudo, a teoria de equações diferenciais lineares de segunda ordem auto-adjuntas é perfeitamente geral porque **sempre** podemos transformar o operador não-auto-adjunto na forma auto-adjunta requerida. Considere a Equação (10.1) com  $p_0' \neq p_1$ . Se multiplicarmos  $\mathcal{L}$  por<sup>3</sup>

$$\frac{1}{p_0(x)} \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right],$$

obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{p_0(x)} \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] \mathcal{L}u(x) &= \frac{d}{dx} \left\{ \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] \frac{du(x)}{dx} \right\} \\ &+ \frac{p_2(x)}{p_0(x)} \cdot \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] u, \end{aligned} \quad (10.7)$$

<sup>1</sup>O operador **adjunto** guarda uma relação de certo modo forçada com a matriz **adjunta**. Uma justificativa melhor para a nomenclatura é encontrada em uma comparação do operador **auto-adjunto** (mais condições de fronteira adequadas) com a matriz **adjunta**. As propriedades significativas são desenvolvidas na Seção 10.2.

<sup>2</sup>A maior importância da forma auto-adjunta (mais condições de fronteira) ficará evidente na Seção 10.2. Além disso, serão exigidas formas auto-adjuntas para desenvolver funções de Green na Seção 10.5.

<sup>3</sup>Se multiplicarmos  $\mathcal{L}$  por  $f(x)/p_0(x)$  e então impusermos que

$$f'(x) = \frac{fp_1}{p_0},$$

de modo que o novo operador será auto-adjunto, obtemos

$$f(x) = \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right].$$

que é claramente auto-adjunta (veja a Equação (10.6)). Note  $p_0(x)$  no denominador. É por isso que impomos que  $p_0(x) \neq 0, a < x < b$ . No desenvolvimento a seguir, admitimos que  $\mathcal{L}$  foi colocado na forma auto-adjunta.

### Autofunções, Autovalores

A equação de onda de Schrödinger

$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

é o exemplo mais importante de uma equação de autovalor em Física; aqui, o operador diferencial  $\mathcal{L}$  é definido pela hamiltoniana  $H$  e não pode mais ser real, e o autovalor se torna a energia total  $E$  do sistema. A autofunção  $\psi(x)$  pode ser complexa e costuma ser denominada **função de onda**. Uma formulação variacional dessa equação de Schrödinger aparece na Seção 17.7. Com base em propriedades esféricas, cilíndricas ou algumas outras propriedades de simetria, uma EDP tridimensional ou quadridimensional ou equação de autovalor, tal como a equação de Schrödinger, pode ser separada em equações de autovalor de uma única variável cada. As Equações (9.41), (9.42), (9.50) e (9.53) são exemplos. Contudo, às vezes uma equação de autovalor toma a forma mais geral auto-adjunta

$$\mathcal{L}u(x) + \lambda w(x)u(x) = 0, \quad (10.8)$$

em que a constante  $\lambda$  é o autovalor<sup>4</sup> e  $w(x)$  é um peso conhecido ou função densidade;  $w(x) > 0$  exceto possivelmente em pontos isolados nos quais  $w(x) = 0$ . (Na Seção 10.1),  $w(x) \equiv 1$ .) Para uma dada escolha do parâmetro  $\lambda$ , uma função,  $u_\lambda(x)$ , que satisfaz a Equação (10.8) e as **condições de fronteira impostas**, é denominada **autofunção** correspondente a  $\lambda$ . A constante  $\lambda$  então é denominada **autovalor** pelos matemáticos. Não há nenhuma garantia de que existirá uma autofunção  $u_\lambda(x)$  para uma escolha arbitrária do parâmetro  $\lambda$ . Na verdade, o requisito de que haja uma autofunção costuma restringir os valores aceitáveis de  $\lambda$  a um conjunto discreto. Exemplos disso para as equações de Legendre, Hermite e Chebyshev aparecem nos exercícios da Seção 9.5. Aqui, adotamos a abordagem matemática do processo de quantização da Mecânica Quântica.

O produto interno de duas funções,  $\langle v|u \rangle = \int_a^b v^*(x)w(x)u(x) dx$ , depende da função peso e generaliza nossa definição anterior, em que  $w(x) \equiv 1$ . A função peso também modifica a definição de **ortogonalidade** de duas autofunções: elas são ortogonais se seu produto interno  $\langle u_\lambda|u_\lambda \rangle = 0$ . A função peso extra  $w(x)$  às vezes aparece como uma função de onda assintótica  $\psi_\infty$  que é um fator comum em todas as soluções de uma EDP, tal como a equação de Schrödinger, por exemplo, quando o potencial  $V(x) \rightarrow 0$ , à medida que  $x \rightarrow \infty$  em  $H = T + V$ . Podemos achar  $\psi_\infty$  quando estabelecemos  $V = 0$  na equação de Schrödinger. Uma outra fonte para  $w(x)$  pode ser uma barreira de momento angular não-zero  $l(l+1)/x^2$  em uma EDP ou EDO separada, Equação (9.65), que tem uma singularidade regular e domina em  $x \rightarrow 0$ . Nesse caso, a equação indicial, tal como a Equação (9.87) ou (9.103), mostra que a função de onda tem  $x^l$  como um fator global. Visto que a função de onda entra duas vezes em elementos de matriz e relações de ortogonalidade, as funções peso da Tabela 10.1 vêm desses fatores comuns em ambas as funções de onda radiais. É assim que surge o  $\exp(-x)$  para polinômios de Laguerre e  $x^k \exp(-x)$  para polinômios associados de Laguerre na Tabela 10.1.

**Tabela 10.1**

Equação	$p(x)$	$q(x)$	$\lambda$	$w(x)$
Legendre <sup>a</sup>	$1 - x^2$	0	$l(l+1)$	1
Legendre deslocada <sup>a</sup>	$x(1-x)$	0	$l(l+1)$	1
Legendre associada <sup>a</sup>	$1 - x^2$	$-m^2/(1-x^2)$	$l(l+1)$	1
Chebyshev I	$(1-x^2)^{1/2}$	0	$n^2$	$(1-x^2)^{-1/2}$
Chebyshev deslocada I	$[x(1-x)]^{1/2}$	0	$n^2$	$[x(1-x)]^{-1/2}$
Chebyshev II	$(1-x^2)^{3/2}$	0	$n(n+2)$	$(1-x^2)^{1/2}$
Ultrasférica (Gegenbauer)	$(1-x^2)^{\alpha+1/2}$	0	$n(n+2\alpha)$	$(1-x^2)^{\alpha-1/2}$
Bessel <sup>b</sup> , $0 \leq x \leq a$	$x$	$-n^2/x$	$a^2$	$x$
Laguerre, $0 \leq x < \infty$	$xe^{-x}$	0	$\alpha$	$e^{-x}$
Laguerre associada <sup>c</sup>	$x^{k+1}e^{-x}$	0	$\alpha - k$	$x^k e^{-x}$
Hermite, $0 \leq x < \infty$	$e^{-x^2}$	0	$2\alpha$	$e^{-x^2}$
Oscilador harmônico simples <sup>d</sup>	1	0	$n^2$	1

<sup>a</sup> $l = 0, 1, \dots, -l \leq m \leq l$  são inteiros e  $-1 \leq x \leq 1, 0 \leq x \leq 1$  para Legendre deslocada.

<sup>b</sup>A ortogonalidade de funções de Bessel é bastante especial. Compare com a Seção 11.2 para detalhes. Um segundo tipo de ortogonalidade é desenvolvido na Equação (11.174).

<sup>c</sup> $k$  é um inteiro não-negativo. Para mais detalhes, veja a Tabela 10.2.

<sup>d</sup>Isso formará a base para o Capítulo 14, série de Fourier.

<sup>4</sup>Note que essa definição matemática do autovalor difere por um sinal da utilização em Física.

**Exemplo 10.1.1** EQUAÇÃO DE LEGENDRE

A equação de Legendre é dada por

$$(1 - x^2)u'' - 2xu' + n(n + 1)u = 0, \quad -1 \leq x \leq 1. \quad (10.9)$$

Pelas Equações (10.1), (10.8) e (10.9),

$$\begin{aligned} p_0(x) &= 1 - x^2 = p, & w(x) &= 1, \\ p_1(x) &= -2x = p', & \lambda &= n(n + 1), \\ p_2(x) &= 0 = q. \end{aligned}$$

Lembre-se de que nossas soluções de série da equação de Legendre (Exercício 9.5.5)<sup>5</sup> divergiam, a menos que  $n$  fosse restrito a um dos inteiros. Isso representa uma quantização do autovalor  $\lambda$ . ■

Quando as equações do Capítulo 9 são transformadas para a forma auto-adjunta, encontramos os seguintes valores dos coeficientes e parâmetros (Tabela 10.1). O coeficiente  $p(x)$  é o coeficiente da derivada de segunda ordem da autofunção. O autovalor  $\lambda$  é o parâmetro que está disponível em um termo da forma  $\lambda w(x)u(x)$ ; qualquer dependência de  $x$  à parte a autofunção se torna a função de peso  $w(x)$ . Se houver um outro termo que contenha a autofunção (não as derivadas), o coeficiente da autofunção nesse termo adicional é identificado como  $q(x)$ . Se nenhum termo desses estiver presente,  $q(x)$  é zero.

**Exemplo 10.1.2** DÊUTERON

Uma idéia mais detalhada dos conceitos de autofunção e autovalor pode ser dada por um modelo extremamente simples do dêuteron, um estado ligado de um nêutron e próton. Por experimentação, a energia de ligação de cerca de  $2 \text{ MeV} \ll Mc^2$ , com  $M = M_p = M_n$ , a massa comum de nêutron e próton, cuja pequena diferença de massa desprezamos. Devido ao curto alcance da força nuclear, as propriedades do dêuteron não dependem muito da forma detalhada do potencial de interação. Assim, a interação nuclear nêutron-próton pode ser modelada por um poço de potencial quadrado esfericamente simétrico:  $V = V_0 < 0$  para  $0 \leq r < a$ ,  $V = 0$  para  $r > a$ . A equação de onda de Schrödinger é

$$-\frac{\hbar^2}{M} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi, \quad (10.10)$$

em que o autovalor de energia  $E < 0$  para um estado ligado. Para o estado fundamental, o momento angular orbital  $l = 0$  porque para  $l \neq 0$  há a barreira adicional de momento angular positivo. Assim, com  $\psi = \psi(r)$ , podemos escrever  $u(r) = r\psi(r)$  e, usando o Exercício 2.5.18, a equação de onda se torna

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + k_1^2 u = 0, \quad (10.11)$$

com

$$k_1^2 = \frac{M}{\hbar^2} (E - V_0) > 0 \quad (10.12)$$

para a faixa interna,  $0 \leq r < a$ . Para  $a < r < \infty$ , temos

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - k_2^2 u = 0, \quad (10.13)$$

com

$$k_2^2 = -\frac{ME}{\hbar^2} > 0. \quad (10.14)$$

A condição de fronteira de que  $\psi$  permaneça finito em  $r = 0$  implica  $u(0) = 0$  e

$$u_1(r) = \text{sen } k_1 r, \quad 0 \leq r < a. \quad (10.15)$$

No intervalo fora do poço de potencial, temos uma combinação linear das duas exponenciais,

$$u_2(r) = A \exp k_2 r + B \exp(-k_2 r), \quad a < r < \infty. \quad (10.16)$$

<sup>5</sup>Compare também com os Exercícios 5.2.15 e 12.10.

A continuidade da densidade de partícula e de corrente exige que  $u_1(a) = u_2(a)$  e que  $u_1'(a) = u_2'(a)$ . Essas **condições de junção** ou **compatibilidade** resultam em

$$\begin{aligned} \text{sen } k_1 a &= A \exp k_2 a + B \exp(-k_2 a), \\ k_1 \cos k_1 a &= k_2 A \exp k_2 a - k_2 B \exp(-k_2 a). \end{aligned} \quad (10.17)$$

A condição de que realmente tenhamos uma condição ligada próton-nêutron é que  $\int_0^\infty u^2(r) dr = 1$ . Esse vínculo pode ser cumprido se impusermos uma condição de contorno de que  $\psi(r)$  permaneça finita quando  $r \rightarrow \infty$ . E isso, por sua vez, significa que  $A = 0$ . Dividindo o par de equações precedentes (para cancelar  $B$ ), obtemos

$$\text{tg } k_1 a = -\frac{k_1}{k_2} = -\sqrt{\frac{E - V_0}{-E}}, \quad (10.18)$$

uma equação transcendental para a energia  $E$  com somente certas soluções discretas. Se  $E$  for tal que a Equação (10.18) pode ser satisfeita, nossas soluções  $u_1(r)$  e  $u_2(r)$  podem satisfazer as condições de contorno. Se a Equação (10.18) não for satisfeita, **não existe nenhuma solução aceitável**. Os valores de  $E$  para os quais a Equação (10.18) é satisfeita são os autovalores; as funções correspondentes,  $u_1$  e  $u_2$  (ou  $\psi$ ) são as autofunções. Para o problema do dêuteron existe um (e somente um) valor negativo de  $E$  que satisfaz a Equação (10.18); isto é, o dêuteron tem um e somente um estado ligado.

Agora, o que acontece se  $E$  não satisfizer a Equação (10.18), isto é, se  $E \neq E_0$  não for um autovalor? Em forma gráfica, imagine que  $E$  e, portanto,  $k_1$  sofram um ligeira variação. Para  $E = E_1 < E_0$ ,  $k_1$  é reduzido e  $\text{sen } k_1 a$  não virou para baixo o suficiente para se ajustar a  $\exp(-k_2 a)$ . As condições de junção, Equação (10.17), requerem que  $A > 0$  e que a função de onda vá a  $+\infty$  exponencialmente. Para  $E = E_2 > E_0$ ,  $k_1$  é maior,  $\text{sen } k_1 a$  alcança o pico mais cedo e desceu mais rapidamente em  $r = a$ . As condições de junção exigem que  $A < 0$ , e a função de onda vai a  $-\infty$  exponencialmente. Somente para  $E = E_0$ , um autovalor, a função de onda terá o requerido comportamento assintótico exponencial negativo (veja a Figura 10.1). ■

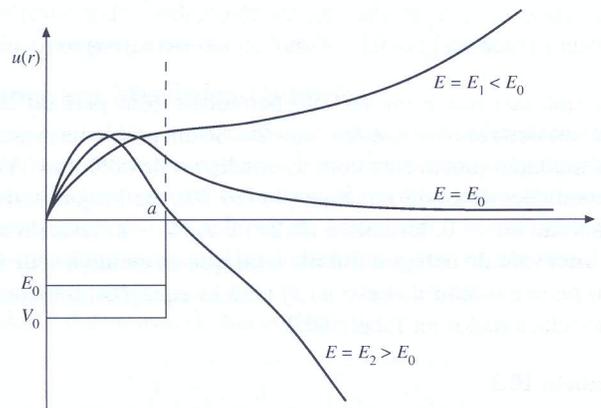


Figura 10.1: Uma autofunção de dêuteron.

### Condições de Contorno

Na definição precedente de autofunção, notou-se que a autofunção  $u_\lambda(x)$  tinha de satisfazer certas condições de fronteira impostas. O termo **condições de contorno** inclui o conceito de **condições iniciais**, como caso especial. Por exemplo, especificar a posição inicial  $x_0$  e a velocidade inicial  $v_0$  em algum problema de dinâmica corresponderia às condições de contorno de Cauchy. A única diferença na presente utilização de condições de contorno nesses problemas unidimensionais é que vamos aplicar as condições sobre **ambas** as extremidades da faixa permitida para a variável.

A forma da equação diferencial ou as condições de contorno determinadas para as soluções habitualmente garantirão que nas extremidades de nosso intervalo (isto é, na contorno, como sugerido pela Equação (10.3)) os seguintes produtos desaparecerão:

$$p(x)v^*(x) \frac{du(x)}{dx} \Big|_{x=a} = 0 \quad \text{e} \quad p(x)v^*(x) \frac{du(x)}{dx} \Big|_{x=b} = 0. \quad (10.19)$$

Aqui  $u(x)$  e  $v(x)$  são soluções da EDO particular (Equação (10.8)) que está sendo considerada. Uma razão para essa forma particular da Equação (10.19) será sugerida em breve. Se recordarmos a função de onda radial  $u$  do átomo de hidrogênio com  $u(0) = 0$  e  $du/dr \sim e^{-kr} \rightarrow 0$ , quando  $r \rightarrow \infty$ , então ambas as condições de contorno são satisfeitas. De forma semelhante, no exemplo do dêuteron (Exemplo 10.1.2),  $\text{sen } k_1 r \rightarrow 0$  quando  $r \rightarrow 0$  e  $d(e^{-k_2 r})/dr \rightarrow 0$  quando  $r \rightarrow \infty$ , ambas as condições de contorno são obedecidas. Entretanto, podemos trabalhar com um conjunto um pouco menos restritivo de condições de contorno,

$$v^* pu' \Big|_{x=a} = v^* pu' \Big|_{x=b}, \quad (10.20)$$

no qual  $u(x)$  e  $v(x)$  são soluções da equação diferencial correspondente aos mesmos autovalores ou a autovalores diferentes. A Equação (10.20) pode perfeitamente ser satisfeita se estivermos tratando com um sistema físico periódico, tal como uma rede cristalina.

As Equações (10.19) e (10.20) são escritas em termos de  $v^*$ , conjugado complexo. Quando as soluções são reais,  $v = v^*$ , e o asterisco pode ser ignorado. Contudo, em expansões exponenciais de Fourier e em Mecânica Quântica as funções serão complexas e o conjugado complexo será necessário.

### Exemplo 10.1.3 INTERVALO DE INTEGRAÇÃO $[a, b]$

Para  $\mathcal{L} = d^2/dx^2$ , uma possível equação de autovalor é

$$\frac{d^2}{dx^2} u(x) + n^2 u(x) = 0, \quad (10.21)$$

com autofunções

$$u_n = \cos nx, \quad v_m = \text{sen } mx.$$

A Equação (10.20) se torna

$$-n \text{sen } mx \text{sen } nx \Big|_a^b = 0, \quad \text{ou} \quad m \cos mx \cos nx \Big|_a^b = 0,$$

permutando  $u_n$  e  $v_m$ . Visto que  $\text{sen } mx$  e  $\cos nx$  são periódicas com período  $2\pi$  (para  $n$  e  $m$  inteiros), a Equação (10.20) é claramente satisfeita se  $a = x_0$  e  $b = x_0 + 2\pi$ . Se um problema prescrever um intervalo diferente, as autofunções e autovalores mudarão juntamente com as condições de contorno. As funções sempre devem ser escolhidas de modo que as condições de contorno (Equação (10.20), etc.) sejam satisfeitas. Para esse caso (série de Fourier), as escolhas usuais são  $x_0 = 0$ , levando a  $(0, 2\pi)$  e  $x_0 = -\pi$ , levando a  $(-\pi, \pi)$ . Aqui, e em todos os outros vários capítulos, **o intervalo de ortogonalidade é tal que as condições de contorno (Equação (10.20)) serão satisfeitas**. O intervalo  $[a, b]$  e o fator de peso  $w(x)$  para as equações diferenciais de segunda ordem mais comumente encontradas estão relacionados na Tabela 10.2. ■

**Tabela 10.2**

Equação	$a$	$b$	$w(x)$
Legendre	-1	1	1
Legendre deslocada	0	1	1
Legendre associada	-1	1	1
Chebyshev I	-1	1	$(1-x^2)^{-1/2}$
Chebyshev deslocada I	0	1	$[x(1-x)]^{-1/2}$
Chebyshev II	-1	1	$(1-x^2)^{1/2}$
Laguerre	0	$\infty$	$e^{-x}$
Laguerre associada	0	$\infty$	$x^k e^{-x}$
Hermite	$-\infty$	$\infty$	$e^{-x^2}$
Oscilador harmônico simples	0	$2\pi$	1
	$-\pi$	$\pi$	1

1. O intervalo de ortogonalidade  $[a, b]$  é determinado pelas condições de contorno da Seção 10.1.
2. A função ponderação é estabelecida colocando a EDO em forma auto-adjunta.

### Operadores Hermitianos

Agora, vamos provar uma importante propriedade do operador diferencial de segunda ordem auto-adjunto (Equação (10.8)), em conjunto com soluções  $u(x)$  e  $v(x)$  que satisfazem condições de fronteira dadas pela Equação (10.20). Isso é motivado por aplicações em Mecânica Quântica.

Integrando  $v^*$  (conjugado complexo) vezes o operador diferencial de segunda ordem auto-adjunto  $\mathcal{L}$  (operando em  $u$ ) no intervalo  $a \leq x \leq b$ , obtemos

$$\int_a^b v^* \mathcal{L}u \, dx = \int_a^b v^* (pu')' \, dx + \int_a^b v^* qu \, dx \quad (10.22)$$

usando a Equação (10.6). Integrando por partes, temos

$$\int_a^b v^* (pu')' \, dx = v^* pu' \Big|_a^b - \int_a^b v^{*'} pu' \, dx. \quad (10.23)$$

A parte integrada desaparece com a aplicação das condições de contorno (Equação (10.20)). Integrando a integral remanescente por partes uma segunda vez, temos

$$- \int_a^b v^{*'} pu' \, dx = -v^{*'} pu \Big|_a^b + \int_a^b u (pv^{*'})' \, dx. \quad (10.24)$$

Mais uma vez, a parte integrada desaparece na aplicação da Equação (10.20). Uma combinação das Equações (10.22) a (10.24) nos dá

$$\int_a^b v^* \mathcal{L}u \, dx = \int_a^b u (\mathcal{L}v)^* \, dx. \quad (10.25)$$

Essa propriedade, dada pela Equação (10.25), é expressa dizendo que o operador  $\mathcal{L}$  é hermitiano em relação às funções  $u(x)$  e  $v(x)$ , que satisfazem as condições de contorno especificadas pela Equação (10.20). Note que, se essa propriedade hermitiana resultar da condição de ser auto-adjunta em um espaço de Hilbert, então ela inclui que as condições de contorno sejam impostas a todas as funções daquele espaço.

### Operadores Hermitianos em Mecânica Quântica

O desenvolvimento desta seção focalizou os clássicos operadores diferenciais de segunda ordem da Física Matemática. Generalizando nossa teoria do operador hermitiano como exigido pela Mecânica Quântica, temos uma extensão: os operadores não precisam ser nem operadores diferenciais de segunda ordem, nem reais.  $p_x = -i\hbar(\partial/\partial x)$  será um operador hermitiano. Simplesmente admitimos (como é costumeiro em Mecânica Quântica) que temos funções de onda que satisfazem condições de contorno adequadas: desaparecem com suficiente força no infinito ou têm comportamento periódico (como em uma rede cristalina ou intensidade unitária em problemas de espalhamento). O operador  $\mathcal{L}$  é denominado **hermitiano** se

$$\int \psi_1^* \mathcal{L}\psi_2 \, d\tau = \int (\mathcal{L}\psi_1)^* \psi_2 \, d\tau. \quad (10.26)$$

À parte a simples extensão para quantidades complexas, essa definição é idêntica à Equação (10.25).

O **adjunto**  $A^\dagger$  de um operador  $A$  é definido por

$$\int \psi_1^* A^\dagger \psi_2 \, d\tau \equiv \int (A\psi_1)^* \psi_2 \, d\tau. \quad (10.27)$$

Essa expressão generaliza nossa definição clássica de operadores orientados de derivada de segunda ordem da Equação (10.5). Aqui, o adjunto é definido em termos da integral resultante, com o  $A^\dagger$  como parte do integrando. É claro que, se  $A = A^\dagger$  (**auto-adjunto**) e satisfaz as condições de contorno já mencionadas, então  $A$  é hermitiano.

O **valor esperado** de um operador  $\mathcal{L}$  é definido como

$$\langle \mathcal{L} \rangle = \int \psi^* \mathcal{L}\psi \, d\tau. \quad (10.28a)$$

Na estrutura da Mecânica Quântica  $\langle \mathcal{L} \rangle$  corresponde ao resultado de uma medição da quantidade física representada por  $\mathcal{L}$  quando o sistema físico está em um estado definido pela função de onda  $\psi$ . Se exigirmos

que  $\mathcal{L}$  seja hermitiano, é fácil mostrar que  $\langle \mathcal{L} \rangle$  é real (como seria de esperar de uma medição em uma teoria física). Tomando o conjugado complexo da Equação (10.28a), obtemos

$$\langle \mathcal{L} \rangle^* = \left[ \int \psi^* \mathcal{L} \psi d\tau \right]^* = \int \psi \mathcal{L}^* \psi^* d\tau.$$

Rearranjando os fatores no integrando, temos

$$\langle \mathcal{L} \rangle^* = \int (\mathcal{L} \psi)^* \psi d\tau.$$

Então, aplicando nossa definição de operador hermitiano, Equação (10.26), obtemos

$$\langle \mathcal{L} \rangle^* = \int \psi^* \mathcal{L} \psi d\tau = \langle \mathcal{L} \rangle, \quad (10.28b)$$

ou  $\langle \mathcal{L} \rangle$  é real. Vale a pena observar que  $\psi$  não é necessariamente uma autofunção de  $\mathcal{L}$ .

### Exercícios

- 10.1.1** Mostre que a EDO de Laguerre, Equação (13.52), pode ser posta em forma auto-adjunta multiplicando por  $e^{-x}$  e que  $w(x) = e^{-x}$  é a função de peso.
- 10.1.2** Mostre que a EDO de Hermite, Equação (13.10), pode ser posta em forma auto-adjunta multiplicando por  $e^{-x^2}$  e que isso dá  $w(x) = e^{-x^2}$  como a função densidade adequada.
- 10.1.3** Mostre que a EDO de Chebyshev (tipo I), Equação (13.100), pode ser posta em forma auto-adjunta multiplicando por  $(1-x^2)^{-1/2}$  e que isso dá  $w(x) = (1-x^2)^{-1/2}$  como a função densidade adequada.
- 10.1.4** Mostre o seguinte quando a equação diferencial linear de segunda ordem é expressa em forma auto-adjunta:
- (a) O wronskiano é igual a uma constante dividida pelo coeficiente inicial  $p$ :

$$W(x) = \frac{C}{p(x)}.$$

- (b) Uma segunda solução é dada por

$$y_2(x) = C y_1(x) \int^x \frac{dt}{p(t)[y_1(t)]^2}.$$

- 10.1.5**  $U_n(x)$ , o polinômio de Chebyshev (tipo II), satisfaz a EDO, Equação (13.101),

$$(1-x^2)U_n''(x) - 3xU_n'(x) + n(n+2)U_n(x) = 0.$$

- (a) Localize os pontos singulares que aparecem no plano finito e mostre se são regulares ou irregulares.
- (b) Ponha essa equação em forma auto-adjunta.
- (c) Identifique o autovalor completo.
- (d) Identifique a função de peso.
- 10.1.6** Para o caso muito especial  $\lambda = 0$  e  $q(x) = 0$  a equação de autovalor adjunta se torna

$$\frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] = 0,$$

satisfeita por

$$\frac{du}{dx} = \frac{1}{p(x)}.$$

Use essa expressão para obter uma "segunda" solução para o seguinte:

- (a) Equação de Legendre,

- (b) Equação de Laguerre,  
(c) Equação de Hermite.

Resposta: (a)  $u_2(x) = \frac{1}{2} \ln \frac{1+x}{1-x}$ ,  
 (b)  $u_2(x) - u_2(x_0) = \int_{x_0}^x e^t \frac{dt}{t}$ ,  
 (c)  $u_2(x) = \int_0^x e^{t^2} dt$ .

Essas segundas soluções ilustram o comportamento divergente encontrado em uma segunda solução.

*Nota:* Em todos os três casos,  $u_1(x) = 1$ .

**10.1.7** Dado que  $\mathcal{L}u = 0$  e  $g\mathcal{L}u$  é auto-adjunta, mostre que para o operador adjunto  $\bar{\mathcal{L}}$ ,  $\bar{\mathcal{L}}(gu) = 0$ .

**10.1.8** Para um operador diferencial de segunda ordem  $\mathcal{L}$  que é auto-adjunto mostre que

$$\int_a^b [y_2 \mathcal{L}y_1 - y_1 \mathcal{L}y_2] dx = p(y_1' y_2 - y_1 y_2') \Big|_a^b.$$

**10.1.9** Mostre que, se uma função  $\psi$  tiver de satisfazer a equação de Laplace em uma região finita do espaço e satisfazer condições de contorno de Dirichlet sobre toda a superfície fechada de ligação, então  $\psi$  é única.

*Sugestão:* Uma das formas do teorema de Green, Seção 1.11, será útil.

**10.1.10** Considere que as soluções das equações de Legendre, Chebyshev, Hermite e Laguerre são polinômios. Mostre que os intervalos de integração que garantem que as condições de contorno do operador hermitiano serão satisfeitas são

- (a) Legendre  $[-1, 1]$ ,      (b) Chebyshev  $[-1, 1]$ ,  
 (c) Hermite  $(-\infty, \infty)$ ,      (d) Laguerre  $[0, \infty)$ .

**10.1.11** Dentro da estrutura da Mecânica Quântica (Equações (10.26) e seguintes), mostre que os seguintes operadores são hermitianos:

- (a) momento  $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla \equiv -i \frac{\hbar}{2\pi} \nabla$   
 (b) momento angular  $\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla \equiv -i \frac{\hbar}{2\pi} \mathbf{r} \times \nabla$ .

*Sugestão:* Em forma cartesiana  $\mathbf{L}$  é uma combinação linear de operadores hermitianos não-comutativos.

**10.1.12** (a)  $A$  é um operador não-hermitiano. No sentido das Equações (10.26) e (10.27), mostre que

$$A + A^\dagger \quad \text{e} \quad i(A - A^\dagger)$$

são operadores hermitianos.

(b) Usando o resultado precedente, mostre que todo operador não-hermitiano pode ser escrito como uma combinação de dois operadores hermitianos.

**10.1.13**  $U$  e  $V$  são dois operadores arbitrários, não necessariamente hermitianos. No sentido da Equação (10.27), mostre que

$$(UV)^\dagger = V^\dagger U^\dagger.$$

Note a semelhança com matrizes hermitianas adjuntas.

*Sugestão:* Aplique a definição de operador adjunto, Equação (10.27).

**10.1.14** Prove que o produto de dois operadores hermitianos é hermitiano (Equação (10.26)) se, e somente se, os dois operadores comutarem.

**10.1.15**  $A$  e  $B$  são operadores não-comutativos da Mecânica Quântica:

$$AB - BA = iC.$$

Mostre que  $C$  é hermitiano. Admita que as condições de contornos adequadas são satisfeitas.

**10.1.16** O operador  $\mathcal{L}$  é hermitiano. Mostre que  $\langle \mathcal{L}^2 \rangle \geq 0$ .

**10.1.17** Um valor esperado da Mecânica Quântica é definido por

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(x) A \psi(x) dx,$$

em que  $A$  é um operador linear. Mostre que exigir que  $\langle A \rangle$  seja real significa que  $A$  deve ser hermitiano, em relação a  $\psi(x)$ .

**10.1.18** Pela definição de adjunto, Equação (10.27), mostre que  $A^{\dagger\dagger} = A$  no sentido de que  $\int \psi_1^* A^{\dagger\dagger} \psi_2 d\tau = \int \psi_1^* A \psi_2 d\tau$ . O adjunto do adjunto é o operador original.  
*Sugestão:* As funções  $\psi_1$  e  $\psi_2$  da Equação (10.27) representam uma classe de funções. Os índices 1 e 2 podem ser permutados ou substituídos por outros índices.

**10.1.19** A equação de onda de Schrödinger para o deuteron (com um potencial de Woods-Saxon) é

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi + \frac{V_0}{1 + \exp[(r - r_0)/a]} \psi = E \psi.$$

Aqui,  $E = -2,224$  MeV,  $a$  é um "parâmetro de espessura",  $0,4 \times 10^{-13}$  cm. Expressando comprimentos em fermis ( $10^{-13}$  cm) e energias em milhões de elétron-volts (MeV), podemos reescrever a equação de onda como

$$\frac{d^2}{dr^2}(r\psi) + \frac{1}{41,47} \left[ E - \frac{V_0}{1 + \exp((r - r_0)/a)} \right] (r\psi) = 0.$$

Admite-se que  $E$  é conhecido por experimentação. A meta é achar  $V_0$  para um valor especificado de  $r_0$  (digamos,  $r_0 = 2,1$ ). Se fizermos  $y(r) = r\psi(r)$ , então  $y(0) = 0$  e consideramos  $y'(0) = 1$ . Ache  $V_0$ , tal que  $y(20,0) = 0$ . (Isso deveria ser  $y(\infty)$ , mas  $r = 20$  está distante o bastante da faixa das forças nucleares para se aproximar do infinito.)

Resposta: Para  $a = 0,4$  e  $r_0 = 2,1$  fm,  $V_0 = -34,159$  MeV.

**10.1.20** Determine o parâmetro de poço de potencial nuclear  $V_0$  do Exercício 10.1.19 como uma função de  $r_0$  para  $r = 2,00(0,05)2,25$  fermis. Expresse seus resultados como uma lei de potências

$$|V_0| r_0^\nu = k.$$

Determine o expoente  $\nu$  e a constante  $k$ . Essa formulação de lei de potências é útil para interpolação precisa.

**10.1.21** No Exercício 10.1.19 admitimos que 20 fermis era uma boa aproximação de infinito. Verifique isso calculando  $V_0$  para  $r\psi(r) = 0$  em (a)  $r = 15$ , (b)  $r = 20$ , (c)  $r = 25$  e (d)  $r = 30$ . Esboce seus resultados. Considere  $r_0 = 2,10$  e  $a = 0,4$  (fermis).

**10.1.22** Para uma partícula quântica em movimento em um poço de potencial,  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ , a equação de onda de Schrödinger é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x),$$

ou

$$\frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} - z^2 \psi(z) = -\frac{2E}{\hbar\omega} \psi(z),$$

em que  $z = (m\omega/\hbar)^{1/2} x$ . Uma vez que o operador é par, esperamos soluções de paridade definida. Para as condições iniciais a seguir, integre desde a origem e determine a constante mínima  $2E/\hbar\omega$  que levará a  $\psi(\infty) = 0$  em cada caso. (Você pode considerar  $z = 6$  uma aproximação do infinito.)

(a) Para uma autofunção par,

$$\psi(0) = 1, \quad \psi'(0) = 0.$$

(b) Para uma autofunção ímpar,

$$\psi(0) = 0, \quad \psi'(0) = 1.$$

*Nota:* Soluções analíticas aparecem na Seção 13.1.

## 10.2 Operadores Hermitianos

Operadores hermitianos, ou auto-adjuntos, com condições de contorno adequadas, têm três propriedades que são de extrema importância na Física, tanto clássica como quântica.

1. Os autovalores de um operador hermitiano são reais.
2. Um operador hermitiano possui um conjunto ortogonal de autofunções.
3. As autofunções de um operador hermitiano formam um conjunto completo.<sup>6</sup>

### Autovalores Reais

Passamos a provar as duas primeiras dessas três propriedades. Seja

$$\mathcal{L}u_i + \lambda_i w u_i = 0. \quad (10.29)$$

Admitindo a existência de um segundo autovalor e autofunção,

$$\mathcal{L}u_j + \lambda_j w u_j = 0. \quad (10.30)$$

Então, tomando o conjugado complexo, obtemos

$$\mathcal{L}^* u_j^* + \lambda_j^* w u_j^* = 0. \quad (10.31)$$

Aqui,  $w(x) \geq 0$  é uma função real. Mas permitimos que  $\lambda_k$ , os autovalores, e  $u_k$ , as autofunções, sejam complexos. Multiplicando a Equação (10.29) por  $u_j^*$  e a Equação (10.31) por  $u_i$  e então subtraindo, temos

$$u_j^* \mathcal{L}u_i - u_i \mathcal{L}^* u_j^* = (\lambda_j^* - \lambda_i) w u_i u_j^*. \quad (10.32)$$

Integramos sobre o intervalo  $a \leq x \leq b$ :

$$\int_a^b u_j^* \mathcal{L}u_i dx - \int_a^b u_i \mathcal{L}^* u_j^* dx = (\lambda_j^* - \lambda_i) \int_a^b u_i u_j^* w dx. \quad (10.33)$$

Uma vez que  $\mathcal{L}$  é hermitiano, o lado esquerdo desaparece, pela Equação (10.26), e

$$(\lambda_j^* - \lambda_i) \int_a^b u_i u_j^* w dx = 0. \quad (10.34)$$

Se  $i = j$ , a integral não pode desaparecer [ $w(x) > 0$ , à parte pontos isolados], exceto no caso trivial de  $u_i = 0$ . Daí, o coeficiente  $(\lambda_i^* - \lambda_i)$  deve ser zero,

$$\lambda_i^* = \lambda_i, \quad (10.35)$$

o que diz que o autovalor é real. Uma vez que  $\lambda_i$  pode representar qualquer um dos autovalores, isso prova a primeira propriedade. Isso é exatamente análogo à natureza dos autovalores de matrizes reais simétricas (e hermitianas). (Compare com a Seção 3.5.)

A análoga da decomposição espectral de uma matriz simétrica real na Seção 3.5 para um operador hermitiano  $\mathcal{L}$  com um conjunto discreto de autovalores  $\lambda_i$  adquire forma

$$\mathcal{L} = \sum_i \lambda_i |u_i\rangle \langle u_i|, \quad f(\mathcal{L}) = \sum_i f(\lambda_i) |u_i\rangle \langle u_i|$$

com autovetores  $|u_i\rangle$  e qualquer função  $f$  infinitamente diferenciável.

Autovalores reais de operadores hermitianos têm um significado fundamental em Mecânica Quântica, onde correspondem a quantidades mensuráveis com precisão como energia e momento angular. Sendo a teoria formulada em termos de operadores hermitianos, essa prova de autovalores reais garante que ela preverá números reais para essas quantidades físicas mensuráveis. Na Seção 17.8 veremos que o conjunto de autovalores reais tem um limite inferior (para problemas não-relativistas).

<sup>6</sup>Essa terceira propriedade não é universal. Ela vale para nossos operadores diferenciais lineares de segunda ordem na forma (auto-adjunta) de Sturm-Liouville. A completude é definida e discutida na Seção 10.4. Uma prova de que as autofunções de nossas equações diferenciais lineares de segunda ordem auto-adjuntas formam um conjunto complexo pode ser desenvolvida pelo cálculo de variações da Seção 17.8.

### Autofunções Ortogonais

Se agora considerarmos  $i \neq j$  e se  $\lambda_i \neq \lambda_j$  na Equação (10.34), a integral do produto de duas autofunções diferentes deve desaparecer:

$$\int_a^b u_i u_j^* w \, dx = 0. \quad (10.36)$$

Esta condição, denominada **ortogonalidade**, é o análogo contínuo de um produto escalar de dois vetores se anular<sup>7</sup>. Dizemos que as autofunções  $u_i(x)$  e  $u_j(x)$  são ortogonais em relação à função de peso  $w(x)$  sobre o intervalo  $[a, b]$ . A Equação (10.36) constitui uma prova parcial da segunda propriedade de nossos operadores hermitianos. Mais uma vez deve ser notada a exata analogia com a análise matricial. De fato, podemos estabelecer uma correspondência um-para-um entre essa teoria de equações diferenciais de Sturm-Liouville e o tratamento de matrizes hermitianas. Essa correspondência tem sido historicamente significativa para estabelecer a equivalência matemática de matrizes mecânicas desenvolvidas por Heisenberg e a mecânica de ondulatória desenvolvida por Schrödinger. Hoje, as duas abordagens diversas estão fundidas na teoria da Mecânica Quântica, e a formulação matemática que for mais conveniente para um problema particular é usada para esse problema. Na verdade, as alternativas matemáticas não param por aqui. Equações integrais, Capítulo 16, são uma terceira abordagem equivalente e às vezes mais conveniente ou poderosa.

Essa prova de ortogonalidade não é bem completa. Há um furo, porque podemos ter  $u_i \neq u_j$ , mas ainda assim ter  $\lambda_i = \lambda_j$ . Tal caso é denominado **degenerado**. Ilustrações de degenerescência são dadas no final desta seção. Se  $\lambda_i = \lambda_j$ , a integral na Equação (10.34) não precisa desaparecer. Isso significa que autofunções independentes correspondentes ao mesmo autovalor não são automaticamente ortogonais e que é preciso procurar algum outro método para obter um conjunto ortogonal. Embora as autofunções nesse caso degenerado possam não ser ortogonais, elas sempre podem ser transformadas em ortogonais. Na próxima seção desenvolvemos um método para fazer isso. Veja também a Equação (4.21) para degenerescência devida à simetria.

Nos capítulos subsequentes veremos que ter um dado conjunto de funções ortogonais é exatamente tão desejável quanto ter um sistema de coordenadas ortogonais. Podemos trabalhar com funções não-ortogonais, mas elas provavelmente mostrarão ser tão confusas quanto um sistema de coordenadas oblíquas.

### Exemplo 10.2.1 SÉRIE DE FOURIER — ORTOGONALIDADE

Continuando o Exemplo 10.1.3, a equação de autovalor, Equação (10.21),

$$\frac{d^2}{dx^2} y(x) + n^2 y(x) = 0,$$

pode descrever quanticamente uma partícula dentro de uma caixa ou talvez uma corda de violino em vibração, um oscilador harmônico clássico com autofunções degeneradas —  $\cos nx$ ,  $\sin nx$  — e autovalores  $n^2$ , sendo  $n$  um inteiro.

Com  $n$  real (aqui considerado inteiro), as integrais de ortogonalidade se tornam

$$(a) \int_{x_0}^{x_0+2\pi} \sin mx \sin nx \, dx = C_n \delta_{nm},$$

$$(b) \int_{x_0}^{x_0+2\pi} \cos mx \cos nx \, dx = D_n \delta_{nm},$$

$$(c) \int_{x_0}^{x_0+2\pi} \sin mx \cos nx \, dx = 0.$$

Para um intervalo de  $2\pi$ , a análise precedente garante o delta de Kronecker em (a) e (b) mas não o zero em (c) porque (c) pode envolver autofunções degeneradas. Contudo, uma inspeção mostra que (c) sempre desaparece para todos os  $m$  e  $n$  inteiros.

<sup>7</sup>Pela definição da integral de Riemann,

$$\int_a^b f(x)g(x) \, dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \sum_{i=1}^N f(x_i)g(x_i)\Delta x \right),$$

$x_0 = a$ , em que  $x_N = b$  e  $x_i - x_{i-1} = \Delta x$ . Se interpretarmos  $f(x_i)$  e  $g(x_i)$  como as  $i$ -ésimas componentes de um vetor de  $N$  componentes, então esse somatório (e, portanto, essa integral) corresponde diretamente a um produto escalar de vetores, Equação (1.24). O produto escalar nulo é a condição para **ortogonalidade** dos vetores ou funções.

Nossa teoria de Sturm-Liouville nada diz sobre os valores de  $C_n$  e  $D_n$  porque EDOs homogêneas têm soluções cujo *scaling* é arbitrário. O cálculo propriamente dito resulta em

$$C_n = \begin{cases} \pi, & n \neq 0, \\ 0, & n = 0, \end{cases} \quad D_n = \begin{cases} \pi, & n \neq 0, \\ 2\pi, & n = 0. \end{cases}$$

Essas integrais de ortogonalidade formam a base das séries de Fourier desenvolvidas no Capítulo 14.

### Exemplo 10.2.2 EXPANSÃO EM AUTOFUNÇÕES ORTOGONAIS — ONDA QUADRADA

A propriedade de completude (veja a (Equação 1.190) e a Seção 10.4) significa que certas classes de funções (por exemplo, contínuas por seção ou contínuas por partes) podem ser representadas por uma série de autofunções ortogonais. Considere a forma de onda quadrada

$$f(x) = \begin{cases} \frac{h}{2}, & 0 < x < \pi, \\ -\frac{h}{2}, & -\pi < x < 0. \end{cases} \quad (10.37)$$

Essa função pode ser expandida em qualquer dentre uma variedade de autofunções — Legendre, Hermite, Chebyshev, e assim por diante. A escolha da autofunção é feita com base na conveniência ou em uma aplicação. Para ilustrar a técnica de expansão, vamos escolher as autofunções do Exemplo 10.2.1,  $\cos nx$  e  $\sin nx$ . A série de autofunção é escrita, por conveniência (e por convenção), como

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{m=1}^{\infty} (a_m \cos mx + b_m \sin mx).$$

Multiplicando  $f(t)$  por  $\cos nt$  ou  $\sin nt$  e integrando, somente o  $n$ ésimo termo sobrevive, pelas integrais de ortogonalidade do Exemplo 10.2.1, por isso resultando os coeficientes

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(t) \cos nt \, dt, \quad b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(t) \sin nt \, dt, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Substituição direta de  $\pm h/2$  por  $f(t)$  resulta em

$$a_n = 0,$$

o que é esperado aqui por causa da anti-simetria,  $f(-x) = -f(x)$ , e

$$b_n = \frac{h}{n\pi} (1 - \cos n\pi) = \begin{cases} 0, & n \text{ par}, \\ \frac{2h}{n\pi}, & n \text{ ímpar}. \end{cases}$$

Daí, a expansão (Fourier) de autofunção da onda quadrada é

$$f(x) = \frac{2h}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin(2n+1)x}{2n+1}. \quad (10.38)$$

Exemplos adicionais, usando outras autofunções, aparecem nos Capítulos 11 e 12. ■

### Degenerescência

O conceito de degenerescência já foi apresentado antes. Se  $N$  autofunções linearmente independentes correspondem ao mesmo autovalor, diz-se que o autovalor é  $N$  vezes degenerado. Uma ilustração particularmente simples é dada pelos autovalores e autofunções da equação do oscilador harmônico clássico, Exemplo 10.2.1. Para cada autovalor  $n^2$ , há duas soluções possíveis:  $\sin nx$  e  $\cos nx$  (e qualquer combinação linear, sendo  $n$  um inteiro). Dizemos que as autofunções são degeneradas ou que o autovalor é degenerado.

Um exemplo mais complicado é dado pelo sistema físico de um elétron em um átomo (tratamento não-relativista, desprezando o spin). Pela equação de Schrödinger, Equação (13.84), para o hidrogênio, a energia total do elétron é nosso autovalor. Podemos denominá-lo  $E_{nLM}$  usando os números quânticos  $n$ ,  $L$ , e  $M$  como

índices. Para cada conjunto distinto de números quânticos  $(n, L, M)$  há uma autofunção linearmente independente  $\psi_{nLM}(r, \theta, \varphi)$ . Para o hidrogênio, a energia  $E_{nLM}$  é independente de  $L$  e  $M$ , refletindo a simetria esférica (e  $SO(4)$ ) do potencial de Coulomb. Com  $0 \leq L \leq n-1$  e  $-L \leq M \leq L$ , o autovalor é  $n^2$  vezes degenerado (incluir o spin do elétron elevaria esse fator para  $2n^2$ ). Em átomos com mais de um elétron, o potencial eletrostático não é mais um simples potencial  $r^{-1}$ . A energia depende de  $L$  tanto quanto de  $n$ , embora **não** de  $M$ ;  $E_{nLM}$  ainda é  $(2L+1)$  vezes degenerescência. Essa degenerescência — devida à invariância rotacional do potencial — pode ser removida aplicando-se um campo magnético externo, quebrando a simetria esférica e dando origem ao efeito de Zeeman. Como regra, as autofunções formam um espaço de Hilbert, isto é, um espaço vetorial completo de funções com uma métrica definida pelo produto interno (veja a Seção 10.4 para mais detalhes e exemplos).

Muitas vezes uma simetria subjacente, tal como invariância rotacional, está causando as degenerescências. Estados que pertencem ao mesmo autovalor de energia então formarão um múltiplo ou representação do grupo de simetria. Os poderosos métodos teóricos de grupos são tratados no Capítulo 4 com certo detalhe.

### Exercícios

**10.2.1** As funções  $u_1(x)$  e  $u_2(x)$  são autofunções do mesmo operador hermitiano, mas para valores autovalores distintos  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$ . Prove que  $u_1(x)$  e  $u_2(x)$  são linearmente independentes.

**10.2.2** (a) Os vetores  $e_n$  são ortogonais um ao outro:  $e_n \cdot e_m = 0$ , para  $n \neq m$ . Mostre que eles são linearmente independentes.

(b) As funções  $\psi_n(x)$  são ortogonais uma à outra no intervalo  $[a, b]$  e em relação à função de pesos  $w(x)$ . Mostre que as  $\psi_n(x)$  são linearmente independentes.

**10.2.3** Dado que

$$P_1(x) = x \quad \text{e} \quad Q_0(x) = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1+x}{1-x} \right)$$

são soluções da equação diferencial de Legendre correspondentes a diferentes autovalores:

(a) Avalie sua integral de ortogonalidade

$$\int_{-1}^1 \frac{x}{2} \ln \left( \frac{1+x}{1-x} \right) dx.$$

(b) Explique por que essas duas funções não são ortogonais, isto é, por que a prova de ortogonalidade não se aplica.

**10.2.4**  $T_0(x) = 1$  e  $V_1(x) = (1-x^2)^{1/2}$  são soluções da equação diferencial de Chebyshev correspondentes a diferentes autovalores. Explique, em termos das condições de contorno, por que essas duas funções não são ortogonais.

**10.2.5** (a) Mostre que as derivadas de primeira ordem dos polinômios de Legendre satisfazem a equação diferencial auto-adjunta com autovalor  $\lambda = n(n+1) - 2$ .

(b) Essas derivadas de polinômios de Legendre satisfazem uma relação de ortogonalidade

$$\int_{-1}^1 P'_m(x) P'_n(x) (1-x^2) dx = 0, \quad m \neq n.$$

*Nota:* Na Seção 12.5  $(1-x^2)^{1/2} P'_n(x)$  será denominado polinômio associado de Legendre,  $P_n^1(x)$ .

**10.2.6** Um conjunto de funções  $u_n(x)$  satisfaz a equação de Sturm-Liouville

$$\frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{d}{dx} u_n(x) \right] + \lambda_n w(x) u_n(x) = 0.$$

As funções  $u_m(x)$  e  $u_n(x)$  satisfazem condições de contorno que levam à ortogonalidade. Os autovalores correspondentes  $\lambda_m$  e  $\lambda_n$  são distintos. Prove que, para condições de contorno adequadas,  $u'_m(x)$  e  $u'_n(x)$  são ortogonais com  $p(x)$  como uma função de peso.

**10.2.7** Um operador linear  $A$  tem  $n$  autovalores distintos e  $n$  autofunções correspondentes:  $A\psi_i = \lambda_i\psi_i$ . Mostre que as  $n$  autofunções são linearmente independentes.  $A$  não é necessariamente hermitiano.

*Sugestão:* Admita dependência linear — que  $\psi_n = \sum_{i=1}^{n-1} a_i \psi_i$ . Use essa relação e a equação de autofunção de operador, primeiro em uma ordem e então na ordem inversa. Mostre que resulta uma contradição.