6 O Formalismo da Mecânica Quântica, Parte II

6.2 Operadores

Um operador é uma expressão que atua sobre uma função para produzir outra função. Podemos escrever isso da seguinte forma

$$\mathbf{A}\, f(x) = F(x) \quad (1)$$

Aqui temos alguns exemplos: $\mathbf{A}$ = d/dx, d^2/dx^2, sen, ∫ dx, √, x^2 etc.

Os Operadores podem combinar-se para formar outros operadores. Os primeiros operadores encontramos na seção 3.1 falando dos observáveis e dos operadores correspondentes. Também a equação de Schrödinger, conf. seç. 3.2, Eq. (3), podemos transformar em uma equação com operador, pois

$$(- \hbar^2/2m \cdot d^2/dx^2 + U(x))\psi(x) = E\psi \quad (2)$$

pode ser escrita como $\mathbf{H}\,\psi = E\,\psi$, onde foi introduzido o operador hamiltoniano

$$\mathbf{H} := - \hbar^2/2m \cdot d^2/dx^2 + U(x) \quad (3)$$

(O nome vem da similitude do operador com a função de Hamilton na mecânica clássica. Observa que a função ψ não pode ser cancelada na equação $\mathbf{H}\psi = E\psi$, pois $\mathbf{H}$ não é um simples multiplicador escalar como a energia E ao lado direito da Eq. 2)

Os operadores constituem entes com existência e propriedades independentes da função sobre a qual eles operam. É preciso determinar quais são as leis que devemos usar para somá-los, multiplicá-los etc., ou seja, precisamos conhecer a álgebra dos operadores. O problema de encontrar o álgebra dos operadores se simplifica grandemente demonstrando que todo operador pode ser posto em forma de matriz, e, em conseqüência, uma operação entre operadores se traduzirá em uma operação equivalente entre matrizes.

As definições relativo aos operadores coincidem com aqueles que se referem às transformações. Neste sentido não há diferencia entre operadores e transformações. Uma **transformação** linear **L** de R^n em R^m é uma função que associa a cada **u** em R^n um único **L**(**u**) em R^m. Se n = m, a transformação linear **L**: $R^n \rightarrow R^n$ é chamada de um **operador** linear em R^n.

6.2.1 Álgebra dos operadores

Quando queremos manipular operadores, precisamos tomar conta da sua álgebra. Temos que saber como operadores *arbitrários* atuam sobre funções e sobre si próprios.

As definições de **soma** e **diferença** de dois operadores **A** e **B** (atuando sobre uma função qualquer) têm a mesma aparência como a definição análoga para números e funções.

A **soma** e a **diferença** de dois operadores são definidas por

$$(\mathbf{A} \pm \mathbf{B})\, f = \mathbf{A}\, f \pm \mathbf{B}\, f \quad (4)$$

Similarmente, tem-se para o **produto** de dois operadores a seguinte definição

$$(\mathbf{AB})\, f = \mathbf{A}(\mathbf{B}\, f) \quad (5)$$

Geralmente, se verifica que o produto não é comutativo, ou seja os operadores (**AB)** e (**BA)** podem não ser iguais, como por exemplo (**x d/dx**) e (**d/dx x**), onde **A** = **x** e **B** = **d/dx**. Temos

$$x(d/dx\, f) = x\, df/dx, \text{ mas } d/dx(x\, f) = f + x\, df/dx$$

Neste caso, dizemos que o **comutador** [**A,B**], definido por

$$[\mathbf{A},\mathbf{B}] := \mathbf{AB} - \mathbf{BA}, \quad (6)$$

não se anula. Se **A** e **B** comutam, então [**A**,**B**] = 0.

Exemplo:

Calcule o comutador [x, d/dx]

Resposta:

$[x, d/dx]f = (x\, d/x - d/dx\, x)f = x\, df/dx - d(xf)/dx = x f' - f - xf' = -f$

ou simplesmente $[x, d/dx] = -1$. Logo, o comutador entre x e d/dx é -1. Normalmente, não se indica a função f, mas é necessário tê-la em mente quando se efetua o cálculo do comutador.

Exemplo:

Calcule o comutador $[\hbar/i\, d/dx, -\hbar^2/2m\, d^2/dx^2]$

Resposta:

$$[\hbar/i\, d/dx, -\hbar^2/2m\, d^2/dx^2]\, f = -\hbar^2/2mi \cdot (d/dx\, d^2/dx^2 - d^2/dx^2\, d/dx)\, f$$

$$= -\hbar^3/2mi\, (f''' - f''') = 0$$

Logo, concluímos que o operador linear **p** comuta com o operador da energia cinética $\mathbf{p}^2/2m$.

> Do Princípio da Incerteza, veja 3.4, podemos deduzir que é possível medirmos duas observáveis simultaneamente e (em princípio!) com exatidão ilimitada, se os operadores correspondentes comutarem. Podemos, pois, concluir que a energia cinética e o momento linear de uma partícula podem ser medidas simultaneamente. (Se pode demonstrar que para dois operadores **A**, **B** vale $\Delta\mathbf{A}\, \Delta\mathbf{B} \geq \langle C\rangle/2$, onde C é um operador hermitiano. No caso do primeiro exemplo escolhemos C = ħ para obter $\Delta\mathbf{x}\, \Delta\mathbf{p}_x \geq \hbar/2$.)

Demonstramos rápido que $\mathbf{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ e $\mathbf{x} = x$ são dois operadores que não comutam, e que p_x e x não podem ser medidos com exatidão arbitrária.

Temos: $(\mathbf{p}_x\mathbf{x})\, f = -i\hbar\partial/\partial x(xf) - i\hbar f$ e $(\mathbf{x}\mathbf{p}_x)\, f = x(-i\hbar\partial/\partial x)f = -i\hbar x\partial f/\partial x$

e então $(\mathbf{x}\mathbf{p}_x - \mathbf{p}_x\mathbf{x})f = i\hbar f\, \mathbf{I}$ ou, tirando o operador identidade **I** e a função f,

$$(\mathbf{x}\mathbf{p}_x - \mathbf{p}_x\mathbf{x}) = i\hbar$$

Logo, vemos que o operador linear $\mathbf{p}_x$ e o operador $\mathbf{x}$ do vetor posição não comutam e que as duas observáveis p_x e x não podem ser medidas simultaneamente. (A coordenada y e o momento p_x sim podem ser medidas simultaneamente, pois podemos mostrar que $(\mathbf{y}\mathbf{p}_x - \mathbf{p}_x\mathbf{y}) = 0$.)

6.2.2 Definições

Operadores lineares

O operador **A** é dito linear se, e somente se, ele possuir as seguinte propriedade

$$\mathbf{A}[c_1f(x) + c_2g(x)] = c_1\mathbf{A}f(x) + c_2\mathbf{A}g(x) \quad (7)$$

Os constantes c_1, c_2 podem ser complexos.

Exemplo:

$f(x) = x$, $g(x) = e^{-x}$. Vamos verificar se o operador diferencial $\mathbf{A} = d^2/dx^2$ é linear.

$\mathbf{A}[c_1f(x) + c_2g(x)] = d^2/dx^2\ [c_1x + c_2e^{-x}] = c_1\cdot 0 + c_2\cdot e^{-x} = -c_2e^{-x}$

$c_1\mathbf{A}f(x) + c_2\mathbf{A}g(x) = c_1d^2/dx^2\ (x) + c_2d^2/dx^2\ e^{-x} = c_1\cdot 0 + c_2\cdot e^{-x} = -c_2e^{-x}$

$\rightarrow$ $\mathbf{A} = d^2/dx^2$ é um operador linear.

A raiz quadrada não é um operador linear, pois $\sqrt{(x+e^{-x})} \neq \sqrt{x} + \sqrt{e^{-x}}$ e $\sqrt{cx} \neq c\sqrt{x}$.

Operadores hermitianos

Entre os operadores lineares existe um grupo de operadores que são de grande importância na mecânica quântica, são eles os operadores **hermitianos**. (Um secreto: Todos os operadores na mecânica quântica são hermitianos.) **Charles Hermite**, 24. 12. 1822 - Dieuze (Moselle) 14.1. 1901 - Paris.

São três as propriedades dos operadores hermitianos que são de máxima importância:

1. Os operadores hermitianos possuem autovalores reais

2. As autofunções de um operador hermitiano são, ou podem ser escolhidas de tal forma que sejam ortogonais.

3. As autofunções de um operador linear hermitiano formam um conjunto completo e ortogonal de funções

Antes de demonstrar as duas primeiras propriedades em 6.2.3, cabe dar uma definição da *hermiticidade*.

Definição:

> Um operador **O** é **hermitiano** se para todo par de funções f e g se cumpre a igualdade

$$\int f^*(\mathbf{O}g)\, dv = \int (\mathbf{O}f)^* g\, dv \quad (8)$$

Na formulação de Dirac: $\langle f|\mathbf{O}g\rangle = \langle \mathbf{O}f\,|g\rangle := \langle f\,|\mathbf{O}|g\rangle$, onde a última forma quer indicar que o operador pode atuar ou sobre f ou sobre g. Note que $(\mathbf{O}f)^* = \mathbf{O}^*f^*$. Se forma $\mathbf{O}^*$ mudando os signos dos números imaginários i onde em **O** aparecerem.

Vale a pena repetir alguns conceitos com respeito à **Notação de Dirac**:

ket: $|g\rangle = g(x)$; bra: $\langle f\,| = f^*(x)$

braket: $\langle f\,|\,g\rangle = \int f^*g\, d\mathbf{x}$ (integração sobre todo o espaço; f* = complexo conjugado de f; bra**c**ket = parêntese)

Um operador hermitiano pode aparecer tanto no ket como no bra sem influenciar o valor do braket. As seguintes propriedades dos brakets demonstra -se usando a definição do braket como sendo uma integral:

$$\langle \psi_1|\,\mathbf{A}\psi_2\rangle = \int \psi_1^*\,\mathbf{A}\,\psi_2\, dv.$$

Propriedade 1: $\langle \psi_1|c\psi_2\rangle = c\langle \psi_1|\psi_2\rangle$

Propriedade 2: $\langle c\psi_1|\psi_2\rangle = c^*\langle \psi_1|\psi_2\rangle$
(Sabemos que $\langle f\,|cg\rangle = c\,\langle f\,|\,g\rangle$ e $\langle cf\,|\,g\rangle = c^*\langle f\,|\,g\rangle$)

Propriedade 3: $\langle \psi_1|\psi_2\rangle^* = \langle \psi_2|\psi_1\rangle$

Propriedade 4: $<\psi_1 + \psi_2 | \psi_3 + \psi_4> = <\psi_1|\psi_3>+<\psi_1|\psi_4>+<\psi_2|\psi_3>+<\psi_2|\psi_4>$

A propriedade 4 é uma conseqüência das propriedades 1-3.

Operador adjunto

Diz-se que $\mathbf{A}^+$ é o operador **adjunto** a **A** quando se verifica que

$$<f\, |\mathbf{A}g> = <\mathbf{A}^+f\, |g> \quad (9)$$

Quando $\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}$, diz-se que o operador é **autoadjunto** ou hermitiano. Escrito sob forma de integrais (tomadas sobre todo o espaço)

$$\int f^*\mathbf{A}g\, dv = \int(\mathbf{A}f)^* g\, dv = \int \mathbf{A}^* f^* g\, dv \quad (10)$$

Exemplo:

A := d/dx não é hermitiano sobre $(-\infty,+\infty)$, porque (integração por partes com u = f*):

$<f\, |\mathbf{A}g) = \int f^*\, (dg/dx)\, dx = f^*\, g\, |_{-\infty}^{+\infty} - \int g\, (df^*/dx)\, dx =$

$$= - \int(df^*/dx)g\, dx = -\int(d/dx\, f)^*\, g\, dx = -<\mathbf{A}f\, |\, g>$$

Vamos mostrar agora que $(\mathbf{AB})^+ = \mathbf{B}^+\, \mathbf{A}^+$ (= propriedade 4)

Por um lado segue da definição que $<f, \mathbf{AB}\, g> = <(\mathbf{AB})^+\, f\, |g>$

por outro lado temos:

$<f, \mathbf{AB}\, g> = <f, \mathbf{A}(\mathbf{B}\, g)> = <\mathbf{A}^+f\, |\, \mathbf{B}\, g> = <\mathbf{B}^+(\mathbf{A}^+f)\, |\, g> = <\mathbf{B}^+\mathbf{A}^+\, f\, |\, g>$, daí segue que $(\mathbf{AB})^+ = \mathbf{B}^+\, \mathbf{A}^+$, o que queríamos demonstrar.

Também as seguintes propriedades se deixam demonstrar sem grandes dificuldades: (veja demonstração no seguinte parágrafo)

Propriedade 1: $(\mathbf{A}^+)^+ = \mathbf{A}$

Propriedade 2: $(\mathbf{A} + \mathbf{B})^+ = \mathbf{A}^+ + \mathbf{B}^+$

Propriedade 3: $(a\, \mathbf{A})^+ = a^*\, \mathbf{A}^+$

6.2.3 Teoremas

Teorema 1 (operadores adjuntos)

Demonstrar a validez das propriedades mencionadas

(Usando $<f\, I \mathbf{A} g> = <\mathbf{A}^{+} f\, I g>$ e $< \mathbf{A} f\, I\, g> = <f\, I\, \mathbf{A}^{+} g>$
e $<f\, I c g> = c <f\, I\, g>$ e $<cf\, I\, g> = c^{*} <f\, I\, g>$)

Propriedade 1: $(\mathbf{A}^{+})^{+} = \mathbf{A}$

$<(\mathbf{A}^{+})^{+} f\, I\, g> = <f\, I\, \mathbf{A}^{+}\, g> = <\mathbf{A}\, f\, I\, g> \rightarrow (\mathbf{A}^{+})^{+} = \mathbf{A}$ q.e.d.

Propriedade 2: Mostrar que $(\mathbf{A} + \mathbf{B})^{+} = \mathbf{A}^{+} + \mathbf{B}^{+}$

temos: $<(\mathbf{A} + \mathbf{B}) f\, I\, g> = < (\mathbf{A} f + \mathbf{B} f)\, I g> = < \mathbf{A} f\, I\, g> + < \mathbf{B} f\, I\, g>$

$= <f\, I\, \mathbf{A}^{+} g> + < f\, I\, \mathbf{B}^{+} g>$

$= <f\, I (\mathbf{A}^{+} + \mathbf{B}^{+}) g>$

pero também: $<(\mathbf{A} + \mathbf{B}) f\, I\, g> = <f\, I\, (\mathbf{A} + \mathbf{B})^{+} g> \rightarrow (\mathbf{A} + \mathbf{B})^{+} = \mathbf{A}^{+} + \mathbf{B}^{+}$ q.e.d.

Propriedade 3: $(a\, \mathbf{A})^{+} = a^{*}\, \mathbf{A}^{+}$

$<(a\mathbf{A})^{+}\, f\, I\, g> = <f\, I\, a\mathbf{A}\, g> = a <f\, I\, \mathbf{A}\, g> = a < \mathbf{A}^{+}\, f\, I\, g> = < a^{*}\mathbf{A}^{+}\, f\, I\, g>$

então: $(a\, \mathbf{A})^{+} = a^{*}\, \mathbf{A}^{+}$ q.e.d.

Teorema 2 (hermiticidade)

Demonstre que $\mathbf{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ é um operador hermitiano.
(Observe que $(-i\hbar\partial/\partial x)^{*} = i\hbar\partial/\partial x$)

Prova:

Devemos comprovar que $<f\, I\mathbf{p}\, g> = <\mathbf{p}\, f\, I g>$ (integração por partes, $u := f^{*}$)

$<f\, I\mathbf{p}\, g> = \int f^{*}(x,t)\, [-i\hbar\, \partial/\partial x\, g(x,t)] dx = -i\hbar\{[f^{*}(x,t) g(x,t)]^{+\infty}_{-\infty} - \int g(x,t)\, \partial/x\, f^{*}(x,t) dx\}$

$[f^{*}(x,t) g(x,t)]^{+\infty}_{-\infty} = 0$ pois f e g tendem a zero com $x \rightarrow \pm\, \infty$

$\rightarrow \int f^{*}(x,t)\, [-i\hbar\, \partial/\partial x\, g(x,t)] dx = (-i\hbar)\, [- \int g(x,t)\, \partial/x\, f^{*}(x,t) dx] = \int (i\hbar\partial/x\, f^{*}(x,t)) g(x,t)\, dx =$

$= \int (-i\hbar\, \partial/\partial x\, f(x,t))^{*}\, g(x,t)\, dx = <\mathbf{p}\, f\, I g>$

Teorema 3 (valores esperados)

Mostre que o valor esperado da variável A do operador hermitiano **A** é real.
(Observe: Um número c é real se é igual ao seu complexo conjugado c*)

Prova:

Queremos comprovar que o valor esperado da variável A com operador hermitiano **A** é igual a seu complexo conjugado.

Valor esperado da observável A é definido como $<A> = \int \psi^* \mathbf{A} \psi \, dv$, veja 3.2.

O complexo conjugado é $<A>^* = \int (\psi^*)^* [\mathbf{A}\psi]^* dv = \int \psi \, [\mathbf{A}\psi]^* dv = \int [\mathbf{A}\psi]^* \psi \, dv$

Sendo **A** hermitiano, a última integral é igual a $\int \psi^* \mathbf{A}\psi \, dv = <A>$ = real q.e.d.

(O valor esperado deve ser real, pois os números medidos num laboratório são números reais.)

É instrutivo fazer a prova usando somente a notação de Dirac:

$$<A>^* = <\psi|\mathbf{A}\psi>^* = <\mathbf{A}\psi|\psi>$$

(a propriedade 3 dos brakets foi usada: $<\psi_1|\psi_2>^* = <\psi_2|\psi_1>$).

Usando a propriedade de hermiticidade, obtemos $<\mathbf{A}\psi|\psi> = <\psi|\mathbf{A}\psi> = <A>$ q.e.d.

Teorema 4: (autovalores reais)

Os autovalores de um operador hermitiano **A** são reais.

Prova:

Já que **A** é hermitiano, temos $<\psi|\mathbf{A}\psi> = <\mathbf{A}\psi|\psi>$. Agora:

$<\psi|\mathbf{A}\psi> = <\psi|a\psi> = a<\psi|\psi>$ e também $<\mathbf{A}\psi|\psi> = <a\psi|\psi> = a^*<\psi|\psi> \rightarrow a = a^*$

($<\psi|\psi> = |\psi|^2$ nunca é negativo!)

Veja também a seguinte demonstração: Já que $\mathbf{A}|\psi> = a\,|\psi>$, temos

$<\psi|\mathbf{A}|\psi> = <\psi|a\,\psi> = a\,<\psi|\psi>$, por outro lado

$$\langle\psi|\mathbf{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\mathbf{A}^{+}|\psi\rangle = \langle\psi|\mathbf{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|a\,\psi\rangle^* = a^* \langle\psi|\psi\rangle,$$

e daí segue $a = a^*$, o que somente será possível se a for real.

Teorema 5: (autofunções são ortogonais)

> As autofunções $\{\psi_i\}$ de um operador hermitiano **A** que pertencem a diferentes autovalores $\{a_i\}$ são **ortogonais**.

Prova:

ψ_i e ψ_k sejam duas autofunções quaisquer do operador **A**. Então

$\langle \mathbf{A}\psi_i|\psi_k\rangle = a_i^*\langle\psi_i|\psi_k\rangle = a_i \langle\psi_i|\psi_k\rangle$ e também $\langle\psi_i|\mathbf{A}\psi_k\rangle = a_k \langle\psi_i|\psi_k\rangle$

Sendo **A** hermitiano, temos $\langle\psi_i|\mathbf{A}\psi_k\rangle = \langle\mathbf{A}\psi_i|\psi_k\rangle$ ou $(a_i - a_k) \langle\psi_i|\psi_k\rangle = 0$.

Mas, como $a_i \neq a_k$, resulta que $\langle\psi_i|\psi_k\rangle = 0$ para $i\neq k$, q.e.d.

Agora existe a possibilidade de as duas funções escolhidas, ψ_i e ψ_k, terem o mesmo autovalor, $a := a_i = a_k$. Nesse caso temos uma degenerescência e a prova anterior não será válida, já que $a_i - a_k = 0$, e as duas funções não têm de ser ortogonais. No entanto, por meio do método de Gram-Schmidt, veja a seção anterior, podemos construir, mesmo neste caso de degenerescência, duas funções mutuamente ortogonais com o mesmo autovalor. Segundo este método, formamos primeiro uma combinação linear $\psi_{k'} = \alpha\psi_i + \beta\psi_k$ com dois constantes arbitrárias a determinar. Vamos determinar as constantes de tal forma que temos

$$\langle\psi_i | \psi_{k'}\rangle = 0$$

Ou seja, a nova autofunção, $\psi_{k'}$, será ortogonal a ψ_i.

Se escolhermos $\alpha := 1$ e multiplicarmos $\psi_{k'} = \psi_i + \beta\psi_k$ da esquerda por ψ_i^*, obteremos por meio de uma integração

$\int\psi_i^*\psi_i\, dx + \beta\int\psi_i^*\psi_k dx = \int \psi_i^*\psi_{k'}\, dx$ ou também $\langle\psi_i|\psi_i\rangle + \beta\langle\psi_i|\psi_k\rangle = \langle\psi_i|\psi_{k'}\rangle$

Escolhendo β da forma $\beta := -\langle\psi_i|\psi_i\rangle /\langle\psi_i|\psi_k\rangle$, obteremos $\langle\psi_i|\psi_{k'}\rangle = 0$, o que queríamos obter. A nova função $\psi_{k'}$ é ortogonal a ψ_i.

Muito importante é o seguinte teorema. Primeiro formulamos uma

Definição:

Diz-se que ψ é uma autofunção **simultânea** dos operadores lineares **A** e **B**, pertencendo aos autovalores α e β, respectivamente, se valem as equações

$$\mathbf{A}\psi = \alpha\psi \quad \text{e} \quad \mathbf{B}\psi = \beta\psi$$

Teorema 6a:

Se as funções de um dado conjunto completo $\{\psi_i\}$ forem simultaneamente autofunções dos operadores **A** e **B**, então **A** e **B** comutam. (ψ seja uma função qualquer do conjunto $\{\psi_i\}$)

Prova:

Consideremos as equação de autovalores

$$\mathbf{A}\psi = \alpha\psi$$
$$\mathbf{B}\psi = \beta\psi$$

Fazendo **B** operar sobre ambos os lados da primeira equação, teremos

$$\mathbf{B}(\mathbf{A}\psi) = \mathbf{B}\,\alpha\psi = \alpha\,\mathbf{B}\psi = \alpha\beta\,\psi$$

da forma similar resulta $\mathbf{A}(\mathbf{B}\psi) = \mathbf{A}\,\beta\psi = \beta\,\mathbf{A}\psi = \beta\alpha\,\psi$

então $\mathbf{AB}\,\psi = \mathbf{BA}\,\psi$ ou seja $[\mathbf{A},\mathbf{B}] = 0$, q.e.d.

Pode-se demonstrar também o teorema inverso:

Teorema 6b:

As autofunções de operadores lineares cujo comutador é zero são simultaneamente autofunções dos dois operadores **A**, **B**. (Ou no caso de degenerescência podem ser construídas para ser autofunções simultâneas dos **A** e **B**.)

Prova (assumamos que os autovalores não sejam degenerados):

Seja ψ autofunção de **A**, ou seja $\mathbf{A}\psi = \alpha\psi$. Multiplicando ambos os lados por **B** dá

$$\mathbf{BA}\psi = \mathbf{B}\,\boldsymbol{\alpha}\psi$$

Já que **A** e **B** comutam, temos $\mathbf{BA}\psi = \mathbf{A}(\mathbf{B}\psi) = \alpha\mathbf{B}\psi$, isto é, **B** é uma autofunção com autovalor α. Uma vez que α foi introduzido como sendo não degenerado, $\mathbf{B}\psi$ somente pode ser um múltiplo de ψ, ou seja

$$\mathbf{B}\psi = \beta\psi \quad \text{q.e.d.}$$

Nós supúnhamos que os autovalores fossem não degenerados. Consideremos agora o caso de **degenerescência**. Para simplificar as considerações, suporemos que α tem uma dupla degenerescência e que ψ_1 e ψ_2 sejam duas autofunções ortonormais de **A** pertencendo ao autovalor α. Então, todas as combinações lineares de ψ_1 e ψ_2 serão também autofunções de **A** com o autovalor α. Vamos escolher uma destas combinações lineares:

$$\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2$$

ψ deve ser uma autofunção de **A**:

$$\mathbf{A}\psi = \alpha\psi = \alpha(a_1\psi_1 + a_2\psi_2)$$

Multipliquemos esta equação pela esquerda por **B**:

$$\mathbf{BA}\psi = \alpha\mathbf{B}\psi = \alpha\mathbf{B}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2)$$

Uma vez que **A** e **B** comutam, podemos reescrever isso na forma

$$\mathbf{AB}\psi = \alpha\mathbf{B}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2)$$

Em outras palavras, $\mathbf{B}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2)$ é uma autofunção de **A** com o autovalor α. Já que supúnhamos que α fosse duplamente degenerado, $\mathbf{B}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2)$ tem que ser uma das combinações lineares de ψ_1 e ψ_2. Por isso podemos escrever

$$\mathbf{B}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

Se escolhermos a_1 e a_2 da seguinte maneira

$$c_1\psi_1 + c_2\psi_2 = \beta(a_1\psi_1 + a_2\psi_2),$$

vemos que $a_1\psi_1 + a_2\psi_2$ também será uma autofunção de **B**, pois teremos

$$\mathbf{B}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = \beta(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) \quad (11)$$

Para determinar estes valores a_1,a_2 especiais, multiplicamos a última equação por ψ^*_1 e ψ^*_2 e logo integramos os produtos

$$a_1\langle\psi_1|\mathbf{B}\psi_1\rangle + a_2\langle\psi_1|\mathbf{B}\psi_2\rangle = \beta a+1\langle\psi_1|\psi_1\rangle + \beta a_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \beta a_1$$

$$a_1\langle\psi_2|\mathbf{B}\psi_1\rangle + a_2\langle\psi_2|\mathbf{B}\psi_2\rangle = \beta a_1\langle\psi_2|\psi_1\rangle + \beta a_2\langle\psi_2|\psi_2\rangle = \beta a_2$$

onde tomamos em conta que ψ_1, ψ_2 foram tomadas como sendo ortonormais.

Usando as abreviações $\langle\psi_1|\mathbf{B}\psi_1\rangle := B_{11}$, $\langle\psi_1|\mathbf{B}\psi_2\rangle := B_{12}$ etc. obteremos o sistema

$$a_1B_{11} + a_2B_{12} = \beta a_1$$

$$a_1B_{21} + a_2B_{22} = \beta a_2 \quad (12)$$

O sistema (12) consta de duas equações simultâneas e lineares para a_1 e a_2. As equações podem ser resolvidas caso o determinante dos coeficientes fosse nulo

$$\begin{vmatrix} B_{11}-\beta & B_{12} \\ B_{21} & B_{22}-\beta \end{vmatrix} = 0$$

Trata-se de uma equação quadrática com as raízes β_1,β_2 para determinar a_1 e a_2. No caso de que $\beta_1 = \beta_2$, β seria um autovalor degenerado, já que qualquer escolha de a_1, a_2 satisfaria as equações (12). Mas, se β_1 e β_2 fossem diferentes, a_1 e a_2 podem ser determinados de tal maneira que Eq. 11 será satisfeita, e foi isso o que queríamos demonstrar.

6.2.4 Teoria de Sturm-Liouville

Todo esse material, a teoria dos operadores lineares, faz parte da área de análise funcional (veja p. ex. Erwin Kreyszig, *Introductory Functional Analysis with Applications*, John Wiley).

É interessante, que todos nossos problemas de contorno que estudamos na mecânica quântica e na mecânica clássica, são parte da teoria de Sturm-Liouville (Charles-François Sturm, 1803-1855, Joseph Liouville, 1809-1882), que também pertence às teorias estudadas na análise funcional.

L seja um **operador diferencial** como $L:= d^2/dx^2$. No caso da "Partícula numa caixa", seção 2.1, consideramos a equação

$$d^2\psi(x)/dx^2 + k^2\psi(x) = 0 \quad (13)$$

$\psi(x)$ estava definido em $0 \le x \le L$ e as condições de contorno eram

$$\psi(o) = 0 \text{ e } \psi(L) = 0. \quad (14)$$

A Eq. 13 é uma equação de Sturm-Liouville (ou: StL) que podemos escrever como $L\psi(x) = - k^2\psi(x)$, onde $L := d^2/dx^2$. Muitas vezes escreve-se o problema a resolver com uma função de peso $r(x)>0$ e um parâmetro λ:

$$L\, u(x) = - \lambda r(x)u(x) \quad (15)$$

A forma geral do operador diferencial L é

$$L = [a_0(x)\, d^n/dx^n + a_1(x)\, d^{n-1}/dx^{n-1} + ...] \quad (16)$$

À equação

$$L\, u(x) = [a_0(x)\, d^n/dx^n + a_1(x)\, d^{n-1}/dx^{n-1} + ...]\, u(x) \quad (17)$$

fazemos corresponder a seguinte equação **adjunta**

$$L^+ u(x) := (-1)^n \{d^n/dx^n\, [a_0(x)\cdot u(x)] - d^{n-1}/dx^{n-1}[a_1(x)\cdot u(x)] + ... + (-1)^n a_n(x)u(x)\} \ (18)$$

Consideremos o caso n = 2

$$L\, u(x) = [a_0(x)\, d^2/dx^2 + a_1(x)\, d/dx + a_2(x)]\, u(x) \quad (18)$$

$$L^+ u(x) = d^2/dx^2\, (a_0(x)\cdot u(x)) - d/dx(\, a_1(x)\cdot u(x)) + a_2(x)\, u(x) =$$

$$= [a_0\, d^2/dx^2 + (2a_0' - a_1)\, d/dx + (a_0'' - a_1' + a_2)]\, u(x) \quad (19)$$

O operador linear diferencial L é **autoadjunto**, se $a_0'(x) = a_1(x)$, pois neste caso temos

$$L = L^+ = d/dx\, [a_0(x)\, d/dx] + a_2(x) \quad (20)$$

(L é **linear**, porque $L(c_1f_1(x) + c_2f_2(x)) = c_1Lf_1(x) + c_2Lf_2(x)$)

Em geral, usa-se $a_0(x) := p(x)$ e $a_2(x) := q(x)$, e essas funções são reais. Então a **forma autoadjunta** do operador é

$$L = L^+ := d/dx\, [p(x)\, d/dx] + q(x) \quad (21)$$

A equação geral de Sturm-Liouville

$$d/dx\, [p(x)\, du/dx] + [g(x) + \lambda r(x)]\, u = 0, \quad (22)$$

onde $q(x) := g(x) + \lambda r(x)$, é então uma equação autoadjunta. Todo operador diferencial linear do segundo ordem pode ser escrito em forma autoadjunta (21).

Na seção 4.4 vimos em Eq. 6 a forma não-autoadjunta de Hermite

$d^2u/dx^2 - 2x\, du/dx + \lambda u = 0$ com $\lambda = w - 1$. A mesma equação tem a seguinte forma autoadjunta

$$d/dx[\exp(-x^2)\, du/dx] + \lambda \exp(-x^2)\, u = 0$$

Esta equação é do tipo StL. com $p(x) = \exp(-x^2)$, $g(x) = 0$, $r(x) = \exp(-x^2)$.

Um número muito grande de funções encontradas em matemática aplicada são soluções de uma equação de Sturm-Liouville. Entre elas encontram-se as funções sen e cos, os polinômios de Legendre, Laguerre e Hermite e as funções de Bessel. Estes polinômios já encontramos e devido a sua importância, vamos depois investigar também a equação de Bessel.

Vamos demonstrar, agora, que o operador $L = L^+ := d/dx\, [p(x)\, d/dx] + q(x)$ é hermitiano.

Teorema 1:

> O operador $L = L^+ := d/dx\, [p(x)\, d/dx] + q(x)$ é hermitiano com respeito às funções u e v que estão definidas em [a,b] e que cumprem com as condições
>
> $v^*pu'|_{x=a} = v^*pu'|_{x=b}$, sendo p(x) e q(x) reais (ou, tomando complexas conjugadas, $vpu^{*\prime}|_{x=a} = vpu^{*\prime}|_{x=b}$)
>
> ou seja $\langle v|Lu\rangle = \langle Lv|u\rangle$.

(Em forma integral: $\int_{a,b} v^*Lu\, dx = \int_{a,b} (L^*v^*)u\, dx = \int_{a,b} Lv^*\, u\, dx$, sendo L um operador real, já que não contém $i = \sqrt{(-1)}$ e p,q são reais.)

Prova:

$L\, u(x) = d/dx\, [p(x)\, du/dx] + q(x)\, u(x)$. Multiplicando por v^* pela esquerda e integrando dá

$$\int v^*Lu(x)\, dx = \int v^*\, [p(x)u(x)']'\, dx + \int v^*q(x)\, u(x)\, dx$$

e integrando a primeira integral duas vezes por partes proporciona

$\int v^*(pu')'dx = v^*pu'|_{a,b} - \int v^{*\prime}\ pu'\ dx$, onde $v^*pu'|_{a,b} = 0$ devido as condições de contorno que supúnhamos acima. Logo segue

$$-\int v^{*\prime}\ pu'\ dx = -v^{*\prime}pu|_{a,b} + \int u(pv^{*\prime})'\ dx = \int u(pv^{*\prime})'\ dx$$

Temos, então,

$$\int v^*Lu(x)\ dx = \int u(pv^{*\prime})'\ dx + \int v^*(x)q(x)u(x)\ dx$$

Multiplicando $Lv^* = [pv^{*\prime}]' + q(x)v^*$ pela esquerda por u, resulta

$$\int uLv^*\ dx = \int u(pv^{*\prime})'\ dx + \int u(x)q(x)v^*(x)\ dx$$

o que significa que $\int v^*Lu(x)\ dx = \int uLv^*dx$, ou seja $\langle v|Lu\rangle = \langle Lv|u\rangle$, ou seja,

L é um operador hermitiano. q.e.d.

6.2.5 Equação de Bessel

Friedrich Wilhelm Bessel, matemático alemão (1784 -1846), já com 20 anos fez um recálculo da trajetória do cometa Halley. Foi designado diretor do observatório em Königsberg em 1810 e manteve essa posição até sua morte. Os seus trabalhos sobre as irregularidades da órbita de Urano prepararam o caminho do descobrimento de Netuno por Leverrier e Adams. É famoso, também, por ter feito o primeiro cálculo preciso (1838) da distância da Terra a um estrela.

A equação de Bessel encontra aplicações em muitas partes da física, por exemplo no cálculo da temperatura num cilindro de grande comprimento. O raio do cilindro é a, e no instante inicial temos a temperatura $v_0(r)$ que só depende da distância r do eixo e é independente de z e θ (coordenadas cilíndricas). A superfície do cilindro obtém em t = 0 a temperatura v(a) = 0 e será, depois, mantida a essa temperatura.

Queremos encontrar uma expressão para a temperatura v(r,t).

O fluxo de calor é um processo de difusão e, por isso, podemos usar a seguinte equação diferencial para a temperatura

$$\frac{\partial v}{\partial t} = k\nabla^2 v \quad (23)$$

A constante k é chamada difusividade térmica e depende da condutividade térmica, K, do material, da capacidade térmica c e da densidade ρ

$$k = K/c\rho \quad (24)$$

O problema tem simetria cilíndrica e a Eq. 23 em coordenadas cilíndricas é

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{k}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial v}{\partial r}) \quad (25)$$

A condição inicial é $v(r,0) = v_0(r) \quad t \leq 0 \quad (26)$

A condição de contorno é $v(a,t) = 0 \quad t \geq 0 \quad (27)$

Como o problema da corda vibrante, também esse é um problema de valor inicial na variável temporal t e um problema de valor de contorno na variável r.

Para aplicar o método de separação de variáveis a esse problema, vamos supor que

$$v(r,t) = T(t)\,R(r) \quad (28)$$

Substituindo 28 na equação 25 nos dá

$$\frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{rR}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial R}{\partial r}\right) \quad (29)$$

A expressão à esquerda do sinal de igualdade depende só de t e a expressão à direita depende só de r. Para que a Eq. 29 seja válida, é preciso que ambos os lados da Eq. 29 sejam iguais à mesma constante. Se denotarmos essa constante de separação por $-\alpha^2k$, então a Eq. 29 fica

$$\frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{rR}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial R}{\partial r}\right) = -\alpha^2 k \quad (30)$$

Obtemos, então, as duas equações diferenciais ordinárias a seguir para T(t) e R(r)

$$T'/T = -\alpha^2 k \quad (31)$$

$$[\, r\, R']'/(rR) = -\, \alpha^2 \quad (32)$$

onde a linha se refere à diferenciação usual em relação à variável independente, seja ela r ou t.

A solução particular da Eq. 31 é

$$T(t) = T_0 \exp(-\alpha^2 kt) \quad (33)$$

A Eq. (32) podemos escrever como

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial R}{\partial r} \right) + r\alpha^2 R = 0 \quad (34)$$

e isso é uma forma de Sturm-Liouville d/dx [p(x) du/dx] + [g(x) + λr(x)] u = 0 com u = R, p = r, g = 0 , r(x) = r e $\alpha^2 = \lambda$. Usando o argumento x = αr, podem escrever a Eq. 34 da seguinte forma

$$x^2\, d^2R/dx^2 + x\, dR/dx + x^2\, R = 0 \quad (35)$$

o que é uma caso especial (n = 0) da **equação de Bessel**

$$x^2\, d^2y/dx^2 + x\, dy/dx + (x^2 - n^2)\, y = 0 \quad (35)$$

As soluções da equação 35 são as funções de Bessel J_n *e* Y_n de primeira e segunda espécie e de ordem n. Então, as soluções da Eq. 34 são J_0 e Y_0. (Mas, Y_0 (x) → -∞ para x→0, e, por isso, não pode ser uma solução de nosso problema.) A solução particular de 34 é, então,

$$R(r) = A\, J_0(\alpha r) \quad (36)$$

onde A é uma constante. A condição de contorno pede que J_0 (αa) = 0. Isso mostra que, sendo x_1, x_2, ... os zeros de J_0 (x) = 0, os valores possíveis de α serão

$$\alpha_j = x_j/a \quad (37)$$

Estes valores de α_j são os autovalores do problema de Sturm-Liouville e as funções $J_0(\alpha_j r)$ são as autofunções.

Isso significa que $J_0(\alpha_i r)$ e $J_0(\alpha_j r)$ são ortogonais para $\alpha_i \neq \alpha_j$ com respeito à função de peso r. Temos, então, para $\alpha_i \neq \alpha_j$, que

$$\int_{0,a} rJ_0(\alpha_i r)J_0(\alpha_j r)\, dr = 0 \quad (38)$$

As constantes de normalização obtemos de

$$N_j^2 = \int_{0,a} r[J_0(\alpha_j r)]^2 dr \quad (39)$$

Temos, agora, as seguintes soluções particulares da Eq. 25

$$v_j = A_j \exp(-\alpha_j^2 kt)\, J_0(\alpha_j r) \quad (40)$$

onde as constantes A_j ainda devem ser determinados. A solução geral é dada pela soma destes soluções particulares

$$v(r,t) = \sum_j A_j \exp(-\alpha_j^2 kt)\, J_0(\alpha_j r) \quad (41)$$

Por meio da condição inicial $v(r,0) = v_0(r) \;\; t \leq 0$ (26) podemos determinar os valores das constantes A_j. Para t = 0 resulta da Eq. 41

$$v_0(r) = \sum_j A_j J_0(\alpha_j r) \quad (42)$$

Multiplicando ambos os lados por $rJ_0(\alpha_1 r)$ e integrando (utilizando 38 e 39) dá

$$A_1 = N_1^{-2}\int_{0,a} v_0(r)\, rJ_0(\alpha_1 r)dr$$

e, da forma semelhante, obteremos para A_j

$$A_j = N_j^{-2}\int_{0,a} v_0(r)\, rJ_0(\alpha_j r)dr \quad (43)$$

Resta, encontrar uma expressão explícita para $J_0(x)$ e $Y_0(x)$. Vamos buscar uma solução em **série** de potências**,** como já fizemos nos caos do OHS e do átomo de hidrogênio. Partimos da equação $x^2\, d^2R/dx^2 + x\, dR/dx + x^2\, R = 0$ (35), ou melhor da $x\, d^2R/dx^2 + dR/dx + x\, R = 0$. Supomos, então, que

$$R(x) = x^\rho(a_0+a_1x + a_2\, x^2 + ...) = x^\rho \sum_{n=0,\infty} a_n x^n \quad (44)$$

Podemos escolher $a_0 = 1$. Logo temos

$$x\, d^2R/dx^2 = \rho(\rho\text{-}1)x^{\rho-1}+ a_1(\rho+1)\rho x^\rho + a_2(\rho+2)(\rho+1)x^{\rho+1}+ ...$$

$$dR/dx = \rho x^{\rho-1}+ a_1(\rho+1)x^\rho+a_2(\rho+2)x^{\rho+1}+...$$

$$xR = x^{\rho+1}+ a_1x^{\rho+2}+ ...$$

Somando estes resultados e juntando os termos semelhantes, temos

$[\rho(\rho\text{-}1) + \rho]x^{\rho-1}+[a_1(\rho+1)+a_1(\rho+1)\rho]x^{\rho}+[a_2(\rho+2)(\rho+1)+a_2(\rho+2)+1]x^{\rho+1}+... = 0$

o coeficiente de cada potência de x tem de ser igual a zero:

$$\rho(\rho-1) + \rho = 0$$

$$a_1(\rho + 1) + a_1(\rho + 1)\rho = 0$$

$$a_2(\rho+2)(\rho+1) + a_2(\rho+2) + 1 = 0$$

$$a_3(\rho+3)(\rho+2) + a_3(\rho+3) + a_1 = 0$$

$$a_4(\rho+4)(\rho+3) + a_4(\rho+4) + a_2 = 0$$

$$.. \quad (45)$$

Da primeira equação vemos que $\rho = 0$ e das outras equações segue

$$a_1 = a_3 = a_5 = a_7 = ... = 0$$

$$a_2 = -1/2^2;\ a_4 = 1/2^2 \cdot 1/4^2 \text{ etc.} \quad (46)$$

Temos, então,

$$J_0(x) = 1 - x^2/2^2 + x^4/\,(2^2{\cdot}4^2) - x^6/(2^2{\cdot}4^2{\cdot}6^2)+ ... \quad (47)$$

Também podemos obter uma série para $Y_0(x)$, a função da segunda espécie. Se ao princípio ignoramos a condição $\rho = 0$ e mantemos ρ nas equações 45, obteremos em vez de (46) as seguintes expressões

$$a_1 = a_3 = a_5 = a_7 = ... = 0$$

$$a_2 = -1/(\rho+2)^2;\ a_4 = 1/(\rho+2)^2(\rho+4)^2 \text{ etc.} \quad (48)$$

A função que resulta desta maneira designaremos por y:

$$y = x^{\rho}[1 - x^2/(\rho+2)^2 + x^4/(\rho+2)^2(\rho+4)^2 + ...] \quad (49)$$

Esta função satisfaz a equação diferencial a seguir (o coeficiente do termo $x^{\rho-1}$ é ρ^2 e já não é zero)

$$xy'' + y' + xy = \rho^2 x^{\rho-1} \quad (50)$$

Derivando esta equação uma vez com respeito a ρ, e designando dy/dρ por y_ρ, obteremos

$$x d^2y_\rho/dx^2 + dy_\rho/dx + xy_\rho = 2\rho x^{\rho-1} + \rho^2 x^{\rho-1} \ln x \quad (51)$$

Observamos que, par ρ → 0, o lado direito de (51) tenderá para zero dando, outra vez, a equação de Bessel. Segue, então, que $y_{\rho\to 0}$ é uma solução da equação de Bessel. Da séria (49) obtemos

$dy/d\rho = x^\rho \ln x\, [1 - x^2/(\rho+2)^2 + \ldots] + x^\rho\{ 2x^2/(\rho+2)^3 - 2x^4[1/(\rho+2)^3(\rho+4)^2 +$

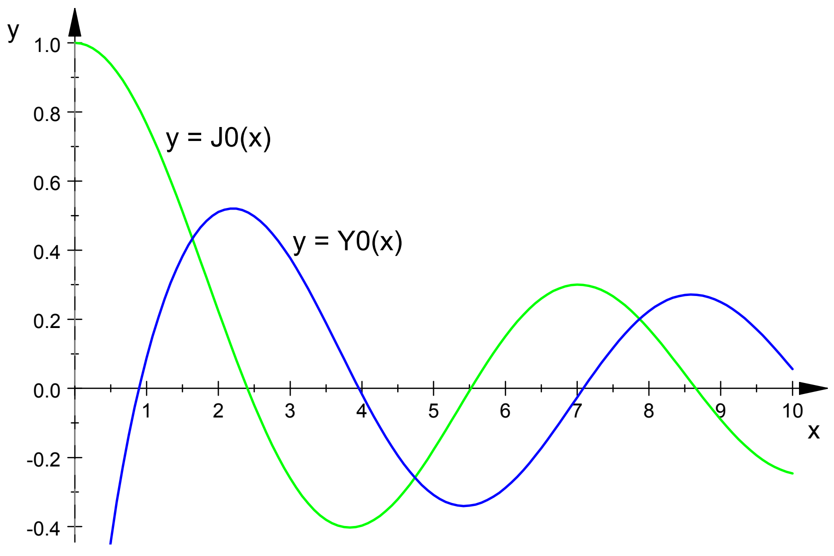
$1/(\rho+2)^2(\rho+4)^3] + \ldots \}$, e disso obtemos para a função da segunda espécie

$$Y_0(x) = dy/d\rho|_{\rho\to 0} = J_0(x) \ln x + x^2/2^2 - x^4/(2^2 \cdot 4^2)\, [1+1/2] +$$

$$+ x^6/(2^2 \cdot 4^2 \cdot 6^2)\, [1 + 1/2 + 1/3] + \ldots \quad (52)$$

Observe que $Y_0(x)$ → -∞ quando x →0, o que foi mencionado acima. Visto que a equação de Bessel é de segunda ordem, ela tem só duas soluções independentes. Por isso, J_0 e Y_0 e combinações lineares delas são todas as soluções da equação de Bessel de ordem zero.

- ```
  J0:=plot::Function2d(besselJ(0,x),x=0..10,Color=
  RGB::Green):// Programa MUPAd
  Y0:=plot::Function2d(besselY(0,x),x=0..10,Color=
    RGB::Blue):
  plot(J0,Y0, plot::Text2d("y = J0(x)",[2,0.7] ),
  plot::Text2d("y = Y0(x)",[3.8,0.4] ))
  ```



As funções de Bessel de ordem zero
  ```