Notas de revisão de matemática para Física Quântica

Bruno Ortega Goes *
Universidade de São Paulo

10 de março de 2018

Sumário

*bruno.ortega.goes@usp.br

1 Revisão de cálculo básico

1.1 Derivadas e álgebra linear

Quando escrevi básico, quis dizer bem básico mesmo. Comecemos pelas primeiras e segundas derivadas das cinco funções mais úteis que existem. Considere “a” uma constante qualquer, mas não nula:

$$f(x) = \sin(ax) \to \frac{df}{dx} = a\cos(ax) \to \frac{d^2 f}{dx^2} = -a^2 \sin(ax) \tag{1}$$

$$g(x) = \cos(ax) \to \frac{df}{dx} = -a\sin(ax) \to \frac{d^2 f}{dx^2} = -a^2 \cos(ax) \tag{2}$$

$$h(x) = e^{ax} \to \frac{df}{dx} = a\, e^{ax} \to \frac{d^2 f}{dx^2} = a^2\, e^{ax} \tag{3}$$

$$p(x) = \sinh(ax) \to \frac{df}{dx} = a\cosh(ax) \to \frac{d^2 f}{dx^2} = a^2 \sinh(ax) \tag{4}$$

$$t(x) = \cosh(ax) \to \frac{df}{dx} = a\sinh(ax) \to \frac{d^2 f}{dx^2} = a^2 \cosh(ax) \tag{5}$$

em que as funções hiperbólicas $\sinh(x)$ e $\cosh(x)$ são definidas a partir da exponencial por:

$$\sinh(ax) = \frac{e^{ax} - e^{-ax}}{2} \tag{6}$$

$$\cosh(ax) = \frac{e^{ax} + e^{-ax}}{2} \tag{7}$$

Questão 1. Você sabe que $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$. Mostre que a relação equivalente para as funções hiperbólicas é $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$, com uma diferença de sinal muito importante.

Observe atentamente as *segundas* derivadas. Perceba que todas essas cinco funções têm em comum o fato de que, ao derivarmos duas vezes, obtermos elas próprias multiplicadas por uma constante $\pm a^2$!

Lembre que em *álgebra linear*, quando tínhamos um operador “A” que, aplicado a um vetor v, resultava no próprio vetor v multiplicado por uma constante $\lambda \neq 0$, ou seja

$$Av = \lambda v \tag{8}$$

dávamos nomes especiais para esses caras: o vetor v é o tal "**auto**vetor"do operador A e λ é o "**auto**valor". Assim, as cinco funções (que são vetores no espaço de funções) são as ***auto****funções* do operador segunda derivada $\frac{d^2}{dx^2}$, com autovalores $\pm a^2$.

Este jargão de "**auto**coisas"é muito utilizado em mecânica quântica[1], e sua origem é essa, da álgebra linear. No decorrer do curso vocês ouvirão muito "autofunção","autoestado", "autoenergia", "auto da compadecida"e por ai vai.

1.2 Números complexos

Em cálculo IV, vocês viram (ou irão ver, não têm como escapar!) que, quando se cria a unidade imaginária $i = \sqrt{-1}$ é possível definir o corpo dos complexos $\mathbb{C}$ e fazer um monte de coisas legais com as funções complexas.

O corpo dos números complexos é o conjunto

$$\mathbb{C} = \{(x,y)|x,y \in \mathbb{R}\} \tag{9}$$

com as seguintes operações: se $z = (x,y)$ e $x = (a,b)$ $z,w \in \mathbb{C}$

$$z + w = (x + a, y + b) \tag{10}$$
$$z.w = (xa - yb, xb + ya) \tag{11}$$

O complexo conjugado é $z^* = (x, -y)$. Em geral, escrevemos $z = x + iy$ então $z^* = x - iy$ (sempre que $x, y \in \mathbb{R}$).

Se você achou a definição da multiplicação estranha, você está certo, a seguinte continha "explica"o porquê dessa definição:

$$zw = (x + iy)(a + ib) = xa + xib + iya + i^2yb = (xa - yb) + i(xb + ya) \tag{12}$$

A figura 1 ilustra a representação geométrica dos números complexos e seus conjugados; esse plano tem o nome de Argand-Gauss.

[1]SPOILER ALERT: no curso de quântica I ficará extremamente claro o porquê. Lá será apresentado o formalismo de Dirac, os axiomas da mecânica quântica e etc. Você verá que as grandezas "observáveis", como a energia, são representadas por operadores hermitianos que têm a excelente propriedade de que seus autovalores são reais. Seu objetivo lá será diagonalizar as coisas e encontrar autovalores... Viajei um pouco, pode voltar pro texto.

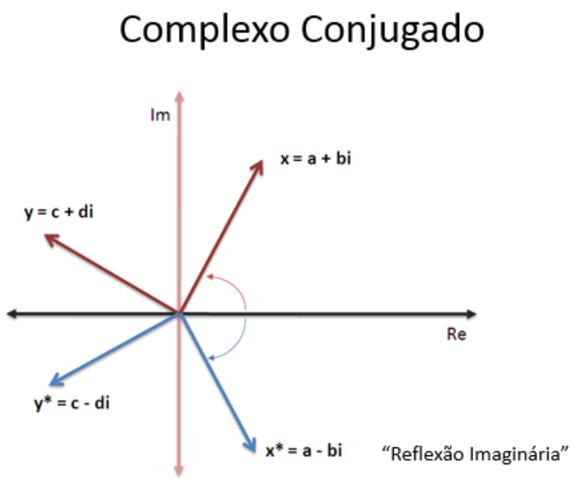

Figura 1: Essa foi a melhor imagem que achei (`https://matematicaintuitiva.wordpress.com/2015/07/26/aritmetica-intuitiva-com-numeros-complexos/`)

De vetores e GA, sabemos que a norma de um vetor é $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$. Seja θ o ângulo entre o vetor que liga a origem a um ponto z do plano complexo, então:

$$\begin{aligned} \sin\theta &= \frac{y}{|z|} \to y = |z|\sin\theta \\ \cos\theta &= \frac{x}{|z|} \to x = |z|\cos\theta \end{aligned} \tag{13}$$

$$z = x + iy = |z|\underbrace{(\cos\theta + i\sin\theta)}_{e^{i\theta},} \tag{14}$$

Antes de mostrar que é verdade que a exponencial complexa é uma função seno–cosseno disfarçada, veja que essa forma corresponde à representação polar (distância e ângulo) no plano da Figura 1

$$z = |z|e^{i\theta} \tag{15}$$

Cabe ressaltar que dois números complexos são iguais se, e só se, suas partes real e imaginária são iguais $z = w \to x + iy = a + ib \leftrightarrow x = a, y = b$. Por fim, vamos ver como fica o quociente de x por w,

$$\begin{aligned} \frac{z}{w} = zw^{-1} &= \frac{x+iy}{a+ib} * \underbrace{1}_{\frac{w^*}{w^*}} \\ &= \frac{x+iy}{a+ib} * \frac{a-ib}{a-ib} = \frac{xa+yb}{a^2+b^2} + i\frac{ya-xb}{a^2+b^2} \end{aligned} \tag{16}$$

Pra quê estudar números complexos? Porque são divertidos, mas o que interessa de verdade pra esse curso é a exponencial complexa e^{ix}. Para derivar ou integrar essa função, basta usarmos o que já vimos, fazendo $a = i$ (qual o problema? é constante e não é nula). Pra ficar mais conveniente ainda, seja $a = ik$ com k uma constante real. Então:

$$\frac{d^2 e^{ikx}}{dx^2} = -k^2 e^{ikx} \tag{17}$$

A exponencial complexa demonstra o mesmo comportamento das funções sin e cos reais. Interessante! Será que há uma relação entre essas três??? Sim, a conhecida **fórmula de Euler**:

$$e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx \tag{18}$$

"Dem.:"(observe as aspas) a ideia é expandirmos a exponencial complexa em série de Taylor e separar o que está multiplicado por "i"e o que não está:

$$\begin{aligned} e^{ikx} &= \sum_{n=0}^{\infty} = 1 + ikx + \frac{i^2k^2x^2}{2!} + \frac{i^3k^3x^3}{3!} + \frac{i^4k^4x^4}{4!} + ... \\ &= i\underbrace{(kx - \frac{k^3x^3}{3!})}_{=\sin kx} + \underbrace{(1 - \frac{k^2x^2}{2!} + \frac{k^4x^4}{4!})}_{=\cos kx} = \cos kx + i \sin kx \end{aligned} \tag{19}$$

Questão 2 Mostre que, se $x, y \in \mathbb{R}$, então $x + yi = r \exp(if)$ com $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ e $f = \operatorname{atan}(y/x)$ se $x > 0$ e $f = \pi + \operatorname{atan}(y/x)$ se $x < 0$.

Agora você pode escolher entre trabalhar com senos e cossenos (muitas vezes, uma grande furada) ou trabalhar com a exponencial complexa (sucesso total), que é fácil de derivar e integrar.

Questão 3 Use $\exp(i(a + b)) = \exp ia \exp ib$ para mostrar como expandir $\cos(a + b)$ e $\sin(a + b)$.

Saber as coisas básicas revisadas até aqui será muito útil quando vocês estiverem resolvendo a equação de Schrödinger. Só para irem se acostumando com a cara dela:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} \tag{20}$$

Aqui $\hbar = h/2\pi$ com h a constante de Planck. Essa é a equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula de massa m sujeita a um potencial $V(x)$ que aqui é independente do tempo, mas poderia depender — é mais complicado nesse caso, vocês nem verão isso até o curso de quântica II. Ψ é a tal função de onda, em geral você vai ter que lidar com a parte espacial, pois a parte temporal você resolve uma vez e guarda o resultado na cartola. O potencial e as **condições de contorno e iniciais** serão os ingredientes que ditarão a forma de $\Psi(x, t)$. Note que essa equação é a **derivadas parciais**. Por isso, revisitaremos um tópico importante de fismat I a seguir.

2 Condições de contorno na equação diferencial

Nesta seção, vou dar exemplos de resoluções de equações diferenciais nas quais há **condições de contorno**. Assim, vamos encontrar uma família de funções que resolva uma equação diferencial, mas, para resolver o *nosso* problema, ela tomará uma forma particular, pois vamos querer que, para determinados valores do seu domínio, ela assuma certos valores particulares.

Exemplo 1: Vamos resolver a seguinte equação diferencial:

$$-i\frac{\partial\phi(x)}{\partial x} = k\phi(x) \rightarrow \frac{\partial\phi(x)}{\partial x} = ik\phi(x) \tag{21}$$

Conhecemos a solução, mas o ponto aqui é que vou exigir duas coisas dessa solução veja, quero que

$$\int_0^L |\phi(x)|^2 dx = 1 \tag{22}$$

só porque 1 é um número bonito e também quero que

$$\phi(x+L) = \phi(x) \tag{23}$$

Aqui, L é um número real qualquer fixo, e x é a variável. Equação (23) representa a **condição de contorno** da minha equação diferencial (21). Ela impõe que toda vez que eu estiver no ponto $x+L$ eu tenho ϕ com o mesmo valor que na posição x. Essa condição de contorno se chama **condição de contorno periódica**, que é bastante utilizada em física do estado sólido, em particular esse exemplo é baseado no modelo do gás de elétrons livres.

Vamos lá, a solução da (21) é manjada: $\phi(x) = Ae^{ikx}$, onde A é uma constante qualquer. Agora, vamos impor a condição (22)

$$\int_0^L Ae^{ikx}A^*e^{-ikx}dx = 1 \rightarrow |A|^2\int_0^L dx = 1 \rightarrow |A|^2L = 1 \rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{L}} \tag{24}$$

Logo, já temos uma forma um pouco mais particular da nossa solução, que é

$$\phi(x) = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}} \tag{25}$$

Agora vamos usar a condição de contorno (23)

$$\phi(x+L) = \frac{e^{ik(x+L)}}{\sqrt{L}} = \frac{e^{ikx}e^{ikL}}{\sqrt{L}} = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}} = \phi(x) \tag{26}$$

Simplificando as coisas, temos

$$e^{ikL} = 1 = e^{i2\pi n} \tag{27}$$

em que n é um número inteiro qualquer, $n = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ Ou seja

$$kL = 2\pi n \rightarrow k = \frac{2\pi n}{L} \tag{28}$$

Moral das contas: a nossa condição de contorno impôs que a grandeza k tem uma forma muito bem definida dada por (28) e, finalmente, a solução que procuramos da equação diferencial obedecendo o capricho (22) e a condição de contorno periódica (23) é

$$\phi(x) = \frac{e^{i\frac{2\pi n}{L}x}}{\sqrt{L}} \tag{29}$$

O procedimento é, basicamente: dada uma equação diferencial com condições de contorno (e algum capricho que ela deva satisfazer), ache a forma geral da equação, imponha a condição de contorno (e o capricho, se tiver).

Exemplo 2: Vamos resolver a equação de Laplace em uma dimensão para o potencial $V(x)$, sujeito às condições de contorno:

$$\begin{aligned} V(1) &= 4 \\ V(5) &= 0 \end{aligned} \tag{30}$$

A equação de Laplace é

$$\nabla^2 V = 0 \rightarrow \frac{d^2V}{dx^2} = 0 \tag{31}$$

Essa equação é super fácil, a solução geral é:

$$V(x) = mx + b \tag{32}$$

em que m e b precisam ser encontradas. Usando agora as condições de contorno, chegamos que:

$$\begin{aligned} V(1) &= m + b = 4 \\ V(0) &= 0m + b = 0 \end{aligned} \tag{33}$$

Resolvendo, teremos $m = -1$ e $b = 5$, o que nos dá a seguinte forma pro potencial V: $V(x) = -x + 5$.

3 Revisão de física matemática: O método de Fourier

Para relembrar o método de Fourier visto no curso de física matemática I, vamos resolver um problema bem simples que é o da condução do calor numa barra de comprimento L, isolada nas laterais.

Problema: Encontrar a função $u(x, t)$ que satisfaça

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \tag{34}$$

sujeita às seguintes condições inicial e de fronteira:

$$\begin{aligned} u(x,0) &= f(x), \text{ (condição inicial)} \\ u(0,t) &= u(L,t) = 0, \text{ (condições de fronteira ou contorno)} \end{aligned} \tag{35}$$

Note que adotamos uma condição inicial muito geral, mas as condições de fronteira são bem particulares, elas garantem que $\lim_{t\to\infty} u(x,t) = 0$. Vamos começar a resolver.

$1^{\underline{o}}$ Usamos **separação de variáveis**, ou seja, procuramos por soluções que tenham a forma

$$u(x,t) = F(x)G(t) \tag{36}$$

Plugando isso em (34), temos

$$\frac{\partial F(x)G(t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 F(x)G(t)}{\partial x^2} \quad \to \quad F(x)\frac{dG(t)}{dt} = G(t)\frac{d^2F(x)}{dx^2} \tag{37}$$

Dividindo a última equação de (37) por $u(x,t)$

$$\begin{aligned} \frac{1}{F(x)G(t)}F(x)\frac{dG(t)}{dt} &= \frac{1}{F(x)G(t)}G(t)\frac{d^2F(x)}{dx^2} \\ \frac{1}{G(t)}\frac{dG(t)}{dt} &= \frac{1}{F(x)}\frac{d^2F(x)}{dx^2} \end{aligned} \tag{38}$$

O lado esquerdo só depende do tempo enquanto o lado direito só depende da posição e eles são iguais! Logo, cada lado é independente de x e t, é uma constante. Isto é:

$$\begin{aligned} \frac{1}{G(t)}\frac{dG(t)}{dt} &= \sigma \\ \frac{1}{F(x)}\frac{d^2F(x)}{dx^2} &= \sigma \end{aligned} \tag{39}$$

Vamos resolver primeiro a parte espacial.

As condições de fronteira em (35) passam para a função $F(x)$, ou seja, temos:

$$F(0) = F(L) = 0 \tag{40}$$

$$\frac{1}{F(x)}\frac{d^2F(x)}{dx^2} = \sigma \to \frac{d^2F(x)}{dx^2} = \sigma F(x) \tag{41}$$

Há 3 possibilidades para o σ

(i) $\sigma = 0$. Neste caso

$$\frac{d^2F(x)}{dx^2} = 0 \rightarrow F(x) = ax + b \tag{42}$$

Usando (40)

$$\begin{aligned} F(0) &= a0 + b = 0 \rightarrow b = 0 \\ F(L) &= aL + b = aL = 0 \rightarrow a = 0 \end{aligned} \tag{43}$$

Logo a solução é $F(x) = 0$ e isso não é uma solução aceitável fisicamente, primeiro porque não poderíamos fazer a divisão por $u(x,t)$ que fizemos acima e também não nos informa nada sobre como se dá a condução do calor na barra.

(ii) $\sigma > 0$ Por conveniência, reescrevemos esta condição como $\sigma = k^2 > 0$

$$\frac{d^2F(x)}{dx^2} = k^2F(x) \rightarrow F(x) = c_1e^{kx} + c_2e^{-kx}, \text{ confira!} \tag{44}$$

Usando (40)

$$\begin{aligned} F(0) &= c_1 + c_2 \\ F(L) &= c_1e^{kL} + c_2e^{-kL} \end{aligned} \tag{45}$$

Usando o método de Cramer para resolver para os coeficientes c_1, c_2 encontramos que eles devem ser nulos (faça!), chegando novamente a $F(x) = 0$, a solução não aceitável.

(iii) $\sigma < 0$ Aqui também vamos reescrever essa condição, $\sigma = -k^2 < 0$

$$\begin{aligned} \frac{d^2F(x)}{dx^2} = -k^2F(x) &\rightarrow F(x) = c_1e^{ikx} + c_2e^{-ikx}, \text{ ou} \\ &\rightarrow F(x) = c_1 \sin kx + c_2 \cos kx \end{aligned} \tag{46}$$

Vamos usar a solução de senos e cossenos. Usando (40)

$$\begin{aligned} F(0) &= c_1 \cos 0 + c_2 \sin 0 \rightarrow c_1 = 0 \\ F(L) &= c_1 \cos kl + c_2 \sin kL = c_2 \sin kL = 0 \end{aligned} \tag{47}$$

Não queremos outra solução $F(x) = 0$, então impomos que $c_2 \neq 0$, o que implica em:

$$\sin kL = 0 \rightarrow kl = n\pi \rightarrow k = \frac{n\pi}{L} \tag{48}$$

n sendo um inteiro qualquer

Vou colocar $c_2 = 1$, em geral qualquer combinação linear de senos será solução, então a solução será

$$F_n(x) = \sin kx = \sin \frac{n\pi x}{L} \tag{49}$$

Aqui $-\sigma = k^2 = n\pi/L$ são os autovalores e $F_n(x)$ são as autofunções.

Agora resolveremos a parte temporal, não precisamos mais estudar 3 casos pois apenas o caso $\sigma = -k^2 < 0$ é que importa por nos dar solução aceitável. Então:

$$\frac{1}{G(t)}\frac{dG(t)}{dt} = -k^2 \rightarrow \frac{dG(t)}{dt} = -k^2 G(t) \tag{50}$$

A solução geral é $G(t) = c_3 e^{k^2 t} + c_4 e^{-k^2 t}$, mas não queremos que nossa $u(x,t)$ exploda para o tempo evoluindo infinitamente (ou seja, t tendendo a infinito), dessa forma a exponencial positiva tem que ser jogada fora, fazemos isso colocando $c_3 = 0$, então $G(t) = c_4 e^{-k^2 t}$. Sabemos já a forma de k da solução da parte espacial.

Então $G_n(t) = c_4 e^{\frac{n^2\pi^2 t}{L^2}}$. E para cada $n = 1, 2, 3, ...$ temos uma função:

$$u_n(x,t) = F_n(x)G_n(t) = e^{\frac{n^2\pi^2 t}{L^2}} \sin\frac{n\pi x}{L} \tag{51}$$

Este $u_n(x,t)$ satisfaz a equação diferencial (34) e as condições de fronteira de (35). Só falta usar a informação da condição inicial no tempo $t = 0$, que é $u(x,0) = f(x)$. Vamos primeiro considerar a situação (escolhida de modo totalmente arbitrário) em que $f(x) = \sin\frac{5\pi x}{L}$,

$$u_n(x,0) = 1\sin\frac{n\pi x}{L} = \sin\frac{5\pi x}{L} \rightarrow n = 5 \tag{52}$$

Assim a solução final, que satisfaz tudo o que tem que satisfazer é:

$$u(x,t) = e^{\frac{25\pi^2 t}{L^2}} \sin\frac{5\pi x}{L} \tag{53}$$

Em geral, se $f(x)$ puder ser expandida em série de Fourier (o que ocorre para qualquer situação que corresponda a uma situação física real) então

$$f(x) = \sum_{n=1}^{N} c_n \sin\frac{n\pi x}{L}, \text{ de modo que, } u(x,0) = 1\sum_{n=1}^{N} c_n \sin\frac{n\pi x}{L} \tag{54}$$

e a solução vai ser algo do tipo

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{N} c_n e^{\frac{n^2\pi^2 t}{L^2}} \sin\frac{n\pi x}{L} \tag{55}$$

Resumo das contas: dada uma EDP faça o método de separação de variáveis (método de Fourier), pegue as soluções que fazem sentido para o problema, plugue as condições de fronteira e a condição inicial e voilà!

4 Revisão de física matemática: A transformada de Fourier

Para uma revisão em bom nível deste tópico, sugiro a leitura das notas de aula do prof. Rodney Josué Biezuner da UFMG, disponível aqui. Elas são a referência mais direta ao ponto e acessível que encontrei, não conseguiria fazer melhor por isso nem tentarei. Abaixo só darei as informações mais relevantes para uma referência rápida:

As definições de transformada e antitransformada de Fourier são dadas, respectivamente, por $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$

$$F(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ix\xi} dx \tag{56}$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\xi) e^{ix\xi} dx \tag{57}$$

Existem condições sobre as funções, as integrais acima devem existir e a condição necessária e suficiente para isso é que $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty$. Neste caso temos o Teorema de Plancherel-Parseval para uma classe de funções "boas"

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |F(\xi)|^2 d\xi \tag{58}$$

As funções utilizadas em física geralmente são bem comportadas e poderemos fazer a transformada numa boa. Se quiser saber formalmente o que são funções "boas"sugiro a leitura do capítulo 6 do livro *Análise de Fourier e EDPs* do Djairo Guedes de Figueiredo, ou as notas do prof. João Barata que são acessíveis aqui.

5 Integração por partes

A integração por partes é a regra da integração correspondente à regra do produto para a diferenciação e é útil em vários casos, no curso em específico será muito utilizada no cálculo de médias de operadores e nas demonstrações de muitas das propriedades básicas das funções de onda que se relacionam com a interpretação probabilística da mecânica quântica. O objetivo é simples, encontrar uma integral mais simples de resolver do que a integral inicial.

Lembre que a regra do produto diz que

$$\frac{d}{dx}[f(x)g(x)] = f'(x)g(x) + f(x)g'(x) \tag{59}$$

Integrando a eq. (59) com relação a x temos

$$\begin{aligned} \int \frac{d}{dx}[f(x)g(x)]dx &= \int f'(x)g(x)dx + \int f(x)g'(x)dx \\ f(x)g(x) &= \int f'(x)g(x)dx + \int f(x)g'(x)dx \end{aligned} \tag{60}$$

Então temos que

$$\boxed{\int f'(x)g(x)dx = f(x)g(x) - \int f(x)g'(x)dx} \tag{61}$$

Exemplo:

$$\int \underbrace{x}_{f(x)} \underbrace{\sin x}_{g'(x)} dx \tag{62}$$

Escolho

$$\begin{gathered} f(x) = x \rightarrow f'(x) = 1 \\ g'(x) = \sin x \rightarrow g(x) = -\cos x \end{gathered} \tag{63}$$

e essa escolha foi baseada no traquejo, se eu fizesse a escolha trocada, acabaria chegando numa integral com um x^2 (verifique!) que claramente é pior! Então

$$\int x \sin x dx = -x \cos x - \int 1(-\cos x)dx = -x \cos x + \int \cos x dx = -x \cos x + \sin x + C \tag{64}$$

onde C é a constante de integração.

Em alguns casos você precisa fazer a integração por partes mais de uma vez pra conseguir resolver, a integral de $h(x) = x^2 e^{kx}$ é uma dessas, por exemplo.

6 Diferencial sob o sinal de integração

A primeira vez que soube da existência desse método foi por meio deste artigo , o qual sugiro a leitura inclusive. Na época não apreciei muito bem, em mecânica estatística entretanto comecei a usar esse método a torto e a direito, isso porque ele é **extremamente prático**, a integral de $h(x) = x^2 e^{kx}$ requer que façamos integral por partes duas vezes, não que a técnica seja difícil mas requer mais manipulações matemáticas o que pode fazer que numa distração a gente erre o sinal ou perca um fator e chegue num resultado errado.

A ideia do presente método é a seguinte, a gente olha o que tem que integrar e pensamos num jeito de escrever a função que queremos integrar como uma derivada de um parâmetro de uma função simples. Se isso for possível, nós escrevemos a função como uma derivada dentro da integral e ai, e isso pode ser desconfortável para alguns, *trocamos a ordem da derivada e da integral*, integramos a função simples e depois derivamos com relação ao parâmetro da derivada. Esse parágrafo pode ter ficado confuso, vamos resolver a integral dessa $h(x) = x^2 e^{kx}$ pra ver como funciona, é melhor do que ficar descrevendo.

Queremos resolver

$$\int x^2 e^{kx} dx \tag{65}$$

Note que podemos pensar nessa função como uma função não só de x mas de k também. Bom, vamos derivar e^{kx} com relação a k pra ver o que acontece

$$\frac{\partial}{\partial k}e^{kx} = xe^{kx} \to \frac{\partial^2}{\partial^2 k}e^{kx} = x^2 e^{kx} \tag{66}$$

Olha que beleza! Derivando a exponencial com relação ao parâmetro k duas vezes chegamos exatamente na função que queremos integrar. Vamos escrever então

$$\int x^2 e^{kx} dx = \int \frac{\partial^2}{\partial^2 k}e^{kx} dx = \frac{\partial^2}{\partial^2 k}\int e^{kx} dx = \frac{\partial^2}{\partial^2 k}\left[\frac{e^{kx}}{k}\right] + C \tag{67}$$

Agora é só derivar e^{kx}/k duas vezes com relação a k. O resultado vai ser

$$\int x^2 e^{kx} dx = \frac{\partial^2}{\partial^2 k}\left[\frac{e^{kx}}{k}\right] + C = \frac{x^2 k e^{kx} - x e^{kx}}{k^2} - \frac{k^2 x e^{kx} - 2k e^{kx}}{k^4} + C \tag{68}$$

Se $k = 1$ temos que

$$\int x^2 e^x dx = x^2 - 2xe^x + 2e^x + C \tag{69}$$

Para inverter a ordem de derivação e integração, tudo que é necessário é que os limites de integração **não** dependam da variável em que você está derivando — não esqueça de verificar isso. Muitas vezes que usar essa técnica, você vai acabar caindo na integral da gaussiana, tenha esse resultado no bolso, tatue no coração:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{70}$$

7 Fórmulas para o Laplaciano

Esta seção é para ser apenas uma referência rápida para a forma que o operador Laplaciano assume nas coordenadas cartesianas, esféricas e cilindricas, em geral vocês só precisarão das duas primeiras.

Cartesianas $\Psi = \Psi(x, y, z)$

$$\nabla^2\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \tag{71}$$

Esféricas $\Psi = \Psi(r, \theta, \phi)$

$$\nabla^2\Psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} \tag{72}$$

Cilíndricas $\Psi = \Psi(r, \theta, z)$

$$\nabla^2\Psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} \tag{73}$$

É só isso, use com sabedoria.

8 Mudança de variável em integral múltipla: coordenadas esféricas

Quando temos que calcular o volume de uma esfera, por exemplo, temos que fazer uma integral tripla, e neste caso usar as nossas adoradas coordenadas cartesianas é, pra falar o mínimo, uma grande estupidez. Quando um problema tem simetria esférica é natural pensar em resolvê-lo no sistema de coordenadas esféricas, que se relacionam com as cartesianas por:

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \tag{74}$$

onde $r \in [0,\infty)$, $\phi \in [0,\pi]$ e $\theta \in [0,2\pi]$. Quando fazemos essa transformação de coordenadas é muito, mas muito importante mesmo, não esquecer de colocar o **Jacobiano** da transformação ma integral, que nesse caso é $r^2\sin\theta$, assim, quando trocamos o sistema de coordenadas temos

$$\iiint_D f(x,y,z)\,dx\,dy\,dz = \iiint_E g(r,\theta,\phi)r^2\ \sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi \tag{75}$$

Enfatizando, **ao mudar de coordenadas não se esqueça do Jacobiano!!!** A dedução dessa coisa é um pouco trabalhosa e não agrega, por isso omiti, se tiver interesse é fácilmente encontrada em livros de cálculo, física matemática, internet e afins.

9 A função gama

A função Γ pode ser representada por uma integral que vai aparecer em algum momento no decorrer do curso, sempre que essa integral aparecer você terá uma fórmula fechada para calculá-la. O meu objetivo aqui é apenas de definir essa função e escrever fórmulas que poderão ser úteis para uma referência rápida. Para quem gosta de matemática sugiro a leitura das notas do prof. João Barata, que podem ser encontradas aqui. Outra boa referência é o livro *Mathematical methods in the physical sciences* de Mary Boas, capítulo 9.

Comecemos calculando a seguinte integral:

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x}dx = -\frac{1}{\alpha}e^{-\alpha x}|_0^\infty = \frac{1}{\alpha} \tag{76}$$

Beleza, agora vamos derivar ambos os lados de (76) com relação à α algumas vezes só pra ver o que acontece

$$\begin{aligned}\int_0^\infty xe^{-\alpha x}dx &= \frac{1}{\alpha^2} \\ \int_0^\infty x^2e^{-\alpha x}dx &= \frac{2}{\alpha^3} \\ \int_0^\infty x^3e^{-\alpha x}dx &= \frac{3!}{\alpha^4} \\ \int_0^\infty x^4e^{-\alpha x}dx &= \frac{4!}{\alpha^5}\end{aligned} \tag{77}$$

Em geral temos o seguinte:

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x}dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \tag{78}$$

Para $\alpha = 1$ vamos ter:

$$\int_0^\infty x^n e^{-x}dx = n! \tag{79}$$

Observe que (79) é uma representação integral para o valor de $n!$, em particular se $n = 0$ temos que

$$0! = \int_0^\infty e^{-x}dx = -e^{-x}|_0^\infty = 1 \tag{80}$$

Até agora n é um número inteiro maior que 0. Vamos usar o que foi discutido acima para definir a função Γ para um número p qualquer **maior que zero**.

Def. A função Γ é, para *qualquer* $p > 0$, definida por

$$\Gamma(p) = \int_0^\infty x^{p-1}e^{-x}dx, \ p > 0 \tag{81}$$

Para $p < 0$ essa integral diverge, e portanto não é usada para definir $\Gamma(p)$, logo veremos como fazer pra definir esta função neste intervalo. Temos até agora que

$$\begin{aligned}\Gamma(n) &= \int_0^\infty x^{n-1}e^{-x}dx = (n-1)! \\ \Gamma(n+1) &= \int_0^\infty x^n e^{-x}dx = (n)!\end{aligned} \tag{82}$$

Podemos escrever então:

$$\Gamma(p+1) = \int_0^\infty x^p e^{-x}dx = p!, p > -1 \tag{83}$$

Há uma fórmula recursiva para a função Γ que é

$$\Gamma(p+1) = p\Gamma(p) \tag{84}$$

Outra formuleta é:

$$\Gamma(p)\Gamma(1-p) = \frac{\pi}{\sin \pi p} \tag{85}$$

A fórmula recursiva é utilizada para definirmos $\Gamma(p)$ para $p < 0$, e neste intervalo

$$\Gamma(p) = \frac{\Gamma(p+1)}{p} \tag{86}$$

Dessa forma temos que, por exemplo:

$$\begin{aligned} \Gamma(-0.5) &= \frac{1}{-0.5}\Gamma(0.5) \\ \Gamma(-1.5) = \frac{1}{-1.5}\Gamma(-0.5) &= \frac{1}{-1.5}\frac{1}{-0.5}\Gamma(0.5) \end{aligned} \tag{87}$$

E só por completeza, $\Gamma(0.5) = \sqrt{\pi}$. É importante notar que $\Gamma(p) = \frac{\Gamma(p+1)}{p} \to \infty$ para $p \to 0$.

Abaixo está o gráfico da função $\Gamma(p)$ para $-4 < p < 6$.