

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS

G. M. Sotkov e U. Camara da Silva

Notas de Funções Especiais, versão 4.0

VITÓRIA
2022

Resumo

Estas notas, auto-consistentes, foram feitas para auxiliar o aluno (você mesmo) no estudo das seguintes funções especiais: *Gamma*, *Beta*, *Hipergeométrica*, *Hipergeométrica Confluyente*, os *Polinômios de Hermite*, *de Legendre*, *de Laguerre e Laguerre Associados*, as *Funções de Legendre Associadas* e *Funções de Bessel*. Nós enfatizamos propriedades que serão úteis em vários cursos - *condições para as hipergeométricas se tornarem polinômios e expansões assintóticas das hipergeométricas*. Também são oferecidos vários exercícios, todos com aplicações em física, com o objetivo de estimular o aluno a se interessar mais pelo assunto. Temos cinco apêndices que complementam o texto. No primeiro há uma pequena introdução sobre a Transformada de Fourier (essencial na Mec. Quântica) e a “função” Delta de Dirac; no segundo as possíveis singularidades de uma Equação Diferencial Ordinária (EDO) são analisadas; o terceiro é dedicado à obtenção da segunda solução independente duma EDO de segunda ordem quando já conhecemos uma solução; no quarto tratamos do problema de Sturm-Liouville; o quinto apêndice é dedicado ao estudo de integrais gaussianas e na aproximação de ponto de sela.

Todo o conteúdo das notas pode ser encontrado nas referências bibliográficas, não há nada de novo aqui. O diferencial está nos cálculos detalhados e na ordem de exposição. Os livros, em geral, discutem as funções hipergeométrica e hipergeométrica confluyente após o estudo das funções especiais usuais. Nós fazemos exatamente o oposto, começamos com as hipergeométricas, para depois introduzir as outras funções especiais que no fundo são casos particulares das duas.

Na “segunda edição” vários erros de digitação foram corrigidos¹. Algumas melhorias foram feitas na parte da função Gamma, acrescentamos os capítulos sobre polinômios de Laguerre, funções de Bessel e o apêndice sobre integrais gaussianas. Na “terceira edição”, os textos sobre continuação analítica da função *Gamma* e assintóticos da hipergeométrica foram refeitos, o apêndice sobre singularidades regulares e essenciais foi incluído junto com uma aplicação no texto (última seção do capítulo 2). Na atual “quarta edição”, adicionamos as segundas soluções da hipergeométrica e hipergeométrica confluyente para $c \in \mathbb{Z}$ e parte do texto foi reestruturado. Agradecemos se o leitor enviar sugestões, críticas ou relatar erros para ulysses.silva@ufes.br.

¹Os autores agradecem à aluna do PPGFis Amanda Ziviani de Oliveira pela ajuda voluntária.

Sumário

1	Funções Gamma e Beta	1
1.1	Função Gamma	1
1.2	Função Beta	4
1.3	Relação entre a função Gamma e funções trigonométricas	6
1.4	Fórmula de duplicação de Legendre	8
1.5	<i>Exercícios Propostos</i>	9
2	Funções Hipergeométrica e Hipergeométrica Confluyente	12
2.1	Função Hipergeométrica	12
2.1.1	Equação diferencial e solução via série de potências	12
2.1.2	Soluções centradas nas outras singularidades	16
2.1.3	Representação Integral	18
2.1.4	Relações Úteis	20
2.1.5	Expansões Assintóticas	21
2.1.6	Segunda solução para $c \in \mathbb{Z}$	25
2.2	Função Hipergeométrica Confluyente	30
2.2.1	Equação diferencial e solução via série de potências	30
2.2.2	Representação Integral	33
2.2.3	Segunda solução para $c = 1$	34
2.2.4	Segunda solução para $c \in \mathbb{Z}$	35
2.2.5	Expansão Assintótica	36
2.2.6	Hipergeométrica confluyente como um problema de Sturm-Liouville	37
2.3	<i>Exercícios Propostos</i>	38
3	Resolvendo problemas com as Hipergeométricas	40
3.1	Hipergeométrica	40
3.1.1	Por que fatorizar as singularidades deu certo para hipergeométricas?	46
3.2	Hipergeométrica Confluyente	47
3.3	Correspondência entre os dois casos	50
3.4	<i>Exercícios Propostos</i>	52

4	Polinômios de Hermite	53
4.1	Definição via Função Geratriz, Relações de Recorrência e a EDO de Hermite	53
4.2	Ortogonalidade e norma dos Polinômios de Hermite	54
4.3	Relação com a função Hipergeométrica Confluente	56
4.4	<i>Exercícios Propostos</i>	58
5	Funções de Legendre	60
5.1	Polinômios de Legendre	60
5.1.1	Função Geratriz, Relações de Recorrência e Equação Diferencial . .	60
5.1.2	Ortogonalidade e norma dos polinômios de Legendre	62
5.1.3	Relação entre os polinômios de Legendre e a função hipergeométrica	64
5.1.4	<i>Exercícios Propostos</i>	65
5.2	Funções de Legendre Associadas	66
5.2.1	Definição e equação diferencial	66
5.2.2	Ortogonalidade e norma das Funções de Legendre Associadas . . .	68
5.2.3	O caso $m < 0$	70
5.3	<i>Exercícios Propostos</i>	71
6	Polinômios de Laguerre	72
6.1	Polinômios de Laguerre	72
6.1.1	Equação Diferencial e relação com a Hipergeométrica Confluente . .	74
6.1.2	Ortonormalidade	76
6.2	Polinômios de Laguerre Associados	77
6.2.1	Definição e Relação de Recorrência	77
6.2.2	Equação diferencial e relação com a Hipergeométrica Confluente . .	79
6.2.3	Ortonormalidade dos Polinômios de Laguerre Associados	80
6.3	<i>Exercícios Propostos</i>	81
7	Funções de Bessel	83
7.1	Função de Bessel	83
7.1.1	Representação Integral	87
7.1.2	Função de Neumann	89
7.1.3	Ortogonalidade da Função de Bessel	92
7.1.4	Normalização	93
7.2	Equação de Bessel modificada	95
7.3	Relação com a função hipergeométrica confluyente	97
7.4	Forma assintótica das funções de Bessel e Bessel modificada	99
7.5	Funções de Bessel esféricas e Henkel	100
7.5.1	Funções de Bessel Esféricas	101

7.5.2	Funções de Henkel	104
7.6	Função de Airy	106
7.7	<i>Exercícios Propostos</i>	109
A	Transformada de Fourier e Delta de Dirac	111
A.1	Delta de Kronecker e Séries de Fourier	111
A.2	Transformada de Fourier	113
A.3	Delta de Dirac	115
A.4	Transformada de Fourier em d dimensões e conseqüências	116
B	Singularidades em EDO	121
C	Wronskiano e a segunda solução independente	126
C.1	Wronskiano	126
D	Problema de Sturm - Liouville	131
E	Integrais gaussianas	134
E.1	Integral Gaussiana:	134
E.1.1	Gaussiana de argumento complexo	136
E.2	Método do ponto de Sela	138
E.2.1	Caso real	138
E.2.2	Caso complexo	139
E.3	Teorema de Wick	143
	Referências Bibliográficas	145

Capítulo 1

Funções Gamma e Beta

1.1 Função Gamma

A função Gamma pode ser definida como a integral abaixo:

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt ; \Re(z) > 0, \quad (1.1)$$

sua propriedade mais importante é:

$$\Gamma(1+z) = z\Gamma(z). \quad (1.2)$$

Para provar, basta integrar a eq. (1.1) por partes

$$\Gamma(1+z) = -e^{-t} t^z \Big|_{t=0}^{t=\infty} + z \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt = z\Gamma(z).$$

Repare que $\Gamma(1) = 1$, então para $z = n \in \mathbb{N}$, temos de (1.2) que: $\Gamma(1+n) = n!$. Ou seja, $\Gamma(z)$ é uma generalização natural do fatorial. Outra quantidade importante é $\Gamma(1/2)$

$$\Gamma(1/2) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{-\frac{1}{2}} dt \stackrel{t=u^2}{=} 2 \int_0^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi},$$

$\implies \Gamma(3/2) = \frac{1}{2}\Gamma(1/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$; $\Gamma(5/2) = \frac{3}{2}\Gamma(3/2) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}$; ... onde novamente usamos a eq. (1.2)¹.

Quando o argumento z (assumido real) é muito maior que a unidade, a função Gamma pode ser aproximada por

$$\Gamma(z) \approx \sqrt{2\pi}(z-1)^{z-1/2}e^{-(z-1)}, \quad z \gg 1, \quad (1.3)$$

chamada de fórmula de Stirling, cuja demonstração encontra-se no apêndice E (eq. (E.11)).

A eq. (1.1) está definida na região $\Re(z) > 0$, porém com uma continuação analítica, pode-se definir a função $\Gamma(z)$ em todo plano complexo, exceto nos seus pontos singulares (que iremos descobrir).

Mas antes de prosseguir, vamos responder a pergunta que está na sua cabeça (ou não): o que é uma extensão (ou continuação) analítica?

A ideia é utilizar a própria definição (1.1) em conjunto com a propriedade (1.2) para estender o domínio de validade da função Gamma para além de $\Re(z) > 0$. Por exemplo, a eq. (1.2) pode ser reescrita como

$$\Gamma(z) = \frac{\Gamma(1+z)}{z}. \quad (1.4)$$

De acordo com a definição (1.1), o lado direito é bem definido $\forall \Re(z) > -1$ e $z \neq 0$. Portanto a igualdade serve como uma definição da função $\Gamma(z)$ (lado esquerdo) que estende sua validade $\forall \Re(z) > -1$ e $z \neq 0$, esse é um exemplo de continuação analítica. Um comentário importante é que tomando $z = \epsilon \ll 1$ fica claro que $\Gamma(z)$ possui polo simples em $z = 0$, pois

$$\Gamma(\epsilon) = \frac{\Gamma(1+\epsilon)}{\epsilon} \approx \frac{\Gamma(1)}{\epsilon} = \frac{1}{\epsilon}.$$

O mesmo raciocínio pode ser utilizado para o domínio da função $\Gamma(z)$ ser estendido ainda

¹Uma fórmula geral para $\Gamma(n+1/2)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, será derivada, ver eq. (1.20).

mais. Utilizando duas vezes (1.2)

$$\Gamma(2+z) = (1+z)\Gamma(1+z) = (1+z)z\Gamma(z),$$

ou ainda

$$\Gamma(z) = \frac{\Gamma(z+2)}{z(z+1)}. \quad (1.5)$$

O lado direito está definido (de acordo com (1.1)) $\forall z, \Re(z) > -2$ e $z \neq 0, -1$. Conseguimos uma extensão analítica ainda maior para $\Gamma(z)$. Além do polo em $z = 0$ percebemos que a função possui um outro polo simples em $z = -1$, já que

$$\Gamma(-1+\epsilon) = \frac{\Gamma(1+\epsilon)}{(-1+\epsilon)\epsilon} \approx -\frac{\Gamma(1)}{\epsilon} = -\frac{1}{\epsilon}, \quad |\epsilon| \ll 1.$$

O processo pode ser repetido indefinidamente, basta utilizar $n+1$ vezes (1.2)

$$\Gamma(z) = \frac{\Gamma(z+n+1)}{z(z+1)(z+2)\dots(z+n)}, \quad (1.6)$$

o novo domínio de $\Gamma(z)$ é $\Re(z) > -n-1$, com $z \neq 0, -1, -2, \dots, -n$, onde a função possui polos simples. Ao tomar o limite $n \rightarrow \infty$ temos a extensão analítica de $\Gamma(z)$ para todo plano complexo. Com isso descobrimos que $\Gamma(z)$ é uma função meromórfica, definida em todo plano complexo exceto nos polos simples localizados em $z = 0, -1, -2, -3, \dots$. Uma forma de tomar o limite (que resulta numa expressão elegante) sem relacionar uma função Gamma com outra é através do seguinte processo: começemos reescrevendo a eq. (1.1)

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^n \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n t^{z-1} dt,$$

já que²

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{t^n}{n!} \equiv e^{-t}.$$

Agora faça a troca de variável $u = \frac{t}{n}$ e comece um processo de n integrações por partes

$$\begin{aligned} \Gamma(z) &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^z \int_0^1 (1-u)^n u^{z-1} du \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^z \frac{n}{z} \int_0^1 (1-u)^{n-1} u^z du \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^z \frac{n(n-1)}{z(z+1)} \int_0^1 (1-u)^{n-2} u^{z+1} du \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^z \frac{n(n-1)(n-2)}{z(z+1)(z+2)} \int_0^1 (1-u)^{n-3} u^{z+2} du \\ &\quad \vdots \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^z \frac{n(n-1)(n-2) \dots 1}{z(z+1)(z+2) \dots (z+n-1)} \underbrace{\int_0^1 (1-u)^{n-n} u^{z+n-1} du}_{=\frac{1}{z+n}}, \end{aligned}$$

logo

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n!}{z(z+1)(z+2) \dots (z+n)} n^z, \quad (1.7)$$

que é equivalente ao resultado (1.6) no limite $n \rightarrow \infty$. Essa é uma forma explícita de escrever $\Gamma(z)$ em todo plano complexo, exceto nos pontos $z = 0, -1, -2, \dots$, onde a função possui polos simples. A eq. (1.7) pode ser encarada como a definição mais geral (*i.e.* com a maior extensão analítica possível) da função $\Gamma(z)$, seu problema é ser de difícil manuseio³.

1.2 Função Beta

A função Beta é definida como a seguinte combinação de funções Gammas:

$$B(a, b) \equiv \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)} \quad (1.8)$$

²o famoso limite fundamental que pode ser facilmente verificado via expansão binomial

³uma propriedade que não é difícil provar com essa fórmula é: $\Gamma(1+z) = z\Gamma(z)$. Prove!

Através da eq. (1.1), vamos derivar uma representação integral para a função Beta.

$$\Gamma(a)\Gamma(b) = \left(\int_0^\infty e^{-x} x^{a-1} dx \right) \left(\int_0^\infty e^{-y} y^{b-1} dy \right); \Re(a), \Re(b) > 0$$

com a troca: $x = u^2$; $y = v^2$

$$\Rightarrow \Gamma(a)\Gamma(b) = 4 \int_0^\infty du \int_0^\infty dv e^{-(u^2+v^2)} u^{2a-1} v^{2b-1}$$

$u = r \cos \theta$ e $v = r \sin \theta$

$$= 4 \left(\underbrace{\int_0^\infty e^{-r^2} r^{2(a+b)-1} dr}_{\frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-t} t^{a+b-1} dt = \frac{1}{2} \Gamma(a+b)} \right) \left(\int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta)^{2a-1} (\sin \theta)^{2b-1} d\theta \right)$$

Levando à representação integral de $B(a, b)$:

$$B(a, b) = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta)^{2a-1} (\sin \theta)^{2b-1} d\theta; \Re(a), \Re(b) > 0 \quad (1.9)$$

Formas Alternativas:

$t = (\cos \theta)^2$ em (1.9)

$$B(a, b) = \int_0^1 t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt \quad (1.10)$$

$t = x^2$ em (1.10)

$$B(a, b) = 2 \int_0^1 x^{2a-1} (1-x^2)^{b-1} dx \quad (1.11)$$

$t = \frac{u}{1+u}$ em (1.10)

$$B(a, b) = \int_0^\infty \frac{u^{a-1}}{(1+u)^{a+b}} du \quad (1.12)$$

1.3 Relação entre a função Gamma e funções trigonométricas

$$B(\alpha, 1 - \alpha) \equiv \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(1 - \alpha)}{\underbrace{\Gamma(1)}_{=1}} = \int_0^\infty \frac{u^{\alpha-1}}{(1+u)} du ; 0 < \Re(\alpha) < 1, \quad (1.13)$$

onde usamos a eq. (1.12)

Resolução da integral: $\int_0^\infty \frac{x^{\alpha-1}}{(1+x)} dx ; 0 < \Re(\alpha) < 1.$

Considere a função $f(z) = \frac{z^{\alpha-1}}{1+z}$; $z \in \mathbb{C}$; $z = x + iy.$

A função $f(z)$ possui um polo simples em $z = -1$ e uma ramificação em $z = 0$. Iremos calcular a integral:

$$I = \oint_C f(z) dz,$$

onde o contorno C é dado pela figura (1.1)

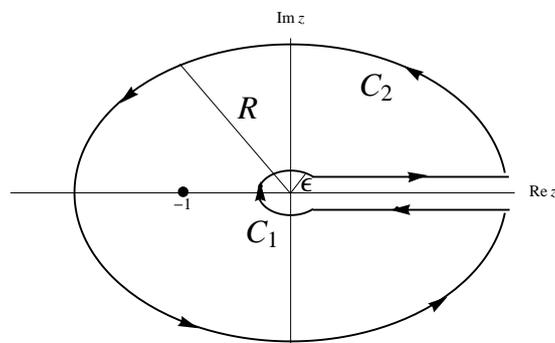


Figura 1.1: Contorno C

$$\begin{aligned} I &= \int_\epsilon^R \frac{x^{\alpha-1}}{1+x} dx + \int_{C_2} \frac{z^{\alpha-1}}{1+z} + \int_R^\epsilon \frac{(e^{2\pi i} x)^{\alpha-1}}{1 + \underbrace{e^{2\pi i}}_{=1} x} dx + \int_{C_1} \frac{z^{\alpha-1}}{1+z} dz \\ &= 2\pi i \operatorname{Res}(f(z)) \Big|_{z=-1} = 2\pi i e^{i\pi(\alpha-1)}. \end{aligned}$$

C_1 :

$$\begin{aligned} & \int_{C_1} \frac{z^{\alpha-1}}{1+z} dz ; z = \epsilon e^{i\theta} \\ &= \epsilon^\alpha \int_0^{2\pi} i \frac{e^{i\alpha\theta}}{1 + \epsilon e^{i\theta}} d\theta \sim \epsilon^\alpha \rightarrow 0 \quad (\epsilon \rightarrow 0). \end{aligned}$$

C_2 :

$$\begin{aligned} & \int_{C_2} \frac{z^{\alpha-1}}{1+z} dz ; z = R e^{i\theta}, \\ &= R^\alpha \int_0^{2\pi} i \frac{e^{i\alpha\theta}}{1 + R e^{i\theta}} d\theta \sim \frac{1}{R^{1-\alpha}} \rightarrow 0 \quad (R \rightarrow \infty). \end{aligned}$$

No limite $\epsilon \rightarrow 0$ e $R \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} 2\pi i e^{i\pi(\alpha-1)} &= (1 - e^{2\pi i(\alpha-1)}) \int_0^\infty \frac{x^{\alpha-1}}{1+x} dx, \\ \Rightarrow \int_0^\infty \frac{x^{\alpha-1}}{1+x} dx &= -\frac{2\pi i}{(e^{\pi i(\alpha-1)} - e^{-\pi i(\alpha-1)})} = -\frac{\pi}{\sin \pi(\alpha-1)} = \frac{\pi}{\sin \pi\alpha}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Substituindo (1.14) em (1.13) temos a relação desejada:

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z}. \quad (1.15)$$

A eq. (1.15) foi derivada apenas para o intervalo $0 < \Re(z) < 1$, porém a função $\Gamma(1-z)\Gamma(z)$ é analítica em todo plano complexo (fora os polos em $z \in \mathbb{Z}$). A função $\frac{\pi}{\sin(\pi z)}$ também é analítica nessa região. Como as funções coincidem na região $0 < \Re(z) < 1$, podemos concluir que elas coincidem na região comum de analiticidade. Portanto, a fórmula (1.15) vale para todo⁴ $z \notin \mathbb{Z}$.

Ela também pode ser escrita da seguinte forma:

$$\Gamma(z)\Gamma(-z) = -\frac{\pi}{z \sin \pi z}. \quad (1.16)$$

⁴A restrição aparente ocorre devido ao fato da eq. ter sido derivada através da representação integral de Γ (eq. (1.1)). Se a derivássemos, por exemplo, via eq. (1.7) (o que é possível, mas muito mais trabalhoso), ela estaria definida $\forall z \notin \mathbb{Z}$

No caso de z ser um imaginário puro, *i.e.* $z \rightarrow ix$, com $x \in \mathbb{R}$, temos uma outra importante relação:

$$\Gamma(ix)\Gamma(-ix) = |\Gamma(ix)|^2 = \frac{\pi}{x \sinh \pi x}. \quad (1.17)$$

Uma importante aplicação da relação entre o produto de funções Gamma e o seno é a determinação da forma exata do resíduo de $\Gamma(z)$ no polo simples $z = -m$ (fator que multiplica o termo divergente de $\Gamma(-m + \epsilon)$, $m = 0, 1, \dots$, $\epsilon \rightarrow 0$). Para isso, faça $z = 1 - (m - \epsilon)$, com $m = 0, 1, \dots$ e $\epsilon \ll 1$ em (1.15)

$$\begin{aligned} \Gamma(-m + \epsilon) &= \frac{\pi}{\sin(\pi + \pi(m - \epsilon))} \frac{1}{\Gamma(1 + m - \epsilon)} = \frac{\pi}{-1 \sin \pi(m - \epsilon)} \frac{1}{\Gamma(1 + m - \epsilon)}, \\ &= \frac{\pi}{(-1)^m \sin \pi \epsilon} \frac{1}{\Gamma(1 + m - \epsilon)} \approx \frac{(-1)^m}{m!} \frac{1}{\epsilon} (1 + \psi(1 + m)), \end{aligned} \quad (1.18)$$

onde $\psi(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{d\Gamma(z)}{dz}$, a função Digamma - ver exercício 4.

1.4 Fórmula de duplicação de Legendre

Para encerrarmos o capítulo iremos derivar uma última relação. Tenha

$$B\left(z + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}\right) = \frac{\Gamma(z + \frac{1}{2})^2}{\Gamma(2z + 1)} \stackrel{\text{eq. (1.10)}}{=} \int_0^1 t^{z-1/2} (1-t)^{z-1/2} dt = 2 \int_0^{1/2} t^{z-1/2} (1-t)^{z-1/2} dt,$$

porque o integrando é par em relação ao ponto $t = \frac{1}{2}$. Com a troca $2t = 1 + \sqrt{x}$

$$= 2^{-2z} \underbrace{\int_0^1 x^{-1/2} (1-x)^{z-1/2} dx}_{\stackrel{\text{eq. (1.10)}}{=} B(1/2, z+1/2) = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(z+1/2)}{\Gamma(z+1)}},$$

então

$$\sqrt{\pi} \Gamma(2z + 1) = 2^{2z} \Gamma(z + 1) \Gamma(z + 1/2), \quad (1.19)$$

que é a fórmula de duplicação de Legendre. No caso particular de $z = n \in \mathbb{N}$,

$$\Gamma(n + 1/2) = \frac{(2n)! \sqrt{\pi}}{2^{2n} n!}. \quad (1.20)$$

1.5 Exercícios Propostos

(1) Ângulo sólido e volume de uma “bola” em d dimensões:

O elemento de volume d -dimensional em coordenadas esféricas é dado por: $d^d x = d\Omega^{d-1} r^{d-1} dr$, onde $d\Omega^{d-1} \equiv$ ângulo sólido.

Prove que:

(a) $\int_{S^{d-1}} d\Omega^{d-1} = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$, onde S^{d-1} é a esfera em $(d-1)$ -dimensões.

(b) O volume da “bola” d -dimensional de raio R é: $V(B^d) = \frac{2\pi^{d/2}}{d\Gamma(d/2)} R^d$.

Dica: use a igualdade:

$$(\sqrt{\pi})^d = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \right)^d = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_1^2} dx_1 \right) \dots \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_d^2} dx_d \right) = \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\sum_{i=1}^d x_i^2} d^d x.$$

(2) Prove a relação abaixo:

$$\Gamma(z) \approx \frac{1}{z} - \gamma + \mathcal{O}(z), \quad (1.21)$$

onde

$$\gamma \equiv - \int_0^{\infty} e^{-t} \ln(t) dt = - \frac{d}{dz} \Gamma(1+z) \Big|_{z=0} \approx 0.5772, \quad (1.22)$$

é a famosa constante de Euler. *Dica:* utilize as eqs. (1.1) e (1.2) e expanda $\Gamma(1+z)$ em Taylor ao redor de $z = 0$. A eq. (1.21) é muito importante para o processo de renormalização dimensional em teorias quânticas dos campos.

(3) Calcule a integral:

$$\int_0^{\pi} (\sin \theta)^{2n+1} d\theta, \quad n \in \mathbb{N}$$

(Resposta: $\frac{2^{2n+1}(n!)^2}{(2n+1)!}$)

Dica: Identifique a integral como uma função Beta e use a eq. (1.20).

(4) Função Digamma e mais sobre a constante de Euler:

A função Digamma é definida como a derivada logarítmica de $\Gamma(z)$, *i.e.*

$$\psi(z) \equiv \frac{d}{dz} \ln \Gamma(z). \quad (1.23)$$

Usando a identidade $\Gamma(1+z) = z\Gamma(z)$ em conjunto com a eq. (1.7), demonstre que

$$\psi(1+z) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{m=1}^n \frac{1}{m} - \ln n \right) + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z}{l(z+l)}. \quad (1.24)$$

Obs.: $\psi(1) = \frac{1}{\Gamma(1)} \frac{d}{dz} \Gamma(1+z) \Big|_{z=0} = -\gamma$ pela eq. (1.22), logo tomando $z = 0$ no resultado acima chegamos numa outra forma de escrever a constante de Euler:

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{m=1}^n \frac{1}{m} - \ln n \right). \quad (1.25)$$

A eq. (1.25) é útil para encontrarmos valores aproximados de γ de forma bem simples (usando uma calculadora), basta fixar um valor finito para n (quanto maior o valor escolhido, melhor será a aproximação)⁵. Com (1.25), a representação em série da função Digamma fica

$$\psi(1+z) = -\gamma + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z}{l(z+l)}. \quad (1.26)$$

Repare que assim como a função Gamma, a Digamma possui polos simples quando o argumento é $0, -1, -2, \dots$. O fator multiplicativo (resíduo) pode ser determinado fazendo $z+1 = -m + \epsilon$, $m = 0, 1, \dots$ em (1.26) (no fim toma-se $\epsilon \rightarrow 0$)

$$\psi(-m + \epsilon) = -\gamma + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-m - 1 + \epsilon)}{l(l - 1 - m + \epsilon)},$$

⁵por exemplo, $\gamma_{n=100} = 0.582207$. O erro relativo é de 0.865%.

cuja soma é dominada pelo termo $l = m + 1$ (onde está o polo)

$$\Psi(-m + \epsilon) \approx -\gamma - \frac{1 + (m - \epsilon)}{(m + 1)\epsilon} \approx -\frac{1}{\epsilon} + \mathcal{O}(\epsilon^0). \quad (1.27)$$

(5) Definição alternativa para a função Gamma:

Começando da eq. (1.7) e com a ajuda de (1.25), mostre que

$$\frac{1}{\Gamma(z)} = ze^{\gamma z} \prod_{m=1}^{\infty} \left(1 + \frac{z}{m}\right) e^{-\frac{z}{m}}, \quad (1.28)$$

onde γ é dado pela eq. (1.25). A definição da função Γ como (1.28) é chamada de definição de Weierstrass.

Capítulo 2

Funções Hipergeométrica e Hipergeométrica Confluente

2.1 Função Hipergeométrica

2.1.1 Equação diferencial e solução via série de potências

Tenha a seguinte equação diferencial ordinária (EDO) de segunda ordem¹:

$$z(1-z)\frac{d^2y(z)}{dz^2} + [c - (a+b+1)z]\frac{dy(z)}{dz} - aby(z) = 0. \quad (2.1)$$

Ela é invariante sob a permutação $a \leftrightarrow b$ e possui singularidades regulares nos pontos $z = 0$, $z = 1$ e $z = \infty$,². Vamos procurar uma solução via série de potências (Frobenius)

$$y(z) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n z^{n+k}; \quad k \in \mathbb{R}; \quad g_0 \neq 0.$$

¹No capítulo 2, o argumento z será considerado como real ou um imaginário puro. Os coeficientes a , b e c são números complexos.

²Uma ampla discussão sobre singularidades em EDO's pode ser encontrada no apêndice B. A leitura desse apêndice é basicamente um pré-requisito para o estudo do capítulo.

O raio de convergência da série é $|z| \leq 1$ para $\Re(c - a - b) > 0$ (a ser justificado)

$$\begin{aligned} y'(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} (k+n)z^{k+n-1}, \\ y''(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} (k+n-1)(k+n)z^{k+n-2}. \end{aligned}$$

Substituindo em (2.1) e agrupando termo a termo:

$$k(k-1+c)g_0z^{k-1} + \sum_{n=0}^{\infty} \left[(k+n+1)(k+n+c)g_{n+1} - [(k+n)(k+n+a+b) + ab]g_nz^{n+k} \right] = 0,$$

como $g_0 \neq 0 \Rightarrow k(k+c-1) = 0$ ou

$$k = \begin{cases} 0 \\ 1-c \end{cases} \quad (2.2)$$

Caso $k = 0$:

Temos a relação de recorrência:

$$g_{n+1} = \frac{(n+a)(n+b)}{(n+1)(n+c)}g_n; \quad c \neq 0, -1, -2, \dots, \quad (2.3)$$

escolhendo $g_0 = 1$

$$\Rightarrow y(z)_{k=0} = 1 + \frac{ab}{c}z + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)}\frac{z^2}{2} + \dots,$$

ou

$$y(z)_{k=0} = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{z^n}{n!} \equiv {}_2F_1(a, b; c; z), \quad (2.4)$$

pois, usando sucessivamente a eq. (1.2) chega-se à igualdade

$$a(a+1)(a+2) \dots a(a+n-1) = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}. \quad (2.5)$$

A eq. (2.4) é a famosa função hipergeométrica em sua representação de série de potências.

Propriedades importantes

(a) se $-a$ (ou $-b$) $\in \mathbb{N}$, então:

$$g_{-a+1} = \frac{(-a+a)(-a+b)}{(-a+1)(-a+c)} g_{-a} = 0 ; -a \in \mathbb{N},$$

logo

$$g_n = 0 ; \forall n > -a \quad (-a \in \mathbb{N}),$$

$\Rightarrow {}_2F_1(-N, b; c; z)$ é um polinômio de grau N ($N \in \mathbb{N}$). Utilizando o fato que:

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma(-(N-n))}{\Gamma(-N)} &= \frac{(-N+n-1)!}{(-N-1)!} = (-N+n-1)(-N+n-2)\dots(-N+n-(n-1))(-N), \\ &= (-1)^n N(N-1)(N-2)\dots(N-(n-2))(N-(n-1)) \left(\frac{(N-n)!}{(N-n)!} \right), \\ &= (-1)^n \frac{N!}{(N-n)!}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

o polinômio ${}_2F_1(-N, b; c; z)$ toma a forma:

$${}_2F_1(-N, b; c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)} \sum_{n=0}^N (-1)^n \frac{N!}{(N-n)!} \frac{\Gamma(b+n) z^n}{\Gamma(c+n) n!}, \quad (2.7)$$

(b) se $b = c$

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b; b; z) &= \frac{1}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{n!} z^n, \\ &= 1 + az + (a+1)a \frac{z^2}{2} + (a+2)(a+1)a \frac{z^3}{3!} + \dots, \\ &= (1-z)^{-a}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

que pode ser facilmente verificado expandindo $(1-z)^{-a}$ em série de Taylor ao redor de $z = 0$.

Caso $k = 1 - c$:

A recorrência fica:

$$g_{n+1} = \frac{(1-c+n)(1+n+a+b-c)+ab}{(2-c+n)(1+n)} g_n = \frac{(n+a+1-c)(n+b+1-c)}{(n+2-c)(1+n)} g_n ; c \neq 2, 3, \dots$$

Assim, a segunda solução também pode ser escrita em termos de uma hipergeométrica:

$$y(z)_{k=1-c} = z^{1-c} {}_2F_1(a+1-c, b+1-c; 2-c; z). \quad (2.9)$$

A solução geral da eq. (2.1) é³:

$$y(z) = A {}_2F_1(a, b; c; z) + B z^{1-c} {}_2F_1(a+1-c, b+1-c; 2-c; z) ; c \notin \mathbb{Z} \quad (2.10)$$

onde A e B são constantes. As soluções são degeneradas, ou seja coincidem, para $c = 1$. Isso indica que a segunda solução não pode ser expandida em série de potências ao redor de $z = 0$, ela tem um comportamento $\sim \ln(z)$, $z \rightarrow 0$. Mais à frente neste capítulo vamos voltar a discutir esse ponto, no Apêndice C também há uma discussão qualitativa do assunto.

Observações:

(i) Se $\Re(c) > 1$, então a segunda solução é singular em $z = 0$, portanto se as condições de contorno exigirem uma solução finita em $z = 0 \Rightarrow B = 0$.

(ii) Assim como a equação diferencial (2.1), a solução (2.10) é invariante sob a permutação $a \leftrightarrow b$.

(iii) Derivando (2.1)

$$z(1-z) \frac{d^2 y'(z)}{dz^2} + [c+1 - (a+b+3)z] \frac{dy'(z)}{dz} - (a+b+1+ab)y'(z) = 0, \quad (2.11)$$

$$z(1-z) \frac{d^2 y'(z)}{dz^2} + [c+1 - ((a+1) + (b+1) + 1)z] \frac{dy'(z)}{dz} - (a+1)(b+1)y'(z) = 0,$$

temos uma nova EDO hipergeométrica, agora com $a, b, c \rightarrow a+1, b+1, c+1$, respectivamente. A conclusão é que se $y_{a,b,c}(z)$ é solução de (2.1), então $y'_{a,b,c}(z)$ é solução da mesma equação com coeficientes acrescidos pela unidade.

³no caso $c \in \mathbb{Z}$, o método de série de potências só fornece uma solução. A explicação desse problema e um método alternativo para encontrar a segunda solução independente encontram-se no apêndice C

(iv) A equação (2.9) diz que se realizarmos o *ansatz* $y(z) = z^{1-c}F(z)$ em (2.1), teremos

$$z(1-z)\frac{d^2F(z)}{dz^2} + [2-c-(a+b-2c+3)z]\frac{dy(z)}{dz} - (a+1-c)(b+1-c)y(z) = 0 \quad (2.12)$$

a EDO hipergeométrica com $a \rightarrow a+1-c$, $b \rightarrow b+1-c$ e $c \rightarrow 2-c$. Essa observação tem sua relevância, ela garante que só precisamos saber as soluções gerais de (2.1) para $c > 1$ (ou $c < 1$), pois, suponha $c < 1$, então $y_{a,b;c}(z) = z^{1-c}F(z)$ é solução de (2.1) ($c < 1$) se $F(z)$ for solução de (2.12), uma EDO hipergeométrica com seu “ c ” = $2-c > 1$. Esse fato será utilizado na seção 2.1.6

2.1.2 Soluções centradas nas outras singularidades

A solução geral (2.10) da EDO (2.1) está descrita em termos de série de potências ao redor da singularidade regular $z = 0$. Por outro lado, a mesma EDO possui outras duas singularidades regulares, uma em $z = 1$ e outra em $z \rightarrow \infty$. Aqui será demonstrado que é possível escrever soluções para a mesma EDO em termos de funções hipergeométricas centradas nos outros dois pontos singulares.

- $z = 1$: Faça a troca $z = 1 - \sigma$ em (2.1). Com um pouco de carinho a nova EDO pode ser escrita da forma

$$\sigma(1-\sigma)y''(\sigma) + [a+b+1-c-(a+b+1)\sigma]y'(\sigma) - aby(\sigma) = 0, \quad (2.13)$$

que possui a mesma forma de (2.1) trocando $z \rightarrow \sigma$, $c \rightarrow a+b+1-c$ (a e b permanecem os mesmos) e sua solução geral é dada por (2.10) com as respectivas substituições. Assim outro par de soluções independentes da EDO hipergeométrica é:

$$y(z) = A_1 {}_2F_1(a, b; a+b+1-c; 1-z) + \quad (2.14)$$

$$+ B_1 (1-z)^{c-a-b} {}_2F_1(c-b, c-a; 1+c-a-b; 1-z); \quad c-a-b \notin \mathbb{Z}, \quad c \neq a+b.$$

Um resultado tão bom quanto (2.10). É crucial conseguirmos escrever a solução geral

da EDO hipergeométrica de mais de uma forma, pois cada uma possui suas limitações e vantagens. Por exemplo, se $c \in \mathbb{Z}$ e $c - a - b \notin \mathbb{Z}$, então apenas (2.14) é bem definida (o raciocínio inverso é válido). As soluções são degeneradas quando $c = a + b$ e há singularidade $\sim \ln(1 - z)$.

• $z \rightarrow \infty$: Para estudar esse limite a coordenada adequada é $u = 1/z$, a EDO (2.1) fica (ver apêndice B)

$$u(1-u)y''(u) + [1-a-b-(2-c)u]y'(u) + \frac{ab}{u}y(u) = 0, \quad (2.15)$$

que não é exatamente uma hipergeométrica, mas pode ser transformada em uma com o simples *ansatz* $y(z) = u^k F(u)$, onde k é raiz de $k^2 - (a+b)k + ab = 0$, ou seja, $k = a$ ou $k = b$. Os detalhes desse cálculo (e uma justificativa para o *ansatz*) podem ser encontrados na seção 3.1. A EDO para $F(u)$, com a escolha $k = a$, é a seguinte Hipergeométrica

$$u(1-u)y''(u) + [1+a-b-(2a-c+2)u]y'(u) - a(1+a-c)y(u) = 0, \quad (2.16)$$

com coeficientes (basta comparar com (2.1)): $a_\infty = a$, $b_\infty = 1 - c + a$ e $c_\infty = 1 + a - b$.

A solução geral é obtida via (2.10)

$$y(z) = A_\infty z^{-a} {}_2F_1(a, 1+a-c; 1+a-b; 1/z) + B_\infty z^{-b} {}_2F_1(b, 1+b-c; 1+b-a; 1/z), \quad a-b \notin \mathbb{Z}, a \neq b. \quad (2.17)$$

Neste caso, as soluções são degeneradas quando $a = b$, indicando singularidade essencial em $z \rightarrow \infty$. As eqs (2.10), (2.14) e (2.17) são todas soluções gerais da EDO hipergeométrica (2.1), cada uma descrita em termos de séries de potências centradas em uma das singularidades regulares. Obviamente cada solução pode ser escrita como combinação

linear das outras, portanto existem constantes A_1 , B_1 , A_∞ e B_∞ , tais que

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b; c; z) &= A_1 {}_2F_1(a, b; a + b + 1 - c; 1 - z) + \\ &\quad + B_1 (1 - z)^{c-a-b} {}_2F_1(c - b, c - a; 1 + c - a - b; 1 - z); \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b; c; z) &= A_\infty z^{-a} {}_2F_1(a, 1 + a - c; 1 + a - b; 1/z) + \\ &\quad + B_\infty z^{-b} {}_2F_1(b, 1 + b - c; 1 + b - a; 1/z). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Na subseção 2.1.5 esses coeficientes serão determinados.

2.1.3 Representação Integral

Vamos estudar representações integrais para a função hipergeométrica que, em particular, serão úteis na derivação das formas assintóticas da hipergeométrica, ver subseção 2.1.5.

Iniciando com a integral

$$I = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(d)\Gamma(c-d)} \int_0^1 {}_2F_1(a, b; d; zt) t^{d-1} (1-t)^{c-d-1} dt; \quad \Re(c) > \Re(d) > 0.$$

Substituindo a eq. (2.4) dentro da integral e invertendo a ordem da soma e integral

$$\begin{aligned} I &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(d)\Gamma(c-d)} \left(\frac{\Gamma(d)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(b+n)\Gamma(d+n)} \frac{z^n}{n!} \left(\underbrace{\int_0^1 t^{n+d-1} (1-t)^{c-d-1} dt}_{\substack{\text{eq. (1.10)} \\ \equiv B(n+d, c-d) = \frac{\Gamma(n+d)\Gamma(c-d)}{\Gamma(n+c)}}} \right) \\ &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{z^n}{n!} \equiv {}_2F_1(a, b; c; z) \end{aligned}$$

Assim:

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(d)\Gamma(c-d)} \int_0^1 {}_2F_1(a, b; d; zt) t^{d-1} (1-t)^{c-d-1} dt; \quad (2.20)$$

Essa é uma representação integral de uma hipergeométrica em termos de outra. Tudo é válido para $\Re(c) > \Re(d) > 0$. No caso particular $d = b$, ela assume uma forma mais

simples. Da eq. (2.8) temos:

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)\Gamma(c-b)} \int_0^1 t^{b-1}(1-t)^{c-b-1}(1-zt)^{-a} dt; \Re(c) > \Re(b) > 0 \quad (2.21)$$

que é a representação integral usual da hipergeométrica. Vamos mostrar duas aplicações simples da eq. (2.21).

Primeira: tomando $z = 1$ em (2.21):

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b; c; 1) &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)\Gamma(c-b)} \underbrace{\int_0^1 t^{b-1}(1-t)^{c-a-b-1} dt}_{\stackrel{\text{eq. (1.10)}}{=} B(b, c-a-b) = \frac{\Gamma(b)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)}} \\ &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} \end{aligned} \quad (2.22)$$

com⁴ $\Re(c-a-b) > 0$ e $\Re(b) > 0$.

Segunda: derivando os dois lados da igualdade

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} {}_2F_1(a, b; c; z) &= a \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)\Gamma(c-b)} \int_0^1 t^b(1-t)^{c-b-1}(1-zt)^{-(a+1)} dt \\ &= \frac{ab}{c} \frac{\overbrace{c\Gamma(c)}^{\Gamma(1+c)}}{\underbrace{b\Gamma(b)}_{\Gamma(1+b)} \Gamma(c-b)} \int_0^1 t^{(b+1)-1}(1-t)^{(c+1)-(b+1)-1}(1-zt)^{-(a+1)} dt \\ &= \frac{ab}{c} {}_2F_1(a+1, b+1; c+1; z) \end{aligned}$$

Repetindo o processo m vezes

$$\frac{d^m}{dz^m} {}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{[a(a+1)\dots(a+m-1)][b(b+1)\dots(b+m-1)]}{c(c+1)\dots(c+m-1)} {}_2F_1(a+m, b+m; c+m; z)$$

que pode ser escrito de uma forma mais elegante (via eq. (2.5))

$$\frac{d^m}{dz^m} {}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{\Gamma(m+a)}{\Gamma(a)} \frac{\Gamma(m+b)}{\Gamma(b)} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(m+c)} {}_2F_1(a+m, b+m; c+m; z) \quad (2.23)$$

⁴condição de validade da equação (1.10), justificando o raio de convergência da série de potências, $0 < z < 1$.

2.1.4 Relações Úteis

(i) Da representação integral (2.21), temos:

$$\begin{aligned} {}_2F_1\left(a, c-b; c; \frac{-z}{1-z}\right) &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-b)\Gamma(b)} \int_0^1 t^{c-b-1}(1-t)^{b-1} \left(1 + \frac{zt}{1-z}\right)^{-a} dt \\ &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-b)\Gamma(b)} (1-z)^a \int_0^1 t^{c-b-1}(1-t)^{b-1} (1 - (1-t)z)^{-a} dt \end{aligned}$$

agora faça a troca: $1-t = u$

$$\begin{aligned} &= (1-z)^a \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-b)\Gamma(b)} \int_0^1 u^{b-1}(1-u)^{c-b-1} (1+zu)^{-a} dt \\ &= (1-z)^a {}_2F_1(a, b, c; z). \end{aligned}$$

Ou seja

$${}_2F_1(a, b, c; z) = (1-z)^{-a} {}_2F_1\left(a, c-b; c; \frac{-z}{1-z}\right) \quad (2.24)$$

que relaciona, e.g. valores da hipergeométrica no intervalo $0 < \frac{-z}{1-z} < 1$ (a série (2.4) converge nesse intervalo) com valores entre $-\infty < z < 0$. Assim, a eq. (2.24) permite uma continuação analítica da função hipergeométrica.

(ii) Definindo $y(z) = (1-z)^{c-a-b}\xi(z)$, onde $y(z)$ é solução da Hipergeométrica.

$$\begin{aligned} \Rightarrow y'(z) &= (1-z)^{c-a-b} [-(c-a-b)(1-z)^{-1}\xi + \xi'] \\ y''(z) &= (1-z)^{c-a-b} \left[(c-a-b)(c-a-b-1)(1-z)^{-2}\xi - 2\frac{(c-a-b)}{1-z}\xi' + \xi'' \right] \end{aligned}$$

Substituindo na eq. (2.1) e simplificando:

$$\begin{aligned} (1-z)^{(c-a-b)} \left[z(1-z)\xi'' - [c - ((c-a) + (c-b) + 1)z]\xi' - (c-a)(c-b)\xi \right] &= 0 \\ \Rightarrow \xi(z) &= A {}_2F_1(c-a, c-b; c; z) + Bz^{1-c} {}_2F_1(-a+1, -b+1, 2-c; z), \quad A, B = \text{const.} \end{aligned}$$

Determinamos outra forma de escrever a solução geral. Tomando $y(z) = {}_2F_1(a, b; c; z)$ e $|z| \ll 1$ temos

$${}_2F_1(a, b; c; z) \approx 1 + \mathcal{O}(z) = A(1 + \mathcal{O}(z)) + Bz^{1-c}(1 + \mathcal{O}(z)),$$

como a igualdade independe de c , necessariamente temos $B = 0$ e $A = 1$. Portanto:

$${}_2F_1(a, b; c; z) = (1 - z)^{c-a-b} {}_2F_1(c - a, c - b; c; z), \quad (2.25)$$

uma relação não trivial entre duas hipergeométricas.

2.1.5 Expansões Assintóticas

Os cálculos preliminares são suficientes para derivarmos a forma assintótica da função hipergeométrica ao redor das singularidades $z = 1$ e $|z| \rightarrow \infty$.

(i) $z \rightarrow 1$: De acordo com a eq. (2.18)

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b; c; z) &= A_1 {}_2F_1(a, b; a + b + 1 - c; 1 - z) + \\ &\quad + B_1 (1 - z)^{c-a-b} {}_2F_1(c - b, c - a; 1 + c - a - b; 1 - z), \\ &\stackrel{z \rightarrow 1}{\approx} A_1 (1 + \mathcal{O}(1 - z)) + B_1 (1 - z)^{c-a-b} (1 + \mathcal{O}(1 - z)). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Com um pouco de malabarismo vamos determinar as constantes A_1 e B_1 .

Para $\Re(c) > \Re(a + b)$, o termo que acompanha A_1 é o líder da expansão e o outro o sublíder. A função hipergeométrica é finita e seu valor é fornecido pela eq. (2.22). Ao comparar com (2.26) determinamos

$$A_1 = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c - b - a)}{\Gamma(c - a)\Gamma(c - b)}. \quad (2.27)$$

Já se $\Re(c) < \Re(a + b)$, a hipergeométrica não é definida (é singular) no ponto $z = 1$ e o

termo líder em (2.26) é o que acompanha B_1 . A equação (2.25) nos fornece a forma como a hipergeométrica diverge. Dela temos:⁵

$${}_2F_1(a, b; c; z) \stackrel{z \rightarrow 1}{\approx} (1-z)^{c-a-b} {}_2F_1(c-a, c-b; c; 1) = (1-z)^{c-a-b} \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}.$$

O resultado fixa B_1 como a constante que multiplica $(1-z)^{c-a-b}$. Então temos a igualdade exata

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b; c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-b-a)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b; a+b+1-c; 1-z) + \\ &+ \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-z)^{c-a-b} {}_2F_1(c-b, c-a; 1+c-a-b; 1-z), \end{aligned} \quad (2.28)$$

que nas redondezas de $z = 1$ pode ser aproximada por

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b; c; z) &\stackrel{z \rightarrow 1}{\approx} \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-b-a)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} (1 + \mathcal{O}(1-z)) + \\ &\frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-z)^{c-a-b} (1 + \mathcal{O}(1-z)). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Repare na simetria nos índices a e b . A equação (2.29) é válida para os dois casos analisados, sendo que um dos termos domina o outro. Uma observação importante é que para $a = -N$, $N \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$, o segundo termo desaparece devido ao polo de $\Gamma(a)$ e a função é sempre finita no ponto $z = 1$ - o esperado, uma vez que é um polinômio. Ainda falta um caso a ser analisado, ele é mais sutil.

Caso: $c = a + b$. Não é possível substituir diretamente $c = a + b$ no assintótico (2.29) devido aos termos $\Gamma(\pm c \mp a \mp b)$. O resultado correto (que você só vai encontrar aqui) é encontrado através do seguinte limite. Faça $c = a + b + \varepsilon$ em (2.29)

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b; a+b+\varepsilon; z) &\stackrel{z \rightarrow 1}{\approx} \frac{\Gamma(a+b+\varepsilon)\Gamma(\varepsilon)}{\Gamma(b+\varepsilon)\Gamma(a+\varepsilon)} (1 + \mathcal{O}(1-z)) + \\ &\frac{\Gamma(a+b+\varepsilon)\Gamma(-\varepsilon)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-z)^\varepsilon (1 + \mathcal{O}(1-z)). \end{aligned}$$

⁵ ${}_2F_1(c-a, c-b; c; 1)$ existe, pois $\Re(c) < \Re(a+b)$ (ver equação (2.22))

Agora o limite $\varepsilon \rightarrow 0$ será tomado. Para isso vamos precisar dos resultados

$$\begin{aligned}\Gamma(\pm\varepsilon) &\approx -\gamma \pm \frac{1}{\varepsilon}, \quad \Gamma(x + \varepsilon) \approx \Gamma(x) (1 + \varepsilon\psi(x)), \\ (1 - z)^\varepsilon &= e^{\varepsilon \ln(1-z)} \approx 1 + \varepsilon \ln(1 - z),\end{aligned}\tag{2.30}$$

onde foram usadas (1.21) e (1.23). Dessa forma

$$\begin{aligned}{}_2F_1(a, b; a + b + \varepsilon; z) &\stackrel{z \rightarrow 1}{\approx} \frac{\Gamma(a + b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \left[(1 + \psi(a + b)\varepsilon) (1 - \psi(a)\varepsilon) (1 - \psi(b)\varepsilon) \left(\frac{1}{\varepsilon} - \gamma\right) + \right. \\ &\quad \left. (1 + \psi(a + b)\varepsilon) \left(-\frac{1}{\varepsilon} - \gamma\right) (1 + \varepsilon \ln(1 - z)) \right].\end{aligned}$$

Simplificando a expressão acima os termos divergentes se anulam e o limite $\varepsilon \rightarrow 0$ é bem definido. O resultado final é

$${}_2F_1(a, b; a + b; z) \stackrel{z \rightarrow 1}{\approx} -\frac{\Gamma(a + b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (2\gamma + \psi(a) + \psi(b) + \ln(1 - z) + \mathcal{O}(1 - z)).\tag{2.31}$$

(ii) $|z| \rightarrow \infty$: O assintótico será derivado com base na equação (2.19), reproduzida aqui

$$\begin{aligned}{}_2F_1(a, b; c; z) &= A_\infty z^{-a} {}_2F_1(a, 1 + a - c; 1 + a - b; 1/z) + \\ &\quad + B_\infty z^{-b} {}_2F_1(b, 1 + b - c; 1 + b - a; 1/z), \\ &\stackrel{|z| \gg 1}{\approx} A_\infty z^{-a} (1 + \mathcal{O}(1/z)) + B_\infty z^{-b} (1 + \mathcal{O}(1/z)).\end{aligned}\tag{2.32}$$

A questão é determinar A_∞ e B_∞ . Para isso coloque (2.24) dentro da integral (2.20):

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(d)\Gamma(c-d)} \int_0^1 t^{d-1} (1-t)^{c-d-1} (1-zt)^{-a} {}_2F_1\left(a, d-b; d; -\frac{zt}{1-zt}\right) dt$$

para $|z| \rightarrow \infty$ e $\Re(b) > \Re(a)$

$${}_2F_1\left(a, d-b; d; -\frac{zt}{1-zt}\right) \approx {}_2F_1(a, d-b; d; 1) = \frac{\Gamma(d)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(d-a)},$$

portanto

$$\begin{aligned}
{}_2F_1(a, b; c; z) &\stackrel{|z| \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\Gamma(c)\Gamma(d)\Gamma(b-a)}{\Gamma(d)\Gamma(c-d)\Gamma(b)\Gamma(d-a)} \int_0^1 t^{d-1}(1-t)^{c-d-1}(-zt)^{-a} dt \\
&= \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)(-z)^{-a}}{\Gamma(c-d)\Gamma(b)\Gamma(d-a)} \underbrace{\int_0^1 t^{d-a-1}(1-t)^{c-d-1} dt}_{\stackrel{\text{eq. (1.10)}}{=} B(d-a, c-d) = \frac{\Gamma(d-a)\Gamma(c-d)}{\Gamma(c-a)}} , \text{ ou} \\
{}_2F_1(a, b; c; z) &\stackrel{|z| \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} ; \Re(b) > \Re(a).
\end{aligned}$$

Ao comparar com (2.32) determinamos a constante

$$A_\infty = (-1)^{-a} \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)},$$

mas e a outra constante? Sabemos que a função hipergeométrica é simétrica com relação a permutação dos índices a e b (como (2.32)), por outro lado, a expressão assintótica encontrada não possui tal simetria. Isso é natural, já que ela foi derivada assumindo uma diferença entre esses índices, $\Re(b) > \Re(a) \Rightarrow |z|^{-b} \ll |z|^{-a}$, quando $|z| \rightarrow \infty$, ou seja, o termo simétrico de $\mathcal{O}(|z|^{-b})$ em (2.32) não aparece na expressão acima, pois é de segunda ordem em relação ao termo de $\mathcal{O}(|z|^{-a})$ - termo líder. O outro caso ($\Re(b) < \Re(a) \Rightarrow |z|^{-b} \gg |z|^{-a}$, quando $|z| \rightarrow \infty$) pode ser facilmente derivado repetindo todos os cálculos, porém permutando os índices a e b no lado direito das equações. O resultado é o mesmo trocando $a \leftrightarrow b$ e como consequência, $B_\infty(a, b, c) = A_\infty(b, a, c)$. O resultado exato fica

$$\begin{aligned}
{}_2F_1(a, b; c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} {}_2F_1(a, 1+a-c; 1+a-b; 1/z) + \\
&\quad + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)} (-z)^{-b} {}_2F_1(b, 1+b-c; 1+b-a; 1/z), \quad (2.33)
\end{aligned}$$

que para $\frac{1}{|z|} \ll 1$ possui a forma

$${}_2F_1(a, b; c; z) \stackrel{|z| \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} (1 + \mathcal{O}(1/z)) + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)} (-z)^{-b} (1 + \mathcal{O}(1/z)), \quad (2.34)$$

simétrica nos índices a e b . Aqui é importante salientar que em várias aplicações físicas a e b são números imaginários puros, nesses casos não há um termo “líder” e ambos

são de mesma ordem. Também repare que a função é real (para coeficientes reais e a e b não naturais) quando $z < 0$ (por causa dos termos $(-z)^{-a}$ e $(-z)^{-b}$). O mesmo procedimento usado nas proximidades de $z = 1$, ver equação (2.31), pode ser usado aqui para a possibilidade particular, $a = b$. Tomando $b = a + \varepsilon$ em (2.34) com $\varepsilon \ll 1$ temos

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, a + \varepsilon; c; z) &\stackrel{|z| \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\Gamma(c)\Gamma(\varepsilon)}{\Gamma(a + \varepsilon)\Gamma(c - a)}(-z)^{-a} + \frac{\Gamma(c)\Gamma(-\varepsilon)}{\Gamma(a)\Gamma(c - a - \varepsilon)}(-z)^{-a - \varepsilon}, \\ &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c - a)} \left[\left(\frac{1}{\varepsilon} - \gamma \right) (1 - \varepsilon\psi(a)) + \right. \\ &\quad \left. \left(-\frac{1}{\varepsilon} - \gamma \right) (1 + \psi(c - a)\varepsilon) (1 - \varepsilon \ln(-z)) \right] \end{aligned}$$

os termos $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ se cancelam e no limite $\varepsilon \rightarrow 0$

$${}_2F_1(a, a; c; z) \stackrel{|z| \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c - a)}(-z)^{-a} (-2\gamma - \psi(a) - \psi(c - a) + \ln(-z)), \quad (2.35)$$

provando a existência da singularidade logarítmica.

2.1.6 Segunda solução para $c \in \mathbb{Z}$

Quando $c \in \mathbb{Z}$, a equação (2.10) não fornece duas soluções l.i. (indicando que a segunda solução possui singularidade essencial na origem), em particular, elas coincidem para $c = 1$. Com toda a bagagem acumulada até agora somos capazes de encontrar uma segunda solução l.i. em qualquer situação.

Abordagem 1: Uso de solução centrada em $z = 1$

A segunda solução sempre pode, a priori, ser obtida através de uma solução definida em termos da série usual, mas centrada em outra singularidade, $z = 1$ ou $z = \infty$ - assunto da seção 2.1.2. Uma opção simples que funciona para qualquer $c \in \mathbb{Z}$, mas não se mostrará prática se as redondezas de $z = 0$ forem de interesse, é a primeira solução da equação (2.14), sendo a única restrição $a + b \notin \mathbb{Z}$. Dessa forma, a proposta de solução geral para

$c \in \mathbb{Z}$ é

$$y_{c=1+p}(z) = A_{1+p} {}_2F_1(a, b; 1 + p; z) + B_{1+p} {}_2F_1(a, b; a + b - p; 1 - z), \quad p = 0, 1, \dots, \quad (2.36)$$

$$y_{c=-p}(z) = A_{-p} z^{1+p} {}_2F_1(a + 1 + p, b + 1 + p; 2 + p; z) + B_{-p} {}_2F_1(a, b; a + b + 1 + p; 1 - z),$$

onde as segundas soluções são problemáticas em $z = 0$. Um caso ilustrativo é $c = 1$ ($p = 0$ na primeira linha de (2.36)), pela equação (2.31)) temos o assintótico

$$y_{c=1}(z) \approx A_{c=1} (1 + \mathcal{O}(z)) - B_{c=1} \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (2\gamma + \psi(a) + \psi(b) + \ln(z) + \mathcal{O}(z)), \quad (2.37)$$

explicitando a singularidade logarítmica - a mesma conclusão é feita no apêndice C de forma qualitativa. Essa abordagem é excelente para $c = 1$, e funciona nas proximidades de $z = 1$ e $z \rightarrow \infty$, por outro lado ela é problemática nas proximidades de $z = 0$, exceto $c = 1$. Isso ocorre pois sempre temos $c - a - b \in \mathbb{Z}$ e o assintótico (2.29) não é válido para esse caso. Para outros valores $c = 2, 3, \dots$, a melhor forma que imaginei para determinar o assintótico (apenas o termo mais singular) em $z = 0$, uma vez que (2.29) não é válida, foi derivando sucessivamente⁶ (2.31) com escolha adequada de parâmetros

$$\begin{aligned} y_{c=1+p}^{(2)}(z) &= (-1)^p \frac{\Gamma(a-p)}{\Gamma(a)} \frac{\Gamma(b-p)}{\Gamma(b)} \frac{\Gamma(a+b-p)}{\Gamma(a+b-2p)} \frac{d^p}{dz^p} {}_2F_1(a-p, b-p; a+b-2p; 1-z) \\ &\stackrel{(2.31)}{\approx} -(-1)^p \frac{\Gamma(a-p)}{\Gamma(a)} \frac{\Gamma(b-p)}{\Gamma(b)} \frac{\Gamma(a+b-p)}{\Gamma(a+b-2p)} \frac{\Gamma(a+b-2p)}{\Gamma(a-p)\Gamma(b-p)} \frac{d^p}{dz^p} \ln(z), \\ &= \frac{\Gamma(a+b-p)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \frac{(p-1)!}{z^p}, \quad p = 1, 2, \dots, \quad z \ll 1. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Para obter os outros termos divergentes, da forma $\sim 1/z^{p-1}, 1/z^{p-2}, \dots$ e $\ln(z)$, é necessário mais termos na expansão (2.31). Um problema pior é para $c = 0, -1, -2, \dots$, os tópicos estudados nessas notas não permitem analisar o comportamento da segunda solução nas proximidades da origem ($c - a - b \in \mathbb{Z}$ e (2.29) não é válida em nenhum caso). Obviamente não seremos detidos por isso, vamos tentar mais uma vez.

⁶E fazendo uso de (2.23).

Abordagem 2: Limite das soluções centradas em $z = 0$

Na nova abordagem vamos continuar com nossa solução geral centrada em $z = 0$, equação (2.10), e o foco será o, já famoso, $c = 1$. Em $c = 1$ as duas soluções coincidem, porém se $c = 1 + \varepsilon$, $\varepsilon \ll 1$, as duas soluções são bem definidas e temos

$$y_\varepsilon(z) = A {}_2F_1(a, b; 1 + \varepsilon; z) + B z^{-\varepsilon} {}_2F_1(a - \varepsilon, b - \varepsilon; 1 - \varepsilon; z).$$

O “truque artesanal” a ser descrito agora será repetido nos estudos da Hipergeométrica Confluyente e Funções de Bessel e segue sugestão descrita no apêndice da referência [5]. Ele consiste em assumir ε um parâmetro contínuo e escolher uma solução que se anule⁷ no limite $\varepsilon \rightarrow 0$ com $\partial_\varepsilon y_\varepsilon(z)|_{\varepsilon=0} = G_1^{a,b}(z) \neq 0$. Nossa escolha é

$$y_\varepsilon(z) = \frac{1}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \left(\frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(1+\varepsilon)} {}_2F_1(a, b; 1 + \varepsilon; z) - \frac{\Gamma(a-\varepsilon)\Gamma(b-\varepsilon)}{\Gamma(1-\varepsilon)} z^{-\varepsilon} {}_2F_1(a-\varepsilon, b-\varepsilon; 1-\varepsilon; z) \right).$$

Dessa forma $y_0(z) = 0$ e

$$G_1^{a,b}(z) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} y_\varepsilon(z) = \partial_\varepsilon y_\varepsilon(z) \Big|_{\varepsilon=0}. \quad (2.39)$$

Por que estou fazendo isso? Porque $G_1(z)$ é solução de (2.1). Pode não parecer, mas é bem fácil provar isso. Considere (2.1) com $c = 1 + \varepsilon$ e derive a EDO com respeito ao parâmetro ε

$$z(1-z) \frac{d^2(\partial_\varepsilon y(z))}{dz^2} + [1 - (a+b+1)z] \frac{d(\partial_\varepsilon y(z))}{dz} - ab(\partial_\varepsilon y(z)) = -\frac{dy_\varepsilon(z)}{dz}. \quad (2.40)$$

Tomando $\varepsilon \rightarrow 0$, o lado direito da igualdade se anula ($y_0(z) = 0$) e no lado esquerdo $\partial_\varepsilon y(z) \rightarrow G_1^{a,b}(z)$, i.e., $G_1^{a,b}(z)$ é solução da EDO hipergeométrica para $c = 1$. Agora só falta determinar $G_1^{a,b}(z)$. O procedimento é semelhante ao realizado em casos já estudados,

⁷Na verdade uma constante é o suficiente.

precisamos apenas de (2.30).

$$\begin{aligned}
G_1^{a,b}(z) &= \frac{1}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \partial_\varepsilon \left(\frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(1+\varepsilon)} {}_2F_1(a, b; 1+\varepsilon; z) - \frac{\Gamma(a-\varepsilon)\Gamma(b-\varepsilon)}{\Gamma(1-\varepsilon)} z^{-\varepsilon} {}_2F_1(a-\varepsilon, b-\varepsilon; 1-\varepsilon; z) \right) \Bigg|_{\varepsilon=0}, \\
&= \frac{1}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \partial_\varepsilon \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(1+\varepsilon+n)} \frac{z^n}{n!} - z^{-\varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a-\varepsilon+n)\Gamma(b-\varepsilon+n)}{\Gamma(1-\varepsilon+n)} \frac{z^n}{n!} \right) \Bigg|_{\varepsilon=0}, \\
&= -2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(a)\Gamma(b)n!} \psi(n+1) \frac{z^n}{n!} + \ln z {}_2F_1(a, b; 1; z) + \\
&\quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(a)\Gamma(b)n!} (\psi(a+n) + \psi(b+n)) \frac{z^n}{n!}. \tag{2.41}
\end{aligned}$$

Expandindo a série

$$G_1^{a,b}(z) \approx (2\gamma + \psi(a) + \psi(b) + \ln z) z^0 + (-2\psi(2) + \psi(a+1) + \psi(b+1) + \ln z) (ab)z + \dots \tag{2.42}$$

Sendo solução da EDO Hipergeométrica, $G_1(z)$ pode ser escrita como a combinação (2.36).

Comparando o assintótico acima com (2.37) temos

$$G_1^{(a,b)}(z) = -\frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)} {}_2F_1(a, b; a+b; 1-z). \tag{2.43}$$

Ou seja, aparentemente a “única” novidade foi conseguir reescrever a segunda solução para $c = 1$, ${}_2F_1(a, b; a+b; 1-z)$, em termos de uma série ao redor de $z = 0$. É claro que há um ganho aqui, repetindo o procedimento da seção anterior, a série completa ao redor de $z = 0$ para as soluções com $c = 1 + p = 2, \dots$ (e não apenas o primeiro termo assintótico), é obtida via múltiplas derivações⁸

$$\begin{aligned}
y_{p+1}^{(2)}(z) &\equiv G_{p+1}^{a,b} = \frac{\Gamma(a-p)\Gamma(b-p)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \frac{d^p}{dz^p} G_1^{a-p, b-p}(z) \\
&= -2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)\psi(n+1+p)}{\Gamma(a)\Gamma(b)(n+p)!} \frac{z^n}{n!} + \\
&\quad \frac{\Gamma(a-p)\Gamma(b-p)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{k=0}^p \frac{p!}{k!(p-k)!} \left(\frac{d^{p-k} \ln z}{dz^{p-k}} \right) {}_2F_1(a-p+k, b-p+k; 1+k; z) + \\
&\quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(a)\Gamma(b)(n+p)!} (\psi(a+n) + \psi(b+n)) \frac{z^n}{n!}.
\end{aligned}$$

⁸De acordo com a observação (iii) do fim da seção 2.1.1. Também repare nos usos da Regra de Leibniz, ver equação (5.26), e da equação (2.23) na p -ésima derivação de $\ln {}_2F_1(a-p, b-p; 1; z)$

Acredito que o resultado fica mais claro separando o termo $\ln z$ na soma (termo $k = p$), pois para $n > 1$, $d^n \ln z / dz^n = -(-1)^n(n-1)!/z^n$, e temos

$$\begin{aligned}
y_{p+1}^{(2)}(z) &= -2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)\psi(n+1+p)}{\Gamma(a)\Gamma(b)(n+p)!} \frac{z^n}{n!} + \\
&\frac{\Gamma(a-p)\Gamma(b-p)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \ln z {}_2F_1(a, b; 1+p; z) - \\
&\frac{\Gamma(a-p)\Gamma(b-p)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{k=0}^{p-1} \frac{(-1)^{p-k} p!}{k!(p-k)} \frac{1}{z^{p-k}} {}_2F_1(a-p+k, b-p+k; 1+k; z) + \\
&\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(a)\Gamma(b)(n+p)!} (\psi(a+n) + \psi(b+n)) \frac{z^n}{n!}. \tag{2.44}
\end{aligned}$$

Esse expressão deixa mais clara as singularidades $\mathcal{O}(1/z^p)$, $\mathcal{O}(1/z^{p-1})$, $\dots \mathcal{O}(1/z)$, e $\mathcal{O}(\ln z)$. O resultado também corrobora com a discussão da apêndice C - a segunda solução segue o padrão $y^{(2)}(z) = u(z) \ln z + v(z)$, onde $u(z)$ é a outra solução linearmente independente. Se $p = 1$, o somatório em k torna-se apenas um termo com $p = 1$ e $k = 0$.

Como diria o vendedor dum antigo programa humor, *e não é só isso*, a solução acima para $c = 1 + p = 2, 3, \dots$ é suficiente para determinar as segundas soluções para $c = -p = 0, -1, -2, \dots$, pois a função está centrada em zero e sabemos, pela observação **(iv)** do fim da seção 2.1.1, que

$$\begin{aligned}
\tilde{G}_{-p}^{a,b}(z) &= z^{1+p} G_{2+p}^{a+1+p, b+1+p}(z), \quad p = 0, 1, 2, \dots, \tag{2.45} \\
&-2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+1+p+n)\Gamma(b+1+p+n)\psi(n+2+p)}{\Gamma(a+1+p)\Gamma(b+1+p)(n+p+1)!} \frac{z^n}{n!} + \\
&\frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+1+p)\Gamma(b+1+p)} \ln z {}_2F_1(a+1+p, b+1+p; 2+p; z) - \\
&\frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+1+p)\Gamma(b+1+p)} \sum_{k=0}^p \frac{(-1)^{p+1-k} p!}{k!(p+1-k)} \frac{1}{z^{p+1-k}} {}_2F_1(a+k, b+k; 1+k; z) + \\
&\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+1+p+n)\Gamma(b+1+p+n)}{\Gamma(a+1+p)\Gamma(b+1+p)(n+p+1)!} (\psi(a+1+p+n) + \psi(b+1+p+n)) \frac{z^n}{n!}.
\end{aligned}$$

é solução da EDO hipergeométrica para a , b e $c = -p = 0, -1, \dots$. Para não gerar confusão, quando $c = 0$, basta colocar $k = p = 0$ no único termo do somatório em k . De forma sublime encerramos nosso estudo sobre a hipergeométrica.

2.2 Função Hipergeométrica Confluente

2.2.1 Equação diferencial e solução via série de potências

Vamos estudar a seguinte EDO de segunda ordem

$$zy''(z) + (c - z)y'(z) - ay(z) = 0 \quad (2.46)$$

com singularidades em $z = 0$ e $z \rightarrow \infty$,⁹. Seguindo a receita, procuramos soluções via série de potências

$$y(z) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n z^{n+k}, \quad k \in \mathbb{R}, \quad g_0 \neq 0, \quad (2.47)$$

portanto

$$\frac{dy(z)}{dz} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+k)g_n z^{n+k-1}, \quad \frac{d^2y(z)}{dz^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+k)(n+k-1)g_n z^{n+k-2}.$$

Tudo em (2.46) resulta em

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} (n+k)(n+k-1)g_n z^{n-1} + c \sum_{n=0}^{\infty} (n+k)g_n z^{n-1} - \sum_{n=0}^{\infty} (n+k)g_n z^n - a \sum_{n=0}^{\infty} g_n z^n &= 0, \\ \sum_{n=-1}^{\infty} (n+1+k)(n+k)g_{n+1} z^n + c \sum_{n=-1}^{\infty} (n+1+k)g_{n+1} z^n - \sum_{n=0}^{\infty} [(n+k)+a]g_n z^n &= 0, \\ [k(k-1) + ck] \frac{g_0}{z} + \sum_{n=0}^{\infty} [(n+1+k)(n+k+c)g_{n+1} - (n+k+a)g_n] z^n &= 0. \end{aligned}$$

Como o resultado vale independente do valor de z , os coeficientes em cada potência são linearmente independentes (l.i.). Por hipótese $g_0 \neq 0$, então temos duas soluções (o esperado já que a EDO é de segunda ordem) para k : $k = 0$, $k = 1 - c$. A primeira escolha fornece a recorrência:

$$g_{n+1} = \frac{n+a}{(n+c)(n+1)} g_n, \quad c \neq 0, -1, -2, \dots \quad (2.48)$$

⁹A primeira regular e a segunda irregular, ver apêndice B.

Ao fixar $g_0 = 1$, toda a série é determinada

$$y_1(z) = 1 + \frac{a}{c}z + \frac{(1+a)a}{(1+c)c} \frac{z^2}{2} + \frac{(2+a)(1+a)a}{(2+c)(1+c)c} \frac{z^3}{3!} + \dots$$

Esta solução possui a seguinte representação em série de potências

$$y_1(z) = {}_1F_1(a; c; z) \equiv \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{z^n}{n!}; \quad c \neq 0, -1, -2, \dots, \quad (2.49)$$

e é chamada de função hipergeométrica confluyente. A outra solução, onde $k = 1 - c$, possui recorrência

$$g_{n+1} = \frac{n + (1 + a - c)}{(n + (2 - c))(n + 1)} g_n, \quad c \neq 2, 3, \dots, \quad (2.50)$$

que claramente pode ser escrita em termos da função hipergeométrica confluyente com $a \rightarrow 1 + a - c$ e $c \rightarrow 2 - c$, logo

$$y_2(x) = x^{1-c} {}_1F_1(1 + a - c; 2 - c; z), \quad c \neq 2, 3, \dots \quad (2.51)$$

A solução geral de (2.46)¹⁰

$$y(z) = A {}_1F_1(a; c; z) + B z^{1-c} {}_1F_1(1 + a - c; 2 - c; z); \quad c \notin \mathbb{Z} \quad (2.52)$$

onde A e B são constantes.

O leitor pode se perguntar o porquê da EDO (2.46) ser chamada de hipergeométrica confluyente. Ela possui relação com a hipergeométrica? A resposta é sim! Com as trocas $z \rightarrow \epsilon z$ e $b \rightarrow 1/\epsilon$, a eq. (2.1) multiplicada por ϵ fica:

$$z(1 - \epsilon z)y(z)'' + [c - (a + \epsilon^{-1} - 1)\epsilon z]y(z)' - ay(z) = 0 \quad (2.53)$$

¹⁰no caso $c \in \mathbb{Z}$, recaímos na mesma discussão já feita para a hipergeométrica.

Tomando o limite $\epsilon \rightarrow 0$ temos a EDO (2.46). De forma análoga, a função (2.49) é obtida pelo limite

$$\begin{aligned}
{}_1F_1(a; c; z) &\equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} {}_2F_1(a, 1/\epsilon; c; \epsilon z) \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{(\epsilon z)^n}{n!} \underbrace{\frac{\Gamma(1/\epsilon + n)}{\Gamma(1/\epsilon)}}_{\frac{1}{\epsilon^n} (1+\epsilon)(1+2\epsilon)\dots(1+(n-1)\epsilon)} \\
&= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{z^n}{n!}.
\end{aligned}$$

Por fim, da mesma forma que a EDO hipergeométrica, a segunda solução indica que se $y(z) = z^{1-c}F(z)$ é solução de (2.46), então $F(z)$ é solução de

$$zF''(z) + (2 - c - z)F'(z) - (a + 1 - c)F(z) = 0, \quad (2.54)$$

ou seja, uma EDO confluyente com $a \rightarrow a + 1 - c$ e $c \rightarrow 2 - c$. Caso queira verificar esse fato explicitamente basta substituir $y(z) = z^{1-c}F(z)$ em (2.46). Existe uma lição aqui - só precisamos das soluções para $c \geq 1$, pois a mesma função gera solução de outra EDO confluyente com $a \rightarrow a + 1 - c$ e $c \rightarrow 2 - c$, com $c \leq 1$.

Observações:

(i) A eq. (2.46) é singular nos pontos $z = 0$ (regular) e $z = \infty$ (irregular). A singularidade no ∞ é formada pela confluência de duas singularidades regulares da hipergeométrica (pontos $z = 1$ e $z = \infty$).

(ii) A hipergeométrica confluyente é um polinômio de grau N se $-a = N \in \mathbb{N}$. E com a ajuda da eq. (2.6) o polinômio pode ser escrito como:

$${}_1F_1(-N; c; z) = \sum_{n=0}^N (-1)^n \frac{N!}{(N-n)!} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c+n)} \frac{z^n}{n!} \quad (2.55)$$

(iii) ${}_1F_1(a; a; z) = \sum_0^\infty \frac{z^n}{n!} = e^z$. **(iv)** Se $y(z)$ é uma solução da EDO (2.46), então $\frac{dy(z)}{dz}$ é solução da EDO confluyente com $a \rightarrow a + 1$ e $c \rightarrow c + 1$.

Prova: Derivando (2.46)

$$\begin{aligned} z \left(\frac{dy(z)}{dz} \right)'' + \left(\frac{dy(z)}{dz} \right)' + (c - z) \left(\frac{dy(z)}{dz} \right)' - \frac{dy}{dz} - a \frac{dy}{dz} &= 0, \\ z \left(\frac{dy(z)}{dz} \right)'' + (c + 1 - z) \left(\frac{dy(z)}{dz} \right)' - (a + 1) \frac{dy}{dz} &= 0. \end{aligned}$$

2.2.2 Representação Integral

Fazendo $b \rightarrow \epsilon^{-1}$ e $z \rightarrow \epsilon z$ em (2.20) e tomando o limite $\epsilon \rightarrow 0$

$${}_1F_1(a; c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(d)\Gamma(c-d)} \int_0^1 {}_1F_1(a; d; zt)t^{d-1}(1-t)^{c-d-1}dt; \Re(c) > \Re(d) > 0, \quad (2.56)$$

Para $d = a$, temos a representação integral da hipergeométrica confluyente usualmente encontrada na literatura:

$${}_1F_1(a; c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \int_0^1 e^{zt}t^{a-1}(1-t)^{c-a-1}dt; \Re(c) > \Re(a) > 0. \quad (2.57)$$

Derivando¹¹

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} [{}_1F_1(a; c; z)] &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \int_0^1 e^{zt}t^{(a+1)-1}(1-t)^{c-a-1}dt, \\ &= \frac{\Gamma(a+1)}{\Gamma(a)} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c+1)} \frac{\Gamma(c+1)}{\Gamma(a+1)\Gamma(c+1-(a+1))} \int_0^1 e^{zt}t^{(a+1)-1}(1-t)^{(c+1)-(a+1)-1}dt. \\ &= \frac{a}{c} {}_1F_1(a+1; c+1; z), \end{aligned}$$

Repetindo o processo m vezes

$$\frac{d^m}{dz^m} ({}_1F_1(a; c; z)) = \frac{\Gamma(a+m)}{\Gamma(a)} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c+m)} {}_1F_1(a+m; c+m; z). \quad (2.58)$$

¹¹Você pode derivar o mesmo resultado usando a representação integral (2.49).

2.2.3 Segunda solução para $c = 1$

Da mesma forma que na hipergeométrica, as duas soluções em (2.52) coincidem quando $c = 1$. A segunda solução será determinada pelo mesmo procedimento realizado na seção 2.1.6 e que será usado novamente no Capítulo 5 - função de Neumann. Suponha $c = 1 + \varepsilon$ ($\varepsilon \ll 1$), a EDO confluyente é

$$zy''_{\varepsilon}(z) + (1 + \varepsilon - z)y'_{\varepsilon}(z) - ay_{\varepsilon}(z) = 0, \quad (2.59)$$

com solução geral

$$y_{\varepsilon}(z) = A_1 F_1(a, 1 + \varepsilon; z) + Bz^{-\varepsilon} {}_1F_1(a - \varepsilon; 1 - \varepsilon; z). \quad (2.60)$$

Derivando (2.59) com relação ao parâmetro ε

$$z(\partial_{\varepsilon}y_{\varepsilon})''(z) + (1 + \varepsilon - z)(\partial_{\varepsilon}y_{\varepsilon})'(z) - a(\partial_{\varepsilon}y_{\varepsilon}) = -\frac{d}{dz}(y_{\varepsilon}(z)). \quad (2.61)$$

Se os parâmetros de (2.60) forem ajustados para $y_{\varepsilon \rightarrow 0}(z) = 0$ (ou constante) e o limite $\partial_{\varepsilon}y_{\varepsilon}(z)|_{\varepsilon=0}$ gerar uma função não trivial, então $\partial_{\varepsilon}y_{\varepsilon}(z)|_{\varepsilon=0}$ é solução da EDO hipergeométrica confluyente para $c = 1$. A escolha usualmente encontrada na literatura é a função hipergeométrica confluyente de segundo tipo, ou simplesmente função U , definida, para $c = 1$, como

$$\begin{aligned} U(a, 1; z) &\equiv \frac{1}{\Gamma(a)^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\Gamma(a - \varepsilon)}{\Gamma(1 - \varepsilon)} z^{-\varepsilon} {}_1F_1(a - \varepsilon; 1 - \varepsilon; z) - \frac{\Gamma(a)}{\Gamma(1 + \varepsilon)} {}_1F_1(a; 1 + \varepsilon; z) \right), \\ &= \frac{1}{\Gamma(a)^2} \partial_{\varepsilon} \left(\frac{\Gamma(a - \varepsilon)}{\Gamma(1 - \varepsilon)} z^{-\varepsilon} {}_1F_1(a - \varepsilon; 1 - \varepsilon; z) - \frac{\Gamma(a)}{\Gamma(1 + \varepsilon)} {}_1F_1(a; 1 + \varepsilon; z) \right) \Big|_{\varepsilon=0} \\ &= \frac{1}{\Gamma(a)^2} \partial_{\varepsilon} \left(z^{-\varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a + n - \varepsilon)}{\Gamma(1 + n - \varepsilon)} \frac{z^n}{n!} \right) \Big|_{\varepsilon=0} - \frac{1}{\Gamma(a)^2} \partial_{\varepsilon} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a + n)}{\Gamma(1 + n + \varepsilon)} \frac{z^n}{n!} \right) \Big|_{\varepsilon=0} \quad (2.62) \end{aligned}$$

Utilizando sem dó (2.30) a segunda solução é determinada pela série

$$U(a; 1; z) = \frac{1}{\Gamma(a)} \left[-\ln(z) {}_1F_1(a; 1; z) + \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{2\psi(n+1) - \psi(n+a)}{n!} \right) \frac{\Gamma(n+a)}{\Gamma(a)} \frac{z^n}{n!} \right] \quad (2.63)$$

Nas proximidades da origem

$$U(a; 1; z) \approx \frac{1}{\Gamma(a)} [(-\ln(z) - 2\gamma - \psi(a)) + a(2 + 2\gamma - \ln(z) - \psi(1+a))z + \mathcal{O}(z^2)] \quad (2.64)$$

2.2.4 Segunda solução para $c \in \mathbb{Z}$

A mesma abordagem realizada na seção anterior¹² pode ser adotada para a obtenção da segunda solução na situação mais geral, $c \in \mathbb{Z}$. Temos vários resultados intermediários que são suficientes para determinar a segunda solução quando $c \in \mathbb{Z}$. Como discutido no texto ao redor da equação (2.54), analisar os casos $c \geq 1$ é o suficiente para determinar as soluções para qualquer c . Suponha uma solução $y_{a;c}(z)$ da EDO confluyente para os parâmetros a e $c > 1$, dessa forma $z^{1-c}y_{a+1-c;2-c}(z)$, para $c < 1$, é bem definida. O último ingrediente necessário é a lembrança da observação (iii) do fim da seção 2.2.1, ela garante que a função definida abaixo,

$$U(a; p+1; z) = (-1)^p \frac{\Gamma(a-p)}{\Gamma(a)} \frac{d^p}{dz^p} U(a-p; 1; z), \quad p = 1, 2, \dots, \quad (2.65)$$

é solução da EDO confluyente para a e $c = p+1$. “Basta” derivar sucessivamente (2.63) para obter¹³

$$\begin{aligned} U(a; p+1; z) = & -\frac{(-1)^p}{p!} \ln(z) {}_1F_1(a; 1+p; z) + \\ & \frac{1}{\Gamma(a)} \sum_{k=0}^{p-1} \frac{p!}{k!(p-k)} \frac{(-1)^k \Gamma(a-p+k)}{z^{p-k} k!} {}_1F_1(a-p+k; 1+k; z) + \\ & \frac{(-1)^p}{\Gamma(a-p)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{2\psi(n+p+1) - \psi(n+a)}{(n+p)!} \right) \frac{\Gamma(n+a)}{\Gamma(a)} \frac{z^n}{n!}. \end{aligned} \quad (2.66)$$

¹²E com as soluções $c \in \mathbb{Z}$ da EDO hiperteométrica.

¹³Foram usados as equações 2.58) (5.26) (Regra de Leibniz) e o fato de $d^{n+1} \ln z / dz^{n+1} = (-1)^n n! / z^{n+1}$, $n=0,1,\dots$

Separando o termo $\sim \ln z$ no somatório em k Para encerrar, a mesma função fornece uma segunda solução para $c = -p = 0, -1, -2, \dots$, dada por

$$\begin{aligned} \bar{y}_{a;-p}(z) &= z^{1+p}U(a+1+p; 2+p; z), \quad p = 0, 1, 2, \dots, \\ &= (-1)^p \frac{z^{p+1}}{(p+1)!} \ln(z) {}_1F_1(a+p+1; 2+p; z) + \\ &\quad \frac{1}{\Gamma(a+1+p)} \sum_{k=0}^p \frac{(p+1)!}{k!(p+1-k)} (-1)^k z^k \frac{\Gamma(a+k)}{k!} {}_1F_1(a+k; 1+k; z) - \\ &\quad \frac{(-1)^p}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{2\psi(n+p+2) - \psi(n+a+1+p)}{(n+p+1)!} \right) \frac{\Gamma(n+1+a+p)}{\Gamma(a+1+p)} \frac{z^{n+p+1}}{n!}. \end{aligned} \quad (2.67)$$

A função é finita em $z = 0$, $\bar{y}_{a;-p}(0) = \frac{p!\Gamma(a)}{\Gamma(a+1+p)}$. Para $c = 0$, o somatório em k torna-se apenas o termo $k = p = 0$.

2.2.5 Expansão Assintótica

A partir da equação (2.57), iremos achar o comportamento da função hipergeométrica confluyente para $|z| \rightarrow \infty$.

$${}_1F_1(a; c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \int_0^1 e^{zt} t^{a-1} (1-t)^{c-a-1} dt,$$

com a troca $u = -tz$

$${}_1F_1(a; c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} \left(\underbrace{\int_0^{\infty} e^{-u} u^{a-1} \left(1 + \frac{u}{z}\right)^{c-a-1} du}_{(I)} + \underbrace{\int_{\infty}^{-z} e^{-u} u^{a-1} \left(1 + \frac{u}{z}\right)^{c-a-1} du}_{(II)} \right).$$

(I): $|z| \rightarrow \infty$

$$(I) \approx \int_0^{\infty} e^{-u} u^{a-1} du = \Gamma(a).$$

(II):

$$\begin{aligned} (II) &= \int_{\infty}^{-z} e^{-u} \left(1 + \frac{u}{z}\right)^{c-a-1} u^{a-1} du \stackrel{v=u+z}{=} \int_{\infty}^0 e^{z-v} \left(\frac{v}{z}\right)^{c-a-1} (v-z)^{a-1} dv, \\ \Rightarrow (II) &\stackrel{|z| \rightarrow \infty}{\approx} -e^z z^{a-c+1} (-z)^{a-1} \int_0^{\infty} e^{-v} v^{c-a-1} dv = -e^z z^{a-c+1} (-z)^{a-1} \Gamma(c-a). \end{aligned}$$

Assim:

$${}_1F_1(a; c; z) \stackrel{|z| \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-c}, \quad (2.68)$$

o resultado procurado¹⁴.

2.2.6 Hipergeométrica confluyente como um problema de Sturm-Liouville

Vamos aplicar a lógica desenvolvida no apêndice D à função hipergeométrica confluyente.

Primeiro, reescrevemos a eq. (2.46) na forma Auto-Adjunta:

$$(z^c e^{-z} y')' = a(z^{c-1} e^{-z}) y(z).$$

Comparando com a eq. (D.3) (ver apêndice), temos: $p(z) = z^c e^{-z}$, $q(z) = 0$, $\omega(z) = z^{c-1} e^{-z}$ e $\mu_n = -a$. Temos uma eq. de autovalores, sendo “ a ” o autovalor. Se $\Re(c) > 0 \Rightarrow p(z=0) = p(z \rightarrow \infty) = 0$, então nosso espaço CP é o das funções contínuas por partes (ver apêndice A) com $z \in [0, \infty)$, onde os vetores y_a e $y_{a'}$ ($a \neq a'$) são ortogonais com relação ao produto interno (D.5), *i.e.*

$$\int_0^{\infty} z^{c-1} e^{-z} {}_1F_1(a; c; z) {}_1F_1(a'; c; z) dz = 0, \quad a \neq a', \quad \Re(c) > 0 \quad (2.69)$$

¹⁴repare que a eq. (2.68) cresce exponencialmente, por isso a singularidade no infinito é irregular (essencial). Veja o apêndice B para mais detalhes.

2.3 Exercícios Propostos

(1) Integral elíptica completa de primeiro tipo e o período do pêndulo simples:

(a) A integral elíptica completa de primeiro tipo é definida como

$$k(m) = \int_0^1 \frac{dt}{(1-t^2)^{\frac{1}{2}}(1-mt^2)^{\frac{1}{2}}}, \quad |m| < 1. \quad (2.70)$$

Comparando com a forma integral (2.21) da função hipergeométrica, demonstre a igualdade:

$$k(m) = \frac{\pi}{2} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; m\right)$$

(b) O período de oscilação de um pêndulo é dado pela integral:

$$T = 4\sqrt{\frac{l}{2g}} \int_0^{\theta_M} \frac{d\theta}{\sqrt{\cos\theta - \cos\theta_M}} = 2\sqrt{\frac{l}{g}} \int_0^{\theta_M} \frac{d\theta}{\sqrt{\sin^2\left(\frac{\theta_M}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}},$$

onde l é o comprimento do pêndulo, g a aceleração gravitacional e θ_M o ângulo máximo de oscilação (ponto de retorno). Com a troca $\sin\frac{\theta}{2} = \sin\left(\frac{\theta_M}{2}\right)x$, ($0 < x < 1$) e usando a eq. (2.70), chegue em:

$$\begin{aligned} T &= 4\sqrt{\frac{l}{g}} k\left[\sin^2\left(\frac{\theta_M}{2}\right)\right] = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; \sin^2\left(\frac{\theta_M}{2}\right)\right), \\ &= 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}} \left[1 + \frac{1}{4}\sin^2\left(\frac{\theta_M}{2}\right) + \frac{9}{64}\sin^4\left(\frac{\theta_M}{2}\right) + \mathcal{O}\left(\sin^6\left(\frac{\theta_M}{2}\right)\right)\right] \end{aligned}$$

(2) A definição da função Gamma Incompleta é:

$$\gamma(z, x) \equiv \int_0^x e^{-t} t^{z-1} dt = 2 \int_0^{\sqrt{x}} e^{-u^2} u^{2z-1} du, \quad x > 0, \quad (2.71)$$

Através da representação integral (2.57), verifique a igualdade:

$$\gamma(z, x) = \frac{x^z}{z} {}_1F_1(z; z+1; -x), \quad (2.72)$$

(3) A função Beta Incompleta é definida como:

$$B(a, b)_x \equiv \int_0^x t^{a-1}(1-t)^{b-1} dt, \quad 0 < x \leq 1, \quad (2.73)$$

(a) Demonstre a seguinte série de Taylor:

$$(1-t)^{b-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(1-b+n)}{\Gamma(1-b)} \frac{t^n}{n!}$$

(b) Substitua o resultado da letra (a) na definição de $B(a, b)_x$, inverta a ordem da soma e integral e integre para obter o resultado:

$$B(a, b)_x = x^a \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(1-b+n)}{\Gamma(1-b)} \frac{x^n}{n!(n+a)}$$

(c) Comparando com a série (2.4), conclua que

$$B(a, b)_x = \frac{x^a}{a} {}_2F_1(a, 1-b; a+1; x) \quad (2.74)$$

(4) Utilizando as representações de séries de potências da hipergeométrica e da hipergeométrica confluyente (eqs. (2.4) e (2.49)), demonstre a fórmula:

$$\int_0^{\infty} e^{-\lambda t} t^{\nu} {}_1F_1(\alpha; \gamma; kt) dt = \frac{\Gamma(\nu+1)}{\lambda^{\nu+1}} {}_2F_1\left(\alpha, \nu+1; \gamma; \frac{k}{\lambda}\right). \quad (2.75)$$

Capítulo 3

Resolvendo problemas com as Hipergeométricas

Uma EDO associada a um sistema físico concreto, *e.g.* um problema de Mecânica Quântica, provavelmente, não terá o formato nem um pouco parecido com a de (2.1) e nem com (2.46). Isso não necessariamente implica que a solução não possa ser escrita em termos de hipergeométricas. Existe um certo procedimento para saber se é possível reescrever a EDO em termos da hipergeométrica ou da hipergeométrica confluenta. O primeiro, e mais difícil, passo é utilizar uma coordenada adimensional e que seja “natural”¹ - aqui está a arte, não há regra tal escolha, apenas *a troca que funciona*.

3.1 Hipergeométrica

Assumindo que já estamos utilizando a coordenada adimensional “natural” z e ela é definida no intervalo $0 < z < 1$. Se a EDO possui a estrutura

$$z(1-z)y''(z) + [\alpha + \beta(1-z)]y'(z) + \left(\rho + \frac{\delta}{z} + \frac{\omega}{1-z}\right)y(z) = 0, \quad (3.1)$$

¹Por exemplo, se a EDO possui funções que só dependem de x^2 é mais “natural” utilizar $z = x^2$ como variável.

então podemos escrevê-la em termos de uma hipergeométrica - $\alpha, \beta, \rho, \delta$ e ω são números reais. Uma dica para relacionar essa EDO com a hipergeométrica é olhar para as singularidades. De acordo com o procedimento explicado no apêndice B, a eq. (3.1) possui singularidades regulares em $z = 0, 1$ e ∞ ,² (exatamente como a hipergeométrica). A eq. característica para a singularidade em $z = 0$ é

$$k_0^2 + (\alpha + \beta - 1)k_0 + \delta = 0, \quad (3.2)$$

$$k_0^{(\pm)} = \frac{1 - \alpha - \beta}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1 - \alpha - \beta}{2}\right)^2 - \delta}.$$

Já para a estudar a singularidade em $z = 1$ primeiro vamos fazer a troca $\sigma = 1 - z$. A EDO fica

$$(1 - \sigma)\sigma y''(\sigma) - (\alpha + \beta\sigma)y'(\sigma) + \left(\rho + \frac{\delta}{1 - \sigma} + \frac{\omega}{\sigma}\right)y(\sigma) = 0,$$

agora analisamos a singularidade em $\sigma = 0$. Sua eq. característica é

$$k_1^2 - (1 + \alpha)k_1 + \omega = 0, \quad (3.3)$$

$$k_1^{(\pm)} = \frac{1 + \alpha}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1 + \alpha}{2}\right)^2 - \omega}.$$

Vamos propor um *ansatz* que fatoriza essas potências, *i.e.*

$$y(z) = z^{k_0}(1 - z)^{k_1}F(z), \quad (3.4)$$

onde k_0 é (uma) solução de (3.2) e k_1 é (uma) solução de (3.3). Derivando:

$$y'(z) = z^{k_0}(1 - z)^{k_1} \left[\frac{k_0}{z}F(z) - \frac{k_1}{1 - z}F(z) + F'(z) \right],$$

$$y''(z) = z^{k_0}(1 - z)^{k_1} \left\{ \left[\frac{k_0^2}{z^2} + \frac{k_1(k_1 - 1)}{(1 - z)^2} - \frac{k_0}{z^2(1 - z)}(1 + z(2k_1 - 1)) \right] F(z) + \right.$$

$$\left. + 2 \left[\frac{k_0}{z} - \frac{k_1}{1 - z} \right] F'(z) + F''(z) \right\}.$$

²A EDO mais geral envolvendo polinômios com três singularidades regulares, em z_1, z_2 e z_3 arbitrários é a de Riemann-Papperitz, veja o capítulo 5 da referência [2]. A eq. (3.1) é seu limite para $z_1 = 0, z_2 = 1$ e $z_3 \rightarrow \infty$.

Substituindo em (3.1) e com um pouco de cuidado chega-se em

$$\begin{aligned}
& z(1-z)F''(z) + [\alpha + \beta + 2k_0 - (\beta + 2k_0 + 2k_1)z] F'(z) + \\
& + \left[\rho - k_0(k_0 - 1) - k_1(k_1 - 1) - 2k_0k_1 - (k_0 + k_1)\beta + \right. \\
& \left. + \frac{1}{z} (k_0^2 + (\alpha + \beta - 1)k_0 + \delta) + \frac{1}{1-z} (k_1^2 - (1 + \alpha)k_1 + \omega) \right] F(z) = 0. \quad (3.5)
\end{aligned}$$

Comparando com (3.2) e (3.3) fica evidente que a terceira linha da eq. é nula. O *ansatz* escolhido eliminou os “problemáticos” $\sim 1/z$ e $\sim 1/(1-z)$ da EDO uma vez que os termos associados a atuação do operador diferencial nas quantidades fatorizadas reproduzem as estruturas de “equações de Euler” que determinam as próprias equações características. Por isso (3.2) e (3.3) aparecem na terceira linha (termo sem derivadas em $F(z)$) multiplicando os termos “ruins”³ de (3.5). A nova eq. é simplesmente

$$\begin{aligned}
& z(1-z)F''(z) + [\alpha + \beta + 2k_0 - (\beta + 2k_0 + 2k_1)z] F'(z) + \\
& - [-\rho + k_0(k_0 - 1) + k_1(k_1 - 1) + 2k_0k_1 + (k_0 + k_1)\beta] F(z) = 0, \quad (3.6)
\end{aligned}$$

uma hipergométrica com

$$c = \alpha + \beta + 2k_0, \quad (3.7)$$

$$a + b + 1 = \beta + 2k_0 + 2k_1,$$

$$ab = -\rho + k_0(k_0 - 1) + k_1(k_1 - 1) + 2k_0k_1 + (k_0 + k_1)\beta.$$

Resolvendo a eq. quadrática para a ou b temos:

$$a = \frac{\beta - 1}{2} + k_0 + k_1 - \sqrt{\left(\frac{\beta - 1}{2}\right)^2 + \rho}, \quad (3.8)$$

$$b = \frac{\beta - 1}{2} + k_0 + k_1 + \sqrt{\left(\frac{\beta - 1}{2}\right)^2 + \rho}. \quad (3.9)$$

Lembrando que a e b são simétricos (tanto faz chamar um de a e o outro de b , mas a escolha de sinais desse jeito será relevante - temos certa preferência em impor condições

³No fim da seção a discussão sobre esse *ansatz* será retomada.

sobre a). A solução geral de (3.1) é determinada por (2.10) ($c \notin \mathbb{Z}$) como

$$y(z) = z^{k_0}(1-z)^{k_1} [A {}_2F_1(a, b; c; z) + B z^{1-c} {}_2F_1(a+1-c, b+1-c; 2-c; z)], \quad (3.10)$$

onde a , b e c são dados respectivamente por (3.8), (3.9) e (3.7) e $0 < z < 1$; A e B são constantes. Os parâmetros k_0 e k_1 são soluções (uma das raízes) de (3.2) e (3.3). A fatorização feita gerou uma nova EDO com outras singularidades (da hipergeométrica), mas elas permanecem regulares e nos mesmos pontos, então toda solução de uma EDO com singularidades regulares em $z = 0, 1, \infty$ (a EDO (3.1) é a mais geral com essas características) pode ser escrita em termos de hipergeométricas (quando $c \notin \mathbb{Z}$) multiplicadas por $z^{k_0}(1-z)^{k_1}$.

Um exemplo de aplicação do resultado (3.10) é a eq. (2.16) (trocando $z \rightarrow u = 1/z$). Nela $\rho = \omega = 0$, $\alpha = c - a - b - 1$, $\beta = 2 - c$ e $\delta = ab$. Escolhendo a raiz $k_1 = 0$ e $k_0 = a$ (poderia escolher a outra opção $k_0 = 0$), (3.10) torna-se exatamente (2.17) para o argumento $1/z$.

Em física a solução geral de uma EDO não é o fim da história, precisamos impor as condições de contorno do problema. O caso mais comum é $|y(0)| < \infty$ (ou $y(0) = 0$). Uma condição de contorno desse tipo nos motiva a escolher a raiz k_0 adequada. Suponha $k_0^{(\pm)}$ reais e com sinais opostos, necessariamente $k_0^{(+)} > 0$ e $k_0^{(-)} < 0$,⁴ a escolha mais simples a se fazer é $k_0 \rightarrow k_0^{(+)}$ (que deve ser refletida em a , b e $c \rightarrow a_+$, b_+ e c_+). Essa opção de raiz não é necessária (tudo continuaria funcionando se escolhêssemos $k_0 = k_0^{(-)}$), mas precisamos escolher uma e essa é mais amigável. Tomando $z \ll 1$, a expressão ganha a forma

$$\begin{aligned} y(z) &\approx z^{k_0^{(+)}} [A(1 + \mathcal{O}(z)) + B z^{1-c_+} (1 + \mathcal{O}(z))] \\ &= A z^{k_0^{(+)}} (1 + \mathcal{O}(z)) + B z^{k_0^{(+)}+1-c_+} (1 + \mathcal{O}(z)) \\ &= A z^{k_0^{(+)}} (1 + \mathcal{O}(z)) + B z^{k_0^{(+)}+1-\alpha-\beta-2k_0^{(+)}} (1 + \mathcal{O}(z)) \\ &= A z^{k_0^{(+)}} (1 + \mathcal{O}(z)) + B z^{1-\alpha-\beta-k_0^{(+)}} (1 + \mathcal{O}(z)), \\ &= A z^{k_0^{(+)}} (1 + \mathcal{O}(z)) + B z^{k_0^{(-)}} (1 + \mathcal{O}(z)), \end{aligned}$$

⁴Resumindo, consideramos $\delta < 0$.

exatamente o esperado (de acordo com o estudo feito nas redondezas do ponto singular). Se a raiz $k_0^{(-)}$ fosse a escolhida, A e B estariam trocados (pois $1 - \alpha - \beta - k_0^{(\pm)} = k_0^{(\mp)}$). Continuando, essa escolha de raiz leva ao assintótico acima e ao impor a condição de contorno $|y(0)| < \infty$ (ou $y(0) = 0$) somos obrigados a fixar $B = 0$ (lembrando que por hipótese $k_0^{(-)} < 0$ e $k_0^{(+)} > 0$). A função procurada é

$$y(z) = Az^{k_0^{(+)}}(1-z)^{k_1} {}_2F_1(a_+, b_+; c_+; z) \approx Az^{k_0^{(+)}}(1 + \mathcal{O}(z)), \quad k_0^{(+)} > 0.$$

Em quase 100% dos casos relevantes em que as raízes k_0 são reais, apenas uma satisfaz a condição, mas e se ambas funcionarem? Quando isso acontece⁵ temos uma outra história e não vamos abordar o assunto.

Em outros problemas, a condição de contorno está definida em $z = 1$. A lógica permanece a mesma, supondo $k_1^{(+)} > 0$ e $k_1^{(-)} < 0$,⁶ e a condição $|y(1)| < \infty$, os mesmos passos são seguidos. A diferença está no fato dessa análise dar bem mais trabalho (você precisará de (2.29)). O resultado terá a forma

$$y(z) \approx C(1-z)^{k_1}(1 + \mathcal{O}(z)) + D(1-z)^{\alpha+1-k_1}(1 + \mathcal{O}(z)), \quad (3.11)$$

$$C = \Gamma(\alpha + 1 - k_1) \left[A \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} + B \frac{\Gamma(2-c)}{\Gamma(1-a)\Gamma(1-b)} \right], \quad (3.12)$$

$$D = \Gamma(-\alpha - 1 + k_1) \left[A \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} + B \frac{\Gamma(2-c)}{\Gamma(a-c+1)\Gamma(b-c+1)} \right]. \quad (3.13)$$

Repare que $\alpha + 1 - k_1^{(\pm)} = k_1^{(\mp)}$, portanto cada termo possui uma das raízes de (3.3). Escolhendo $k_1 \rightarrow k_1^{(+)} > 0$ é preciso fixar $D = 0$ ($k_1^{(-)} < 0$) para a condição de contorno ser satisfeita, criando uma relação não trivial

$$A = -\frac{\Gamma(2-c)\Gamma(a_+)\Gamma(b_+)}{\Gamma(a_+ - c_+ + 1)\Gamma(b_+ - c_+ + 1)\Gamma(c_+)} B \quad (3.14)$$

entre as constantes.

Por fim, a situação mais interessante (bem comum em Mecânica Quântica e Eletrostática)

⁵ $\delta > 0$ e $\frac{1-\alpha-\beta}{2} > \sqrt{\delta}$, então $k_0^{(\pm)} > 0$.

⁶ $\omega < 0$.

é quando as duas condições de contorno existem simultaneamente, *e.g.*, precisamos de $|y(0)|, |y(1)| < \infty$. Escolhendo as raízes positivas de k_0 e k_1 (as mesmas hipóteses feitas, anteriormente - $\delta, \omega < 0$), a restrição na origem elimina a constante B e a solução tem a forma dada por (3.10), porém com $B = 0$ não é possível, a priori, satisfazer o requerimento de $|y(1)| < \infty$ uma vez que essa condição de contorno culmina em (3.14) e $B = 0$ implicaria em $A = 0$ (a solução é trivialmente nula). Mantendo $A \neq 0$ (única opção que temos), ao redor de $z = 1$ a solução é dada por (3.11) com $B = 0$, logo o termo divergente

$$D_+(1-z)^{k_1^{(-)}} = A \frac{\Gamma(-k_1^{(-)}) \Gamma(c_+)}{\Gamma(a_+) \Gamma(b_+)} (1-z)^{k_1^{(-)}}, \quad (3.15)$$

domina o comportamento da função. A única forma de eliminá-lo é impor $-a_+ = n = 0, 1, 2, \dots$,⁷. Com essa escolha a hipergeométrica é um polinômio de grau n e obviamente não diverge em $z = 1$,⁸. As duas condições de contorno não apenas fixam completamente a solução (a menos de uma constante multiplicativa), como também restringem os possíveis parâmetros do modelo. A solução final é

$$y_n(z) = A_n z^{k_0^{(+)}} (1-z)^{k_1^{(+)}} {}_2F_1(-n, b_+; c_+; z), \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} n &= -\frac{(\beta-1)}{2} - k_0^{(+)} - k_1^{(+)} + \sqrt{\left(\frac{\beta-1}{2}\right)^2 + \rho}, \\ &= -\frac{1}{2} - \sqrt{\left(\frac{1-\alpha-\beta}{2}\right)^2 - \delta} - \sqrt{\left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^2 - \omega} + \sqrt{\left(\frac{\beta-1}{2}\right)^2 + \rho}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde a hipergeométrica é um polinômio de grau n . A fórmula (3.17) mostra que a decisão em discretizar a ao invés de b (ver diferença de sinais em (3.8) e (3.9)) foi acertada. O lado esquerdo da igualdade é positivo, com o outro sinal o lado direito seria necessariamente negativo levando a uma contradição. Em problemas de Mecânica Quântica para estados ligados temos exatamente essas condições de contorno e algum parâmetro da EDO, por exemplo ρ , é função da energia. Assim (3.17) determina que o espectro de energia do sistema só pode assumir certos valores discretos, ele é *quantizado* (ver exercício (4)).

⁷A explicação da escolha de a ao invés de b , ver eqs. (3.8) e (3.9), está na próxima página.

⁸Outra forma de pensar é olhar diretamente para o assintótico (3.15), se $a_+ = -n$, então $1/\Gamma(a_+) = 1/\Gamma(-n) \rightarrow 0$ e o termo divergente desaparece.

Outra possibilidade é $z < 0$ com uma EDO da forma

$$z(1-z)y''(z) + [\alpha + \beta(1-z)]y'(z) + \left(\rho + \frac{\delta}{z}\right)y(z) = 0. \quad (3.18)$$

Agora não passamos pelo ponto singular em $z = 1$. As singularidades (regulares) de interesse são $z = 0$ e $z \rightarrow -\infty$. Como não é possível expandir a função ao redor da singularidade regular no $-\infty$ (o caso irregular é diferente, ver próxima seção) via coordenada z , apenas o limite $z \rightarrow 0$ é analisado para a construção do *ansatz*, levando ao mesmo resultado de (3.2). A solução geral é (3.10) com $k_1 = \omega = 0$ e com ela basta impor as condições de contorno do problema em $z = 0$ e $z \rightarrow -\infty$ (com a ajuda de (2.34)) para fixar a função desejada.

Um último comentário. Em toda a análise feita aqui os parâmetros k_0 e k_1 sempre foram considerados números reais. Em problemas de mecânica quântica envolvendo espectro contínuo de energia (“espalhamento” unidimensional) tais números são complexos. Isso não muda absolutamente nada na construção feita, a solução geral (3.10) ainda é válida, uma vez que sua derivação é fruto de trabalho puramente algébrico, em nenhum momento foi dito que k_0 e k_1 deveriam ser reais. A diferença brutal desse caso está no uso dessa solução geral em problemas no espectro contínuo, onde as condições de contorno são outras e o todo o desenvolvimento apresentado a partir de (3.10) deve ser alterado para adequá-lo ao novo cenário.

3.1.1 Por que fatorizar as singularidades deu certo para hipergeométricas?

A solução geral de uma EDO com singularidade regular em z_0 e eq. característica com raízes k_{\pm} possui comportamento

$$\begin{aligned} y(z) &\approx A_+ (z - z_0)^{k_+} [1 + \mathcal{O}(z - z_0)] + A_- (z - z_0)^{k_-} [1 + \mathcal{O}(z - z_0)], \\ &\approx A_{\pm} (z - z_0)^{k_{\pm}} \left[1 + \mathcal{O}(z - z_0) + \frac{A_{\mp}}{A_{\pm}} (z - z_0)^{k_{\mp} - k_{\pm}} (1 + \mathcal{O}(z - z_0)) \right]. \end{aligned}$$

Um *ansatz* da forma $y(z) = (z - z_0)^{k_{\pm}} F(z)$ implica que a forma geral de $F(z)$ ao redor da mesma singularidade é

$$F(z) \approx C_1 [1 + \mathcal{O}(z - z_0)] + C_2 (z - z_0)^{k_{\mp} - k_{\pm}} [1 + \mathcal{O}(z - z_0)],$$

ou seja, as raízes características de $F(z)$ são $k_1^F = 0$ e $k_2^F = k_{\mp} - k_{\pm}$. Necessariamente uma raiz é nula (a que foi fatorizada), assim $F(z)$ é a solução geral de uma EDO com essa propriedade. Esse é exatamente o caso da hipergeométrica tanto no ponto $z_0 = 0$, raízes são 0 e $1 - c$, quanto na singularidade em $z_0 = 1$, agora com raízes 0 e $c - a - b$. A discussão é um tanto óbvia, mas é importante ter em mente que ao fatorizar a singularidade regular a nova EDO terá uma raiz nula e nem todas as funções especiais satisfazem esse requisito, *e.g.* Bessel.

3.2 Hipergeométrica Confluente

Problemas que envolvem a Confluente são bem mais simples (em relação aos apresentados na seção anterior). A proposta continua a mesma, temos um modelo físico descrito por uma EDO que na coordenada “natural” (adimensional), $0 < z < \infty$, tem a forma

$$zy''(z) + (\alpha + \beta z)y'(z) + \left(\rho + \frac{\delta}{z} + \omega z\right)y(z) = 0, \quad (3.19)$$

A eq. é quase a confluyente, mas δ e ω “estragam a festa”. Não é difícil descobrir, usando o método apresentado no apêndice B, que essa EDO possui uma singularidade regular em $z = 0$ e uma irregular em $z \rightarrow \infty$,⁹. Os parâmetros da singularidade na origem são soluções da seguinte eq. característica

$$\begin{aligned} k^2 + (\alpha - 1)k + \delta &= 0, , \\ k_{\pm} &= \frac{1 - \alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{(1 - \alpha)^2}{4} - \delta}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

⁹Essa é a EDO mais geral com essas singularidades envolvendo polinômios.

Para entender o comportamento das soluções dessa EDO nas proximidades de $z \rightarrow \infty$ vamos dividir (3.19) por z e tomar $z \gg 1$. Desprezando termos $\mathcal{O}(1/z)$ a eq. pode ser aproximada por

$$y''(z) + \beta y'(z) + \omega y(z) \approx 0,$$

uma EDO de coeficientes constantes. A solução é da forma $y \sim e^{\kappa z}$,¹⁰ onde κ satisfaz

$$\begin{aligned} \kappa^2 + \beta\kappa + \omega &= 0, \\ \kappa_{\pm} &= -\frac{\beta}{2} \pm \sqrt{\frac{\beta^2}{4} - \omega}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Vamos fatorizar esses assintóticos através do *ansatz*

$$y(z) = z^k e^{\kappa z} F(z), \quad (3.22)$$

sendo k e κ , respectivamente, soluções de (3.20) e (3.21). Derivando

$$\begin{aligned} y'(z) &= z^k e^{\kappa z} \left[\left(\frac{k}{z} + \kappa \right) F(z) + F'(z) \right], \\ y''(z) &= z^k e^{\kappa z} \left[\left(\kappa^2 + 2\frac{k\kappa}{z} + \frac{k(k-1)}{z^2} + \right) F(z) + 2 \left(\kappa + \frac{k}{z} \right) F'(z) + F''(z) \right]. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Substituindo em (3.19) e simplificando com carinho

$$\begin{aligned} zF''(z) + [\alpha + 2k + (\beta + 2\kappa)z] F'(z) + \\ + \left[\rho + \alpha\kappa + k(\beta + 2\kappa) + (k^2 + (\alpha - 1)k + \delta) \frac{1}{z} + (\kappa^2 + \beta\kappa + \omega) z \right] F(z) = 0. \end{aligned}$$

Devido as igualdades (3.20) e (3.21) os termos problemáticos na segunda linha ($\sim 1/z$ e $\sim z$) são nulos. O problema foi eliminado, mas a EDO não é exatamente a confluyente se $\beta + 2\kappa \neq -1$. Na verdade precisamos de uma simples troca de variável

$$z = -\frac{1}{\beta + 2\kappa} u. \quad (3.24)$$

¹⁰Deixando clara a singularidade irregular.

Na nova coordenada u a confluyente fica *certinha*, dada por

$$uF''(u) + (\alpha + 2k - u)F'(u) - \left[\frac{\rho + \alpha\kappa}{\beta + 2\kappa} + k \right] F(u) = 0, \quad (3.25)$$

cujos parâmetros são

$$a = \frac{\rho + \alpha\kappa}{\beta + 2\kappa} + k, \quad (3.26)$$

$$c = \alpha + 2k. \quad (3.27)$$

A solução geral é

$$y(z) = z^k e^{\kappa z} \left\{ A {}_1F_1(a; c; -(\beta + 2\kappa)z) + B [-(\beta + 2\kappa)z]^{1-c} {}_1F_1(1 + a - c; 2 - c; -(\beta + 2\kappa)z) \right\}, \quad c \notin \mathbb{Z}, \quad (3.28)$$

com a e c definidos por (3.26) e (3.27), respectivamente. A fatorização feita relacionou (3.19) com a confluyente (3.25). A nova EDO possui singularidades diferentes, mas elas permanecem em 0 e no ∞ , sendo a primeira regular e a segunda essencial. Assim demonstramos que toda solução da uma EDO com essas singularidades nesses pontos ((3.19) é a mais geral) pode ser escrita como confluentes, no argumento u , multiplicadas por $z^k e^{\kappa z}$.

Independente da raiz escolhida para k , por inspeção direta $k_{\pm} + 1 - c_{\pm} = k_{\mp}$, para $|z| \ll 1$

$$y(z) \approx A z^{k_{\pm}} (1 + \mathcal{O}(z)) + B [-(\beta + 2\kappa)]^{1-c} z^{k_{\mp}} (1 + \mathcal{O}(z)).$$

Para terminar suponha um problema (digamos de Mecânica Quântica) descrito por uma EDO da forma (3.19) com $\delta, \omega < 0$, logo $k_+, \kappa_+ > 0$ e $k_-, \kappa_- < 0$. As condições de contorno são $|y(0)|, |y(\infty)| < \infty$. Vamos escolher as raízes (adequadas) $k = k_+$ e $\kappa = \kappa_-$ na solução (3.28), conseqüentemente temos os sinais superiores em (3.29) e a condição de contorno na origem fixa $B = 0$ (a solução $\sim z^{k_-}$ diverge na origem). Para analisar o

comportamento em $z \rightarrow \infty$ vamos contar com a ajuda de (2.68), portanto

$$\begin{aligned} y(z) &\approx A z^{k_+} e^{\kappa_- z} \left(\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} (-u)^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^u u^{a-c} \right) \\ &\propto z^{k_+ + a - c} e^{(\kappa_- - \beta - 2\kappa_-)z} = z^{k_+ + a - c} e^{\kappa_+ z} \rightarrow \infty, \end{aligned}$$

a solução diverge exponencialmente, $\kappa_+ > 0$. A única forma da condição de contorno $|y(\infty)| < \infty$ ser satisfeita é se o assintótico (2.68) não for válido, em outras palavras se $-a = n = 0, 1, 2, \dots$ - a confluyente é um polinômio de grau n ,¹¹. A solução que atende as condições de contorno possui parâmetros *quantizados* por $a = -n$ e tem a forma:

$$y_n(z) = A_n z^{k_+} e^{\kappa_- z} {}_1F_1(-n; c_+; -(\beta + 2\kappa_-)z), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} n &= -\frac{\rho + \alpha\kappa_-}{\beta + 2\kappa_-} - k_+ = \frac{\rho - \frac{\alpha\beta}{2}}{\sqrt{\beta^2 - 4\omega}} - \frac{\alpha}{2} - k_+, \\ &= \frac{\rho - \frac{\alpha\beta}{2}}{\sqrt{\beta^2 - 4\omega}} - \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{(1-\alpha)^2}{4} - \delta} \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$c_+ = \alpha + 2k_+ = 1 + \sqrt{(1-\alpha)^2 - 4\delta}, \quad \delta < 0, \quad \beta < 1. \quad (3.31)$$

Num problema de Mecânica Quântica essas condições de contorno surgem em estados ligados. O parâmetro ρ é função da energia que fica *quantizada* por (3.30).

O comentário feito no fim da subsecção 3.1 permanece válido aqui. A solução geral (3.28) é verdadeira mesmo se os parâmetros forem números imaginários, por outro lado, esses casos aparecem em problemas físicos com outras condições de contorno.

3.3 Correspondência entre os dois casos

Como demonstrado em (2.53), a EDO hipergeométrica tem como limite a EDO hipergeométrica confluyente quando a singularidade em $z = 1$ é levada para o infinito de forma bem específica - as duas singularidades regulares no infinito tornam-se uma singularidade essencial. É válido cogitar a existência de um processo que conecte as EDO's (3.1) e

¹¹Repare que para $a = -n$, o segundo termo do assintótico desaparece pois $1/\Gamma(a) = 1/\Gamma(-n) = 0$ e o primeiro termo fica $\sim z^{-a} \sim z^n$ (polinômio de grau n).

(3.19). Tal procedimento existe e é bem capcioso. Vamos começar de forma semelhante ao feito para ligar a hipergeométrica com a confluyente, tome $z \rightarrow \epsilon z$ ($d/dz \rightarrow \frac{1}{\epsilon}d/dz$), então $\epsilon \cdot (3.1)$ fica

$$z(1 - \epsilon z)y'' + [\bar{\alpha} + \bar{\beta}(1 - \epsilon z)]y' + \left(\epsilon \bar{\rho} + \frac{\epsilon \bar{\delta}}{\epsilon z} + \frac{\epsilon \bar{\omega}}{1 - \epsilon z} \right) y = 0,$$

as “barras” nos índices foram colocadas para evitar confusão na notação. O próximo passo é realizar as seguintes modificações

$$\begin{aligned} \bar{\alpha} &\rightarrow \alpha + \frac{\beta}{\epsilon}, & \bar{\beta} &\rightarrow -\frac{\beta}{\epsilon}, & \bar{\delta} &\rightarrow \delta, \\ \bar{\rho} &\rightarrow \frac{\rho}{\epsilon} - \frac{\omega}{\epsilon^2}, & \bar{\omega} &\rightarrow \frac{\omega}{\epsilon^2}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

agora temos

$$z(1 - \epsilon z)y'' + (\alpha + \beta z)y' + \left(\rho + \frac{\delta}{z} - \frac{\omega}{\epsilon} + \frac{\omega}{\epsilon} \frac{1}{1 - \epsilon z} \right) y = 0.$$

Tomando o limite $\epsilon \rightarrow 0$, utilize $1/(1 - \epsilon z) = 1 + \epsilon z + \mathcal{O}(\epsilon^2)$, a EDO (3.19) é obtida. Os mesmos limites podem ser tomados em outras quantidades de interesse, por exemplo, as raízes características da singularidade em $z = 0$, eq. (3.2),

$$k_0^{(\pm)} = \frac{1 - \bar{\alpha} - \bar{\beta}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1 - \bar{\alpha} - \bar{\beta}}{2} \right)^2 - \bar{\delta}} \rightarrow \frac{1 - \alpha}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1 - \alpha}{2} \right)^2 - \delta},$$

exatamente a eq. (3.20). Já as raízes da singularidade em $z = 1$, eq. (3.3), possuem um limite menos trivial (já que essa singularidade “flui” para o infinito)

$$\begin{aligned} k_1^{(\pm)} &= \frac{1 + \bar{\alpha}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1 + \bar{\alpha}}{2} \right)^2 - \bar{\omega}} \rightarrow \frac{1 + \alpha + \frac{\beta}{\epsilon}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1 + \alpha + \frac{\beta}{\epsilon}}{2} \right)^2 - \frac{\omega}{\epsilon^2}}, \\ &\quad \left(\frac{\beta}{2} \pm \sqrt{\frac{\beta^2}{4} - \omega} \right) \frac{1}{\epsilon} + \mathcal{O}(\epsilon^0), \end{aligned}$$

portanto ao comparar com (3.21), temos o limite

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon k_1^{(\pm)} = -\kappa_{\mp}.$$

O resultado é exatamente o necessário para relacionar os termos fatorizados $(1-z)^{k_1}$ (do caso “hipergeométrico”) e $e^{\kappa z}$ (caso “confluyente”), já que

$$(1-z)^{k_1^{(\pm)}} \rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (1-\epsilon z)^{-\frac{\kappa \mp}{\epsilon}} = e^{\kappa \mp z}. \quad (3.33)$$

Fica como exercício utilizar (3.32) para derivar (3.30) a partir de (3.17) (não é uma tarefa complicada).

3.4 Exercícios Propostos

(1) A equação de Schrödinger estacionária para partícula de massa M no famoso potencial de Pöschl-Teller é

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{V_0}{\cosh^2\left(\frac{x}{x_0}\right)} \psi(x) = E\psi(x), \quad V_0 > 0.$$

Considerando um estado ligado ($E < 0$), ou seja, a autofunção de energia obedece as condições de contorno $\psi(-\infty) = \psi(\infty) = 0$: (a) faça a troca “natural” (ou melhor mágica!) $z = (1 - \tanh(x/x_0))/2$ (repare que $0 < z < 1$) para chegar na nova EDO

$$z(1-z)\psi''(z) + (1-2z)\psi'(z) + \left[(x_0\lambda)^2 - \frac{(x_0k)^2}{4} \frac{1}{z} - \frac{(x_0k)^2}{4} \frac{1}{(1-z)} \right] \psi(z) = 0,$$

onde $k = \sqrt{-2ME/\hbar^2}$ e $\lambda = \sqrt{2MV_0/\hbar^2}$; (b) Compare a eq. acima com (3.1); (c) Seguindo o texto da seção 3.1 determine as autofunções de energia (não normalizadas) e o espectro de energia (obtidos diretamente de (3.16) e (3.17))

(2) Determine as autofunções de energia (não normalizadas) e o espectro de energia para o potencial de Morse $V(x) = V_0 \left(e^{-2\frac{x}{x_0}} - 2e^{-\frac{x}{x_0}} \right)$ no caso de estado ligado - $E < 0$ e $\psi(-\infty) = \psi(\infty) = 0$. *Dica:* Faça a troca $z = 2x_0\sqrt{\frac{2MV_0}{\hbar^2}} e^{-x/x_0}$ (M é a massa da partícula) para chegar numa eq. nos moldes de (3.19). Seguindo o texto da seção 3.2, as autofunções serão dadas por (3.29) e o espectro de energia determinado por (3.30).

Capítulo 4

Polinômios de Hermite

4.1 Definição via Função Geratriz, Relações de Recorrência e a EDO de Hermite

Uma ótima forma de definir os polinômios de Hermite ($H_n(u)$) é como os coeficientes da série de potências da seguinte função geratriz

$$g(z, u) \equiv e^{-z^2+2zu} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(u) \quad (4.1)$$

Tal definição é útil, pois possibilita a derivação de relações de recorrência entre os polinômios de forma muito simples. Aplicando $\frac{\partial}{\partial z}$ na eq. acima:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial z} &= (-2z + 2u)g = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} H_n(u) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_{n+1}(u) \\ \Rightarrow (2uH_0 - H_1) &+ \sum_{n=1}^{\infty} (2uH_n - 2nH_{n-1} - H_{n+1}) \frac{z^n}{n!} = 0 \end{aligned}$$

nos levando a relação de recorrência:

$$\begin{aligned} H_1 &= 2uH_0, \\ 2uH_n - 2nH_{n-1} &= H_{n+1}, \quad n = 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (4.2)$$

que permite a obtenção de qualquer $H_n(u)$ conhecendo apenas H_0 . Como $g(0, u) = 1$, temos que $H_0(u) = 1$. Logo, os primeiros polinômios podem ser facilmente encontrados via eq. (4.2):

$$H_0(u) = 1; H_1(u) = 2u; H_2(u) = 2(2u^2 - 1); H_3(u) = 12u\left(\frac{2}{3}u^2 - 1\right). \quad (4.3)$$

Agora, vamos derivar a função geratriz em relação à variável u para encontrar outra recorrência:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial u} &= 2zg = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H'_n(u) \\ 2n \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(u) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H'_n(u) \\ \Rightarrow H'_n &= 2nH_{n-1}(u) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Derivando a eq. (4.4) e usando a eq. (4.2) chegamos à EDO de Hermite:

$$H''_n(u) - 2uH'_n(u) + 2nH_n(u) = 0 \quad (4.5)$$

Os polinômios de Hermite só representam uma das soluções dessa eq. diferencial de segunda ordem. A outra solução (que não é um polinômio) será discutida na seção (4.3).

4.2 Ortogonalidade e norma dos Polinômios de Hermite

Seguindo o método desenvolvido no apêndice D, iremos mostrar que os polinômios de Hermite são vetores ortogonais¹ do espaço vetorial das funções contínuas por partes (ver apêndice A) com o argumento $u \in \mathbb{R}$ (na verdade eles formam uma base desse espaço vetorial). Para isso, vamos reescrever a eq. (4.5) na forma Auto-Adjunta:

$$\left(e^{-u^2} H'_n(u)\right)' = -2ne^{-u^2} H_n(u)$$

¹em relação a um produto interno a ser definido

ou seja, a EDO de Hermite é uma eq. de auto-valores. Comparando com a eq. geral (D.3), temos que $p(x) = \omega(x) = e^{-u^2}$ ($\rightarrow 0$, quando $u \rightarrow \pm\infty$), $q(x) = 0$ e $\mu_n = 2n$. Substituindo em (D.5):

$$(H_n, H_m) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} H_n(u) H_m(u) du = 0, \quad n \neq m$$

Além da ortogonalidade, também precisamos da norma do vetor (para normalizar a função de onda do oscilador harmônico por exemplo), *i.e.* de

$$(H_n, H_n) = \int_0^{\infty} e^{-u^2} H_n(u)^2 du \equiv A_n$$

Com a ajuda da ortogonalidade e da eq. de recorrência (4.2), calcular tal norma será uma tarefa bem simples, vamos à ela! Pela eq. acima:

$$\begin{aligned} 2nA_{n-1} &= \int_0^{\infty} e^{-u^2} (2nH_{n-1})H_{n-1} du \stackrel{\text{eq. (4.2)}}{=} \int_0^{\infty} e^{-u^2} (-H_{n+1} + 2uH_n)H_{n-1} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} H_n(2uH_{n-1}) du \stackrel{\text{eq. (4.2)}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} H_n(H_n + 2(n-1))H_{n-2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} H_n^2 du = A_n \\ \Rightarrow A_{n+1} &= 2(n+1)A_n \end{aligned} \tag{4.6}$$

A eq. (4.6) relaciona as normas dos polinômios H_n e H_{n+1} , logo só precisamos calcular

$$(H_0, H_0) \equiv A_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$$

para conhecer qualquer A_n .

$$\begin{aligned} A_1 &= 2A_0 = 2\sqrt{\pi}, \quad A_2 = 2^2 2\sqrt{\pi}, \quad A_3 = 2^3 3!\sqrt{\pi} \dots \\ \Rightarrow A_n &= 2^n n! \sqrt{\pi}, \end{aligned}$$

ou seja:

$$(H_n, H_m) = \int_0^{\infty} e^{-u^2} H_n(u) H_m(u) du = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm} \tag{4.7}$$

4.3 Relação com a função Hipergeométrica Confluente

Até aqui, discutimos as principais propriedades dos polinômios de Hermite exatamente da mesma forma que o leitor pode encontrar em qualquer livro de física matemática ou mecânica quântica (ver referências bibliográficas). Entretanto, o que não é muito discutido na literatura é que quando vamos resolver a eq. de Schrödinger para o oscilador harmônico não chegamos imediatamente à eq. diferencial (4.5), mas sim em

$$H_\nu''(u) - 2uH_\nu'(u) + 2\nu H_\nu(u) = 0 \quad (4.8)$$

com, a priori, $\nu > -\frac{1}{2}$. Então por que nos interessamos tanto pelo caso $\nu = n = 0, 1, 2, \dots$? E qual é o paradeiro da segunda solução independente desta eq. diferencial de *segunda ordem*? As respostas para essas perguntas estão na relação entre a função H_ν e a hipergeométrica confluyente, juntamente com as condições de contorno impostas pela mecânica quântica. Tal relação pode ser facilmente obtida com a troca $x = u^2$ que transforma a eq. (4.8) em:

$$x \frac{d^2 H_\nu(x)}{dx^2} + \left(\frac{1}{2} - x\right) \frac{dH_\nu(x)}{dx} + \frac{\nu}{2} H_\nu(x) = 0$$

que é a EDO hipergeométrica confluyente para $a = -\frac{\nu}{2}$, $c = \frac{1}{2}$, cuja solução é dada pela eq. (2.49), *i.e.*

$$H_\nu(u) = A_\nu {}_1F_1\left(-\frac{\nu}{2}; \frac{1}{2}; u^2\right) + B_\nu u {}_1F_1\left(-\frac{(\nu-1)}{2}; \frac{3}{2}; u^2\right) \quad (4.9)$$

Em mecânica quântica essa solução aparece como autoestado de energia para o modelo do oscilador harmônico simples, $V(u) \sim u^2$. Como o potencial é uma função par, as autofunções de energia têm paridade bem definida, *i.e.* a solução deve ser par ou ímpar. A solução geral de (4.9) não possui paridade definida, uma vez que a primeira função é par e a segunda é ímpar. Por isso, sempre precisamos descartar uma delas, para autofunções pares tomamos $B_\nu = 0$ e para ímpares $A_\nu = 0$. Uma outra exigência da mecânica quântica

é que a função de onda obedeça condições de contorno de forma que a integral

$$(H_\nu, H_\nu) = \int_0^\infty e^{-u^2} H_\nu(u)^2 du, \quad (4.10)$$

convirja. Isso só é possível se H_ν for um polinômio (${}_1F_1(-n; c; u^2)$, $n \in \mathbb{N}$) - devido ao crescimento $\sim e^{u^2}$, $u \gg 1$, para valores arbitrários de a . Então se $\nu = n = 0, 2, 4, \dots$, devemos tomar $B_n = 0$ (solução par) e se $\nu = n = 1, 3, 5, \dots$ A_n é quem deve ser nulo (polinômio ímpar). Em suma temos:

$$H_n(u) \equiv \begin{cases} (-1)^{\frac{n}{2}} \frac{n!}{(\frac{n}{2})!} {}_1F_1\left(-\frac{n}{2}; \frac{1}{2}; u^2\right), & n = 0, 2, 4, \dots \\ (-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{2(n!)}{(\frac{n-1}{2})!} u {}_1F_1\left(-\frac{n-1}{2}; \frac{3}{2}; u^2\right), & n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (4.11)$$

onde as constantes foram ajustadas para as eqs. (4.2) e (4.11) coincidirem². O estudo desta seção explica o porquê de $\nu \rightarrow n = 0, 1, 2, \dots$ (justificando a quantização da energia do oscilador) e o motivo de só utilizarmos uma das soluções da EDO de Hermite.

Uma abordagem alternativa (mais trabalhosa, porém instrutiva) seria impor primeiro a condição da convergência de (4.10). Como já foi alertado, de acordo com a forma assintótica da hipergométrica confluyente, equação (2.68), cada solução separada de (4.9) possui um termo $\sim e^{u^2}$ que necessariamente irá divergir (exceto se a confluyente for um polinômio). Por outro lado, podemos tentar cancelar as divergências de cada solução para obter uma função cuja integral (4.10) convirja. Tomando $u \gg 1$, o termo divergente da solução geral de $H_\nu(u)$ tem a forma (a outra parte assintótica tende a zero pois $\sim e^{-u^2/2}$)

$$\begin{aligned} H_\nu(u) &\approx A_\nu \frac{\Gamma(1/2)}{\Gamma(-\frac{\nu}{2})} (u^2)^{-\frac{\nu}{2}-\frac{1}{2}} e^{\frac{u^2}{2}} + B_\nu \frac{\Gamma(3/2)}{\Gamma(-\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2})} (u^2)^{-\frac{\nu}{2}+\frac{1}{2}-\frac{3}{2}} e^{\frac{u^2}{2}}, \\ &= \sqrt{\pi} \left(\frac{A_\nu}{\Gamma(-\frac{\nu}{2})} + \frac{1}{2} \frac{B_\nu}{\Gamma(-\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2})} \right) u^{-\nu-1} e^{\frac{u^2}{2}}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

onde foi usado que $\Gamma(3/2) = (1/2)\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}/2$. A divergência desaparece se impormos

²compare com a eq. (4.3). Também repare na clara paridade $H_n(-u) = \pm(-1)^n H_n(u)$.

a razão

$$\frac{B_\nu}{A_\nu} = -2 \frac{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)}. \quad (4.13)$$

Definindo $C_\nu = \Gamma(1/2 - \nu/2)A_\nu$, a solução mais geral de (4.8) quadrado integrável fica escrita como

$$D_\nu(u) = C_\nu \left(\frac{1}{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2}\right)} {}_1F_1\left(-\frac{\nu}{2}; \frac{1}{2}; u^2\right) - \frac{2}{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} u {}_1F_1\left(-\frac{\nu-1}{2}; \frac{3}{2}; u^2\right) \right). \quad (4.14)$$

Essa função é chamada de parabólica cilíndrica. Voltando para o problema do oscilador harmônico, percebemos que (4.14), assim como a função geral original, não possui paridade bem definida ao redor de $u = 0$. Isso só ocorre se ν for inteiro, para ν par a segunda solução desaparece (polo de $\Gamma(-\nu/2)$) e a primeira vira o polinômio de Hermite par, já para ν ímpar a primeira solução desaparece e a segunda vira um polinômio de Hermite ímpar³. Finalmente o resultado anterior é recuperado. Em problemas de mecânica quântica, a função $D_\nu(u)$ aparentemente não é relevante (pois possui relação com o oscilador, mas não possui paridade definida), mas ela tem o seu valor. Por exemplo, vamos supor que temos um estado ligado que é descrito pelo potencial de um oscilador harmônico para $u > 0$ e outra função para $u < 0$. Então (4.14) é a solução mais geral na semirreta positiva, restrições nos valores de ν surgirão devido a colagem de $D_\nu(u)$ com a solução do semi-eixo negativo. Outro exemplo onde ela aparece é no poço duplo descrito por dois osciladores, i.e. $V(x) = \hbar\omega(|x| - a)^2$, com $u = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(|x| - a)$. Nesse caso a paridade não está em $u = 0$, mas deve ser imposta em $x = 0$, isso leva a uma discretização não trivial dos valores de ν .

4.4 Exercícios Propostos

(1) Derivação alternativa da eq. (4.9):

Faça a troca $H_\nu(u(x)) = \sqrt{x}W(x)$ (onde $x = u^2$) na eq. (4.8), encontre a eq. diferencial

³Essa construção é que motiva esse arranjo de funções Gamma na definição de $D_\nu(u)$.

para $W(x)$ (uma hipergeométrica confluyente) e chegue novamente em (4.9).

(2) Fórmula de Rodrigues

Uma outra forma de definir os polinômios de Hermite é através da fórmula de Rodrigues:

$$H_n(u) \equiv (-1)^n e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}. \quad (4.15)$$

Verifique que para os valores de $n = 0, 1, 2$ e 3 ela coincide com a eq. (4.3).

(3) Expansão de uma função em termos dos polinômios de Hermite

(a) Seja $F(u)$ uma função contínua por partes (ver apêndice A), com $u \in \mathbb{R}$. Supondo que $F(u)$ possa ser expandida em termos dos polinômios de Hermite

$$F(u) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n H_n(u), \quad (4.16)$$

mostre (com a ajuda da eq. (4.7)) que

$$C_n = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} F(u) H_n(u) du. \quad (4.17)$$

(b) Prove a chamada relação de completude (ver eq. (D.8)):

$$\delta(u - u') = e^{-u'^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(u) H_n(u')}{2^n n! \sqrt{\pi}}. \quad (4.18)$$

Capítulo 5

Funções de Legendre

5.1 Polinômios de Legendre

5.1.1 Função Geratriz, Relações de Recorrência e Equação Diferencial

Os polinômios de Legendre ($P_l(x)$) podem ser definidos através da seguinte função geratriz:

$$g(x, t) \equiv \frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x)t^l, \quad 0 \leq t < 1, \quad -1 \leq x \leq 1 \quad (5.1)$$

Como $g(x, 0) = 1$, então $P_0(x) = 1$. O que será suficiente para conhecermos todos os polinômios $P_l(x)$, assim que derivarmos algumas relações de recorrência. Para isso, começarei aplicando $\frac{\partial}{\partial t}$ em (5.1)

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(x, t)}{\partial t} &= \frac{x - t}{(1 - 2xt + t^2)^{1/2}(1 - 2xt + t^2)} = \sum_{l=1}^{\infty} l P_l(x) t^{l-1} \stackrel{l \rightarrow l+1}{=} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) P_{l+1}(x) t^l \\ \stackrel{eq.(5.1)}{\Rightarrow} (x - t) \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) t^l &= (1 - 2xt + t^2) \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) P_{l+1}(x) t^l \end{aligned}$$

Agrupando os termos em potências de t

$$(xP_0 - P_1)t^0 + (3xP_1 - P_0 - 2P_2)t + \sum_{l=2}^{\infty} [(2l+1)xP_l - (l+1)P_{l+1} - lP_{l-1}]t^l = 0$$

levando à relação

$$(l+1)P_{l+1} = (2l+1)xP_l - lP_{l-1}, \quad l = 0, 1, \dots \quad (5.2)$$

Os polinômios $P_l(x)$ podem ser facilmente derivados, para qualquer l , via eq. (5.2), sabendo que $P_0(x) = 1$ (como já havíamos adiantado). Os primeiros termos são:

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\ P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \quad P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) \end{aligned} \quad (5.3)$$

Outras recorrências, agora relacionando derivadas de $P_l(x)$, resultam da diferenciação da função geratriz (5.1) com relação à variável x ($P'_l \equiv \frac{dP_l(x)}{dx}$).

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(x, t)}{\partial x} &= \frac{t}{(1 - 2xt + t^2)} \sum_{l=0}^{\infty} P_l t^l = \sum_{l=0}^{\infty} P'_l(x) t^l \\ \Rightarrow \sum_{l=1}^{\infty} P_{l-1} t^l &= \sum_{l=0}^{\infty} P'_l t^l - 2x \sum_{l=0}^{\infty} P'_{l-1} t^l + \sum_{l=2}^{\infty} P'_{l-2} t^l \\ \Rightarrow 0 &= P'_0 t^0 + (P'_1 - 2xP'_0 - P_0)t + \sum_{l=2}^{\infty} (P'_l + P'_{l-2} - 2xP'_{l-1} - P_{l-1})t^l \end{aligned}$$

A igualdade só é verdadeira se cada potência for nula, ou seja:

$$\begin{aligned} P'_0(x) &= 0, \quad P'_1(x) = 1 \\ P'_{l+1}(x) + P'_{l-1}(x) &= 2xP'_l(x) + P_l(x), \quad l \geq 1 \end{aligned} \quad (5.4)$$

Vamos efetuar a seguinte operação: $2\frac{d}{dx}[\text{eq. (5.2)}] - (2l+1)[\text{eq. (5.4)}]$. Após um pequeno trabalho algébrico

$$(2l+1)P_l(x) = P'_{l+1}(x) - P'_{l-1}(x) \quad (5.5)$$

Combinações das eqs. (5.4) e (5.5) fornecem várias relações interessantes. Por exemplo, eq. (5.4)+ eq. (5.5) (com $l \rightarrow l - 1$)

$$P'_l = xP'_{l-1} + lP_{l-1} \quad (5.6)$$

e x (eq. (5.4)–eq. (5.5))

$$xP'_{l-1} = x^2P'_l - lxP_l \quad (5.7)$$

Através dessas relações, vou derivar a eq. diferencial de segunda ordem, cujo polinômio $P_l(x)$ é uma das soluções. Somando (5.6) e (5.7)

$$(1 - x^2)P'_l = lP_{l-1} - lxP_l, \quad (5.8)$$

uma consequência importante de (5.8) é: $P_l(1) = P_{l-1}(1)$ e $P_l(-1) = -P_{l-1}(-1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$. Como $P_0(x) = 1$, então $P_l(\pm 1) = (\pm 1)^l$. Derivando (5.8)

$$(1 - x^2)P''_l - 2xP'_l = \underbrace{lP'_{l-1}}_{\substack{\text{eq. (5.7)} \\ l(xP'_l - lP_l)}} - lP_l - lxP'_l$$

assim, terminamos com a seguinte eq. diferencial de segunda ordem (onde só aparece P_l)

$$(1 - x^2)P''_l(x) - 2xP'_l(x) + l(l + 1)P_l(x) = 0 \quad (5.9)$$

que é a eq. de Legendre. A outra solução da eq. (5.9) será discutida daqui a pouco (seção (5.1.3)).

5.1.2 Ortogonalidade e norma dos polinômios de Legendre

A eq. (5.9) pode ser trivialmente reescrita como

$$((1 - x^2)P'_l)' = -l(l + 1)P_l$$

i.e., temos uma eq. de auto-valores (ver apêndice D), onde $\omega(x) = 1$, $q(x) = 0$ e $p(x) = 1 - x^2 \rightarrow p(-1) = p(1) = 0$. Logo os polinômios P_l são ortogonais em relação ao seguinte produto interno

$$(P_l, P_m) = \int_{-1}^1 P_l(x)P_m(x)dx = 0, \quad l \neq m$$

A norma (P_n, P_n) é facilmente calculada através da eq. (5.2) e da ortogonalidade. Primeiro faça $l \rightarrow l - 1$ em (5.2), então multiplique-a por $P_l(x)$ e integre:

$$\begin{aligned} \Rightarrow (P_l, P_l) &= \int_{-1}^1 P_l(x)^2 dx = \frac{1}{l} \int_{-1}^1 P_l(x) \left((2l - 1)xP_{l-1}(x) - (l - 1)P_{l-2}(x) \right) \\ &= \frac{(2l - 1)}{l} \int_{-1}^1 xP_l(x)P_{l-1}(x)dx \end{aligned}$$

onde a ortogonalidade foi usada.

Agora multiplique a eq. (5.2) por P_{l-1} e integre:

$$\begin{aligned} (P_{l-1}, P_{l-1}) &= \int_{-1}^1 P_{l-1}^2 = \frac{1}{l} \int_{-1}^1 P_{l-1}(x) \left((2l + 1)xP_l - (l + 1)P_{l+1} \right) \\ &= \frac{(2l + 1)}{l} \int_{-1}^1 xP_{l-1}(x)P_l(x)dx \end{aligned}$$

Comparando as eqs.

$$(P_l, P_l) = \frac{2l - 1}{2l + 1} (P_{l-1}, P_{l-1})$$

Sabendo que

$$\begin{aligned} (P_0, P_0) &= \int_{-1}^1 dx = 2 \rightarrow (P_1, P_1) = \frac{1}{3}2, (P_2, P_2) = \frac{3}{5}\frac{1}{3}2, \dots, \\ (P_l, P_l) &= \left(\frac{2l - 1}{2l + 1} \right) \left(\frac{2l - 3}{2l - 1} \right) \left(\frac{2l - 5}{2l - 3} \right) \dots \left(\frac{1}{3} \right) 2 = \frac{2}{2l + 1} \end{aligned}$$

Levando à forma final

$$(P_l, P_m) = \int_{-1}^1 P_l(x)P_m(x)dx = \frac{2}{2l + 1} \delta_{lm} \quad (5.10)$$

5.1.3 Relação entre os polinômios de Legendre e a função hipergeométrica

Faça a troca $y = \frac{1-x}{2}$ ($x = -2y + 1$) na eq. diferencial de Legendre (5.9). Após uma pequena álgebra

$$y(1-y)\frac{d^2}{dy^2}P_l(y) + (1-2y)\frac{d}{dy}P_l(y) + l(l+1)P_l(y) = 0$$

Uma rápida comparação com a eq. (2.1) mostra que a eq. acima é uma hipergeométrica com os parâmetros $a = -l$ (como deve ser para a hipergeométrica ser um polinômio), $b = l + 1$ e $c = 1$. Já que $c = 1 \in \mathbb{Z}$, a segunda solução independente é singular no ponto $y = 0$ ($x = 1$)¹. Sendo $P_l(1) = 1$ (ver exercício (1) deste parágrafo) e ${}_2F_1(a, b; c; 0) = 1$, a relação entre essas funções fica

$$P_l(x) = {}_2F_1\left(-l, l+1; 1; \frac{1-x}{2}\right) \quad (5.11)$$

Queremos deixar claro que a segunda solução da eq. (5.9) existe, mas pela relação com a eq. diferencial hipergeométrica fica claro (pois $c = 1 \in \mathbb{Z}$) que ela não é um polinômio e diverge em $y = 0$ ($x = 1$) (da forma $\ln y$, $y \rightarrow 0$, como mostrado no apêndice C). Em praticamente todas as aplicações físicas exige-se a regularidade de $P_l(x)$ no ponto $x = 1$ ($y = 0$), assim essa segunda solução é descartada.

Outro comentário digno de nota é que na Mecânica Quântica (e quase todas as outras aplicações físicas²) a eq. (5.9) não aparece (*a priori*) com $l = 0, 1, 2, \dots$, mas sim com $l = \nu > 0$. A discretização de l é uma imposição que ocorre quando as condições de contorno do problema exigem regularidade da solução no ponto $x = -1$ ($y = 1$), já que pela eq. (2.22) ${}_2F_1(-l, l+1; 1; 1) \sim \Gamma(0) \rightarrow \infty$ (pólo simples), pois $c = a + b = 1$, a menos que a hipergeométrica seja um polinômio³.

¹ver apêndice C

²existem exceções, principalmente no eletromagnetismo.

³um polinômio não pode divergir num valor finito. Além disso, a M.Q. exige que $\int_{-1}^1 (P_\nu(x))^2 dx < \infty$ o que não seria possível se $P_\nu(-1)$ fosse um pólo simples $\Rightarrow \int_{-1}^1 (P_\nu(x))^2 dx \sim \int_{-1}^1 \frac{1}{(1+x)^2} dx \sim \frac{1}{1+x}$, $x \rightarrow -1$.

5.1.4 Exercícios Propostos

(1) Usando a eq. (5.1) no ponto $x = 1$, mostre que $P_l(1) = 1 \forall l = 0, 1, 2, \dots$

(2) Fórmula de Rodrigues:

Uma definição alternativa para os polinômios de Legendre é:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \quad (5.12)$$

Verifique que os primeiros termos coincidem com a eq. (5.3).

(3) Paridade dos Polinômios de Legendre: novamente com a ajuda da eq. (5.1), demonstre a igualdade

$$P_l(-x) = (-1)^l P_l(x) \quad (5.13)$$

(4) Prove a relação (basta usar a função geratriz (5.1))

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \left(\frac{\tilde{r}}{r}\right)^l, \quad \tilde{r} < r \quad (5.14)$$

onde $\cos \theta = \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{|\vec{r}| |\vec{r}'|}$. A eq. acima é muito útil no eletromagnetismo, em especial na expansão multipolar (ver final do apêndice A).

(5) Expansão de uma função em termos dos polinômios de Legendre

(a) Seja $F(x)$ uma função contínua por partes definida no intervalo $x \in [-1, 1]$. Supondo que $F(x)$ possa ser expandida em termos dos polinômios de Legendre

$$F(x) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(x) \quad (5.15)$$

mostre (com a ajuda da eq. (5.10)) que

$$C_l = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 F(x) P_l(x) dx \quad (5.16)$$

(b) Prove a chamada relação de completude (ver eq. (D.8)):

$$\delta(x - x') = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2} P_l(x) P_l(x'), \quad -1 < x, x' < 1 \quad (5.17)$$

5.2 Funções de Legendre Associadas

5.2.1 Definição e equação diferencial

A definição das Funções de Legendre Associadas é

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x), \quad -l \leq m \leq l \quad (5.18)$$

A eq. acima fornece alguns resultados importantes de imediato. Um é que

$$P_l^m(1) = P_l^m(-1) = 0 \quad (5.19)$$

outro é a paridade de $P_l^m(x)$. Fazendo $x \rightarrow -x$ na definição acima mais a ajuda da eq. (5.13):

$$P_l^m(-x) = (-1)^{l+m} P_l^m(x) \quad (5.20)$$

Também é evidente que $P_l^m(x) = 0$ se $m > l$ (explicando parte da restrição sobre os valores de m), pois $P_l(x)$ é um polinômio de grau l , logo, se o derivarmos mais de l vezes o resultado será zero. Já a outra restrição ($-l < m$) é necessária, pois a definição (5.18) não faz sentido para esses valores de $m < -l$. Na verdade, vamos considerar, por enquanto, apenas $m > 0$, mais à frente será mostrado que existe uma relação entre $P_l^m(x)$ e $P_l^{-m}(x)$, *i.e.* é suficiente nos restringirmos ao caso $m > 0$.

Pela definição (5.18) mais a eq. (5.3) fica fácil derivar algumas das Funções de Legendre Associadas:

$$l = 1 : P_1^1(x) = (1 - x^2)^{1/2} \quad (5.21)$$

$$l = 2 : P_2^1(x) = 3x(1 - x^2)^{1/2}, \quad P_2^2(x) = 3(1 - x^2)$$

$$l = 3 : P_3^1(x) = \frac{3}{2}(5x^2 - 1)(1 - x^2)^{1/2}, \quad P_3^2(x) = 15(1 - x^2), \quad P_3^3 = 15x(1 - x^2)^{3/2}$$

$$l = 4 : P_4^1(x) = \frac{5}{2}(7x^3 - 3x)(1 - x^2)^{1/2}, \quad P_4^2(x) = \frac{15}{2}(7x^2 - 1)(1 - x^2)$$

$$P_4^3(x) = 105x(1 - x^2)^{3/2}, \quad P_4^4(x) = 105(1 - x^2)^2$$

O estudo que segue será feito via relação entre os polinômios de Legendre e a função hipergeométrica mais a eq. (2.23), o que permite (de uma forma bem simples) relacionar as funções de Legendre Associadas com hipergeométricas.

$$\frac{d^m}{dx^m} P_l(x) = \frac{d^m}{dx^m} {}_2F_1\left(-l, l+1; 1; \frac{1-x}{2}\right),$$

eq.(2.23)

$$\left(\frac{\Gamma(-l+m)}{\Gamma(-l)}\right) \frac{(l+m)!}{l!} \frac{1}{m!} \frac{(-1)^m}{2^m} {}_2F_1\left(-l+m, l+1+m; 1+m; \frac{1-x}{2}\right).$$

Usando a eq. (2.6) (com $N \rightarrow l$ e $n \rightarrow m$) no termo entre parênteses, as funções de Legendre Associadas podem ser escritas, de forma elegante, como:

$$P_l^m(x) = \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^m m!} {}_2F_1\left(-l-m, l+1+m; 1+m; \frac{1-x}{2}\right). \quad (5.22)$$

A vantagem da eq. acima é que obviamente $\frac{P_l^m(x(y))}{[1-x^2(y)]^{m/2}} \sim \frac{P_l^m(y)}{[y(1-y)]^{m/2}} \sim {}_2F_1(-l-m, l+1; m+1; y)$ ($y = \frac{1-x}{2}$) é solução da eq. hipergeométrica (2.1), com $a = -(l-m)$, $b = l+m+1$ e $c = m+1$, *i.e.*

$$y(1-y) \frac{d^2}{dy^2} \left((y(1-y))^{-m/2} P_l^m(y) \right) + (1+m-2(m+1)y) \frac{d}{dy} \left((y(1-y))^{-m/2} P_l^m(y) \right) + ((l-m))(l+m+1) \left((y(1-y))^{-m/2} P_l^m(x) \right) = 0$$

Abrindo as derivadas (e usando a igualdade $(l-m)(l+m+1) = l(l+1) - m(m+1)$)

$$\Rightarrow y(1-y) \frac{d^2}{dy^2} P_l^m(y) + (1-2y) \frac{d}{dy} P_l^m(y) + \left(l(l+1) + \frac{m^2}{4y(y-1)} \right) P_l^m(y) = 0$$

Voltando para a coordenada $x = 1 - 2y$:

$$(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} P_l^m(x) - 2x \frac{d}{dx} P_l^m(x) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{(1-x^2)} \right) P_l^m(x) = 0 \quad (5.23)$$

que é a EDO para as funções de Legendre Associadas. Os motivos por trás da segunda solução independente da eq. acima ser ignorada e de não ser discutido o caso $l \notin \mathbb{N}$ são os mesmos já mencionados na seção dos polinômios de Legendre.

5.2.2 Ortogonalidade e norma das Funções de Legendre Associadas

Reescrevendo a eq. (5.23) na forma Auto-Adjunta:

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} P_l^m(x) \right) - \frac{m^2}{(1-x^2)} P_l^m(x) = -l(l+1) P_l^m$$

Uma simples comparação com a eq. (D.3) fornece: $p(x) = (1-x^2)$, $q(x) = \frac{m^2}{(1-x^2)}$, $\mu_l = l(l+1)$ e $\omega = 1$. Aplicando o resultado dado por (D.5), obtém-se

$$(P_l^m, P_{l'}^m) \equiv \int_{-1}^1 dx P_l^m(x) P_{l'}^m(x) = 0, \quad l \neq l' \quad (5.24)$$

Repare que a eq. acima só tem sentido se os índices m 's das duas funções forem os mesmos, devido ao fato de $q(x)$ depender explicitamente de m (na verdade de $|m|$) e na derivação da eq. (D.5) assumirmos que apenas o auto-valor $\mu_l = l(l+1)$ muda.

O cálculo da norma não é nada simples. O método que vamos usar é trabalhoso mas de fácil entendimento. Ele é baseado na fórmula de Rodrigues para P_l^m , algo facilmente derivado via a fórmula de Rodrigues dos polinômios $P_l(x)$ (eq. (5.12)) e a definição (5.18)

$$P_l^m(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} (x^2-1)^l \equiv \frac{(-1)^{m/2}}{2^l l!} \mathbb{X}^{m/2} \frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} \mathbb{X}^l \quad (5.25)$$

onde $\mathbb{X} = (x^2-1)$. Assim:

$$(P_l^m, P_l^m) = \int_{-1}^1 dx P_l^m(x)^2 = \frac{(-1)^m}{2^{2l} (l!)^2} \int_{-1}^1 dx \left(\mathbb{X}^m \frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} \mathbb{X}^l \right) \left(\frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} \mathbb{X}^l \right)$$

integrando por partes (e usando que $\mathbb{X}|_{x=\pm 1} = 0$)

$$= -\frac{(-1)^m}{2^{2l} (l!)^2} \int_{-1}^1 dx \left(\frac{d^{m+l-1}}{dx^{m+l-1}} \mathbb{X}^l \right) \frac{d}{dx} \left[\mathbb{X}^m \frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} \mathbb{X}^l \right]$$

após $l+m$ integração por partes:

$$(P_l^m, P_l^m) = \frac{(-1)^l}{2^{2l} (l!)^2} \int_{-1}^1 dx \mathbb{X}^l \frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} \left[\mathbb{X}^m \frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} \mathbb{X}^l \right]$$

Usando a fórmula de Leibniz

$$\frac{d^n}{dx^n} [A(x)B(x)] = \sum_{s=0}^n \frac{n!}{(n-s)!s!} \left(\frac{d^{n-s}}{dx^{n-s}} A(x) \right) \left(\frac{d^s}{dx^s} B(x) \right) \quad (5.26)$$

temos:

$$\frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} \left[\mathbb{X}^m \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} \mathbb{X}^l \right] = \sum_{s=0}^{l+m} \frac{(m+l)!}{(m+l-s)!s!} \left(\frac{d^{m+l-s}}{dx^{m+l-s}} \mathbb{X}^m \right) \left(\frac{d^{s+l+m}}{dx^{s+l+m}} \mathbb{X}^l \right)$$

como \mathbb{X}^p é um polinômio de grau $2p$ ($p \in \mathbb{N}$)⁴, os termos não nulos da soma acima são aqueles que obedecem, simultaneamente, as duas desigualdades:

$$m+l+s \leq 2l$$

$$m+l-s \leq 2m$$

implicando que $s = l - m$. Logo:

$$\frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} \left[\mathbb{X}^m \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} \mathbb{X}^l \right] = \frac{(m+l)!}{(2m)!(l-m)!} \left(\frac{d^{2m}}{dx^{2m}} \mathbb{X}^m \right) \left(\frac{d^{2l}}{dx^{2l}} \mathbb{X}^l \right) = \frac{(m+l)!}{(2m)!(l-m)!} (2m)!(2l)!$$

Substituindo o resultado acima no cálculo da norma e escrevendo \mathbb{X} explicitamente:

$$\begin{aligned} (P_l^m, P_l^m) &= \frac{(2l)!(l+m)!}{2^{2l}(l!)^2(l-m)!} \int_{-1}^1 dx (-1)^l (x^2 - 1)^l \\ &= \frac{(2l)!(l+m)!}{2^{2l}(l!)^2(l-m)!} \underbrace{\int_0^\pi (\sin \theta)^{2l+1} d\theta}_{=2^{2l+1} \frac{(l!)^2}{(2l+1)!}}, \quad x = \cos \theta \\ &= \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \end{aligned}$$

onde o resultado da integral acima é dado pelo exercício **(3)** do capítulo 1. Finalmente:

$$(P_l^m, P_l^m) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll} \quad (5.27)$$

que é a equação procurada.

⁴ $\mathbb{X}^p = (x^2 - 1)^p = x^{2p} + \mathcal{O}(x^{2p-1}) \rightarrow \frac{d^{2p}}{dx^{2p}} \mathbb{X}^p = (2p)!$

5.2.3 O caso $m < 0$

Nosso interesse está na solução, não singular em $x = 1$, da eq. diferencial (5.23) (é ela que irá aparecer por toda a sua vida) e repare que a mesma só depende de m^2 , *i.e.* não depende do sinal de m . Esse fato demonstra que $P_l^{-m}(x)$ ($m > 0$) também é solução da mesma equação. Consequentemente ou ela é proporcional à P_l^m ou corresponde à segunda solução independente da equação (que é singular em $x = 1$). A primeira opção é a correta, pois P_l^{-m} é regular em $x = 1$ ($y = \frac{1-x}{2} = 0$) (ver eq. (5.25) com $m \rightarrow -m$,⁵), portanto

$$P_l^{-m}(x) = C_{lm}P_l^m(x)$$

onde C_{lm} é uma constante de proporcionalidade que só depende de l e m . Para encontrar C_{lm} tenha:

$$(P_l^{-m}, P_l^m) = \int_{-1}^1 dx P_l^{-m}(x) P_l^m(x) \stackrel{\text{eq. (5.18)}}{=} \int_{-1}^1 dx \left(\frac{d^{-m}}{dx^{-m}} P_l(x) \right) \left(\frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \right)$$

integrando por partes

$$= \left(\frac{d^{-m}}{dx^{-m}} P_l(x) \right) \left(\frac{d^{m-1}}{dx^{m-1}} P_l(x) \right) \Big|_{x=-1}^{x=1} - \int_{-1}^1 dx \left(\frac{d^{-m+1}}{dx^{-m+1}} P_l(x) \right) \left(\frac{d^{m-1}}{dx^{m-1}} P_l(x) \right)$$

Não é fácil mostrar, mas o primeiro termo é nulo. Após m integrações por partes (sempre com o termo de derivada total dando zero):

$$(P_l^{-m}, P_l^m) = (-1)^m \int_{-1}^1 dx P_l(x)^2 = (-1)^m \frac{2}{2l+1}$$

Por outro lado:

$$(P_l^{-m}, P_l^m) = C_{lm}(P_l^m, P_l^m) = C_{lm} \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}$$

⁵Por exemplo, o caso “mais dramático”, $m = -l$, fornece a função bem definida $P_l^{-l}(x) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{1}{2}}$.

Comparando:

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x) \quad (5.28)$$

provando que P_l^m e P_l^{-m} são proporcionais, *i.e.* linearmente dependentes.

5.3 Exercícios Propostos

(1) Os *harmônicos esféricos* (que descrevem a dependência angular de um sistema quântico não-relativístico com simetria radial) são definidos como:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi \quad (5.29)$$

onde $l \in \mathbb{N}$ e $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. Verifique que:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 = 1$$

Capítulo 6

Polinômios de Laguerre

As funções de Laguerre, um caso particular de Hipergeométrica Confluente, precisam ser estudados por qualquer pessoa que tenha interesse em mecânica quântica. Eles simplesmente descrevem a parte radial da função de onda estacionária do átomo de Hidrogênio - o átomo mais simples (formado por um próton e um elétron) e único com descrição completamente analítica. Primeiro vamos estudar um caso particular, chamados de Polinômios de Laguerre, para depois analisar o caso geral - Polinômios Associados - que estão relacionados com o átomo Hidrogênio.

6.1 Polinômios de Laguerre

A forma mais prática de estudá-los é via função geratriz, definida como:

$$g(x, t) = \frac{e^{-\frac{xt}{1-t}}}{1-t} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x)t^n, \quad |t| < 1, \quad (6.1)$$

onde $L_n(x)$ são os polinômios de Laguerre. Expandindo em potências de t

$$g(x, t) \approx 1 + (-x + 1)t + \mathcal{O}(t^2),$$

então

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = -x + 1. \quad (6.2)$$

Da função geratriz vamos derivar uma relação de recorrência entre os polinômios L_n para diferentes n 's e com apenas $L_0(x) = 1$ dado, todos os outros poderão ser determinados.

Para chegar nela derive (6.1) com relação à coordenada t

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(x, t)}{\partial t} &= g(x, t) \left(\frac{1}{1-t} - \frac{x}{1-t} - \frac{xt}{(1-t)^2} \right) = g(x, t) \frac{(1-x-t)}{(1-t)^2}, \\ \Rightarrow (1-t^2)^2 \frac{\partial g(x, t)}{\partial t} &= (1-x-t)g(x, t). \end{aligned} \quad (6.3)$$

Usando a definição $g(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) t^n$ em (6.3)

$$\begin{aligned} (1+t^2-2t) \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) n t^{n-1} &= (1-x-t) \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) t^n, \\ \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) L_{n+1}(x) t^n + \sum_{n=2}^{\infty} L_{n-1}(x) (n-1) t^n - 2 \sum_{n=1}^{\infty} n L_n(x) t^n &= \\ \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) t^n - x \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) t^n - \sum_{n=1}^{\infty} L_{n-1}(x) t^n, \\ L_1(x) - L_0 + x L_0 + (2L_2 - 2L_1 - L_1 + x L_1 + L_0) t + \\ \sum_{n=2}^{\infty} [(n+1) L_{n+1}(x) - (2n+1-x) L_n(x) + n L_{n-1}(x)] t^n &= 0. \end{aligned}$$

Como o resultado vale para todo x e t , as potências em t são l.i., portanto $L_1(x) = (1-x)L_0(x)$ - de acordo com (6.2) - e

$$(n+1)L_{n+1}(x) = (2n+1-x)L_n(x) - nL_{n-1}(x), \quad n = 1, \dots, \quad (6.4)$$

sendo $L_0(x) = 1$, a eq. (6.4) permite calcular qualquer $L_n(x)$, por exemplo $2L_2(x) = x^2 - 4x + 2$.

6.1.1 Equação Diferencial e relação com a Hipergeométrica Confluente

Para determinar uma EDO de segunda ordem cuja solução (regular na origem) seja $L_n(x)$, derive (6.1) com relação a x

$$\begin{aligned}\frac{\partial g(x, t)}{\partial x} &= -\frac{tg(x, t)}{1-t}, \\ \Rightarrow (1-t)\frac{\partial g(x, t)}{\partial x} &= -tg(x, t).\end{aligned}\quad (6.5)$$

Manipulando (6.3) e (6.5)

$$\begin{aligned}x\frac{\partial g}{\partial x} - t\frac{\partial g}{\partial t} &= -\frac{xt}{(1-t)}g - \frac{t(1-t-x)}{(1-t^2)^2}g = (xt^2 - xt - t + xt + t^2)\frac{g}{(1-z)^2} \\ &= \frac{xt^2}{(1-t)^2}g - \frac{t}{1-t}g,\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}-t\frac{\partial(tg)}{\partial t} &= -t^2\frac{\partial g}{\partial t} - tg = t^2\frac{(1-x-t)}{(1-t^2)}g - tg \\ &= -t^2\frac{1-t}{(1-t)^2}g + \frac{t^2x}{(1-t)^2}g - tg = \frac{t^2x}{(1-t)^2}g + \frac{(-t^2-t+t^2)}{(1-t)}g \\ &= \frac{xt^2}{(1-t)^2}g - \frac{t}{1-t}g,\end{aligned}$$

o mesmo resultado da conta anterior. Ou seja $x\partial_x g - z\partial_z g = z\partial_z(zg)$, ou ainda

$$x\frac{\partial g}{\partial x} = t\frac{\partial g}{\partial t} - t\frac{\partial(tg)}{\partial t}.\quad (6.6)$$

Substituindo a definição (6.1)

$$\begin{aligned}x\sum_{n=0}^{\infty} L'_n(x)t^n &= \sum_{n=0}^{\infty} nL_n(x)t^n - \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)L_n(x)t^{n+1}, \\ xL'_0(x) + \sum_{n=1}^{\infty} (xL'_n(x) - nL_n(x) + nL_{n-1}(x))t^n &= 0,\end{aligned}\quad (6.7)$$

como cada termo é l.i. e válido para todo x , então $L'_0(x) = 0$ - resultado que corrobora com (6.2) e

$$xL'_n(x) = nL_n(x) - nL_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.8)$$

Substituindo (6.1) em (6.5)

$$(1-t) \sum_{n=0}^{\infty} L'_n(x)t^n = -t \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x)t^n \rightarrow L'_n(x) - L'_{n-1}(x) = -L_{n-1}(x). \quad (6.9)$$

Esse resultado em (6.8)

$$\begin{aligned} x(L'_{n-1}(x) - L_{n-1}(x)) &= nL_n(x) - nL_{n-1}(x), \\ xL'_{n-1}(x) + (n-x)L_{n-1}(x) - nL_n(x) &= 0, \end{aligned} \quad (6.10)$$

derivando

$$xL''_{n-1}(x) + L'_{n-1}(x) + (n-x)L'_{n-1}(x) - L_{n-1}(x) - n \underbrace{L'_n(x)}_{=L_{n-1}' - L_{n-1}} = 0,$$

com $n-1 \rightarrow n$, chega-se a EDO dos polinômios de Laguerre

$$xL''_n(x) + (1-x)L'_n(x) + nL_n(x) = 0. \quad (6.11)$$

Comparando com (2.46) fica evidente que (6.11) é um caso particular da confluyente com $c = 1$ e $a = -n$. Como $c = 1$, a solução geral da confluyente (2.52) fornece apenas uma solução, indicando que a outra possui singularidade essencial na origem - como discutido no apêndice C - e não possui relação com L_n . Como pode ser verificado explicitamente nos exemplos, $L_n(0) = 1$, assim como ${}_1F_1(-n; 1; 0) = 1$, então

$$\begin{aligned} L_n(x) &= {}_1F_1(-n; 1; x), \\ &\stackrel{(2.55)}{=} \sum_{l=0}^n (-1)^l \frac{n!}{(n-l)!(l!)^2} x^l. \end{aligned} \quad (6.12)$$

6.1.2 Ortonormalidade

A eq. (6.11) pode ser escrita facilmente na forma Auto-Adjunta (ver apêndice D), mas nem precisamos nos dar ao trabalho. Sendo um caso particular da confluyente podemos ir direto à eq. (2.69) e concluimos que os polinômios de Laguerre são ortogonais com relação ao seguinte produto interno:

$$(L_n, L_m) = \int_0^{\infty} e^{-x} L_n(x) L_m(x) dx = 0, \quad n \neq m. \quad (6.13)$$

A norma quadrática

$$(L_n, L_n) \equiv |L_n|^2 = \int_0^{\infty} e^{-x} (L_n(x))^2 dx,$$

é obtida via alguns truques de recorrência. Começando de (6.4) (com $n \rightarrow n-1$)

$$\begin{aligned} |L_n|^2 &= \int_0^{\infty} e^{-x} L_n(x) \frac{1}{n} ((2n-1)L_{n-1}(x) - xL_{n-1}(x) - (n-1)L_{n-1}(x)) dx, \\ &\stackrel{(6.13)}{=} \int_0^{\infty} e^{-x} L_{n-1}(x) \frac{1}{n} (-xL_n(x)) dx \\ &\stackrel{(6.4)}{=} \int_0^{\infty} e^{-x} L_{n-1}(x) \frac{1}{n} (-(2n+1)L_n + nL_{n-1} + (n+1)L_{n+1}) dx \\ &\stackrel{(6.13)}{=} \int_0^{\infty} e^{-x} (L_{n-1}(x))^2 dx = |L_{n-1}|^2, \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Todos os polinômios L_n possuem a mesma norma. Só precisamos calcular a de um deles, por exemplo,

$$|L_1|^2 = \int_0^{\infty} e^{-x} dx = 1,$$

portanto $|L_n|^2 = 1$. A fórmula da ortonormalidade dos polinômios de Laguerre é:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} L_n(x) L_m(x) dx = \delta_{nm}. \quad (6.14)$$

Assumindo que eles formem uma base para as funções contínuas por partes na semi-reta $[0, \infty)$,

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n L_n(x). \quad (6.15)$$

A eq. (6.14) garante que

$$C_n = (L_n, f) = \int_0^\infty e^{-x} L_n(x) f(x). \quad (6.16)$$

Em particular para $f(x) = \delta(x - x_0)$, $C_n = e^{-x_0} L_n(x_0)$. A relação de completude para os polinômios de Laguerre fica

$$\delta(x - x_0) = e^{-x_0} \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x_0) L_n(x). \quad (6.17)$$

6.2 Polinômios de Laguerre Associados

6.2.1 Definição e Relação de Recorrência

Chegamos na função que descreve o átomo H. O estudo apresentado na seção anterior é necessário, pois o Polinômio de Laguerre Associado de grau n é definido da seguinte forma:

$$L_n^k \equiv (-1)^k \frac{d^k L_{n+k}(x)}{dx^k}, \quad (6.18)$$

onde $L_{n+k}(x)$ é dado por (6.4) ($L_0(x) = 1$). A função geratriz pode ser determinada derivando k vezes (6.1) com relação à coordenada x

$$(-1)^k \frac{d^k}{dx^k} \left(\frac{e^{-\frac{x}{1-t}}}{1-t} \right) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} \sum_{n=-k}^{\infty} L_{n+k} t^{n+k},$$

no lado direito os termos $-k \leq n < 0$ desaparecem devido as sucessivas derivadas, então

$$\begin{aligned} (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} \left(\frac{e^{-\frac{x}{1-t}}}{1-t} \right) &= (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} \sum_{n=0}^{\infty} L_{n+k} t^{n+k}, \\ (-1)^k (-1)^k \frac{t^k}{(1-t)^k} \frac{e^{-\frac{x}{1-t}}}{1-t} &= \sum_{n=0}^{\infty} L_n^k(x) t^{n+k}, \end{aligned}$$

arrumando um pouco chega-se a função geratriz procurada

$$g^k(x, t) = \frac{e^{-\frac{xt}{1-t}}}{(1-t)^{k+1}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} L_n^k(x) t^n. \quad (6.19)$$

Uma consequência direta da geratriz é que expandindo-a em potências de t , $g^k(x, t) \approx 1 + \mathcal{O}(t)$, $\rightarrow L_0^k(x) = 1, \forall k$. O único resultado que precisamos, todos os outros $L_n^k(x)$ podem ser obtidos via relação de recorrência a ser derivada (eq. (6.20)) pelo procedimento: derive (6.19) com respeito à coordenada t

$$\begin{aligned} & \frac{(k+1)}{(1-t)} g^k - x \left(\frac{1}{1-t} + \frac{t}{(1-t)^2} \right) g^k = \sum_{n=1}^{\infty} n L_n^k t^{n-1}, \\ & (k+1)(1-t) g^k - x g^k = (1-t)^2 \sum_{n=1}^{\infty} n L_n^k t^{n-1}, \\ & (k+1)(1-t) \sum_{n=0}^{\infty} L_n^k t^n - x \sum_{n=0}^{\infty} L_n^k t^n = (1+t^2-2t) \sum_{n=1}^{\infty} n L_n^k t^{n-1}, \\ & (k+1) \sum_{n=0}^{\infty} L_n^k t^n - (k+1) \sum_{n=1}^{\infty} L_{n-1}^k t^n - \sum_{n=0}^{\infty} (x L_n^k) t^n = \\ & \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) L_{n+1}^k t^n + \sum_{n=2}^{\infty} (n-1) L_{n-1}^k t^n - 2 \sum_{n=1}^{\infty} n L_n^k t^n, \\ \Rightarrow & [(k+1)L_0^k - xL_0^k - L_1^k] t^0 + [(k+1)L_1^k - (k+1)L_0^k - xL_1^k - 2L_2^k + 2L_1^k] t - \\ & \sum_{n=2}^{\infty} [(n+1)L_{n+1}^k - (2n+k+1-x)L_n^k + (n+k)L_{n-1}^k] t^n = 0, \end{aligned}$$

resultado válido $\forall x$ e t - cada potência em t é l.i.. Assim todos os Polinômios de Laguerre Associados são obtidos através da recorrência

$$\begin{aligned} L_0^k(x) &= 1, \quad L_1^k(x) = k+1-x, \\ 2L_2^k(x) &= (k+1+2-x)(k+1-x) - k-1 = (k+2)(k+1) - 2(2+k)x + x^2, \\ (n+1)L_{n+1}^k(x) &= (2n+k+1-x)L_n^k(x) - (n+k)L_{n-1}^k(x), \quad n = 2, 3, \dots \quad (6.20) \end{aligned}$$

Uma outra recorrência - envolvendo derivadas - é obtida derivando (6.19) com respeito à coordenada x

$$\begin{aligned}\frac{-t}{1-t}g^k &= \sum_{n=0}^{\infty} (L_n^k)' t^n, \\ -t \sum_{n=0}^{\infty} L_n^k t^n &= (1-t) \sum_{n=0}^{\infty} (L_n^k)' t^n, \\ -\sum_{n=1}^{\infty} L_{n-1}^k t^n &= \sum_{n=0}^{\infty} (L_n^k)' t^n - \sum_{n=1}^{\infty} (L_{n-1}^k)' t^n,\end{aligned}$$

com uma arrumada temos o resultado trivial, $(L_0^k)' = 0$, e

$$\frac{dL_n^k(x)}{dx} = \frac{dL_{n-1}^k(x)}{dx} - L_{n-1}^k(x), \quad n = 1, \dots \quad (6.21)$$

6.2.2 Equação diferencial e relação com a Hipergeométrica Confluyente

A EDO de segunda ordem cuja solução regular em $x = 0$ é dada por (6.18) pode ser obtida via sucessivas derivadas de (6.11) - essa abordagem fica como exercício. Uma forma mais direta é apelar para a relação de L_n com a confluyente (eq. (6.12)) e a fórmula (2.58),

$$\frac{d^k}{dx^k} (L_{n+k}(x)) \stackrel{(6.12)}{=} \frac{d^k}{dx^k} [{}_1F_1(-n-k, 1, x)] \stackrel{(2.58)}{=} \underbrace{\frac{\Gamma(-n)}{\Gamma(-n-k)}}_{\stackrel{(2.6)}{=} (-1)^k \frac{(n+k)!}{n!}} \frac{\Gamma(1)}{\Gamma(k+1)} {}_1F_1(-n, 1+k, x).$$

Ou seja, $L_n^k \sim {}_1F_1(-n, 1+k, x)$. De forma exata

$$\begin{aligned}L_n^k(x) &= \frac{(n+k)!}{n!k!} {}_1F_1(-n, 1+k, x), \\ &\stackrel{(2.55)}{=} \sum_{l=0}^n (-1)^l \frac{(n+k)!}{(n-l)!(k+l)!l!} x^l.\end{aligned} \quad (6.22)$$

Uma consequência direta desta eq. é $L_n^k(0) = \frac{(n+k)!}{n!k!} {}_1F_1(-n, 1+k, 0) = \frac{(n+k)!}{n!k!}$. O polinômio L_n^k é a solução regular na origem da eq. confluyente com $a = -n$ e $c = 1 + k$. *i.e.*

$$x \frac{d^2 L_n^k(x)}{dx^2} + (1 + k - x) \frac{dL_n^k(x)}{dx} + nL_n^k(x) = 0. \quad (6.23)$$

Como $c = 1 + k \in \mathbb{N}^*$, a outra solução independente desta EDO possui singularidade essencial na origem - ver eq. (2.52) e apêndice C.

6.2.3 Ortonormalidade dos Polinômios de Laguerre Associados

Sendo um caso particular da confluyente - eq. (6.22) - o resultado (2.69) garante a ortogonalidade dos Polinômios de Laguerre Associados com relação ao produto interno

$$(L_n^k, L_m^k) = \int_0^\infty e^{-x} x^k L_n^k(x) L_m^k(x) dx = 0, \quad n \neq m. \quad (6.24)$$

A norma quadrática (caso $n = m$) é determinada com a ajuda de (6.20)

$$\begin{aligned} (L_n^k, L_n^k) &\equiv |L_n^k|^2 = \int_0^\infty e^{-x} x^k (L_n^k(x))^2 dx, \\ (6.20) &\stackrel{n \rightarrow n-1}{=} \frac{1}{n} \int_0^\infty e^{-x} x^k L_n^k(x) [(2n-1+k)L_{n-1}^k - xL_n^k - (n-1+k)L_{n-2}^k] dx \\ (6.24) &\stackrel{=}{=} \frac{1}{n} \int_0^\infty e^{-x} x^k L_{n-1}^k(x) (-xL_n^k(x)) dx \\ (6.20) &\stackrel{=}{=} \frac{1}{n} \int_0^\infty e^{-x} x^k L_{n-1}^k(x) [(n+1)L_{n+1}^k - (2n+k+1)L_n^k + (n+k)L_{n-1}^k] dx \\ (6.24) &\stackrel{=}{=} \left(\frac{n+k}{n}\right) \int_0^\infty e^{-x} x^k [L_{n-1}^k(x)]^2 dx = \left(\frac{n+k}{n}\right) |L_{n-1}^k|^2. \end{aligned} \quad (6.25)$$

O cálculo

$$|L_0^k|^2 = \int_0^\infty e^{-x} x^k dx = \Gamma(k+1) = k!, \quad (6.26)$$

é suficiente para qualquer $|L_n^k|^2$ ser determinado

$$|L_1^k|^2 = (1+k)|L_0^k|^2 = (k+1)!, \quad |L_2^k|^2 = \frac{(k+2)}{2}|L_1^k|^2 = \frac{(k+2)!}{2}, \quad |L_3^k|^2 = \frac{(k+3)!}{3!},$$

em geral

$$|L_n^k|^2 = \frac{(n+k)!}{n!}. \quad (6.27)$$

Os resultados desta seção são compilados na fórmula

$$(L_n^k, L_m^k) = \int_0^\infty e^{-x} x^k L_n^k(x) L_m^k(x) dx = \frac{(n+k)!}{n!} \delta_{nm}. \quad (6.28)$$

Assumindo que os polinômios (k fixo) formem uma base para as funções contínuas por partes na semi reta $[0, \infty)$, a função

$$f^{(k)}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(k)} L_n^k(x), \quad (6.29)$$

e a eq. (6.28) fornece os coeficientes da expansão

$$C_n^{(k)} = (L_n^k, f^{(k)}) = \frac{n!}{(n+k)!} \int_0^\infty e^{-x} x^k f^{(k)}(x) L_n^k(x) dx. \quad (6.30)$$

Em particular para $f^{(k)}(x) = \delta(x - x_0)$, $C_n^{(k)} = \frac{n!}{(n+k)!} e^{-x_0} x_0^k L_n^k(x_0)$ e temos a relação de completude

$$\delta(x - x_0) = x_0^k e^{-x_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{(n+k)!} L_n^k(x_0) L_n^k(x), \quad x, x_0 > 0. \quad (6.31)$$

6.3 Exercícios Propostos

(2) Fórmula de Rodrigues: Uma definição alternativa dos Polinômios de Laguerre Associados é através da fórmula de Rodrigues

$$L_n^k(x) = \frac{e^x x^{-k}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^{n+k} e^{-x}). \quad (6.32)$$

A fórmula para os polinômios de Laguerre é obtida via $L_n(x) = L_n^0(x)$. Com esta expressão calcule os três primeiros polinômios $L_n^k(x)$ e $L_n(x)$, compare com os resultados

apresentados no texto. Também demonstre que para $x \gg 1$, $L_n^k(x) \approx \frac{(-1)^n}{n!} x^n + \mathcal{O}(x^{n-1})$.

(2) Escreva as respectivas EDO dos Polinômios de Laguerre e Laguerre Associados na forma Auto-Adjunta (ver apêndice D) e derive (6.13) e (6.24) sem utilizar a relação com a hipergeométrica confluyente.

(3) Derive a EDO (6.34) derivando k vezes a EDO (6.11).

(4) **Átomo de Hidrogênio:** Dada a EDO que descreve a parte radial da eq. de Schrödinger do átomo de Hidrogênio (potencial $V(r) = -\alpha/r$, $\alpha > 0$) para a coordenada $x = 2kr$ ($k = \sqrt{-2ME/\hbar^2} > 0$)

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(-\frac{1}{ka_0} \frac{1}{x} + \frac{1}{4} + \frac{l(l+1)}{x^2} \right) \psi(x) = 0, \quad l = 0, 1, \dots, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{M\alpha}, \quad (6.33)$$

com o *ansatz* $\psi(x) = x^{l+1} e^{-x/2} f(x)$, chegue na nova EDO:

$$x \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + (2l + 2 - x) \frac{df(x)}{dx} + \left(\frac{1}{ka_0} - l - 1 \right) f(x) = 0. \quad (6.34)$$

A função hipergeométrica confluyente para $c = 2l + 1$ e $a = -\frac{1}{ka_0} + l + 1$. Conclua que as condições de contorno $\psi(r) \rightarrow 0$, $r \rightarrow \infty$, e $\psi(0) < \infty$ só podem ser satisfeitas se $-a = N = \frac{1}{ka_0} - l + 1 = 0, 1, 2, \dots$, *i.e.* $a_0 k_{N,l} = \frac{1}{N+l+1} \equiv \frac{1}{n}$, $n = 0, 1, 2, \dots$, onde n é chamado de número quântico principal e $f(x) = L_N^{2l+1}(x)$, polinômio de Laguerre Associado.

Capítulo 7

Funções de Bessel

Neste capítulo vamos abordar as famosas funções de Bessel, extremamente importantes em física. Elas aparecem em problemas de mecânica quântica, eletromagnetismo bidimensional, na vibração de um tambor, em flutuações lineares cosmológicas, etc. Praticamente tudo que oscila ao redor de um ponto pode ser descrito por uma função de Bessel.

7.1 Função de Bessel

Desta vez vamos mudar um pouco a construção que estamos seguindo em todos os capítulos. Ao invés de definirmos a EDO cuja função de Bessel é uma das soluções, comecemos definindo a função $y_\nu(z)$ (parametrizada em z e caracterizada pelo número $\nu \in \mathbb{C}$) que obedece as duas relações de recorrência:

$$y_{\nu-1}(z) + y_{\nu+1}(z) = \frac{2\nu}{z} y_\nu(z), \quad (7.1)$$

$$y_{\nu-1}(z) - y_{\nu+1}(z) = 2 \frac{dy_\nu(z)}{dz}. \quad (7.2)$$

As duas eqs. são suficientes para derivarmos uma EDO de segunda ordem para $y_\nu(z)$, permitindo a obtenção da função. Somando e subtraindo (7.1) e (7.2) chegamos em

$$z \frac{dy_\nu(z)}{dz} = zy_{\nu-1}(z) - \nu y_\nu(z), \quad (7.3)$$

$$-z^2 \frac{dy_{\nu-1}(z)}{dz} + (\nu - 1)zy_{\nu-1}(z) = z^2 y_\nu(z). \quad (7.4)$$

Agora derive (7.3) para ter

$$z^2 \frac{d^2 y_\nu(z)}{dz^2} + (1 + \nu)z \frac{dy_\nu(z)}{dz} - z^2 y_{\nu-1}(z) - zy_{\nu-1}(z) = 0. \quad (7.5)$$

A operação (7.5) $- \nu \cdot (7.3)$, após algumas simplificações, fornece

$$z^2 \frac{d^2 y_\nu(z)}{dz^2} + z \frac{dy_\nu(z)}{dz} - \underbrace{z^2 \frac{dy_{\nu-1}(z)}{dz} + (\nu + 1)zy_{\nu-1}(z)}_{\stackrel{(7.4)}{=} z^2 y_\nu(z)} = 0,$$

e a EDO de Bessel é determinada como:

$$z^2 \frac{d^2 y_\nu(z)}{dz^2} + z \frac{dy_\nu(z)}{dz} + (z^2 - \nu^2)y_\nu(z) = 0, \quad \nu \in \mathbb{R}. \quad (7.6)$$

É evidente que as soluções desta eq. obedecem as propriedades (7.1) e (7.2). A equação possui singularidade (regular) em $z = 0$ e irregular em $z \rightarrow \infty$ (verifique a última através do método apresentado no apêndice B). Como de costume vamos procurar as soluções ao redor do ponto singular $z = 0$ via método de série de potências (Frobenius “generalizado”)

$$y_\nu(z) = \sum_{s=0}^{\infty} g_s z^{s+k}, \quad k \in \mathbb{C}, \quad g_0 \neq 0, \quad (7.7)$$

portanto

$$\frac{dy_\nu(z)}{dz} = \sum_{s=0}^{\infty} (s+k)g_s z^{s+k-1}, \quad \frac{d^2 y_\nu(z)}{dz^2} = \sum_{s=0}^{\infty} (s+k)(s+k-1)g_s z^{s+k-2},$$

que substituídos em (7.6) resultam em

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_{s=0}^{\infty} [(s+k)(s+k-1)g_s + (s+k)g_s - \nu^2 g_s] z^s + \sum_{s=0}^{\infty} g_s z^{s+2}, \\
&= [k(k-1) + k - \nu^2] g_0 + [k(k+1) + (k+1) - \nu^2] g_1 z + \sum_{s=2}^{\infty} [((s+k)^2 - \nu^2) g_s + g_{s-2}] z^s, \\
&= (k^2 - \nu^2) g_0 + [(k+1)^2 - \nu^2] g_1 z + \sum_{s=2}^{\infty} [((s+k)^2 - \nu^2) g_s + g_{s-2}] z^s.
\end{aligned}$$

Como por hipótese $g_0 \neq 0$, temos os dois possíveis valores $k = \pm\nu$. Para ambas as escolhas o termo de $\mathcal{O}(z)$ não se anula e precisamos fixar $g_1^{(\pm)} = 0$. Os outros termos da expansão são determinados pela relação de recorrência

$$g_s^{(\pm)} = -\frac{1}{(s \pm \nu)^2 - \nu^2} g_{s-2}, \quad s \geq 2. \quad (7.8)$$

Ao fixar $g_0 \equiv 1$ ambas as séries (duas possíveis escolhas de k) são completamente determinadas. Pela recorrência é evidente que os termos ímpares são nulos (uma vez que $g_1 = 0$), os primeiros termos pares são

$$g_0^{(\pm)} = 1, \quad g_2^{(\pm)} = \frac{-1}{4(1 \pm \nu)}, \quad g_4^{(\pm)} = \frac{1}{2^4(2 \pm \nu)(1 \pm \nu)} \frac{1}{2!}, \quad g_6^{(\pm)} = \frac{-1}{2^6(3 \pm \nu)(2 \pm \nu)(1 \pm \nu)} \frac{1}{3!},$$

que torna evidente a forma do termo genérico $s = 2l$ ($l = 0, 1, 2, \dots$)

$$g_{2l}^{(\pm)} = -\frac{(-1)^l}{2^{2l} l! (l \pm \nu)(l - 1 \pm \nu) \dots (1 \pm \nu)} = \frac{(-1)^l}{2^{2l} l!} \frac{\Gamma(1 \pm \nu)}{\Gamma(1 + l \pm \nu)}. \quad (7.9)$$

Soluções da eq. (7.6) são combinações lineares das séries

$$y_\nu^{(\pm)}(z) = z^{\pm\nu} \Gamma(1 \pm \nu) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{2^{2l} \Gamma(1 + l \pm \nu)} \frac{z^{2l}}{l!},$$

porém a função de Bessel não é usualmente definida assim na literatura. Como a EDO é linear, as funções $y^{(\pm)}$ multiplicadas por constantes ainda são soluções da mesma equação.

A forma padrão da famosa função de Bessel¹, $J_\nu(z)$, é determinada após a multiplicação

¹Também chamada de função de Bessel de primeiro tipo.

de $y^{(\pm)}(z)$ pela constante $1/(2^{\pm\nu}\Gamma(1 \pm \nu))$, *i.e.*

$$J_{\pm\nu}(z) \equiv \left(\frac{z}{2}\right)^{\pm\nu} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{2^{2l}\Gamma(1+l\pm\nu)} \frac{z^{2l}}{l!}. \quad (7.10)$$

A solução geral de (7.6), para $\nu \notin \mathbb{N}$,² é:

$$y_{\nu}(z) = AJ_{\nu}(z) + BJ_{-\nu}(z), \quad (7.11)$$

onde A e B são constantes. Repare que para $z \approx 0$,

$$J_{\pm\nu}(z) \approx \left(\frac{z}{2}\right)^{\pm\nu} \frac{1}{\Gamma(1 \pm \nu)} (1 + \mathcal{O}(z^2)), \quad (7.12)$$

e a função $J_{-\nu}(z)$ diverge na origem. Em muitas situações físicas é exigida regularidade da solução na origem, implicando em $B = 0$.

Para alguns valores particulares a função de Bessel pode ser reescrita em termos de funções elementares. Por exemplo, para $\nu = -1/2$

$$\begin{aligned} J_{-1/2}(z) &= \left(\frac{z}{2}\right)^{-1/2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{2^{2l} \underbrace{\Gamma(1+l-1/2)}_{\text{eq. (1.20)} (2l)!\sqrt{\pi}/(2^{2l}l!)}} \frac{z^{2l}}{l!}, \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l z^{2l}}{(2l)!} = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos z, \end{aligned} \quad (7.13)$$

singular em $z = 0$ ($\sim z^{-1/2}$). Já para $\nu = 1/2$

$$\begin{aligned} J_{1/2}(z) &= \left(\frac{z}{2}\right)^{1/2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{2^{2l} \underbrace{\Gamma(1+l+1/2)}_{\text{eq. (1.20)} (l+1/2)(2l)!\sqrt{\pi}/(2^{2l}l!)}} \frac{z^{2l}}{l!}, \\ &= \sqrt{\frac{2z}{\pi}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l z^{2l}}{(2l+1)(2l)!} = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l z^{2l+1}}{(2l+1)!} = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin z, \end{aligned} \quad (7.14)$$

regular em $z = 0$ ($\sim z^{1/2}$).

²O caso $\nu = 0, 1, 2, \dots$ necessita de uma análise separada, ver seção 7.1.2.

7.1.1 Representação Integral

Vamos demonstrar que a função de Bessel pode ser escrita como uma integral envolvendo outra função de Bessel. Tenha a integral:

$$I(z; \nu; \mu) = 2 \frac{z^{\nu-\mu}}{2^{\nu-\mu}} \frac{1}{\Gamma(\nu-\mu)} \int_0^1 dt (1-t^2)^{\nu-\mu-1} t^{\mu+1} J_\mu(z t), \quad \nu > \mu,$$

substituindo (7.10) no integrando

$$\begin{aligned} I(z) &= \frac{z^{\nu-\mu}}{2^{\nu-\mu}} \frac{1}{\Gamma(\nu-\mu)} \left(\frac{z}{2}\right)^\mu \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{z}{2}\right)^{2l} \frac{(-1)^l}{l!} \frac{1}{\Gamma(l+1+\mu)} \underbrace{2 \int_0^1 dt (1-t^2)^{\nu-\mu-1} t^{2(\mu+l+1)-1}}_{\substack{\text{eq. (1.11)} \\ B(l+\mu+1, \nu-\mu) = \frac{\Gamma(l+\mu+1)\Gamma(\nu-\mu)}{\Gamma(l+1+\nu)}}}, \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{2^{2l}\Gamma(1+l\pm\nu)} \frac{z^{2l}}{l!} = J_\nu(z), \end{aligned}$$

ou seja, uma representação integral da função de Bessel (chamada de integral de Sonini) é:

$$J_\nu(z) = 2 \frac{z^{\nu-\mu}}{2^{\nu-\mu}} \frac{1}{\Gamma(\nu-\mu)} \int_0^1 dt (1-t^2)^{\nu-\mu-1} t^{\mu+1} J_\mu(z t), \quad \nu > \mu. \quad (7.15)$$

O resultado acima não é muito útil para definir J_ν , mas esse tipo de integral é bem interessante, uma vez que costuma aparecer em vários problemas físicos bidimensionais. Uma forma de simplificar a forma de (7.15) é fixando o valor de μ para um caso simples. Só conhecemos explicitamente de $J_{\pm 1/2}$, a melhor escolha é $\mu = -1/2$ (a integral passa a existir para $\nu > -1/2$). Então a eq. (7.13) em (7.15) resulta na representação integral padrão da função de Bessel:

$$J_\nu(z) = 2 \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \frac{1}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu+1/2)} \int_0^1 dt (1-t^2)^{\nu-1/2} \cos(z t), \quad \nu > -1/2. \quad (7.16)$$

A integral (7.16) possui algumas formas alternativas. Com a troca $t = \sin \theta$

$$\begin{aligned} J_\nu(z) &= 2 \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \frac{1}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu + 1/2)} \int_0^{\pi/2} d\theta (\cos^2 \theta)^\nu \cos(z \sin \theta), \\ &= \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \frac{1}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu + 1/2)} \int_0^\pi d\theta (\cos^2 \theta)^\nu \cos(z \sin \theta), \end{aligned} \quad (7.17)$$

na segunda linha foi usado o fato do integrando ser par ao redor de $\theta = \pi/2$. Uma outra forma é a troca $t = \cos \theta$ em (7.16). O resultado é

$$\begin{aligned} J_\nu(z) &= 2 \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \frac{1}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu + 1/2)} \int_0^{\pi/2} d\theta (\sin^2 \theta)^\nu \cos(z \cos \theta), \\ &= \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \frac{1}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu + 1/2)} \int_0^\pi d\theta (\sin^2 \theta)^\nu \cos(z \cos \theta), \end{aligned} \quad (7.18)$$

novamente o limite de integração pode ser estendido pois o integrando é par. A eq. (7.18) é interessante pois permite mais uma forma integral (a que mais costuma aparecer). Ao integrando de (7.18) podemos acrescentar o termo

$$\pm i (\sin^2 \theta)^\nu \sin(z \cos \theta),$$

cuja integral é nula, já que a função é ímpar ao redor de $\theta = \pi/2$. Com esse termo extra, a função de Bessel também pode ser escrita como:

$$J_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \frac{1}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu + 1/2)} \int_0^\pi d\theta (\sin^2 \theta)^\nu e^{\pm iz \cos \theta}. \quad (7.19)$$

O resultado é válido para ambos os sinais - algo esperado uma vez que J_ν é real. Por fim voltando à coordenada t ($t = \cos \theta$), nossa última representação integral da função de Bessel é:

$$J_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \frac{1}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu + 1/2)} \int_{-1}^1 dt (1 - t^2)^{\nu-1/2} e^{\pm izt}. \quad (7.20)$$

7.1.2 Função de Neumann

As soluções da EDO (7.6) precisam ser estudadas separadamente quando o índice $\nu = n = 0, 1, 2, \dots$. O método de série de potências não fornece mais as duas soluções independentes, pois

$$J_{-n}(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^{-n} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{2^{2l}\Gamma(1+l-n)} \frac{z^{2l}}{l!} = \left(\frac{z}{2}\right)^{-n} \sum_{l=n}^{\infty} \frac{(-1)^l}{2^{2l}(l-n)!} \frac{z^{2l}}{l!},$$

a soma se inicia no n -ésimo termo devido aos pólos da função Gamma. Fazendo a troca na soma $l = n + u$ ($u = 0, 1, \dots$)

$$J_{-n}(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^{-n} \left(\frac{z}{2}\right)^{2n} (-1)^n \sum_{u=0}^{\infty} \frac{(-1)^u}{2^{2u}u!} \frac{z^{2u}}{(u+n)!},$$

ou seja

$$J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z), \quad (7.21)$$

e a equação (7.11) apresenta apenas uma solução independente. A relação (7.21) prova que a solução singular em $z = 0$ não pode ser obtida via método de série de potências. O mesmo “problema” já surgiu anteriormente nessas notas e o mesmo procedimento descrito na seção 2.1.6 será utilizado mais uma vez, outra forma de obter a segunda solução independente é encontrada no apêndice C. Vamos definir uma segunda solução l.i. da EDO para qualquer caso (ν inteiro ou não). Sua definição parece um pouco arbitrária, mas tal escolha ficará clara quando estudarmos os comportamentos assintóticos. A segunda solução independente é chamada de função de Neumann³, definida como:

$$N_\nu(z) = \frac{\cos(\pi\nu) J_\nu(z) - J_{-\nu}(z)}{\sin(\pi\nu)}. \quad (7.22)$$

³Também conhecida como função de Bessel de segundo tipo. Aqui mantemos o nome de Neumann. Ao mesmo tempo, J_ν e N_ν são chamadas de *funções de Bessel*.

Claramente $N_\nu(z)$ é solução da eq. de Bessel quando $\nu \notin \mathbb{N}$. Já para $\nu \in \mathbb{N}$ temos uma indeterminação $\frac{0}{0}$, que pode ser retirada via regra de L'Hospital

$$N_n(z) = \lim_{\nu \rightarrow n} \frac{\frac{\partial}{\partial \nu} (\cos(\pi \nu) J_\nu(z) - J_{-\nu}(z))}{\frac{\partial}{\partial \nu} (\sin(\pi \nu))} = \lim_{\nu \rightarrow n} \frac{1}{\pi} \left(\frac{\partial J_\nu(z)}{\partial \nu} - (-1)^\nu \frac{\partial J_{-\nu}(z)}{\partial \nu} \right). \quad (7.23)$$

A derivada de $J_{\pm \nu}(z)$ com relação ao parâmetro ν pode parecer não natural, mas não existe nenhum problema - é um parâmetro contínuo. Um cálculo direto com a ajuda das definições da função de Bessel (7.10) e a função Digamma (1.23) (cuja representação em série é dada por (1.26)) resulta em⁴:

$$\frac{\partial}{\partial \nu} J_{\pm \nu}(z) = \pm \ln \left(\frac{z}{2} \right) J_{\pm \nu}(z) \mp \left(\frac{z}{2} \right)^{\pm \nu} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \left(\frac{z}{2} \right)^{2l} \frac{\psi(l+1 \pm \nu)}{\Gamma(l+1 \pm \nu)}.$$

olhando *a priori* para o segundo termo parece que quando $\nu \rightarrow n$ a soma só tem início quando $l = n$ - devido aos pólos simples de $\Gamma(z)$ em $z = 0, -1, -2, \dots$, ver eq. (1.18).

Porém a função Digamma também possui pólos simples nos mesmos valores, ver eq. (1.27).

A razão das funções é finita e dada por:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\psi(-m + \epsilon)}{\Gamma(-m + \epsilon)} \stackrel{(1.27)/(1.18)}{=} -(-1)^m m!. \quad (7.24)$$

Estando tudo certo, o resultado acima é suficiente para escrevermos explicitamente (7.23)

como:

$$\begin{aligned} N_n(z) = & \frac{2}{\pi} \ln \left(\frac{z}{2} \right) J_n(z) - \frac{1}{\pi} \left(\frac{z}{2} \right)^n \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \left(\frac{z}{2} \right)^{2l} \frac{\psi(l+n+1)}{(n+l)!} - \\ & \frac{1}{\pi} \left(\frac{z}{2} \right)^{-n} \sum_{l=0}^{n-1} \frac{(n-l-1)!}{l!} \left(\frac{z}{2} \right)^{2l} - \\ & \frac{(-1)^n}{\pi} \left(\frac{z}{2} \right)^{-n} \sum_{l=n}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \left(\frac{z}{2} \right)^{2l} \frac{\psi(l-n+1)}{(l-n)!}, \end{aligned} \quad (7.25)$$

que obviamente não é proporcional à função $J_n(z)$. A função $N_n(z)$ possui exatamente a mesma estrutura da eq. (C.6) - com o termo $\ln z/2$ multiplicando a outra solução

⁴No primeiro termo foi usado que $\frac{\partial(x/2)^{\pm \nu}}{\partial \nu} = \frac{\partial e^{\pm \nu \ln(x/2)}}{\partial \nu} = \pm(x/2)^{\pm \nu} \ln x/2$

independente acrescentada de uma outra série. Para $n = 0$, o termo da segunda linha não existe e toda a singularidade está codificada em $\ln(z/2)$. O último termo de (7.25) começa $\sim (z/2)^n$, exatamente como o segundo. A redefinição $l \rightarrow l + n$ no último permite a junção dos dois termos em uma soma única, portanto temos o seguinte resultado mais “ajeitado”

$$N_n(z) = \frac{2}{\pi} \ln\left(\frac{z}{2}\right) J_n(z) - \frac{1}{\pi} \left(\frac{z}{2}\right)^n \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \left(\frac{z}{2}\right)^{2l} \frac{\psi(l+n+1) + \psi(l+1)}{(n+l)!} - \frac{1}{\pi} \left(\frac{z}{2}\right)^{-n} \sum_{l=0}^{n-1} \frac{(n-l-1)!}{l!} \left(\frac{z}{2}\right)^{2l}. \quad (7.26)$$

A parte mais importante não foi feita - mostrar que quando $\nu = n$ (7.22), ou melhor (7.23), é solução da eq. de Bessel. Começemos diferenciando (7.6) com relação ao parâmetro ν

$$z^2 \frac{d^2}{dz^2} \left(\frac{\partial J_{\pm\nu}(z)}{\partial \nu} \right) + z \frac{d}{dz} \left(\frac{\partial J_{\pm\nu}(z)}{\partial \nu} \right) + (x^2 - \nu^2) \frac{\partial}{\partial \nu} J_{\pm\nu}(z) = \pm 2\nu J_{\pm\nu}(z),$$

fazendo a combinação linear adequada:

$$z^2 \frac{d^2}{dz^2} \left(\frac{1}{\pi} \left(\frac{\partial J_{\nu}(z)}{\partial \nu} - (-1)^{\nu} \frac{\partial J_{-\nu}(z)}{\partial \nu} \right) \right) + z \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{\pi} \left(\frac{\partial J_{\nu}(z)}{\partial \nu} - (-1)^{\nu} \frac{\partial J_{-\nu}(z)}{\partial \nu} \right) \right) + (x^2 - \nu^2) \left(\frac{1}{\pi} \left(\frac{\partial J_{\nu}(z)}{\partial \nu} - (-1)^{\nu} \frac{\partial J_{-\nu}(z)}{\partial \nu} \right) \right) = \frac{2\nu}{\pi} (J_{\nu}(z) - (-1)^{\nu} J_{-\nu}(z)).$$

No limite $\nu \rightarrow n$, o lado direito da eq. se anula e os termos do lado esquerdo tornam-se a função de Neumann, logo $N_n(z)$ é solução da eq. de Bessel (7.6) mesmo quando $\nu = n$.

A solução geral de (7.6) para qualquer ν é:

$$y_{\nu}(z) = AJ_{\nu}(z) + BN_{\nu}(z), \quad (7.27)$$

com A e B constantes arbitrárias. Novamente salientamos que se for exigida regularidade da solução em $z = 0$ é necessário impor $B = 0$ (ν inteiro ou não). A forma assintótica de

$N_n(z)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, nas proximidades de $z = 0$, obtida diretamente de (7.25), é:

$$\begin{aligned} N_n(z) &\approx \frac{2}{\pi n!} \ln\left(\frac{z}{2}\right) \left(\frac{z}{2}\right)^{2n} (1 + \mathcal{O}(z^2)) - \frac{1}{\pi} (n-1)! \left(\frac{z}{2}\right)^{-n} (1 + \mathcal{O}(z^2)), \quad n \neq 0, \\ N_0(z) &\approx \frac{2}{\pi} \left(\ln\left(\frac{z}{2}\right) + \gamma\right) (1 + \mathcal{O}(z^2)), \end{aligned} \quad (7.28)$$

onde foi usado que $\psi(1) = -\gamma$. Quando $\nu \neq n = 0, 1, 2, \dots$, a forma assintótica é obtida de (7.22) e (7.12)

$$N_\nu(z) \approx -\frac{1}{\sin(\pi\nu)\Gamma(1-\nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu} (1 + \mathcal{O}(z^2)) \stackrel{(1.15)}{=} -\frac{\Gamma(\nu)}{\pi} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu} (1 + \mathcal{O}(z^2)). \quad (7.29)$$

7.1.3 Ortogonalidade da Função de Bessel

Utilizando os resultados do apêndice D, a EDO (7.6) pode ser reescrita na forma Auto-Adjunta

$$\frac{d}{dz} (zy'_\nu(z)) + \left(z - \frac{\nu^2}{z}\right) y_\nu(z) = 0,$$

e não temos uma eq. de autovalor. Por outro lado, toda função de Bessel possui infinitos zeros⁵ e isso permite um “truque” para a construção de um produto escalar onde as funções de Bessel são ortogonais. Ele consiste em parametrizar $J_\nu(z)$ na nova coordenada ρ , no intervalo $[0, a]$, onde $z = \frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho$, sendo $\alpha_{\nu n}$ o n -ésimo zero de $J_\nu(z)$, *i.e.* $J_\nu(\alpha_{\nu n}) = 0$. Então em $\rho \in [0, a]$, a eq. (7.6) fica

$$\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) + \rho \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) + \left[\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right)^2 - \nu^2\right] J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) = 0, \quad (7.30)$$

⁵isso será mostrado na seção 7.4, mas já temos uma ideia pelos dois únicos exemplos explícitos que escrevemos até então - eqs. (7.13) e (7.14).

Uma construção análoga pode ser feita trocando $\alpha_{\nu n} \rightarrow \alpha_{\nu m}$ (outro zero da mesma função de Bessel). A operação $J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right)(7.30)_n - J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right)(7.30)_m$ fornece

$$\begin{aligned} & \rho^2 \left(J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) \frac{d^2}{d\rho^2} J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) - J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) \frac{d^2}{d\rho^2} J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) \right) + \\ & \rho \left(J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) - J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) \right) + \\ & = -\frac{\rho^2}{a^2} [(\alpha_{\nu n})^2 - (\alpha_{\nu m})^2] J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right), \end{aligned}$$

com algumas manipulações a identidade se simplifica em:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\rho} \left[\rho \left(J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) - J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) \right) \right] \\ & = -\frac{\rho}{a^2} [(\alpha_{\nu n})^2 - (\alpha_{\nu m})^2] J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right), \end{aligned}$$

integrando na variável ρ , no intervalo $[0, a]$ e usando que $J_\nu(0) = J_\nu(\alpha_{\nu n}) = J_\nu(\alpha_{\nu m}) = 0$, conclui-se que (é assumido $\alpha_{\nu n} \neq \alpha_{\nu m}$)

$$\int_0^a d\rho \rho J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) = 0, \quad n \neq m. \quad (7.31)$$

7.1.4 Normalização

Para calcular a integral (7.31) com $n = m$ vamos refazer todos os passos da seção anterior, mas trocando $\frac{\alpha_{\nu n}}{a} \rightarrow k \in \mathbb{R}$, que não é necessariamente um zero de Bessel. No fim teremos

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\rho} \left[\rho \left(J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) \frac{d}{d\rho} J_\nu(k\rho) - J_\nu(k\rho) \frac{d}{d\rho} J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) \right) \right] \\ & = -\rho \left[k^2 - \left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\right)^2 \right] J_\nu(k\rho) J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right), \end{aligned}$$

integrando $\int_0^a d\rho$

$$a J_\nu(ka) \frac{dJ_\nu(\alpha_{\nu m})}{d\rho} = \left[k^2 - \left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\right)^2 \right] \int_0^a d\rho \rho J_\nu(k\rho) J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right).$$

Derivando os dois lados com relação ao parâmetro (contínuo) k ,⁶:

$$(a^2 J'_\nu(ka)) \left(\underbrace{\frac{dJ_\nu(\alpha_{\nu m})}{d\rho}}_{=\frac{\alpha_{\nu m}}{a} J'_\nu(\alpha_{\nu m})} \right) = 2k \int_0^a d\rho \rho J_\nu(k\rho) J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) + \left[k^2 - \left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\right)^2 \right] \int_0^a d\rho \rho^2 J'_\nu(k\rho) J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right).$$

Por fim tomando $k \rightarrow \frac{\alpha_{\nu m}}{a}$, o último termo se anula e temos o resultado:

$$\int_0^a d\rho \rho \left(J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) \right)^2 = \frac{a^2}{2} (J'_\nu(\alpha_{\nu m}))^2.$$

O lado direito pode ser reescrito em termos de uma função de Bessel via eq. (7.4)

$$\frac{dJ_\nu(z)}{dz} \Big|_{z=\alpha_{\nu m}} = \left(\frac{\nu}{z} J_\nu(z) - J_{\nu+1}(z) \right) \Big|_{z=\alpha_{\nu m}} = -J_{\nu+1}(\alpha_{\nu m}).$$

Os resultados das duas últimas seções são compilados na fórmula:

$$\int_0^a d\rho \rho J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu m}}{a}\rho\right) J_\nu\left(\frac{\alpha_{\nu n}}{a}\rho\right) = \frac{a^2}{2} [J_{\nu+1}(\alpha_{\nu n})]^2 \delta_{nm}, \quad (7.32)$$

muito importante em vários problemas físicos - por exemplo, uma partícula quântica dentro de uma esfera.

Supondo que a função $f_\nu(\rho)$ ($0 \leq \rho \leq a$) possa ser escrita como a combinação linear:

$$f_\nu(\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} C_{\nu n} J_\nu\left(\alpha_{\nu n} \frac{\rho}{a}\right),$$

a eq. (7.32) é suficiente para determinarmos as constantes $C_{\nu m}$. Basta multiplicar ambos os lados por $\rho J_\nu\left(\alpha_{\nu m} \frac{\rho}{a}\right)$ e integrar termo a termo no intervalo $\rho \in [0, a]$. O cálculo fornece

$$C_{\nu m} = \frac{2}{a^2 J'_{\nu+1}(\alpha_{\nu m})} \int_0^a d\rho \rho f_\nu(\rho) J_\nu\left(\alpha_{\nu m} \frac{\rho}{a}\right). \quad (7.33)$$

⁶ $\frac{dJ_\nu(kz)}{dk} = z J'_\nu(kz)$, onde “linha” corresponde a derivada em relação ao argumento.

7.2 Equação de Bessel modificada

Se trata de uma outra EDO, definida por:

$$z^2 \frac{d^2 \bar{y}_\nu(z)}{dz^2} + z \frac{d\bar{y}_\nu(z)}{dz} - (z^2 + \nu^2) \bar{y}_\nu(z) = 0, \quad \nu \geq 0. \quad (7.34)$$

A equação diferencial é muito parecida com (7.6), na verdade com a troca $z \rightarrow iz$, (7.34) torna-se (7.6). Uma solução desta eq. deve ser

$$\bar{y}_\nu(z) \sim J_\nu(iz) = i^\nu \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l (i^2)^l}{l! \Gamma(l+1+\nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2l} = i^\nu \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l! \Gamma(l+1+\nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2l}.$$

Queremos soluções reais quando o argumento z e o parâmetro ν são reais, assim a função de Bessel modificada - chamada de $I_\nu(z)$ -, solução de (7.34), é definida como:

$$I_{\pm\nu}(z) \equiv i^{-\mp\nu} J_{\pm\nu}(iz) = \left(\frac{z}{2}\right)^{\pm\nu} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l! \Gamma(l+1 \pm \nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2l}. \quad (7.35)$$

Repare que $I_\nu(-z) = (-1)^\nu I_\nu(z)$ (quando $\nu \notin \mathbb{N}$ a função só é definida na semi-eixo positivo e se $\nu \in \mathbb{N}$ ela possui paridade positiva). Para $\nu \notin \mathbb{N}$, a solução geral da EDO de Bessel modificada é:

$$\bar{y}_\nu(z) = AI_\nu(z) + BI_{-\nu}(z), \quad (7.36)$$

para A e B constantes. É evidente que $I_{-\nu}(z)$ diverge $\sim z^{-\nu}$ quando $z \rightarrow 0$, então se as condições de contorno exigem uma solução finita na origem deve-se tomar $B = 0$.

As representações integrais de $I_\nu(z)$ são consequências diretas de $I_{\pm\nu}(z) = i^{-\mp\nu} J_{\pm\nu}(iz)$.

Por exemplo, de (7.16) e (7.20) temos

$$I_\nu(z) = 2 \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \frac{1}{\sqrt{\pi} \Gamma(\nu + 1/2)} \int_0^1 dt (1-t^2)^{\nu-1/2} \cosh(zt), \quad (7.37)$$

$$I_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \frac{1}{\sqrt{\pi} \Gamma(\nu + 1/2)} \int_{-1}^1 dt (1-t^2)^{\nu-1/2} e^{\mp zt}. \quad (7.38)$$

No caso de $\nu = 0, 1, 2, \dots$ novamente temos um problema. As funções $I_{\pm\nu}(z)$ são proporcionais. Tenha $I_{-n}(z)$

$$\begin{aligned} I_{-n}(z) &= \left(\frac{z}{2}\right)^{-n} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!(l-n)!} \left(\frac{z}{2}\right)^{2l} = \left(\frac{z}{2}\right)^{-n} \sum_{l=n}^{\infty} \frac{1}{l!(l-n)!} \left(\frac{z}{2}\right)^{2l}, \quad l = s + n, \\ &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{(n+s)!s!} \left(\frac{z}{2}\right)^{2s} = I_n(z), \end{aligned}$$

ou seja

$$I_{-n}(z) = I_n(z). \quad (7.39)$$

De forma análoga a feita no caso de Bessel, define-se a combinação linear

$$K_\nu(z) \equiv \frac{\pi}{2} \left(\frac{I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)}{\sin \pi\nu} \right), \quad (7.40)$$

que é uma segunda solução independente da eq. (7.34) $\forall \nu$. Sua escolha peculiar ficará clara na seção 7.4 quando seu assintótico para $z \rightarrow \infty$ será derivado. Uma propriedade trivial desta função é $K_{-\nu}(z) = K_\nu(z)$. No limite $\nu \rightarrow n$ usamos L'Hospital para obter:

$$\begin{aligned} K_n(z) &= \lim_{\nu \rightarrow n} \frac{(-1)^\nu}{2} \left(\frac{\partial I_{-\nu}(z)}{\partial \nu} - \frac{\partial I_\nu(z)}{\partial \nu} \right), \\ &= -(-1)^n \ln \left(\frac{z}{2}\right) I_n(z) + \frac{1}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^{-n} \sum_{l=0}^{n-1} \frac{(-1)^l (n-l-1)!}{l!} \left(\frac{z}{2}\right)^{2l} + \\ &\quad \frac{(-1)^n}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^{-n} \sum_{l=n}^{\infty} \frac{1}{l!} \left(\frac{z}{2}\right)^{2l} \frac{\psi(1+l-n)}{(l-n)!} + \\ &\quad \frac{(-1)^n}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^n \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \left(\frac{z}{2}\right)^{2l} \frac{\psi(1+l+n)}{(l+n)!}, \end{aligned} \quad (7.41)$$

onde seguimos os mesmos passos feitos no estudo da função de Neumann. Fica como exercício provar que $K_n(z)$ é solução de (7.34) (o truque é o mesmo feito com a função de Neumann). A solução geral da eq. (7.34), independente se ν é inteiro ou não, é:

$$\bar{y}_\nu(z) = AI_\nu(z) + BK_\nu(z). \quad (7.42)$$

Nas proximidades da origem os assintóticos dessas funções são⁷:

$$I_\nu(z) \approx \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \frac{1}{\Gamma(1+\nu)} (1 + \mathcal{O}(z^2)), \quad (7.43)$$

$$K_\nu(z) \approx \frac{\Gamma(\nu)}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu} (1 + \mathcal{O}(z^2)), \quad \nu \notin \mathbb{N}, \quad (7.44)$$

$$K_n(z) \approx \frac{(-1)^n}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^{-n} (n-1)! (1 + \mathcal{O}(z^2)) - (-1)^n \ln\left(\frac{z}{2}\right) \left(\frac{z}{2}\right)^n \frac{1}{n!} (1 + \mathcal{O}(z^2)), \quad n \neq 0, \quad (7.45)$$

$$K_0(z) \approx \left(-\ln\left(\frac{z}{2}\right) - \gamma\right) (1 + \mathcal{O}(z^2)). \quad (7.46)$$

7.3 Relação com a função hipergeométrica confluyente

Aqui demonstraremos que a EDO da função de Bessel modificada é um caso particular da EDO hipergeométrica confluyente. Dada (7.34), primeiro faça a troca $z = -x/2$ para ficar com:

$$x^2 \frac{d^2 \bar{y}_\nu(x)}{dx^2} + x \frac{d\bar{y}_\nu(x)}{dx} - \left(\frac{x^2}{4} + \nu^2\right) \bar{y}_\nu(x) = 0.$$

Assuma o *ansatz* $\bar{y}_\nu(x) = e^{-x/2} x^\nu f(x)$,

$$\frac{d\bar{y}_\nu(x)}{dx} = e^{-x/2} x^\nu \left(-\frac{f}{2} + \frac{\nu}{x} f + f'\right), \quad \frac{d^2 \bar{y}_\nu(x)}{dx^2} = e^{-x/2} x^\nu \left(\frac{f}{4} - \frac{\nu}{x} f - f' + \frac{\nu(\nu-1)}{x^2} f + \frac{2\nu}{x} f' + f''\right),$$

que resulta em

$$x^2 \left(\frac{f}{4} - \frac{\nu}{x} f - f' + \frac{\nu(\nu-1)}{x^2} f + \frac{2\nu}{x} f' + f''\right) + x \left(-\frac{f}{2} + \frac{\nu}{x} f + f'\right) - \left(\frac{x^2}{4} + \nu^2\right) f(x) = 0.$$

Após uma simplificação encontramos a eq. da hipergeométrica confluyente

$$x f''(x) + (1 + 2\nu - x) f'(x) - (\nu + 1/2) f(x) = 0, \quad (7.47)$$

⁷Todos os truques usados no estudo da função de Neumann são necessários aqui.

com coeficientes $a = \nu + 1/2$ e $c = 1 + 2\nu$. Isso implica que a função de Bessel modificada pode ser reescrita em termos de hipergeométricas confluentes, ver (2.52),

$$I_\nu(z) = e^z z^\nu [A {}_1F_1(\nu + 1/2; 1 + 2\nu; -2z) + B z^{-2\nu} {}_1F_1(1/2 - \nu; 1 - 2\nu; -2z)].$$

Como $I_\nu(z)$ é regular na origem, $B = 0$. Para determinar a constante A basta expandir ambos os lados em potências de z

$$\begin{aligned} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \frac{1}{\Gamma(1+\nu)} (1 + \mathcal{O}(z^2)) &= A z^\nu (1 + z + \mathcal{O}(z^2)) \left(1 - \frac{\nu + 1/2}{1 + 2\nu} 2z + \mathcal{O}(z^2)\right), \\ &= A z^\nu (1 + \mathcal{O}(z^2)), \end{aligned}$$

então $A = \frac{1}{2^\nu \Gamma(1+\nu)}$. A relação exata é:

$$I_\nu(z) = \frac{e^z}{\Gamma(1+\nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu {}_1F_1(\nu + 1/2; 1 + 2\nu; -2z). \quad (7.48)$$

Por tabela podemos relacionar a função de Bessel $J_\nu(z)$ com a hipergeométrica confluyente.

Lembrando que $J_\nu(z) = i^\nu I_\nu(-iz)$, então:

$$J_\nu(z) = \frac{e^{-iz}}{\Gamma(1+\nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu {}_1F_1(\nu + 1/2; 1 + 2\nu; 2iz). \quad (7.49)$$

Através das eqs. (7.48) e (7.49) podemos determinar facilmente as formas assintóticas de J_ν , N_ν , I_ν e K_ν - assunto da próxima seção.

7.4 Forma assintótica das funções de Bessel e Bessel modificada

Evocando as eqs. (2.68) e (7.49) a forma assintótica da função de Bessel é determinada como

$$\begin{aligned}
 J_\nu(z) &\approx \frac{e^{-iz}}{\Gamma(1+\nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \left(\frac{\Gamma(1+2\nu)}{\Gamma(\nu+1/2)} (-2iz)^{-\nu-1/2} + \frac{\Gamma(1+2\nu)}{\Gamma(1/2+\nu)} e^{2iz} (2iz)^{-\nu-1/2} \right), \\
 &\approx \underbrace{\frac{\Gamma(1+2\nu)}{2^{2\nu}\Gamma(1+\nu)\Gamma(\nu+1/2)}}_{\stackrel{(1.19)}{=} 1/\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2z}} \left(e^{-i(z-\pi\nu/2-1/4)} + e^{i(z-\pi\nu/2-1/4)} \right), \\
 J_\nu(z) &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4} - \frac{\nu\pi}{2}\right), \quad z \gg 1. \tag{7.50}
 \end{aligned}$$

O resultado (7.50) prova que toda função de Bessel possui infinitos zeros, justificando o estudo da seção 7.1.3. Determinar os zeros de uma função de Bessel arbitrária é um problema bem complicado, mas ao menos assintoticamente temos $\alpha_{\nu n} \approx \frac{\pi}{2} \left(2n + 1 + \frac{1}{4} + \frac{\nu}{2}\right)$, $n \gg 1$. O mesmo raciocínio se aplica a função de Neumann (eq. (7.22))

$$\begin{aligned}
 N_\nu(z) &= \frac{\cos(\pi\nu) J_\nu(z) - J_{-\nu}(z)}{\sin(\pi\nu)}, \\
 &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \frac{\cos(\pi\nu) \cos\left(z - \frac{\pi}{4} - \frac{\nu\pi}{2}\right) - \cos\left(z - \frac{\pi}{4} + \frac{\nu\pi}{2} + \left(\frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi\nu}{2}\right)\right)}{\sin(\pi\nu)} \\
 &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \frac{\cos(\pi\nu) \cos\left(z - \frac{\pi}{4} - \frac{\nu\pi}{2}\right) - \cos(\pi\nu) \cos\left(z - \frac{\pi}{4} - \frac{\nu\pi}{2}\right) + \sin(\pi\nu) \sin\left(z - \frac{\pi}{4} - \frac{\nu\pi}{2}\right)}{\sin(\pi\nu)}, \\
 N_\nu(z) &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin\left(z - \frac{\pi}{4} - \frac{\nu\pi}{2}\right), \quad z \gg 1. \tag{7.51}
 \end{aligned}$$

A função de Neumann é definida exatamente para fornecer o assintótico seno com o mesmo argumento da assintótico cosseno de $J_\nu(z)$.

Para terminar a seção vamos derivar os assintóticos das funções de Bessel modificadas - I_ν e K_ν . Podemos começar da relação com a hipergeométrica confluyente ou simplesmente

usar a relação com J_ν . Escolhemos a segunda alternativa.

$$\begin{aligned}
 I_\nu(z) &= i^{-\nu} J_\nu(iz) \approx i^{-\nu} \sqrt{\frac{2}{\pi iz}} \cos\left(iz - \frac{\pi}{4} - \frac{\nu\pi}{2}\right), \\
 &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} e^{-i\pi\nu/2 - i\pi/4} \left(e^{z+i\pi/4+i\pi\nu/2} + e^{z-i\pi/4-i\pi\nu/2}\right), \\
 I_\nu(z) &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} \left(e^z - ie^{-i\pi\nu} e^{-z}\right) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} e^z, \quad z \gg 1.
 \end{aligned} \tag{7.52}$$

Para $K_\nu(z)$ (ver eq. (7.40)) o resultado acima precisa ser usado de forma súpil, pois a primeira contribuição é cancelada na diferença $I_\nu - I_{-\nu}$ (o assintótico independe de ν). A contribuição vem do do segundo termo, escrito na penultima igualdade de (7.52).

$$\begin{aligned}
 K_\nu(z) &= \frac{\pi}{2} \left(\frac{I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)}{\sin \pi\nu}\right) \approx \frac{\pi}{2 \sin \pi\nu} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi z}} \left(e^z - ie^{i\pi\nu} e^{-z}\right) - \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} \left(e^z - ie^{-i\pi\nu} e^{-z}\right)\right), \\
 &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \frac{1}{2i \sin \pi\nu} \left(e^{i\pi\nu} - e^{-i\pi\nu}\right) e^{-z}, \\
 K_\nu(z) &\approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}, \quad z \gg 1.
 \end{aligned} \tag{7.53}$$

Enquanto $I_\nu(z)$ diverge exponencialmente no infinito, $K_\nu(z)$ é a exata combinação que tende a zero no mesmo. Em várias situações físicas a solução da eq. de Bessel modificada precisa ser finita no infinito, isso implica no descarte de $I_\nu(z)$.

7.5 Funções de Bessel esféricas e Henkel

Ao longo deste capítulo estudamos as principais propriedades das funções de Bessel e Bessel modificada - soluções das EDO (7.6) e (7.34). O objetivo desta seção não é introduzir nenhuma novidade, mas estudar alguns casos particulares de funções de Bessel que de tão relevantes merecem um tratamento a parte.

7.5.1 Funções de Bessel Esféricas

Estamos interessados na seguinte EDO:

$$z^2 \frac{d^2 R(z)}{dz^2} + 2z \frac{dR(z)}{dz} + (z^2 - l(l+1)) R(z) = 0, \quad z > 0, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (7.54)$$

que representa a parte radial da eq. de Schrödinger estacionária de uma partícula livre com momento angular bem definido (“onda esférica”). Um fato interessante desta equação é que com a troca $R(z) = \Psi(z)/z$, ela toma a forma

$$\frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2}\right) \Psi(z) = 0, \quad z > 0,$$

da eq. de Schrödinger estacionária de uma partícula unidimensional no potencial $V(z) \sim \frac{l(l+1)}{z^2}$ (potencial conforme). Independente do contexto queremos achar a solução desta EDO. Fazendo a troca

$$R(z) = \frac{y(z)}{\sqrt{z}}, \quad \text{ou} \quad \Psi(z) = \sqrt{z}y(z),$$

chega-se a seguinte EDO para $y(z)$

$$z^2 \frac{d^2 y(z)}{dz^2} + z \frac{dy(z)}{dz} + (z^2 - (l+1/2)^2) y(z) = 0, \quad (7.55)$$

a eq. de Bessel para $\nu = l + 1/2 = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$. A solução geral do problema em termos de $R(z)$ ou $\Psi(z)$ é:

$$\begin{aligned} R(z) &= \frac{A}{\sqrt{z}} J_{l+1/2}(z) + \frac{B}{\sqrt{z}} N_{l+1/2}(z). \\ \Psi(z) &= A\sqrt{z} J_{l+1/2}(z) + B\sqrt{z} N_{l+1/2}(z). \end{aligned}$$

Pronto está tudo resolvido. O que é chamado na literatura de Bessel esférica é justamente a solução de $R(z)$, para ser mais exato

$$j_l(z) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+1/2}(z), \quad n_l(z) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2z}} N_{l+1/2}(z), \quad (7.56)$$

onde $j_l(z)$ é chamada de função de Bessel esférica e $n_l(z)$ é a função de Neumann esférica. A constante $\sqrt{\pi/2}$ é colocada para simplificar o assintótico. Das eqs. (7.50) e (7.51) temos que para $z \gg 1$

$$j_l(z) \approx \frac{\sin\left(z - \frac{\pi l}{2}\right)}{z}, \quad (7.57)$$

$$n_l(z) \approx -\frac{\cos\left(z - \frac{\pi l}{2}\right)}{z}, \quad z \gg 1. \quad (7.58)$$

Já para $z \rightarrow 0$ os assintóticos ficam (com ajuda de (1.15), (1.19), (7.12) e (7.29))

$$\begin{aligned} j_l(z) &\approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \frac{2}{(2l+1)\Gamma(l+1/2)} \left(\frac{z}{2}\right)^{l+1/2} \\ &\stackrel{(1.19)}{=} \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \frac{2}{(2l+1) \frac{\sqrt{\pi}(2l)!}{2^{2l}l!}} \left(\frac{z}{2}\right)^{l+1/2}, \\ j_l(z) &\approx \frac{2^l l!}{(2l+1)(2l)!} z^l = \frac{2^l l!}{(2l+1)!} z^l, \end{aligned} \quad (7.59)$$

e

$$\begin{aligned} n_l(z) &\approx -\sqrt{\frac{\pi}{2z}} \frac{(-1)^l}{\Gamma(1-(l+1/2))} \left(\frac{z}{2}\right)^{-l-1/2}, \\ &\stackrel{(1.15),(1.19)}{=} -\sqrt{\frac{\pi}{2z}} \frac{(-1)^l}{\frac{\pi}{(-1)^l} \frac{2^{2l}l!}{\sqrt{\pi}(2l)!}} \left(\frac{z}{2}\right)^{-l-1/2}, \\ n_l(z) &\approx -\frac{(2l)!}{2^l l!} z^{-(l+1)}. \end{aligned} \quad (7.60)$$

Uma característica importante das funções de Bessel esféricas é que elas podem ser escritas em termos das funções elementares seno e cosseno (lembre-se da eq. (7.14)). Para demonstrar tal propriedade vamos refazer nosso estudo da eq. (7.54) através de uma outra abordagem⁸. Faça a troca $R(z) = z^l \xi_l(z)$

$$R'(z) = z^l \left(\frac{l}{z} \xi_l(z) + \xi_l'(z) \right), \quad R''(z) = z^l \left(\frac{l(l-1)}{z^2} \xi_l(z) + \frac{2l}{z} \xi_l'(z) + \xi_l''(z) \right),$$

⁸O cálculo segue a referência [5].

então (7.54) fica (após simplificações)

$$z \frac{d^2 \xi_l}{dz^2} + 2(l+1) \frac{d\xi_l(z)}{dz} + z\xi_l(z) = 0. \quad (7.61)$$

No caso particular de $l = 0$, a eq. pode ser simplificada em

$$\frac{d^2}{dz^2} (z\xi_0) = -(z\xi_0),$$

a eq. de um “oscilador” para $z\xi_0$ com frequência unitária, cuja solução é

$$\xi_0(z) = A_0 \frac{\sin z}{z} + B_0 \frac{\cos z}{z}. \quad (7.62)$$

Repare que a primeira solução é regular na origem e a segunda singular. Voltando ao caso geral, derive a eq. (7.61) com relação a z para chegar em

$$z \frac{d^3 \xi_l}{dz^3} + 2(l+1) \frac{d^2 \xi_l}{dz^2} + \left(z - \frac{2(l+1)}{z} \right) \frac{d\xi_l}{dz} = 0.$$

Agora faça a troca $\xi'(z) = z f_l(z)$,

$$\xi''(z) = f_l + z f_l', \quad \xi_l'''(z) = 2f_l' + z f_l''.$$

Após simplificações ficamos com:

$$z \frac{d^2 f_l}{dz^2} + 2(l+2) \frac{df_l(z)}{dz} + z f_l(z) = 0, \quad (7.63)$$

exatamente a eq. (7.61) apenas trocando $l \rightarrow l+1$. Ou seja, temos a relação de recorrência

$$\xi_{l+1}(z) = \frac{1}{z} \frac{d\xi_l(z)}{dz}. \quad (7.64)$$

Como resolvemos $\xi_0(z)$, qualquer $\xi_l(z)$ pode ser obtido via sucessivos usos de (7.64). Sendo

$j_l(z)$ não singular na origem e $n_l(z)$ singular, a relação só pode ser

$$j_l(z) \sim z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z}, \quad n_l(z) \sim z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\cos z}{z}.$$

As constantes de proporcionalidade podem ser fixadas analisando o assintótico $z \rightarrow \infty$, onde

$$\begin{aligned} z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z} &\approx \frac{1}{z} \frac{d^l \sin z}{dz^l} + \mathcal{O}(z^{-2}) = \frac{(-1)^l}{z} \sin \left(z - \frac{\pi l}{2} \right), \\ z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\cos z}{z} &\approx \frac{1}{z} \frac{d^l \cos z}{dz^l} + \mathcal{O}(z^{-2}) = \frac{(-1)^l}{z} \cos \left(z - \frac{\pi l}{2} \right). \end{aligned}$$

Comparando com (7.57) e (7.58) temos a relação exata:

$$j_l(z) = (-1)^l z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z}, \quad (7.65)$$

$$n_l(z) = -(-1)^l z^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\cos z}{z}. \quad (7.66)$$

Resultado útil para a obtenção explícita das funções de Bessel esféricas para l 's pequenos.

7.5.2 Funções de Henkel

A primeira função de Henkel é simplesmente a função complexa cuja parte real é $J_\nu(z)$ e a parte imaginária $N_\nu(z)$, *i.e.*

$$H_\nu^{(1)}(z) \equiv J_\nu(z) + iN_\nu(z). \quad (7.67)$$

Já a segunda função de Henkel é o complexo conjugado da primeira (para z real)

$$H_\nu^{(2)}(z) \equiv J_\nu(z) - iN_\nu(z). \quad (7.68)$$

As funções de Henkel aparecem quando numa eq. de Bessel temos como condições de

contorno ondas “esféricas”⁹ bidimensionais indo para o infinito (a primeira função)¹⁰ ou vindo do infinito (segunda). Isso ocorre pois de (7.50) e (7.51) é trivial perceber que

$$H_\nu^{(1/2)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{\pm i(z - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi\nu}{2})}. \quad (7.69)$$

Se as funções de Bessel são “generalizações” das oscilações senoidais, as funções de Henkel são os equivalentes a $e^{\pm iz}$. Para fins de registro, os assintóticos das funções de Henkel para $z \rightarrow 0$ (trivialmente encontrados via assintóticos de $J_\nu(z)$ e $N_\nu(z)$) são

$$H_0^{(1/2)}(z) \approx \left(\pm i \frac{2}{\pi} \ln\left(\frac{z}{2}\right) + 1 + \pm i \frac{2}{\pi} \gamma \right) (1 + \mathcal{O}(z^2)), \quad (7.70)$$

$$H_\nu^{(1/2)}(z) \approx \mp i \frac{\Gamma(\nu)}{\pi} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu} (1 + \mathcal{O}(z^2)). \quad \nu > 0. \quad (7.71)$$

Podemos relacionar $H_\nu^{(1)}$ com K_ν . Tomando $z \rightarrow iz$ temos

$$\begin{aligned} H_\nu^{(1)}(iz) &\equiv J_\nu(iz) + iN_\nu(iz) \stackrel{(7.35),(7.22)}{=} i^\nu \left(1 + i \frac{\cos \pi\nu}{\sin \pi\nu}\right) I_\nu(z) - \frac{i^{-\nu+1}}{\sin \nu\pi} I_{-\nu} \\ &= \frac{i^{\nu+1}}{\sin \pi\nu} \left(\underbrace{\cos \pi\nu - i \sin \pi\nu}_{=e^{-i\pi\nu}=i^{-2\nu}} \right) I_\nu(z) - \frac{i^{-\nu+1}}{\sin \nu\pi} I_{-\nu} \\ &= -\frac{i^{-\nu+1}}{\sin \pi\nu} (I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)) = \frac{i^{-\nu-1}}{\sin \pi\nu} (I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)). \end{aligned}$$

Comparando com a definição de K_ν (eq. (7.40))

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} H_\nu^{(1)}(iz). \quad (7.72)$$

Repare que o resultado está de acordo com (7.53) e (7.69).

⁹A parte “radial” de coordenadas cilíndricas.

¹⁰Por exemplo, a função de Green da eq. de Schrödinger estacionária bidimensional usada para descrever um espalhamento elástico é proporcional a $H_0^{(1)}(z)$.

7.6 Função de Airy

Como última aplicação das funções de Bessel vamos estudar a função de Airy, definida como a solução da EDO

$$\frac{d^2y(z)}{dz^2} + zy(z) = 0, \quad -\infty < z < \infty, \quad (7.73)$$

com a condição de contorno $y(-\infty) = 0$. A aplicação mais famosa de (7.73) é como a eq. de Schödinger estacionária unidimensional para uma partícula num potencial linear (força constante). Essa EDO pode ser relacionada com a eq. de Bessel. Primeiro faça a troca $z = \left(\frac{3}{2}v\right)^{2/3}$ ($z > 0$), fica-se com

$$\frac{d^2y(v)}{dv^2} + \frac{1}{3v} \frac{dy(v)}{dv} + y(v) = 0,$$

bem pior do que era. Agora tome o *ansatz* $y(v) = v^{1/3}f(v)$

$$y'(v) = v^{1/3} \left(\frac{1}{3v}f + f' \right), \quad y''(v) = v^{1/3} \left(-\frac{2}{9v^2}f + \frac{2}{3v}f' + f'' \right),$$

que nos leva a eq. de Bessel

$$v^2 f''(v) + v f'(v) + (v^2 - (1/3)^2) f(v) = 0, \quad (7.74)$$

para $\nu = 1/3$. Então a solução para $z > 0$ é:

$$y(z) = \sqrt{\frac{2z}{3}} \left\{ A J_{1/3} \left[\frac{2}{3} z^{3/2} \right] + B J_{-1/3} \left[\frac{2}{3} z^{3/2} \right] \right\}, \quad z > 0. \quad (7.75)$$

Já para $z < 0$, formalmente temos $v \rightarrow -i|v|$ e a eq. tornar-se a Bessel modificada. Como a condição de contorno exige $y(z \rightarrow -\infty) = 0$, a solução só pode ser K_ν , logo

$$y(z) = C \sqrt{\frac{2|z|}{3}} K_{1/3} \left[\frac{2}{3} |z|^{3/2} \right], \quad z < 0.$$

A continuidade da função em $z = 0$ relaciona as constantes B e C . Tomando $z \rightarrow 0$

$$y(0^+) = B\sqrt{\frac{2}{3}}3^{1/3}\frac{1}{\Gamma(2/3)},$$

$$y(0^-) = B\sqrt{\frac{2}{3}}3^{1/3}\frac{\Gamma(1/3)}{2}.$$

$$\text{Então } B = \frac{\Gamma(2/3)\Gamma(1/3)}{2}C = \frac{\Gamma(1-1/3)\Gamma(1/3)}{2}C = \frac{\pi}{2\sin(\pi/3)}C = \frac{\pi}{\sqrt{3}}C.$$

Para $z \rightarrow -\infty$, a solução possui a forma assintótica

$$y(z) \approx C\sqrt{\frac{2|z|}{3}}\frac{\sqrt{3\pi}}{2}|z|^{-3/4}e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} = \sqrt{\frac{\pi}{2}}C\frac{e^{-\frac{2}{3}|z|^{3/2}}}{|z|^{1/4}}, \quad z \rightarrow -\infty.$$

A continuidade da solução elimina uma das constantes, permanecemos com duas: A e C . É possível relacioná-las criando uma correspondência via assintóticos $z \rightarrow \pm\infty$ - um “truque” (de Landau). Formalmente vamos tratar o argumento como complexo $-z \rightarrow |z|e^{i\phi}$ ($|z| \rightarrow \infty$). O assintótico $z \rightarrow -\infty$ corresponde a escolha $\phi = 0$. *A priori* nosso novo assintótico complexo é

$$y(z, \phi) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2}}Ce^{-i\phi/4}\frac{e^{-\frac{2}{3}|z|^{3/2}e^{i3\phi/2}}}{|z|^{1/4}}, \quad |z| \rightarrow \infty.$$

O assintótico no outro limite é encontrado (mantendo $|z| \rightarrow \infty$ fixo) ao variarmos continuamente ϕ no plano complexo, porém há duas escolhas: pelo caminho C_1 - semi-círculo superior $[0, \pi]$; pelo caminho C_2 - semi-círculo inferior $[0, -\pi]$, ver figura 7.1 . A primeira escolha leva ao assintótico:

$$y(z, \pi) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2}}Ce^{-i\pi/4}\frac{e^{i\frac{2}{3}z^{3/2}}}{z^{1/4}}.$$

Já a segunda escolha

$$y(z, -\pi) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2}}Ce^{i\pi/4}\frac{e^{-i\frac{2}{3}z^{3/2}}}{z^{1/4}}.$$

Cada escolha fornece uma parte do assintótico no limite $z \rightarrow +\infty$ (até porque nenhuma escolha é melhor que outra), então para as soluções nas duas semi-retas serem ligadas por

uma continuação no plano complexo é preciso que para $z \rightarrow +\infty$ o assintótico seja a soma dos resultados obtidos pelos dois caminhos¹¹, *i.e.*

$$\begin{aligned} y(z) &\approx 2C \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{z^{1/4}} \frac{1}{2} \left(e^{i\left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \pi/4\right)} + e^{-i\left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \pi/4\right)} \right) \\ &= C \frac{\sqrt{2\pi}}{z^{1/4}} \cos \left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right). \end{aligned} \quad (7.76)$$

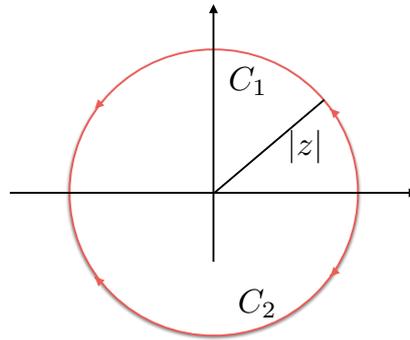


Figura 7.1: As duas escolhas para relacionar os assintóticos $z \rightarrow \pm\infty$ mantendo $|z| \rightarrow \infty$.

Para a relação entre A e C ser determinada é preciso que a eq. (7.76) seja obtida no limite $z \rightarrow +\infty$ em (7.75), que é

$$\begin{aligned} y(z) &\approx \sqrt{\frac{2z}{3}} \sqrt{\frac{2}{\pi \frac{2}{3} z^{3/2}}} \left\{ A \cos \left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{6} \right) + \frac{\pi}{2 \sin(\pi/3)} C \cos \left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{6} \right) \right\}, \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{C\pi}{z^{1/4}} \left\{ \frac{A}{C\pi} \cos \left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{6} \right) + \frac{1}{2 \sin(\pi/3)} \cos \left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{6} \right) \right\}, \\ &= \sqrt{2\pi} \frac{C}{z^{1/4}} \left\{ \left(\frac{A}{C\pi} + \frac{1}{2 \sin(\pi/3)} \right) \cos(\pi/6) \cos \left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right) - \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{A}{C\pi} - \frac{1}{2 \sin(\pi/3)} \right) \sin(\pi/6) \sin \left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Comparando os dois resultados temos:

$$\frac{A}{C\pi} = \frac{1}{2 \sin(\pi/3)} = \frac{1}{2 \cos(\pi/6)} \rightarrow A = \frac{C\pi}{2 \sin(\pi/3)} = B.$$

¹¹No pensamento inverso (saindo do $+\infty$ para o $-\infty$) pode-se ver que uma parte do cosseno fornece o assintótico correto (que decai) e a outra resulta numa exponencial crescente que não possui análogo no outro lado. Por isso nossa análise só fornece uma parte do assintótico por escolha.

Tudo está certo pois $\cos(\pi/6) = \sin(\pi/3) = \frac{\sqrt{3}}{2}$. Redefinindo $C \rightarrow C/\sqrt{2\pi}$, a solução final do nosso problema é:

$$y(z) = \frac{C}{3} \sqrt{\pi z} \left\{ J_{1/3} \left[\frac{2}{3} z^{3/2} \right] + J_{-1/3} \left[\frac{2}{3} z^{3/2} \right] \right\}, \quad z > 0 \quad (7.77)$$

$$y(z) = C \sqrt{\frac{|z|}{3\pi}} K_{1/3} \left[\frac{2}{3} |z|^{3/2} \right], \quad z < 0. \quad (7.78)$$

A constante C não pode ser fixada sem impormos algum tipo de “normalização” (em termos de “Delta de Dirac”). Os assintóticos são:

$$y(z) \approx \frac{C}{z^{1/4}} \cos \left(\frac{2}{3} z^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right), \quad z \rightarrow \infty, \quad (7.79)$$

$$y(z) \approx \frac{C}{2} \frac{e^{-\frac{2}{3}|z|^{3/2}}}{|z|^{1/4}}, \quad z \rightarrow -\infty. \quad (7.80)$$

Relacionar os limites $z \rightarrow \pm\infty$ pode parecer uma escolha arbitrária ou até forçada de fixar as constantes, mas esse truque faz todo o sentido no estudo da aproximação WKB na mecânica quântica e os resultados (com os fatores multiplicativos certos) (7.79) e (7.80) são cruciais lá.

7.7 Exercícios Propostos

(1) Função geratriz de $J_n(z)$: A função de Bessel com índice inteiro, $J_n(z)$, pode ser definida através da seguinte função geratriz:

$$g(z, t) = e^{\frac{x}{2} \left(t - \frac{1}{t} \right)}. \quad (7.81)$$

Expanda a função em potências de t para obter

$$g(z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} J_n(z) t^n, \quad J_n(z) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!(l-n)!} \left(\frac{x}{2} \right)^{-n+2l}.$$

As funções de Bessel são os coeficientes da expansão. Derivando a função geratriz (termo a termo) com relação à variável t obtenha a relação de recorrência (7.1). Já derivando em

z obtenha (7.2).

(2) Seguindo os mesmos passos descritos na seção 7.1.2 para a função N_n , mostre que K_n (eq. (7.41)) é solução de (7.34).

(3) Resolva a eq. de Schrödinger bidimensional estacionária da partícula livre

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{x}) = 0,$$

utilizando coordenadas “esféricas” (cilíndricas sem dependência em z), com a condição de contorno $\psi(0) < \infty$. *Dica: para a separação de variáveis utilize o ansatz: $\psi(r, \phi) = e^{im\phi}R(r)$ e a identificação $\psi(r, \phi) \sim \psi(r, \phi + 2\pi)$.*

Apêndice A

Transformada de Fourier e Delta de Dirac

O objetivo deste apêndice é de, sem se aprofundar na matemática, introduzir elementos básicos da transformada de Fourier, ao menos o suficiente para os nossos propósitos¹. Antes de falar de transformada de Fourier vamos fazer uma pequena revisão sobre séries de Fourier.

A.1 Delta de Kronecker e Séries de Fourier

Se $n, m \in \mathbb{Z}$, então o delta de Kronecker é definido como:

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 0, & \text{se } n \neq m \\ 1, & \text{se } n = m \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

¹o aluno que desejar se aprofundar mais no assunto deve consultar a bibliografia

Existem muitas representações para a eq. (A.1). As de nosso interesse são:

$$\begin{aligned}
 \delta_{nm} &= \frac{1}{2\pi L} \int_{-\pi L}^{\pi L} e^{i(n-m)\frac{x}{L}} dx \\
 &= \frac{1}{\pi L} \int_{-\pi L}^{\pi L} \cos\left(\frac{nx}{L}\right) \cos\left(\frac{mx}{L}\right) dx \\
 &= \frac{1}{\pi L} \int_{-\pi L}^{\pi L} \sin\left(\frac{nx}{L}\right) \sin\left(\frac{mx}{L}\right) dx
 \end{aligned} \tag{A.2}$$

onde as duas últimas não representam $\delta_{00} = 1$. Por inspeção direta você pode confirmar que essas representações são legítimas. A eq. (A.2) serve como pré-requisito para a definição de séries de Fourier.

Seja a função $f(x)$ um vetor no espaço vetorial das funções contínua por partes² no intervalo $x \in [-L\pi, L\pi]$ (chamarei de CP), então assumindo que o conjunto de vetores $(1/2, \cos \frac{x}{L}, \cos \frac{2x}{L}, \dots, \sin \frac{x}{L}, \sin \frac{2x}{L}, \dots)$ forma uma base de CP , $f(x)$ pode ser escrita como:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos\left(\frac{nx}{L}\right) + b_n \sin\left(\frac{nx}{L}\right) \right) \tag{A.3}$$

Mesmo sem provar nada a definição acima é bem natural, onde a parte dos cossenos (incluindo o termo a_0) descreve a parte simétrica da função, enquanto os senos a parte anti-simétrica³. Para determinar os coeficientes de Fourier a_0 , a_n e b_n , vamos aplicar, respectivamente, $\int_{-L\pi}^{L\pi} dx$, $\int_{-L\pi}^{L\pi} dx \cos \frac{mx}{L}$, $\int_{-L\pi}^{L\pi} dx \sin \frac{mx}{L}$ na eq. acima e utilizar (assumindo uma integração termo a termo) a eq. (A.2). Assim temos:

$$\begin{aligned}
 a_0 &= \frac{1}{L\pi} \int_{-L\pi}^{L\pi} dx f(x) \\
 a_n &= \frac{1}{L\pi} \int_{-L\pi}^{L\pi} dx f(x) \cos\left(\frac{nx}{L}\right) \\
 b_n &= \frac{1}{L\pi} \int_{-L\pi}^{L\pi} dx f(x) \sin\left(\frac{nx}{L}\right)
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

²funções que possuem apenas um número finito de descontinuidades e de extremos (máximos, mínimos e pontos de inflexão) em um intervalo definido.

³toda função pode ser escrita como a soma de uma parte simétrica e uma anti-simétrica: $f(x) = \frac{1}{2}(f(x) + f(-x)) + \frac{1}{2}(f(x) - f(-x))$

Com as fórmulas $\cos \frac{nx}{L} = \frac{1}{2}(e^{i\frac{nx}{L}} + e^{-i\frac{nx}{L}})$ e $\sin \frac{nx}{L} = \frac{1}{2i}(e^{i\frac{nx}{L}} - e^{-i\frac{nx}{L}})$, a série de Fourier (A.3) pode ser reescrita como:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i\frac{nx}{L}} \quad (\text{A.5})$$

onde

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{a_0}{2} \\ c_n &= \frac{1}{2}(a_n - ib_n), \text{ se } n > 0 \\ c_n &= \frac{1}{2}(a_{-n} + ib_{-n}), \text{ se } n < 0 \end{aligned}$$

Substituindo (A.4) na eq. acima, chega-se a uma fórmula universal para c_n

$$c_n = \frac{1}{2L\pi} \int_{-L\pi}^{L\pi} dx f(x) e^{-i\frac{nx}{L}} \quad n \in \mathbb{Z} \quad (\text{A.6})$$

que poderia ser derivada aplicando $\int_{-L\pi}^{L\pi} dx e^{-i\frac{mx}{L}}$ na eq. (A.5) e usando a primeira eq. de (A.1). Repare que nessa forma os coeficientes são imaginários, porém $c_n^* = c_{-n}$ o que garante a realidade de $f(x)$ ($f(x)^* = f(x)$). Por outro lado, poderíamos ter definido a série de Fourier como a eq. (A.5) (sem referência à eq. (A.3)) com $f(x)$ sendo uma função complexa e mesmo assim a primeira eq. de (A.2) garantiria que os coeficientes c_n seriam dados por (A.6), *i.e.* as eqs. (A.5) e (A.6) definem a série de Fourier mesmo para uma função complexa (só que sendo complexa, $c_n^* \neq c_{-n}$). Isso encerra a pequena revisão sobre séries de Fourier.

A.2 Transformada de Fourier

A transformada de Fourier consiste no limite $L \rightarrow \infty$ da série de Fourier, ou seja, ela representa uma função $f(x)$ contínua por partes que está definida em toda reta. Vamos ver como tomar tal limite.

Mudando a notação da seguinte forma: $k \equiv \frac{n}{L}$, $\Delta k \equiv k(n+1) - k(n) = \frac{1}{L}$ e $c_n \rightarrow c(k)$,

então temos pela eq. (A.5):

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_k (\underbrace{L\Delta k}_{=1}) c(k) e^{ikx} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k \Delta k (\sqrt{2\pi} L c(k)) e^{ikx} \end{aligned}$$

Definindo:

$$F(k) \equiv (\sqrt{2\pi} L c(k)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L\pi}^{-L\pi} dx f(x) e^{-ikx}$$

a série pode ser escrita como:

$$f(x) = \sum_k \frac{F(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \Delta k = \sum_k \text{Área}_k \quad (\text{A.7})$$

onde Área_k é explicado graficamente na figura A.1

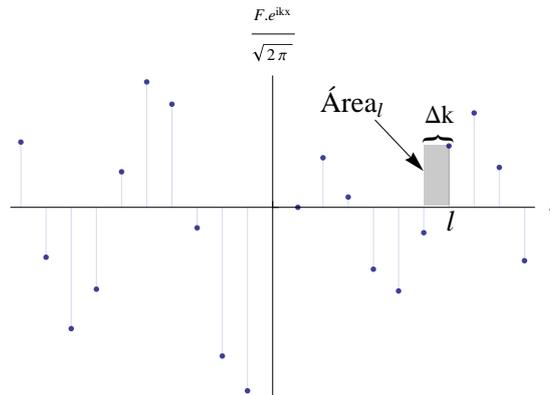


Figura A.1: Valores de $\frac{F(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ (com x fixo) para vários valores de k em um exemplo hipotético. A soma na eq. (A.7) é dada pela soma das pequenas áreas, como mostrado no ponto $k = l$.

Quanto maior L menor será $\Delta k = \frac{1}{L}$ e mais próximos estarão os pontos da fig. (A.1). Fica evidente pela figura (A.1) que no limite $L \rightarrow \infty$ ($\Delta k \rightarrow 0$) a variável k se torna contínua, $F(k) e^{ikx}$ (x fixo) vira uma função contínua de k e a soma (A.7) tem como limite uma integral em k (integral é a área sob a curva). Ou seja, o resultado final para a

transformada de Fourier é:

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk F(k) e^{ikx} \\ F(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

A.3 Delta de Dirac

A transformada de Fourier pode ser usada para derivar uma representação integral da “função” (distribuição) Delta de Dirac ($\delta(x)$) que é definida como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0) \quad (\text{A.9})$$

fazendo $f(x) = \delta(x)$ na segunda eq. de (A.8) implica que

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

e, consequentemente:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \quad (\text{A.10})$$

que é principal representação da Delta de Dirac usada na física. Se afrouxarmos a condição de $f(x) \in \mathbb{R}$, *i.e.* considerarmos $f(x)$ uma função complexa (de um argumento real), e definirmos a transformada de Fourier de $f(x)$ como a primeira eq. de (A.8), a eq. (A.10) garante que a transformada inversa seja dada pela segunda eq. de (A.8) (basta aplicar $\frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik'x}$ nos dois lados da equação). O que quero dizer é que a fórmula (A.8) vale mesmo para funções complexas.

Algumas propriedades da Delta de Dirac são:

- $\delta(-x) = \delta(x)$

prova: basta re-derivar a representação integral tomando $F(k) = \delta(k)$ e $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$,

ao invés de $f(x) = \delta(x)$ e $F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$.

- $f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$ ($|f(a)| < \infty$)

prova: $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a) \cdot 1 = f(a) \left(\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)dx \right) = \int_{-\infty}^{\infty} f(a)\delta(x-a)dx$

-

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|} \quad (\text{A.11})$$

prova: $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{|a|x}{|a|}\right)|a|d\frac{x}{|a|} = \int_{-\infty}^{\infty} (|a|\delta(|a|y))dy = \int_{-\infty}^{\infty} (|a|\delta(ay))dy = \int_{-\infty}^{\infty} (|a|\delta(ax))dx$

-

$$\delta(g(x)) = \sum_{i=1}^n \frac{\delta(x-x_i)}{|g'(x_i)|}, \text{ onde } g(x_i) = 0 \text{ e } g'(x_i) \neq 0 \quad (\text{A.12})$$

prova: $\delta(g(x))$ é não nulo apenas ao redor dos zeros de $g(x)$. Por exemplo, se $g(x)$ possui apenas um zero em $x = x_1$, ao redor dele $g(x) \approx g(x_1) + g'(x_1)(x - x_1) = g'(x_1)(x - x_1)$, logo $\delta(g(x)) = \delta(g'(x_1)(x - x_1)) = \delta(x - x_1)/|g'(x_1)|$, por (A.11). A generalização para n zeros é imediata

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(g(x))dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^n \delta(g'(x_i)(x - x_i))dx \\ &\stackrel{(\text{A.11})}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^n \frac{\delta(x - x_i)}{|g'(x_i)|}dx, \quad g(x_i) = 0, \quad g'(x_i) \neq 0. \end{aligned}$$

A.4 Transformada de Fourier em d dimensões e consequências

A generalização da Delta de Dirac para d -dimensões é:

$$\int_{\mathbb{R}^d} f(\vec{x}')\delta^d(\vec{x} - \vec{x}')d^d x = f(\vec{x}) \quad (\text{A.13})$$

ou seja:

$$\begin{aligned}
\delta^d(\vec{x} - \vec{x}') &\equiv \delta(x_1 - x'_1)\delta(x_2 - x'_2)\dots\delta(x_d - x'_d) \\
&= \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik_1(x_1 - x'_1)}\right) \dots \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik_d(x_d - x'_d)}\right) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} d^d k e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x} - \vec{x}')}
\end{aligned} \tag{A.14}$$

A forma natural da transformada de Fourier em d dimensões é:

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} d^d k F(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tag{A.15}$$

e a eq. (A.14) mais a definição (A.13) garantem que a transformação inversa (basta aplicar $\frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ nos dois lados da eq. acima) seja dada por:

$$F(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} d^d x f(\vec{x}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tag{A.16}$$

definindo a transformada de Fourier em d -dimensões.

Uma propriedade interessante (e *muito* importante na mecânica quântica) da transformada de Fourier é a igualdade de Parseval:

$$\int_{\mathbb{R}^d} d^d x |f(\vec{x})|^2 = \int_{\mathbb{R}^d} d^d k |F(\vec{k})|^2 \tag{A.17}$$

A prova consiste em usar a eq. (A.15) e depois a representação da Delta (A.14):

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^d} d^d x |f(\vec{x})|^2 &= \int_{\mathbb{R}^d} d^d x \left(\frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} d^d k' F^*(\vec{k}') e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}} \right) \left(\frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} d^d k F(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \right) \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} d^d k \int_{\mathbb{R}^d} d^d k' F(\vec{k}) F^*(\vec{k}') \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} d^d x e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\cdot\vec{x}}}_{=\delta^d(\vec{k} - \vec{k}')} \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} d^d k |F(\vec{k})|^2
\end{aligned}$$

Iremos encerrar o apêndice mostrando como resolver uma eq. diferencial parcial através da transformada de Fourier e da representação integral (A.10) da Delta de Dirac. A eq.

em questão é:

$$(\nabla_{(x)}^2 - \mu^2)G(\vec{x} - \vec{x}') = -e\delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \quad (\text{A.18})$$

$\mu \geq 0$ é uma constante com dimensão do inverso do comprimento. Substituindo no lado esquerdo a transformada de Fourier

$$G(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \tilde{G}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}$$

e no direito a eq. (A.14) (com $d = 3$), ficamos com:

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \left(-(|k|^2 + \mu^2) \tilde{G}(k) + \frac{e}{(2\pi)^{3/2}} \right) = 0$$

como a transformada de Fourier de zero é zero

$$\Rightarrow \tilde{G}(|k|) = \frac{e}{(2\pi)^{3/2} (|\vec{k}|^2 + \mu^2)}$$

O uso da transformada de Fourier transfere o problema de resolver a eq. diferencial (A.18) em resolver a seguinte integral:

$$G(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{e}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}}{(|\vec{k}|^2 + \mu^2)}$$

passando para coordenadas esféricas: $d^3k \rightarrow k^2 \sin \theta dk d\theta d\phi$ e $\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}') = kr \cos \theta$, onde $k \equiv |\vec{k}|$ e $r \equiv |\vec{x} - \vec{x}'|$

$$\begin{aligned} G(\vec{x} - \vec{x}') &= \frac{e}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dk \frac{k^2}{k^2 + \mu^2} \underbrace{\int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{ikr \cos \theta}}_{\int_{-1}^1 d\xi e^{ikr\xi}} \\ &= \frac{e}{2\pi^2 r} \int_0^\infty dk \frac{k \sin(kr)}{k^2 + \mu^2} = \frac{e}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^\infty dk \frac{k \sin(kr)}{k^2 + \mu^2} \\ &= \frac{e}{4\pi^2 r} \Im m \left(\int_{-\infty}^\infty dk \frac{k e^{ikr}}{k^2 + \mu^2} \right) = \frac{e}{4\pi^2 r} \Im m \left(\underbrace{\int_{-\infty}^\infty dk \frac{k e^{ikr}}{(k + i\mu)(k - i\mu)}}_{=(I)} \right) \\ (I) &= \oint_C dz \frac{z e^{izr}}{(z + i\mu)(z - i\mu)} = 2\pi i \text{Res} \left(\frac{z e^{izr}}{(z + i\mu)(z - i\mu)} \right)_{z=i\mu} = i\pi e^{-\mu r} \end{aligned}$$

onde o contorno C é dado pela figura (A.2). Pegando a parte imaginária do resultado acima chegamos à resposta do problema:

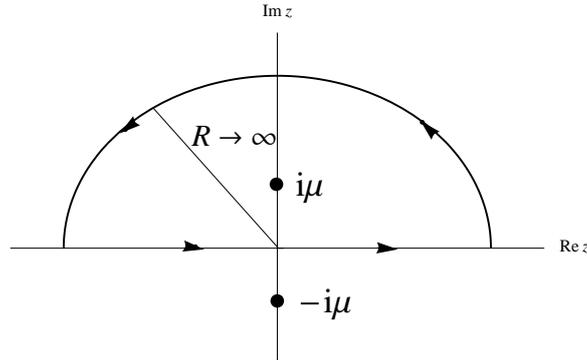


Figura A.2: Contorno C

$$G(r) = \frac{e}{4\pi r} e^{-\mu r} \quad (\text{A.19})$$

conhecido como potencial de Yukawa. No limite $\mu \rightarrow 0$ e com $e = \frac{1}{\epsilon_0}$, a eq. (A.18) vira a eq. de Poisson que descreve o potencial elétrico no ponto \vec{x} de uma carga pontual no ponto \vec{x}' com carga elétrica unitária. E a solução fica:

$$G(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (\text{A.20})$$

Por fim, mostrarei como a solução (A.20) é suficiente para determinar o potencial eletrostático de uma distribuição de carga $\rho(\vec{x})$ localizada (a carga total da distribuição é $q = \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\vec{x}) d^3x$), com a condição de contorno $\varphi(\vec{x}) \Big|_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} = 0$. Tal potencial obedece a eq. de Poisson:

$$\nabla^2 \varphi(\vec{x}) = -\frac{\rho(\vec{x})}{\epsilon_0} \quad (\text{A.21})$$

Assumindo $\varphi(\vec{x})$ da forma:

$$\varphi(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G(\vec{x} - \vec{x}') \rho(\vec{x}')$$

Aplicando ∇^2 :

$$\nabla^2 \varphi(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \nabla^2 (G(\vec{x} - \vec{x}')) \rho(\vec{x}') \stackrel{!}{=} -\frac{\rho(\vec{x})}{\epsilon_0}$$

que só é verdade se $G(\vec{x} - \vec{x}')$ for solução de (A.18) com $\mu = 0$ e $e = \frac{1}{\epsilon_0}$, *i.e.* se for a eq. (A.20). Portanto, a solução geral da eq. (A.21), para a condição de contorno $\varphi(\vec{x}) \Big|_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} = 0$, é:

$$\varphi(\vec{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \frac{\rho(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \quad (\text{A.22})$$

onde o integrando pode ser expandido em termos de $|\frac{\vec{x}'}{\vec{x}}| = \frac{r'}{r}$ (se $|\vec{x}|$ for maior que as dimensões da distribuição de cargas) via fórmula (5.14).

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{x}) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{l=0}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \rho(\vec{x}') P_l(\cos \theta) \left(\frac{r'}{r}\right)^l, \quad \cos \theta = \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{r r'} \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{r^3} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{x_i x_j}{2r^5} Q^{ij} + \dots \end{aligned}$$

que é a famosa expansão multipolar. Os termos \vec{p} e Q^{ij} são, respectivamente, chamados de momento de dipolo e tensor de quadripolo e são dados por:

$$\begin{aligned} \vec{p} &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \vec{x}' \rho(\vec{x}') \\ Q^{ij} &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \rho(\vec{x}') (3x^i x'^j - \delta^{ij} r'^2) \end{aligned}$$

Q^{ij} é um tensor simétrico ($Q^{ij} = Q^{ji}$) e de traço nulo ($\sum_{i=1}^3 Q^{ii} = 0$).

Apêndice B

Singularidades em EDO

Uma Equação Diferencial Ordinária (EDO) do tipo

$$y''(z) + P(z)y'(z) + Q(z)y(z) = 0, \quad (\text{B.1})$$

é dita singular no ponto z_0 se ao menos um dos limites

$$\lim_{z \rightarrow z_0} P(z), \quad \lim_{z \rightarrow z_0} Q(z). \quad (\text{B.2})$$

não é bem definido. Quando $P(z)$ e $Q(z)$ são razões de polinômios, a singularidade pode ser regular ou essencial (irregular). O caso regular ocorre quando

$$\lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0)P(z) = \alpha, \quad \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0)^2 Q(z) = \beta; \quad |\alpha|, |\beta| < \infty, \quad (\text{B.3})$$

ou seja, a função $P(z)$ pode ter um pólo simples e $Q(z)$ um pólo duplo. Caso esses requisitos não sejam satisfeitos a singularidade é dita irregular ou essencial.

Mas o que significa uma singularidade numa EDO e qual a importância de ser regular? Quando uma EDO possui uma singularidade num ponto, logo não é bem definida nele, implica que uma solução dela, eventualmente, também não é definida (é singular) no mesmo ponto. O fato ser regular resulta num comportamento, ao redor da singularidade,

que obedece a uma lei de potência¹. Todos esses conceitos podem ser facilmente entendidos colocando as mãos na massa.

Suponha z_0 um ponto de singularidade regular, multiplicando (B.1) por $(z - z_0)^2$ fica-se com

$$(z - z_0)^2 y''(z) + (z - z_0) [(z - z_0)P(z)] y'(z) + [(z - z_0)^2 Q(z)] y(z) = 0.$$

Tomando $z \approx z_0$, os termos $[(z - z_0)P(z)]$ e $[(z - z_0)^2 Q(z)]$ podem ser substituídos por (B.3) e a EDO fica aproximadamente²

$$(z - z_0)^2 y''(z) + \alpha(z - z_0) y'(z) + \beta y(z) \approx 0, \quad (\text{B.4})$$

uma equação de Euler, cuja solução é da forma $y \sim (z - z_0)^k$. O parâmetro k é solução da equação característica

$$k^2 + (\alpha - 1)k + \beta = 0 \longrightarrow k_{\pm} = \frac{1 - \alpha}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1 - \alpha}{2}\right)^2 - \beta}. \quad (\text{B.5})$$

Temos duas raízes pois a EDO é de segunda ordem. A conclusão é que perto de $z = z_0$ a solução geral (duas funções l.i.) de (B.1) é

$$y(z) \approx A(z - z_0)^{k_+} + B(z - z_0)^{k_-}.$$

Provavelmente ao menos uma das raízes k_{\pm} é negativa (se $\beta < 0$, $k_- < 0$ sempre) e a solução correspondente é singular. Essa análise é importante para identificarmos a forma como uma solução diverge no ponto z_0 . A existência da singularidade implica que não há solução de (B.1) da forma “usual” de Frobenius (em termos de série de Taylor) centrada em z_0 , *i.e.*, $y \neq \sum_{n=0}^{\infty} g_n(z - z_0)^n$. Por outro lado, conhecendo k_{\pm} a singularidade pode ser fatorizada e o “resto” da solução pode ser escrita em série de potências. Vamos chamar esse método de Frobenius generalizado (na verdade esse é o método de Frobenius mesmo),

¹Exceções serão tratadas em separado.

²Não mostre esse argumento para um matemático!

a solução geral de (B.1) escrita como uma série de potências centrada em z_0 possui a forma

$$y(z) = A(z - z_0)^{k_+} y_+(z) + B(z - z_0)^{k_-} y_-(z), \quad (\text{B.6})$$

$$y_{\pm}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n^{(\pm)} (z - z_0)^n = 1 + g_1^{(\pm)} (z - z_0) + \dots, \quad g_0^{(\pm)} = 1.$$

Uma forma prática de lidar com o problema é propor diretamente o *ansatz*

$$y(z) = A \sum_{n=0}^{\infty} g_n (z - z_0)^{n+k} = A (z - z_0)^k (1 + g_1 (z - z_0) + \dots), \quad g_0 = 1, \quad (\text{B.7})$$

ao redor da singularidade regular. As próprias relações de recorrência da EDO irão determinar os possíveis valores de k (o resultado obviamente irá coincidir com a eq. (B.5)) e as duas séries de potência serão obtidas. O método é um pouco sutil em alguns casos excepcionais:

- $\alpha = 1$: O resultado (B.5) torna-se $k_{\pm} = \pm\sqrt{\beta}$. A priori não temos problema, mas se a EDO original depender apenas de $\beta = k_{\pm}^2$, pode acontecer do método fornecer duas soluções linearmente dependentes - exatamente o que ocorre na EDO de Bessel.
- $\beta = \frac{(1-\alpha)^2}{4}$. Aqui (B.5) fornece apenas uma raiz (caso degenerado). O método de Frobenius generalizado permite a construção de apenas uma solução.

Nesses dois casos o que aconteceu? Onde está a segunda solução independente? Quando o método de Frobenius generalizado não fornece as duas soluções l.i. significa que a outra solução possui singularidade essencial no ponto z_0 (a solução em questão não pode ser expandida em série de potências centrada em z_0 multiplicada por $(z - z_0)^k$). Esse assunto é tratado no apêndice C.

Para terminar o apêndice falta tratar o caso de singularidade em $|z_0| \rightarrow \infty$. A descrição feita até aqui não funciona diretamente nesse caso - não é possível tomar $|z_0| \rightarrow \infty$ em (B.6). A solução é trazer singularidade para um ponto finito, por exemplo para a origem.

Com a troca $u = 1/z$, as derivadas em z ficam

$$\begin{aligned}\frac{d}{dz} &= \frac{du}{dz} \frac{d}{du} = -\frac{1}{z^2} \frac{d}{du} = -u^2 \frac{d}{du}, \\ \frac{d^2}{dz^2} &= u^2 \frac{d}{du} \left(u^2 \frac{d}{du} \right) = u^4 \frac{d^2}{du^2} + 2u^3 \frac{d}{du}.\end{aligned}$$

Na nova coordenada a EDO (B.1) ganha o aspecto nada amigável

$$\frac{d^2 y(u)}{du^2} + \frac{1}{u} \left(2 - \frac{P(z(u))}{u} \right) \frac{dy(u)}{du} + \frac{1}{u^2} \frac{Q(z(u))}{u^2} y(u) = 0. \quad (\text{B.8})$$

A singularidade no infinito (positivo ou negativo) em z foi mapeada no ponto $u = 0$. A partir daqui basta usar o raciocínio já exposto, $P_\infty \equiv \frac{1}{u} \left(2 - \frac{P(z(u))}{u} \right)$ e $Q_\infty \equiv \frac{1}{u^2} \frac{Q(z(u))}{u^2}$.

No caso de existir singularidade em $u = 0$, ela será regular se

$$\lim_{u \rightarrow 0} u P_\infty(u) \equiv \lim_{u \rightarrow 0} \left(2 - \frac{P(z(u))}{u} \right) = \alpha_\infty, \quad \lim_{u \rightarrow 0} u^2 Q_\infty(u) \equiv \lim_{u \rightarrow 0} \frac{Q(z(u))}{u^2} = \beta_\infty, \quad (\text{B.9})$$

com α_∞ e β_∞ finitos. Quando ao menos um dos limites não existe a singularidade é essencial (irregular).

Vamos ilustrar o estudo das singularidades em dois exemplos de EDO's:

- **Hipergeométrica:** Na EDO (2.1), $P(z) = \frac{c}{z(1-z)} - \frac{(a+b+1)}{(1-z)}$ e $Q(z) = -\frac{ab}{z(1-z)}$. Claramente temos singularidades em $z = 0$ e $z = 1$ ($z \rightarrow \infty$ será analisado em separado). Para $z = 0$, $\alpha_0 = c$ e $\beta_0 = 0$, portanto a singularidade é regular. De acordo com (B.5) temos $k_1^{(0)} = 0$ e $k_2^{(0)} = 1 - c$ (se $c < 1$, $k_1^{(0)} = k_+$ e $k_2^{(0)} = k_-$, caso contrário eles serão invertidos). Os valores são exatamente os encontrados em (2.2). Já em $z = 1$, $\alpha_1 = -c + a + b + 1$ e $\beta_1 = 0$, então a singularidade também é regular com as potências $k_1^{(1)} = 0$ e $k_2^{(1)} = c - a - b$. A solução deve ter o comportamento

$$y(z) \approx A^{(1)} (1 + \mathcal{O}(1-z)) + B^{(1)} (1-z)^{c-a-b} (1 + \mathcal{O}(1-z)), \quad (\text{B.10})$$

ao redor de $z = 1$ (resultado consistente com (2.14)). Por fim, no limite $u = 1/z \rightarrow 0$ temos uma singularidade evidente (via (B.8)) com $\alpha_\infty = 1 - a - b$ e $\beta_\infty = ab$, as potências

são $k_1^{(\infty)} = a$ e $k_2^{(\infty)} = b$, logo para $|z| \gg 1$

$$\begin{aligned} y(z) &\approx A_\infty u^a (1 + \mathcal{O}(u)) + B_\infty u^b (1 + \mathcal{O}(u)) \\ &= A_\infty z^{-a} (1 + \mathcal{O}(1/z)) + B_\infty z^{-b} (1 + \mathcal{O}(1/z)), \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

forma que corrobora com (2.17).

• **Hipergeométrica Confluente:** Na EDO (2.46), $P(z) = \frac{c}{z} - 1$ e $Q(z) = -\frac{a}{z}$. Temos singularidades em $z = 0$ e $z \rightarrow \infty$ (basta verificar). Em $z = 0$, $\alpha_0 = c$ e $\beta_0 = 0$ (exatamente como na hipergeométrica). As potências ficam $k_1^{(0)} = 0$ e $k_2^{(0)} = 1 - c$. Em $u = 1/z \rightarrow 0$ as coisas são um pouco diferentes, nenhum dos limites

$$\lim_{u \rightarrow 0} \frac{1}{u} \left(2 - \frac{P(z(u))}{u} \right), \quad \lim_{u \rightarrow 0} \frac{Q(z(u))}{u^4},$$

é bem definido. Essa singularidade é essencial. A prova cabal vem do assintótico (2.68), onde existe um termo com $e^z = e^{1/u}$, que não pode ser expandido em série de potências ao redor de $u = 0$.

Apêndice C

Wronskiano e a segunda solução independente

Em alguns casos o método de Frobenius só fornece uma das duas soluções independentes de uma EDO de segunda ordem. O objetivo deste apêndice é tentar responder duas questões: 1) Existe uma forma geral de encontrar a segunda solução? 2) Por que o método de Frobenius falha em certas situações?

Para responder a primeira pergunta (cuja resposta é sim) vamos estudar o Wronskiano.

C.1 Wronskiano

Tenha uma EDO de segunda ordem do tipo

$$y''(x) + P(x)y'(x) + Q(x)y(x) = 0 \tag{C.1}$$

cuja solução geral seja dada por:

$$y(x) = Ay_1(x) + By_2(x); \quad A, B = \text{const}$$

onde $y_1(x)$ e $y_2(x)$ são soluções linearmente independentes (l.i.) da eq. Então o Wronskiano é definido como o seguinte determinante:

$$W(x) \equiv \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ y_1' & y_2' \end{vmatrix} = y_1 y_2' - y_1' y_2 = y_1^2 \frac{d}{dx} \left(\frac{y_2}{y_1} \right) \neq 0 \quad (\text{C.2})$$

O Wronskiano é não nulo, pois se o fosse indicaria que y_1 e y_2 não são l.i. ($y_1(x) \sim y_2(x)$).

Derivando o Wronskiano:

$$W'(x) = y_1 y_2'' - y_1'' y_2$$

como y_1 e y_2 são soluções de (C.1): $y_i'' = -P y_i' - Q y_i$, $i = 1, 2$, a eq. acima pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} W'(x) &= y_1 y_2'' - y_1'' y_2 = -y_1 P y_2' - Q y_1 y_2 + P y_1' y_2 + Q y_1 y_2 \\ &= -P(y_1 y_2' - y_1' y_2) = -P(x)W(x) \end{aligned}$$

Integrando:

$$W(x) \propto e^{-\int^x P(\xi) d\xi}. \quad (\text{C.3})$$

Uma observação importante é que quando $P(x) = 0$ (a EDO de segunda ordem não possui termo de primeira derivada, e.g. a equação do oscilador harmônico ou uma equação de Schrödinger estacionária em uma dimensão) o Wronskiano é uma constante ($W'(x) = 0$) não nula. Geralmente em problemas de Mecânica Quântica a constante é fixada de acordo com as condições de contorno do problema.

Agora igualando as eqs. (C.2) e (C.3)

$$\begin{aligned} y_1^2 \frac{d}{dx} \left(\frac{y_2}{y_1} \right) &\propto e^{-\int^x P(\xi) d\xi} \\ \Rightarrow \int^x d \left(\frac{y_2}{y_1} \right) &\propto \int^x d\eta \frac{\exp\left(-\int^\eta P(\xi) d\xi\right)}{y_1^2(\eta)} \end{aligned}$$

então

$$y_2(x) \propto y_1(x) \int^x d\eta \frac{\exp\left(-\int^\eta P(\xi)d\xi\right)}{y_1^2(\eta)} \quad (\text{C.4})$$

Portanto, conhecendo uma das soluções ($y_1(x)$) a outra é completamente determinada (a menos de constante multiplicativa) por (C.4). Nossa primeira questão está respondida.

Vamos aplicar este método num exemplo bem simples que dará a dica para a resposta da segunda questão. Tenha a EDO:

$$xy''(x) + y'(x) = 0$$

Tentaremos resolver via Frobenius, *i.e.* substituindo o *ansatz* $y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n x^{n+k}$:

$$\begin{aligned} \Rightarrow 0 &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(C_n(n+k)(n+k-1) + C_n(n+k) \right) x^{n+k-1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} C_n(n+k)^2 x^{n+k-1} \end{aligned}$$

ou seja, $C_n = 0$, exceto C_{-k} . Assim, $y(x) \equiv y_1(x) = C_{-k} = \text{const}$ que obviamente é solução da eq. acima. O método não forneceu a segunda solução, vamos achá-la via eq. (C.4) (com $P(x) = \frac{1}{x}$)

$$y_2(x) \propto \int^x d\eta \exp\left(-\int^\eta \frac{1}{\xi} d\xi\right) = \int^x \frac{d\eta}{\eta} = \ln|x|$$

A solução geral fica:

$$y(x) = A + B \ln|x|; \quad A, B = \text{const.}$$

O exemplo acima é muito simples, mas muito instrutivo, ele fornece a explicação exata do método de Frobenius falhar em certas ocasiões. O motivo é que uma das soluções (que chamamos de segunda) possui uma singularidade essencial no ponto $x = 0$ (no caso, $\ln x$, $x \rightarrow 0$) e como não é possível expandir uma solução em série de potências ao redor de uma singularidade essencial é natural que o método de Frobenius falhe. O

comportamento apresentado pelo exemplo é de certa forma geral, no sentido de quando o método de potências falha temos uma segunda solução com o comportamento $\ln x$, $x \rightarrow 0$. Um exemplo mais complicado é o da hipergeométrica com $c = 1$. Nesse caso, as duas soluções independentes (ver eq. (2.10)) coincidem, *i.e.* o método de Frobenius só fornece uma solução. A segunda solução pode ser obtida por (C.4) (com $y_1(z)$ sendo dado por (2.4))

$$\begin{aligned} y_2(z) &\propto y_1(z) \int^z dz' \frac{1}{|z'| |1 - z'|^{a+b}} \frac{1}{y_1(z')^2} \stackrel{|z| \ll 1}{\sim} \int^z \frac{dz'}{|z'|} \\ &\sim \ln|z| \end{aligned}$$

mostrando o comportamento logarítmico próximo de $z = 0$. Um outro exemplo é a segunda solução da de Bessel quando $\nu = 0$, (C.4) fornece

$$y_2(z) \sim J_0(z) \int^z \frac{dx}{x(J_0(x))^2} \sim \int^z \frac{dx}{x} \sim \ln|x|, \quad x \rightarrow 0. \quad (\text{C.5})$$

Como pode ser visto nesses exemplos, o cálculo da eq. (C.4) é, em geral, muito complicado.

Por isso vamos desenvolver um método alternativo para encontrar a segunda solução.

Suponha que Frobenius só forneceu uma solução para a eq. (C.1) ($y_1(x)$), pelos nossos argumentos a segunda solução deve ter um comportamento $\ln x$, $x \rightarrow 0$, o que nos estimula a tentar o seguinte *ansatz*:

$$y_2(x) = u(x) \ln x + v(x) \quad (\text{C.6})$$

$u(x)$ e $v(x)$ são funções a serem determinadas. Colocando em (C.1)

$$\ln x(u'' + Pu' + Q) + \frac{2u'}{x} - \frac{u}{x^2} + \frac{u}{x}P(x) + v'' + P(x)v' + vQ(x) = 0$$

Escolhendo $u = y_1$ o primeiro termo se anula, resultando em:

$$v'' + P(x)v' + Q(x)v = \frac{y_1}{x^2} - \frac{y_1}{x}P(x) - 2\frac{y_1'}{x} \quad (\text{C.7})$$

Agora podemos tentar resolver a eq. acima tomando

$$v(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n x^{n+k}$$

i.e. com Frobenius. Escrevendo explicitamente a série de $y_1(x)$ nos termos do lado direito e comparando potência a potência, podemos determinar os coeficientes C_n .

Resumo: quando o método de série de potências falha, fornecemos argumentos para convencer o leitor que isso é resultado de um comportamento logarítmico nas proximidades do ponto de origem da série, o que sugere o *ansatz* (C.6). Escolhendo $u(x) = y_1(x)$ (solução conhecida), chega-se à eq. (C.7) que, talvez, possa ser resolvida pelo método de Frobenius.

Apêndice D

Problema de Sturm - Liouville

Dada a equação diferencial ordinária de segunda ordem:

$$y''(x) + \frac{a_1(x)}{a_2(x)}y'(x) + \frac{a_0(x)}{a_2(x)}y(x) = 0 \quad (\text{D.1})$$

com $a_2(x) \neq 0$, exceto em alguns pontos isolados (possíveis singularidades). Multiplicando a eq. por $p(x) = \exp(\int^x \frac{a_1(\bar{x})}{a_2(\bar{x})}d\bar{x})$ e definindo $q(x) = \frac{a_0(x)}{a_2(x)} \exp(\int^x \frac{a_1(\bar{x})}{a_2(\bar{x})}d\bar{x})$, reescrevemos a eq. (D.1) na forma Auto-Adjunta (algo sempre possível):

$$\hat{\mathcal{L}}y(x) \equiv (p(x)y'(x))' + q(x)y(x) = 0 \quad (\text{D.2})$$

A forma (D.2) pode ser útil ao resolvermos problemas de auto valores, *i.e.*

$$\hat{\mathcal{L}}y_n(x) = -\mu_n\omega(x)y_n(x) \quad (\text{D.3})$$

supondo que cada y_n corresponda à apenas uma constante μ_n , ou seja, sem degenerescência. A função $\omega(x)$ (positiva definida) é chamada de *função peso* e será importante mais à frente.

As funções $y_n(x)$ (para vários valores de n), estão definidas no espaço vetorial das funções contínuas por partes, num certo intervalo do argumento x (por exemplo, $[a, b]$, $[0, \infty)$),

$(-\infty, \infty)$, etc.) que vamos chamar de CP . Existem certas restrições sobre $p(x)$, $q(x)$ e $\omega(x)$ que são:

- $p(x) > 0$ é diferenciável em CP e $p(x) = 0$ em ∂CP (extremos (ou bordas) de CP)
- $q(x)$ e $\omega(x) > 0$ (pode ser zero em ∂CP) são contínuas em CP

As condições acima são suficientes para mostrar a ortogonalidade entre as funções $y_n(x)$.

Para provar a afirmação, basta tomar a seguinte diferença:

$$y_n(\hat{\mathcal{L}}y_m) - y_m(\hat{\mathcal{L}}y_n) = (\mu_n - \mu_m)\omega(x)y_n(x)y_m(x)$$

que após simplificações no lado esquerdo (usando a eq. (D.2)) toma a forma

$$\left[p(x)(y_n(x)y'_m(x) - y_m(x)y'_n(x)) \right]' = (\mu_n - \mu_m)\omega(x)y_n(x)y_m(x) \quad (D.4)$$

conhecida como identidade de Lagrange.

De acordo com nossas condições, $p = 0$ em ∂CP (limites de CP). Assim ao integrar (D.4) em CP temos:

$$p(x)(y_n(x)y'_m(x) - y_m(x)y'_n(x)) \Big|_{\partial CP} = 0 = (\mu_n - \mu_m) \int_{CP} \omega(x)y_n(x)y_m(x)$$

Com isso, concluímos que se $\mu_n \neq \mu_m$, então

$$(y_n, y_m) \equiv \int_{CP} \omega(x)y_n(x)y_m(x) = 0 \quad n \neq m \quad (D.5)$$

Ou seja, as funções y_n e y_m ($n \neq m$) são ortogonais em relação ao produto interno definido pela eq. (D.5), onde a função peso $\omega(x)$ tem o papel de garantir que a norma quadrada de y_n seja bem definida, *i.e.* $\|y_n\|^2 \equiv (y_n, y_n) < \infty$.

No caso de n ser um índice discreto, variando de zero até o infinito, a eq. (D.5) “garante”¹ que uma função $F(x)$ em CP possa ser expandida em termos de y_n (*i.e.* y_n forma uma base de CP)

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n y_n(x), \text{ com} \quad (\text{D.6})$$

$$c_n = \frac{1}{\|y_n\|^2} (F(x), y_n) = \frac{1}{\|y_n\|^2} \int_{CP} \omega(x) F(x) y_n(x) dx \quad (\text{D.7})$$

Se $F(x) = \delta(x - x')$ ($x, x' \in CP$), temos a relação de completude (ou completeza):

$$\frac{\delta(x - x')}{\omega(x')} = \delta\left(\int_{x'}^x \omega(\tilde{x}) d\tilde{x}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\|y_n\|^2} y_n(x) y_n(x') \quad (\text{D.8})$$

onde na primeira igualdade usei a manjada fórmula (A.12).

¹Não é exatamente uma *prova* matemática.

Apêndice E

Integrais gaussianas

Integrar gaussianas é uma tarefa corriqueira do físico. Elas aparecem desde o famoso *teorema do limite central* até em tudo que o formalismo de integrais de caminho possa ser utilizado - física estatística (termodinâmica), mecânica quântica e teoria quântica de campo. Neste apêndice assumimos muito pouco do leitor, apenas o básico de análise complexa (teorema de Cauchy). Vamos calcular explicitamente a integral gaussiana e apenas com esse resultado simples será possível introduzir um método poderoso, chamado de ponto de sela, para estimar integrais complicadas em certos limites. O material apresentado aqui basicamente segue a referência [9].

E.1 Integral Gaussiana:

A integral gaussiana com uma variável é definida como:

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\lambda}} dx. \quad (\text{E.1})$$

Uma forma engenhosa de resolvê-la é tomar o seu quadrado,

$$I^2(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\lambda}} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{y^2}{\lambda}} dy = \int_{\mathbb{R}^2} dx dy e^{-\frac{1}{\lambda}(x^2+y^2)}.$$

Utilizando coordenadas polares

$$I^2(\lambda) = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty d\theta r dr e^{-\frac{r^2}{\lambda}} \stackrel{r^2 \equiv \lambda u}{=} \frac{2\pi\lambda}{2} \int_0^\infty du e^u = \lambda\pi.$$

Então:

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{x^2}{\lambda}} dx = \sqrt{\lambda\pi}. \quad (\text{E.2})$$

O resultado é imediatamente generalizado para n variáveis

$$\int_{\mathbb{R}^n} d^n x \exp\left(-\frac{1}{\lambda} \sum_{i=1}^n x_i^2\right) = \left(\int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{x_i^2}{\lambda}} dx_i\right)^n = (\lambda\pi)^{n/2}. \quad (\text{E.3})$$

Uma outra generalização (muito importante) é colocar uma função quadrática na exponencial

$$I(b) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n x e^{-\frac{1}{2} A_{ij} x_i x_j + b_i x_i}, \quad (\text{E.4})$$

com $i, j = 1, \dots, n$ e assumimos soma nos índices repetidos (notação de Einstein). A_{ij} é a linha i e coluna j da matriz simétrica A ($A_{ij} = A_{ji}$) com $\det A \neq 0$. Essa integral é transformada numa gaussiana quando “completamos o quadrado”. Para isso usa-se como variável $y_i = x_i - (x_{min})_i$, onde $(x_{min})_i$ é a i -ésima componente do vetor \vec{x}_{min} que minimiza a função na exponencial, *i.e.*

$$\frac{\partial}{\partial x_l} \left(\frac{1}{2} A_{ij} x_i x_j - b_i x_i \right) \Big|_{x_i=(x_{min})_i} = A_{lj} (x_{min})_j - b_l \stackrel{!}{=} 0.$$

Sendo $\Delta = A^{-1}$ ($\Delta_{ij} = \Delta_{ji}$), então $(x_{min})_i = \Delta_{ij} b_j$. A translação $x_i = y_i + \Delta_{ij} b_j$ resulta em

$$I(b) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n y e^{-\frac{1}{2} A_{ij} (y_i + \Delta_{il} b_l) (y_j + \Delta_{jl} b_l) + b_i (y_i + \Delta_{ij} b_j)}. \quad (\text{E.5})$$

Usando que $A_{ij}\Delta_{jl} = \delta_{ij}$, a integral se simplifica

$$I(b) = e^{\frac{1}{2}\Delta_{ij}b_ib_j} \int_{\mathbb{R}^n} d^n y e^{-\frac{1}{2}A_{ij}y_i y_j}.$$

A coisa já melhorou bastante. Uma lição importante: a translação ao redor do mínimo da função foi o que eliminou o termo linear na integral. Para ficar com cara de gaussiana padrão só falta diagonalizar o integrando. Como a matriz A é simétrica e com determinante não nulo, então existe uma matriz ortogonal Λ ($\Lambda^T = \Lambda^{-1}$ e $\det \Lambda = 1$) tal que $D = \Lambda^T A \Lambda$ e D é diagonal - $D_{ij} = d_i \delta_{ij}$ (sem soma em i). Em notação matricial $y_i A_{ij} y_j = Y^T A Y$, onde $Y^T = (y_1, \dots, y_n)$. A troca de coordenadas $Y = \Lambda F \rightarrow d^n y = \det \Lambda d^n f = d^n f$, leva a simplificação:

$$\begin{aligned} I(b) &= e^{\frac{1}{2}\Delta_{ij}b_ib_j} \int_{\mathbb{R}^n} d^n f e^{-\frac{1}{2}F^T(\Lambda^T A \Lambda)F} = e^{\frac{1}{2}\Delta_{ij}b_ib_j} \int_{\mathbb{R}^n} d^n f e^{-\frac{1}{2}F^T(D)F} \\ &= e^{\frac{1}{2}\Delta_{ij}b_ib_j} \int_{\mathbb{R}^n} d^n f e^{-\sum_{i=1}^n \frac{d_i}{2} f_i^2} = \frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\prod_{i=1}^n d_i}} e^{\frac{1}{2}\Delta_{ij}b_ib_j}. \end{aligned}$$

A resposta final pode ser relacionacionada com a matriz original A , $\prod_{i=1}^n d_i = \det D = \det(\Lambda^T A \Lambda) = \det \Lambda^{-1} \det \Lambda \det A = \det A$. O resultado ajustado é:

$$I(b) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n x e^{-\frac{1}{2}A_{ij}x_i x_j + b_i x_i} = \frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det A}} e^{\frac{1}{2}\Delta_{ij}b_ib_j}, \Delta = A^{-1}. \quad (\text{E.6})$$

E.1.1 Gaussiana de argumento complexo

A integral gaussiana apresentada é útil principalmente na mecânica estatística, em mecânica quântica o que costuma aparecer é

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{x^2}{\lambda}} dx, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (\text{E.7})$$

De forma ingênua tomamos $x \rightarrow e^{i\pi/4}x$ em (E.2) e aparentemente a integral acima é $e^{i\pi/4}\sqrt{\lambda\pi}$. Numa primeira olhada não há nenhum argumento para garantir que esse resultado está correto, mas pelo que incrível que pareça ele está! A prova consiste no estudo

da integral no plano complexo

$$\oint_C dz e^{\frac{i}{\lambda} z^2},$$

onde C é o caminho apresentado na figura E.1. Pelo teorema de Cauchy a integral é nula (não há pólos dentro ou sob o caminho de integração). Um ponto importante é que nas curvas (pedaços de círculos) que ligam as retas o integrando é nulo - $e^{\frac{i}{\lambda} z^2} = \exp [i(\Re(z)^2 - \Im(z)^2)/\lambda - 2\Re(z)\Im(z)/\lambda] \rightarrow 0$ para $\Im(z), \Re(z) \rightarrow +\infty$ e $\Im(z), \Re(z) \rightarrow -\infty$. Portanto temos

$$0 = \oint_C dz e^{iz^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i}{\lambda} x} + \int_{C_{45^\circ}} dz e^{\frac{i}{\lambda} z^2}, \quad x = \Re(z),$$

na segunda integral $z = ye^{i\pi/4}$, $-\infty < y < \infty$ (fase fixa) e o caminho de integração é do $+\infty$ para o $-\infty$. Da brincadeira conclui-se:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i}{\lambda} x} = e^{i\pi/4} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\lambda} y^2} = e^{i\pi/4} \sqrt{\pi\lambda}, \quad (\text{E.8})$$

o resultado esperado.

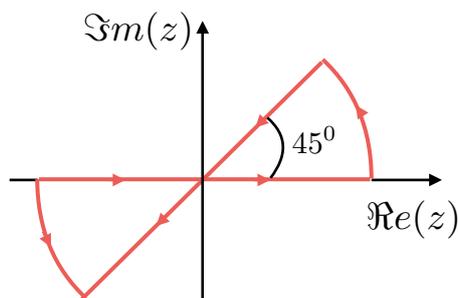


Figura E.1: Caminho fechado C (a direção da seta está errada no oitavo de círculo inferior).

E.2 Método do ponto de Sela

É uma forma poderosa de estimar certas integrais num contorno complexo trabalhando apenas com gaussianas. Começemos com integrais reais de uma variável, depois vamos fazendo as generalizações.

E.2.1 Caso real

Tenha a integral:

$$I(\lambda) = \int_a^b e^{-\frac{S(x)}{\lambda}} dx, \quad (\text{E.9})$$

as hipóteses para o uso do método são: i) $S(x)$ possui um mínimo global no intervalo $[a, b]$; ii) $\lambda > 0$ e a aproximação a ser feita é boa quando $\lambda \ll 1$. Com essas hipóteses, a maior contribuição da integral vem das redondezas do mínimo global de $S(x)$ - devido ao sinal negativo na exponencial. Assim vamos expandir $S(x)$ ao redor do mínimo x_{min}

$$S(x) \approx S(x_{min}) + \underbrace{S'(x_{min})}_{=0}(x - x_{min}) + \frac{1}{2} \underbrace{S''(x_{min})}_{>0}(x - x_{min})^2 + \mathcal{O}(x - x_{min})^3.$$

E com a troca de variável $y = \sqrt{\frac{S''(x_{min})}{2\lambda}}(x - x_{min})$, a integral ganha a forma

$$I(\lambda) = \sqrt{\frac{2\lambda}{S''(x_{min})}} \int_{-\sqrt{\frac{S''(x_{min})}{2\lambda}}(x_{min}-a)}^{\sqrt{\frac{S''(x_{min})}{2\lambda}}(b-x_{min})} \exp\left(-\frac{S(x_{min})}{\lambda} - y^2 + \mathcal{O}(\sqrt{\lambda})\right) dy,$$

como $\lambda \ll 1$, o intervalo de integração pode ser estendido para toda a reta tornando a integral (na aproximação) a de uma gaussiana simples

$$I(\lambda) \approx \sqrt{\frac{2\pi\lambda}{S''(x_{min})}} e^{-\frac{S(x_{min})}{\lambda}} + \mathcal{O}(\lambda). \quad (\text{E.10})$$

A aplicação mais famosa deste resultado é a estimativa da integral (1.1) - função Gamma - quando o argumento (real) z é muito grande. Identificando $\lambda^{-1} = z - 1 \gg 1$ e com a

troca $x = \lambda t$

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty dt t^{z-1} e^{-t} = \int_0^\infty dt e^{-t+(z-1)\ln t} = \lambda^{-1} (\lambda^{-1})^{\lambda^{-1}} \int_0^\infty dx e^{-\frac{1}{\lambda}(x-\ln x)},$$

ou seja, $S(x) = x - \ln x$. É trivial perceber que esta função possui um mínimo global já que $S(0) = S(\infty) = \infty$. Tal mínimo é identificado por $S'(x_{min}) = 1 - \frac{1}{x_{min}} = 0 \rightarrow x_{min} = 1$. também precisamos de $S(1) = 1$ e $S''(1) = 1$. A forma assintótica é:

$$\Gamma(z) \approx (z-1)^{1+z-1} \sqrt{\frac{2\pi}{z-1}} e^{-(z-1)} = \sqrt{2\pi} (z-1)^{z-1/2} e^{-(z-1)}, \quad (\text{E.11})$$

tomando o logaritmo e fazendo $z \rightarrow z+1$

$$\ln \Gamma(z+1) \approx (z+1/2) \ln(z) - z + \ln \sqrt{2\pi} \approx z(\ln z - 1) + \mathcal{O}(\ln z), \quad (\text{E.12})$$

a famosa fórmula de Stirling. Em particular se $1 \ll z = N \in \mathbb{N}$

$$\ln N! \approx N(\ln N - 1) + \mathcal{O}(\ln N), \quad N \gg 1. \quad (\text{E.13})$$

Fórmula muito usada na física estatística.

E.2.2 Caso complexo

A forma da integral permanece a mesma

$$I_c(\lambda) = \int_C dz e^{-\frac{S(z)}{\lambda}}, \quad \lambda \ll 1, \quad (\text{E.14})$$

a diferença é que o argumento é o número complexo $z = x + iy$ e $S(z) = \Re[S(z)] + i\Im[S(z)]$. A estratégia é parecida com a do caso anterior, procurar a região que mais contribui para a integral. Certamente ela está nas proximidades do mínimo (global) da parte real de $S(z)$, ponto que nem precisa estar localizado ao longo do caminho original

- podemos deformar o caminho de integração¹ para incluir o ponto. Mas isso não é suficiente, se a parte imaginária oscila muito nas proximidades do ponto em questão teremos superposições destrutivas e uma contribuição pequena na integral. Assim, além de querer um mínimo da parte real de $S(z)$, vamos deformar o caminho de integração para ao redor deste ponto a parte imaginária de $S(z)$ ficar fixa² - evitando superposições destrutivas. Como isso funciona na prática? Sendo a função analítica (derivada no ponto não depende da direção), o ponto procurado é $S'(z_c) = 0$. Ao redor deste ponto

$$S(z) - S(z_c) \approx \frac{1}{2} S''(z_c) (z - z_c)^2,$$

com $u + iv = (z - z_c) e^{\frac{i}{2} \text{Arg}[S''(z_c)]}$

$$S(z) - S(z_c) \approx \frac{1}{2} |S''(z_c)| (u + iv)^2 = \frac{1}{2} |S''(z_c)| (u^2 - v^2) + i |S''(z_c)| uv.$$

Para a fase ficar fixa ao redor de z_c , a parte imaginária acima deve ser nula - $u = 0$ ou $v = 0$. Olhando para a parte real, é evidente que $\frac{\partial \Re[S(z) - S(z_c)]}{\partial u} \Big|_{z=z_c} = \frac{\partial \Re[S(z) - S(z_c)]}{\partial v} \Big|_{z=z_c} = 0$ (a função é analítica portanto $S'(z_c) = 0$ por qualquer direção), mas na direção u ($v = 0$) $\frac{\partial^2 \Re[S(z) - S(z_c)]}{\partial u^2} \Big|_{z=z_c} = |S''(z_c)| > 0$ - um mínimo (logo um máximo de $-\Re[S(z)]$), enquanto que na direção v ($u = 0$), $\frac{\partial^2 \Re[S(z) - S(z_c)]}{\partial v^2} \Big|_{z=z_c} = -|S''(z_c)| < 0$, um máximo. A lição aprendida é que todo ponto z_c , onde $S'(z_c) = 0$, é um ponto de sela³ (daí o nome do método) da parte real de $S(z)$. Como queremos o maior valor no integrando (menor valor da parte real de $S(z_c)$) o caminho a ser escolhido é o de $v = 0$. O caminho de integração é deformado de acordo com a figura E.2 e fica-se com

$$\begin{aligned} I_c(\lambda) &= \int_C dz e^{-\frac{S(z)}{\lambda}} = \int_{C_{z_c}} dz e^{-\frac{S(z)}{\lambda}} \approx e^{-\frac{S(z_c)}{\lambda}} \int_{C_{z_c}} dz e^{-\frac{1}{2\lambda} S''(z_c) (z - z_c)^2} \\ &= e^{-\frac{S(z_c)}{\lambda}} \int_{C_{z_c}} dz e^{-\frac{|S''(z_c)|}{2\lambda} (u + iv)^2}, \\ &\approx e^{-\frac{S(z_c)}{\lambda}} e^{-\frac{i}{2} \text{Arg}[S''(z_c)]} \int_{-u_c}^{u_c} du e^{-\frac{|S''(z_c)|}{2\lambda} u^2}. \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

¹Na parte analítica da função - sem cruzar pólos.

²Por isso em alguns lugares método do ponto de sela é chamado de *fase estacionária*.

³Um mínimo numa direção e máximo na direção ortogonal. A superfície associada a função nos arredores deste ponto é similar a de uma "sela de cavalo".

Com a troca de coordenadas $y = \sqrt{\frac{|S''(z_c)|}{2\lambda}}u$, o integrando torna-se uma gaussiana comum no intervalo $-\sqrt{\frac{|S''(z_c)|}{2\lambda}}u_c < y < \sqrt{\frac{|S''(z_c)|}{2\lambda}}u_c$. Como $\lambda \ll 1$, o intervalo de integração pode ser estendido para toda a reta - com resultado $\sqrt{\frac{2\pi\lambda}{|S(z_c)''|}}$. Portanto na aproximação de ponto de sela

$$\int_C dz e^{-\frac{S(z)}{\lambda}} \approx \sqrt{\frac{2\pi\lambda}{|S(z_c)''|}} e^{-\frac{S(z_c)}{\lambda}} e^{-\frac{i}{2} \text{Arg}[S''(z_c)]}. \quad (\text{E.16})$$

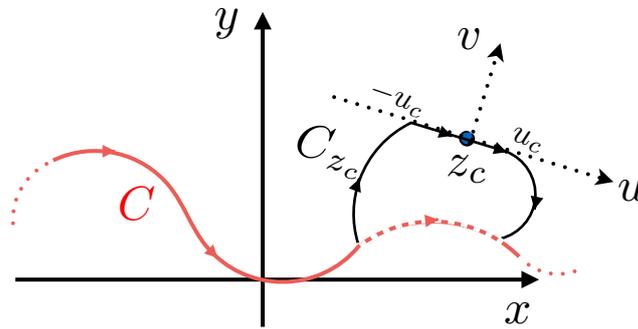


Figura E.2: Caminho original C em vermelho e sua deformação C_{z_c} , em preto, para incluir o ponto de sela.

Em física não costuma aparecer integrais com argumentos complexos, o mais comum (principalmente em mecânica quântica) é a pura fase:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{S(x)}{\hbar}} dx, \quad (\text{E.17})$$

onde \hbar é um parâmetro pequeno⁴ e x é real. Os mesmos passos são tomados e o resultado equivale a eq. (E.16) com a troca $S \rightarrow -iS$ e $\text{Arg}S''[x_c] = 0$. Isso se justifica pois algebricamente não há diferença entre esse cálculo e o do caso real e já mostramos que a integral gaussiana com um “ i ” fornece o mesmo resultado da gaussiana real, eq. (E.8). A diferença é que não há parte real na exponencial, logo não há *mínimo global da parte real*. Todas as soluções de $S'(x) = 0$ são igualmente relevantes e deve-se somar a contribuição

⁴Faz o mesmo papel do λ . Só mudamos para ficar com mais cara de Mecânica Quântica. A essência da aproximação aqui é que o integrando é uma pura fase e essa fase é grande.

de cada uma. Para um caminho com n pontos de sela, a aproximação fica

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\frac{S(x)}{\hbar}} \approx \sum_{l=1}^n \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{-iS''(x_{cl})}} e^{i\frac{S(x_{cl})}{\hbar}}. \quad (\text{E.18})$$

Para ilustrar vamos usar o resultado para estimar a importante integral⁵

$$\psi(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-i\left(\frac{p^3}{3} - xp\right)}, \quad (\text{E.19})$$

nos limites $x \rightarrow \infty$ e $x \rightarrow -\infty$. A aproximação cabe aqui pois em ambos os limites a fase na integral é grande (hipótese básica do método), o “parâmetro pequeno” (o λ ou \hbar) é $1/x$. Identificamos $xS(p) = \left(-\frac{p^3}{3x} + p\right)x$, com os pontos de sela: $S'(p) = -p^2/x + 1 = 0 \rightarrow p_{\pm} = \pm\sqrt{x}$. No caso $x \rightarrow -\infty$, $-iS''(p_{\pm})x = 2ip_{\pm} = \mp 2\sqrt{|x|}$ e a integral fica real ao redor destes pontos (caímos na subseção E.2.1). O ponto p_+ é um mínimo e p_- um máximo (de $-iS(x)x$). O máximo é quem fornece a maior contribuição, por (E.10)

$$\psi(x) \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2\pi(1/x)}{-iS''(p_-)}} e^{ixS(p_-)} = \frac{1}{2} \frac{e^{-\frac{2}{3}|x|^{3/2}}}{|x|^{1/4}}, \quad x \rightarrow -\infty. \quad (\text{E.20})$$

No outro limite, $x \rightarrow +\infty$, as coisas mudam. A integral é complexa e ambos os pontos (de sela) contribuem. Também temos que $-ixS''(p_{\pm}) = \pm 2i\sqrt{x}$ e $xS(p_{\pm}) = \pm \frac{2}{3}x^{3/2}$. A aproximação (E.18) fornece⁶:

$$\begin{aligned} \psi(x) &\approx \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2\pi(1/x)}{-iS''(p_+)}} e^{ixS(p_+)} + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2\pi(1/x)}{-iS''(p_-)}} e^{ixS(p_-)}, \\ &= \frac{1}{2x^{1/4}} \left(e^{i\frac{2}{3}x^{3/2} - i\pi/4} + e^{-i\frac{2}{3}x^{3/2} + i\pi/4} \right), \\ &= \frac{1}{x^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad x \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (\text{E.21})$$

Repare que os assintóticos (E.20) e (E.21) são iguais as eqs. (7.79) e (7.80) ($x \rightarrow z$). Na verdade (E.19) é uma representação integral da função e Airy.

⁵Representa a função de onda estacionária na representação de momento da partícula quântica num potencial linear. O mesmo problema tratado na seção 7.6 - função de Airy.

⁶Lembre-se que $(\pm i) = e^{\pm i\pi/2}$.

E.3 Teorema de Wick

Esta seção é um extra para o uso da eq. (E.6) e não possui aplicação nas notas. Temos interesse na integral

$$\langle x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_m} \rangle_0 \equiv \frac{\int_{\mathbb{R}^n} dx^n x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_m} e^{-\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j}}{\int_{\mathbb{R}^n} dx^n e^{-\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j}}, \quad A_{ij} = A_{ji}, \quad \det A \neq 0, \quad (\text{E.22})$$

chamada de função m -pontos⁷. Tanto o numerador quanto o denominador podem ser calculados via (E.3), por exemplo, para $m = 2$

$$\begin{aligned} \langle x_{i_1} x_{i_2} \rangle_0 &= \frac{1}{\frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det A}}} \int_{\mathbb{R}^n} dx^n x_{i_1} x_{i_2} e^{-\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j} = \frac{1}{\frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det A}}} \frac{\partial^2}{\partial b_{i_2} \partial b_{i_1}} \left(\int_{\mathbb{R}^n} d^n x e^{-\frac{1}{2} A_{ij} x_i x_j + b_i x_i} \right) \Bigg|_{\vec{b}=\vec{0}} \\ &\stackrel{(\text{E.6})}{=} \frac{1}{\frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det A}}} \frac{\partial^2}{\partial b_{i_2} \partial b_{i_1}} \left(\frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det A}} e^{\frac{1}{2} \Delta_{ij} b_i b_j} \right) \Bigg|_{\vec{b}=\vec{0}} = \frac{\partial}{\partial b_{i_2}} \left(\Delta_{i_1 j} b_j e^{\frac{1}{2} \Delta_{ij} b_i b_j} \right) \Bigg|_{\vec{b}=\vec{0}}, \\ &= \left(\Delta_{i_1 i_2} e^{\frac{1}{2} \Delta_{ij} b_i b_j} + \Delta_{i_1 j} b_j \Delta_{i_2 l} b_l e^{\frac{1}{2} \Delta_{ij} b_i b_j} \right) \Bigg|_{\vec{b}=\vec{0}} = \Delta_{i_1 i_2}. \end{aligned}$$

No fim precisamos da inversa das componentes da matriz inversa de A . Também repare que $\langle x_{i_1} \rangle = \langle x_{i_1} x_{i_2} x_{i_3} \rangle = \dots = 0$ por paridade. Qualquer função de n -pontos (n -par) é uma combinação de funções de 2-pontos. Derivando mais duas vezes a última expressão é fácil perceber que:

$$\langle x_{i_1} x_{i_2} x_{i_3} x_{i_4} \rangle_0 = \frac{1}{\frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det A}}} \frac{\partial^4}{\partial b_{i_4} \partial b_{i_3} \partial b_{i_2} \partial b_{i_1}} \left(\int_{\mathbb{R}^n} d^n x e^{-\frac{1}{2} A_{ij} x_i x_j + b_i x_i} \right) \Bigg|_{\vec{b}=\vec{0}}, \quad (\text{E.23})$$

$$= \Delta_{i_1 i_2} \Delta_{i_3 i_4} + \Delta_{i_1 i_3} \Delta_{i_2 i_4} + \Delta_{i_1 i_4} \Delta_{i_2 i_3}. \quad (\text{E.24})$$

A generalização para a função de m -pontos (m par) é imediata,

$$\begin{aligned} \langle x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_m} \rangle_0 &= \frac{1}{\frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det A}}} \frac{\partial^m}{\partial b_{i_m} \dots \partial b_{i_2} \partial b_{i_1}} \left(\int_{\mathbb{R}^n} d^n x e^{-\frac{1}{2} A_{ij} x_i x_j + b_i x_i} \right) \Bigg|_{\vec{b}=\vec{0}}, \\ &= \sum_{\text{combinações de } k} \Delta_{i_{k_1} i_{k_2}} \Delta_{i_{k_3} i_{k_4}} \dots \Delta_{i_{k_{i_{m-1}}} i_{k_{i_m}}}, \end{aligned} \quad (\text{E.25})$$

⁷Muito importante na física estatística - é o valor médio do produto $x_{i_1} \dots x_{i_m}$ no peso gaussiano. A eq. (E.8) garante que os resultados derivados aqui funcionam se no fim troca-se $x_l \rightarrow \sqrt{-i} x_l$, ou seja, tudo ainda funciona com um “ i ” na exponencial - integrais importantes na mecânica quântica (e teoria de campo).

o famoso teorema de Wick. Um exemplo ilustrativo é o cálculo da integral

$$I_4 = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 x_1^3 x_2 \exp \left[-\frac{1}{2} (x_1^2 + x_2^2 + x_1 x_2) \right],$$

uma função de 4-pontos. O primeiro passo é identificar a matriz A ,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1 \end{pmatrix},$$

que possui $\det A = 3/4$ e inversa

$$\Delta = \begin{pmatrix} 4/3 & -2/3 \\ -2/3 & 4/3 \end{pmatrix}.$$

Via (E.22) e (E.24):

$$I_4 = \frac{(2\pi)}{\sqrt{\det A}} (\Delta_{11}\Delta_{12} + \Delta_{11}\Delta_{12} + \Delta_{12}\Delta_{11}) = 3 \frac{(2\pi)^2}{\sqrt{3/4}} \Delta_{11}\Delta_{12} = -\frac{32\pi}{3\sqrt{3}}.$$

Referências Bibliográficas

- [1] Mathematical Methods for Physicists, Sixth Edition, Arfken and Weber.
- [2] Funções Especiais com Aplicações, Edmundo Capelas de Oliveira.
- [3] Funções Analíticas com Aplicações, Edmundo Capelas de Oliveira e Waldyr Alves Rodrigues Jr.
- [4] Notas de Física Matemática, Carmen Lys Ribeiro Braga.
- [5] Quantum Mechanics, Third Edition, L.D. Landau and E.M. Lifshitz.
- [6] Special Functions and Polynomials, Gerard 't Hooft and Stefan Nobbenhuis.
- [7] Introdução à Análise Linear, Vols. 2 e 3, Donald Kreider e outros.
- [8] Física Matemática, Butkov.
- [9] Path Integrals in Quantum Mechanics, J. Zinn-Justin.