Revisão de ferramentas matemáticas

Esta breve lista contém alguns poucos exemplos de técnicas matemáticas muito utilizadas em teorias quânticas. O objetivo é fazer apenas uma breve revisão destes conceitos que provavelmente já foram estudados ao longo dos cursos de física matemática e eletromagnetismo. *Não é necessário entregar a lista resolvida* e ela não será contabilizada de maneira alguma na nota final. Rabisque e anote eventais dúvidas no papel para discutirmos. Procure exemplos cuja solução lhe é conhecida e aplique os métodos apresentados. Não gaste mais que 15 minutos por seção.

I. INTEGRAIS

A. Integração via variação de "constantes"

Considere a seguinte integral:

$$I_\gamma = \int_A^B dx x^m \mathrm{e}^{-\gamma x}, \tag{1}$$

onde γ é uma constante e $m = 1, 2, \ldots$ é um número inteiro positivo.

Essa integral é facilmente resolvida por aplicações sucessivas do método de integração por partes. Outro técnica consiste em transformar a constante γ na variável ω tal que $I_\gamma = \lim_{\omega\to\gamma} I(\omega)$, ou seja,

$$I_\gamma = \lim_{\omega\to\gamma}\left(-\frac{d}{d\omega}\right)^m \int_A^B dx \mathrm{e}^{-\omega x} = \lim_{\omega\to\gamma}\left(-\frac{d}{d\omega}\right)^m \left[\frac{\mathrm{e}^{-\omega A} - \mathrm{e}^{-\omega B}}{\omega}\right]. \tag{2}$$

Observe que os limites da integração são realizados antes da derivação pela variável ω. Tipicamente, os limites de integração são $A \to 0$ e $B \to \infty$. Para este caso particular,

$$I_\gamma = \lim_{\omega\to\gamma}\left(-\frac{d}{d\omega}\right)^m \left[\frac{1}{\omega}\right] = \lim_{\omega\to\gamma}\frac{m!}{\omega^{m+1}} = \frac{m!}{\gamma^{m+1}}. \tag{3}$$

Exercício 1 Calcule

$$\lim_{L/a\to\infty}\int_0^L dz z \mathrm{e}^{-2z/a}. \tag{4}$$

B. Integração gaussiana

A distribuição de probabilidade gaussiana $\mathrm{e}^{-\gamma x^2}$ ocorre com muita frequência em uma gama de problemas físicos. Por este motivo, faz-se mister a extração rápida e precisa de determinadas grandezas como a sua normalização, primeiro e segundo momento, etc. Seja I_γ a seguinte integral:

$$I_\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} dx \mathrm{e}^{-\gamma x^2}. \tag{5}$$

O valor de I_γ é facilmente calculado a partir de seu valor quadrado I_γ^2, pois

$$I_\gamma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \mathrm{e}^{-\gamma(x^2+y^2)}. \tag{6}$$

Na equação (6), a expressão $x^2 + y^2$ indica que a integração também pode ser realizada utilizando-se coordenadas polares. Neste caso, temo

$$I_\gamma^2 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} d\rho (\rho \mathrm{e}^{-\gamma\rho^2}). \tag{7}$$

Note que o jacobiano é ρ e a integração torna-se trivial

$$I_\gamma^2 = 2\pi \int_0^{\infty} d\left(\frac{\mathrm{e}^{-\gamma\rho^2}}{-2\gamma}\right) = \frac{\pi}{\gamma} \qquad \therefore \quad I_\gamma = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}}. \tag{8}$$

Assim, a normalização da integral gaussiana é

$$N_\gamma = I_\gamma = \sqrt{\pi/\gamma}. \tag{9}$$

O primeiro momento é calculado da seguinte maneira

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N_\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} dx (x \mathrm{e}^{-\gamma x^2}) = \frac{1}{N_\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} d\left(\frac{\mathrm{e}^{-\gamma x^2}}{-2\gamma}\right) = \frac{-1}{2\gamma N_\gamma} \lim_{R\to\infty} (\mathrm{e}^{-\gamma R^2} - \mathrm{e}^{-\gamma R^2}) = 0. \tag{10}$$

O primeiro momento nulo ocorre quando a gaussiana é centrada também sobre a origem. No caso mais geral, $\exp(-\gamma(x - x_0)^2)$ produz $\langle x \rangle = x_0$. Já o segundo momento é calculado utilizando-se a variação da constante γ:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{N_\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \mathrm{e}^{-\gamma x^2} = \frac{1}{N_\gamma} \left(-\frac{d}{d\gamma}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \mathrm{e}^{-\gamma x^2} = \frac{1}{N_\gamma} \left(-\frac{d}{d\gamma}\right) N_\gamma. \tag{11}$$

Utilizando o resultado (8),

$$\langle x^2 \rangle = -\frac{d}{d\gamma} \ln N_\gamma = \frac{1}{2\gamma}. \tag{12}$$

Momentos de ordem superior são calculados de maneira análoga.

Exercício 2 Generalize os resultados acima para n-dimensões.

C. Integração por resíduo

Exercício 3 Descreva brevemente o que é o método de integração por resíduos. Por que é útil? Quando se aplica?

Exercício 4 Calcule a integral

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp\mathrm{e}^{-ipx}}{p^2+p_0^2}. \tag{13}$$

II. EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS

Assim como na seção anterior, o intuito desta seção não é apresentar um estudo completo sobre equações diferenciais mas tão somente rever os conceitos mais fundamentais de uma maneira bastante casual.

A. Primeira ordem

Deseja-se determinar a função $x(\omega)$ que satisfaz a seguinte equação diferencial

$$\frac{d}{d\omega}x(\omega)+f(\omega)x(\omega)=g(\omega). \tag{14}$$

Existem diversos métodos para resolver a equação não-homogênea acima. No caso homogêneo $g(\omega)=0$,

$$\frac{dx(\omega)}{d\omega}=-f(\omega)x \quad \Rightarrow \quad \frac{dx}{x}=-f(\omega)d\omega \quad \therefore \quad \ln(x/x_0)=-\int f(\omega)d\omega. \tag{15}$$

Aqui x_0 é uma constante. Note que o argumento da função logaritmo permanece adimensional. Outro modo de expressar esta solução é

$$x=x_0\mathrm{e}^{-\int f(\omega)d\omega}. \tag{16}$$

Esse método não pode ser aplicado diretamente na equação (14) devido ao termo $g(\omega)\neq 0$. Neste caso, e mesmo para o caso homogêneo, recomenda-se o uso do fator integrante $I(\omega)$. A ideia do fator integrante é bastante simples: suponha que exista $I(\omega)$ tal que

$$\frac{d}{d\omega}[I(\omega)x(\omega)]=I\frac{d}{d\omega}x+x\frac{d}{d\omega}I. \tag{17}$$

O primeiro termo da expressão acima difere do primeiro termo da equação (14), $I(\omega)\dot{x}(\omega) \neq \dot{x}(\omega)$. Isso é facilmente corrigido se a equação (14) for multiplicada por $I(\omega)$,

$$I(\omega)\dot{x}(\omega) + f(\omega)I(\omega)x(\omega) = I(\omega)g(\omega). \tag{18}$$

Consequentemente, comparando-se (17) e (18), obtemos

$$\frac{dI(\omega)}{d\omega} = f(\omega)I(\omega) \quad \therefore \quad I(\omega) = I_0 \exp\left\{\int f(\omega)d\omega\right\}. \tag{19}$$

Logo,

$$\frac{d}{d\omega}\{I(\omega)x(\omega)\} = I(\omega)g(\omega) \quad \Rightarrow \quad x(\omega) = \frac{1}{I(\omega)}\int^{\omega} d\omega' I(\omega')g(\omega') + \frac{C}{I(\omega)}. \tag{20}$$

Exercício 5 Resolva

$$\left(\frac{d}{dt} - i\omega\right)\psi(t) = \mathrm{e}^{-i\omega t}. \tag{21}$$

Exercício 6 Determine $p(x)$ tal que $\lim_{x\to\pm\infty} p(x) = 0$ e

$$\frac{d}{dx}p(x) + \gamma x p(x) = -\frac{\gamma x_0}{\sqrt{\pi/\gamma}}\mathrm{e}^{-\gamma(x-x_0)^2}. \tag{22}$$

B. Segunda ordem

Existe uma enorme variedade de métodos para a determinação de equações diferenciais de segunda ordem. Nesta seção, queremos explorar apenas o método de Riccati. A ideia é extremamente simples: dada uma equação diferencial com

$$\frac{d^2y}{dx^2} + f(x)\frac{dy}{dx} + g(x)y(x) = 0, \tag{23}$$

queremos encontrar $\gamma(x)$, $\Gamma(x)$, α e β tal que

$$\left(\alpha\frac{d}{dx} + \gamma(x)\right)\left(\beta\frac{d}{dx} + \Gamma(x)\right)y(x) = 0. \tag{24}$$

A expansão da equação (24) utiliza os mesmos conceitos de operadores que vemos em mecânica quântica,

$$0 = \alpha\beta\frac{d^2y}{dx^2} + [\beta\gamma(x) + \alpha\Gamma(x)]\frac{dy}{dx} + \left[\alpha\left(\frac{d\Gamma}{dx}\right) + \gamma(x)\Gamma(x)\right]y(x). \tag{25}$$

Para que (24) seja válida, é necessário que as seguintes identidades (ou equações de Riccati) sejam satisfeitas

$$\alpha\beta = 1, \tag{26}$$

$$\beta\gamma(x) + \alpha\Gamma(x) = f(x), \tag{27}$$
$$\alpha\left(\frac{d\Gamma}{dx}\right) + \gamma(x)\Gamma(x) = g(x). \tag{28}$$

Ora, mas (28) nada mais é do que uma equação de primeira ordem, de modo que podemos utilizar o resultado (20). Logo, determina-se $\Gamma(x)$ e consequentemente $\gamma(x)$. Para resolver (24) basta definir

$$\Phi(x) = \left(\beta\frac{d}{dx} + \Gamma(x)\right) y(x), \tag{29}$$

tal que

$$\alpha\frac{d\Phi}{dx} + \gamma(x)\Phi(x) = 0, \tag{30}$$

que é por sua vez uma equação diferencial de primeira ordem. Uma vez que a solução $\Phi(x)$ é determinada a partir da equação (30), podemos retornar à equação (29) e encontrar $y(x)$, isto é

$$\beta\frac{dy}{dx} + \Gamma y = \Phi(x). \tag{31}$$

Exercício 7 Use as equações de Riccati para resolver a equação diferencial abaixo:

$$\frac{d^2\psi}{dt^2} + \omega^2\psi = 0. \tag{32}$$

Exercício 8 Use as equações de Riccati para resolver a equação diferencial abaixo:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2}{x^2}\psi = 0. \tag{33}$$

C. Equações de Riccati e operadores

Os métodos das equações de Riccati geralmente são úteis *quando* os $\gamma(x)$ e $\Gamma(x)$ são determinados por inspeção. Isto se deve ao seu caráter não linear, que requer mudanças de variáveis adequadas. Entretanto, essa formulação introduz naturalmente a descrição de equações diferenciais como equações de autovalores e, portanto, é mais adequada para a descrição da teoria quântica. Como exemplo, vamos considerar a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico em uma dimensão:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\psi(x) = E_\psi\psi(x). \tag{34}$$

É conveniente rescrever a equação acima de modo que as grandezas físicas fiquem adimensionais,

$$\left(\frac{E_\psi}{\hbar\omega}\right)\psi(x) = \left(-\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\psi(x). \tag{35}$$

Nessa forma, o comportamento operatorial do hamiltoniano do oscilado harmônico pode ser melhor apreciado se for possível encontrar $\alpha, \beta, \gamma(x)$ e $\Gamma(x)$ tal que

$$\left(\alpha\frac{d}{dx} + \gamma(x)\right)\left(\beta\frac{d}{dx} + \Gamma(x)\right)\psi(x) = \frac{E_\psi}{\hbar\omega}\psi(x). \tag{36}$$

A primeira equação de Riccati, $\alpha\beta = -\hbar/2m\omega$, é rapidamente resolvida por mera inspeção $\alpha = -\beta$ tal que

$$\alpha\beta = -\alpha^2 = -\hbar/2m\omega \quad \Rightarrow \quad \alpha = \pm\sqrt{\hbar/2m\omega}. \tag{37}$$

A escolha do sinal pode ser feita neste momento pois é fácil verificar que sua escolha afeta tão somente a fase global da função de onda. Desse modo, tomamos $\alpha = \sqrt{\hbar/2m\omega}$. A segunda equação de Riccati lida com a derivada primeira, que é nula para o oscilado harmônico, isto é, $f(x) = 0$. Assim, a partir da equação (27), concluimos que $\gamma(x) = \Gamma(x)$. Substituindo esses resultados na equação (28), a seguinte equação é obtida:

$$g(x) = \frac{m\omega}{2\hbar}x^2 = \alpha\left(\frac{d\Gamma}{dx}\right) + \Gamma(x)^2. \tag{38}$$

Podemos inferir a solução desta equação, que aparentemente é difícil devido ao termo quadrático, se considerarmos uma expressão linear em x,

$$\Gamma(x) = x\sqrt{m\omega/2\hbar}. \tag{39}$$

Este *ansatz* resulta em

$$\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 \neq \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\right) + \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\right)^2 x^2. \tag{40}$$

Entretanto, a diferença é constante e igual a $1/2$ para todos os coeficientes $\psi(x)$. Isto significa que um deslocamento constante das autoenergias por $\hbar\omega/2$ é suficiente para que existam soluções para as equações de Riccati, $E_\psi \to E_\psi - \hbar\omega/2$.

A equação (36) assume a seguinte forma:

$$E_\psi\psi(x) = \left(\hbar\omega a^\dagger a + \frac{\hbar\omega}{2}\right)\psi(x), \tag{41}$$

onde os operadores a e $a^\dagger$ são os operadores de destruição e criação, dados por

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2h}}\left[x + \frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{d}{dx}\right)\right], \tag{42}$$

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2h}}\left[x - \frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{d}{dx}\right)\right]. \tag{43}$$

D. Transformada de Fourier

Sistemas físicos que apresentam simetria translacional são bons candidatos para o emprego da transformada de Fourier para resolução de equações diferenciais. Nestes casos, o espaço dos momenta simplifica a análise de autofunções e autoenergias.

Considere o estado $|\psi\rangle$ cujos coeficientes $\psi(x)$ na base das posições $|x\rangle$ são determinados pela equação de Schrödinger (vamos considerar tão somente o caso unidimensional por simplicidade)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}\right)+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x). \tag{44}$$

Uma mudança de base significa realizar a seguinte rotação

$$|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dx\psi(x)|x\rangle=\int dx\int dp\psi(x)|p\rangle\langle p|x\rangle\equiv\int dp\Psi(p)|p\rangle, \tag{45}$$

onde

$$\Psi(p)=\int_{-\infty}^{\infty}dx\langle p|x\rangle\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\psi(x). \tag{46}$$

Na base das translações (ou momento), a equação de Schrödinger fica

$$\frac{p^2}{2m}\Psi(p)+\int dp'\langle p|V|p'\rangle\Psi(p')=E_p\Psi(p). \tag{47}$$

A completeza deve ser utilizada para se computar o valor dos elementos de matriz $V_{p'p}$:

$$\langle p|V|p'\rangle=\int dx\int dx'\langle p|x\rangle\langle x|V|x'\rangle\langle x'|p'\rangle=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dx\mathrm{e}^{-i(p-p')x/\hbar}V(x). \tag{48}$$

Se o potencial possuir determinada periodicidade espacial, sua transformada de Fourier nada mais é do que a soma ou combinação linear de diversos modos normais (senos e cossenos). Por exemplo, considere

$$V(x)=V_0\cos(x/L). \tag{49}$$

Sua transformada de Fourier é $V(p-p')=V_0[\delta(p-p'-\hbar/L)+\delta(p-p'+\hbar/L)]/2$.

Exercício 9 Calcule explicitamente a transformada de Fourier de $V(x)=V_0\sin(x/L)$.

A equação de Schrödinger para o potencial com uma única frequência espacial torna-se uma equação algébrica,

$$\frac{p^2}{2m}\Psi(p)+\frac{V_0}{2}(\Psi(p-\hbar/L)+\Psi(p+\hbar/L))=E_p\Psi(p). \tag{50}$$

Para $\hbar/L$ finito, esse sistema de equações algébricas deve ser resolvido por método de Gauss, por exemplo. No limite $\hbar/L = \delta p \to 0$,

$$\frac{p^2\Psi(p)}{2m} + V_0[1 + o(\delta p^2)]\Psi(p) - E_p\Psi(p) = 0. \tag{51}$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V_0 - E_p\right)\Psi(p) \approx 0 \quad \Rightarrow E_p \approx \frac{p^2}{2m} + V_0. \tag{52}$$

Exercício 10 O resultado (52) era esperado? Justifique considerando o tamanho macroscópico L.

Exercício 11 Determine as autoenergias para um sistema de comprimento L e com potencial periódico $V(x) = -V_0 \cos(x/a_0)$, onde a_0 é o raio de Bohr.

Exercício 12 Generalize os resultados acima para n-dimensões espaciais.