INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN-UNICAMP

TESE DE MESTRADO

CÁLCULO DE FUNÇÕES DE GREEN PELO MÉTODO DE EXPANSÃO TIPO STURM-LIOUVILLE

Candidato: Edmundo Capelas de Oliveira

Orientador: Prof. Dr. José Bellandi Filho

Campinas = 1979

A meus pais

Manoel (em memória) e Conceição

AGRADECIMENTOS

- Ao prof. e amigo Dr. José Bellandi Filho pela sugestão e orientação deste trabalho.

- Ao prof. Dr. Cesare Mansueto Giulio Lattes, chefe do Departamento de Cronologia, Raios Cósmicos e Altas Energias pelas facilidades concedidas para realização deste trabalho.

- A Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo FAPESP pelo apoio financeiro.

- A Maria Cláudia e Patrícia pelo apoio e comprazer que tiveram comigo durante este trabalho.

- Aos meus familiares em especial ao Eduardo.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO

O objetivo deste trabalho é o cálculo de funções de Green utilizando-se do método de expansão tipo Sturm-Liouville. Este método de cálculo de função de Green para uma equação diferencial é bastante simples, permitindo escrever a função de Green em termos das duas soluções linearmente independentes da equação diferencial homogênea. Geralmente, estas soluções são funções do tipo hipergeométricas confluentes podendo-se, assim, obter uma representação fechada e analítica para a função de Green na região de interesse do plano complexo.

O método de expansão tipo Sturm-Liouville é aplicável para cálculo de funções de Green para equações diferenciais, em problemas unidimensionais. No entanto, podemos estendê-lo para equações diferenciais a uma dimensão qualquer, quando temos uma específica simetria. Por exemplo, Hostler[1] calculou a função de Green para a equação de Schrödinger com o potencial Coulombiano, fazendo uma expansão da função de Green em ondas parciais, aplicando o método de Sturm-Liouville para a equação radial.

Bellandi e Zimerman[2] calcularam, também, a partir deste método, a função de Green para a equação de Schrödinger para um elétron livre na presença de um campo magnético uniforme. Conhecendo-se a função de Green não relativística para esse problema a extensão relativística para um elétron de Dirac pode ser facilmente obtida[3].

Neste trabalho fazemos algumas aplicações do método de expansão tipo Sturm-Liouville. Como aplicações deste método a problemas unidimensionais efetuamos o cálculo da função de Green para a equação de Schrödinger com o potencial de Morse[4], bem conhecido da teoria das moléculas diatômicas, bem como o cálculo da função de Green para a equação diferencial associada de Legendre. Efetuamos o cálculo da função de Green para a equação de Schrödinger com um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico tridimensional obtendo-se uma representação integral e uma representação fechada em termos de funções de Whittaker. A função de Green unidimensional foi primeiramente calculada por Titchmarsh[5], via expansão tipo Sturm-Liouville. Bakhrakh, Vetchinkin e Kristenko[6] calcularam para o caso estacionário multidimensional, fazendo a transformada de Laplace da função de Green dependente do tempo, onde a função de Green multidimensional é uma produtória de funções de Green unidimensionais.

Bellandi e Caetano Neto[7] calcularam a função de Green para a equação de Schrödinger com um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico multidimensional usando a função geratriz do produto de funções de onda do oscilador harmônico dada pela fórmula de Mehler generalizada.

Na secção I discutimos o método de expansão tipo Sturm-Liouville. Calculamos a função de Green para a equação de Schrödinger com o potencial de Morse e a função de Green para a equação diferencial associada de Legendre, na secção II. Finalmente, na secção III, calculamos a função de Green para a equação de Schrödinger com um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico, sendo que, na primeira parte obtemos uma representação integral para a função de Green do oscilador harmônico isotrópico tridimensional, na segunda parte uma representação fechada em termos de funções de Whittaker, e, na última parte uma representação integral para a função de Green para a equação de Schrödinger com um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico multidimensional.

I - MÉTODO DE EXPANSÃO TIPO STURM-LIOUVILLE

Seja D_x um operador diferencial unidimensional e $G(x,x')$ a função de Green que satisfaz a equação diferencial não homogênea

$$D_x \; G(x,x') = -\delta(x-x') \; . \tag{1.1}$$

O método de cálculo de função de Green conhecido como expansão tipo Sturm-Liouville ou método de Lagrange[8], consiste essencialmente em se procurar transformar o operador diferencial dado em um operador diferencial tipo Sturm-Liouville, cuja equação diferencial homogênea tem soluções conhecidas, que em geral são funções do tipo hipergeométricas confluentes.

O operador diferencial de Sturm-Liouville é da forma

$$Q = \frac{d}{dx} \{ \; p(x) \frac{d}{dx} \} + q(x) \tag{1.2}$$

onde $p(x)$ é uma função contínua que tem derivada primeira contínua num certo intervalo $[a,b]$ e $q(x)$ é, também, uma função contínua nesse intervalo.

De maneira geral estamos interessados em obter soluções para a equação diferencial não homogênea

$$Q \; y(x) + f(x) = 0 \tag{1.3}$$

em que $y(x)$ satisfaça certas condições de contorno bem definidas no intervalo $[a,b]$.

Se conhecemos a função de Green, $G(x,x')$, para o operador diferencial de Sturm-Liouville $\mathcal{Q}$ satisfazendo a equação diferencial não homogênea

$$\mathcal{Q}\, G(x,x') = -\delta(x-x') \qquad (1.4)$$

a solução da eq, 1.3 será dada por

$$y(x) = \int_a^b G(x,x')\, f(x')\, dx' \quad . \qquad (1.5)$$

As condições de contorno para as soluções da eq.1.3 são escolhidas de uma forma conveniente

$$\alpha\, y(a) + \beta\, y'(a) = 0 \qquad (1.6)$$

$$\alpha_1 y(b) + \beta_1 y'(b) = 0 \qquad (1.7)$$

onde α, β, α_1 e β_1 são constantes arbitrárias não nulas e $y'(a)$ e $y'(b)$ são as derivadas primeira calculadas nos pontos a e b, respectivamente. Supomos também que $G(x,x')$ satisfaz essas condições de contorno.

Podemos escrever $G(x,x')$ na forma

$$G(x,x') = \begin{cases} C_1\ u(x) & a \leq x < x' \\ C_2\ v(x) & x' < x \leq b \end{cases} \qquad (1.8)$$

em que $u(x)$ e $v(x)$ são soluções da equação diferencial homogênea satisfazendo as mesmas condições de contorno que $y(x)$ em $x=a$ e $x=b$, respectivamente.

Devido à continuidade de $G(x,x')$ no ponto $x=x'$ temos

$$C_1 \, u(x') = C_2 \, v(x') \tag{1.9}$$

e da descontinuidade na primeira derivada em $x=x'$ temos

$$C_2 \, v'(x') - C_1 \, u'(x') = 1/p(x') \,. \tag{1.10}$$

O sistema formado pelas eq.1.9 e eq.1.10 admite uma única solução para as constantes arbitrárias C_1 e C_2 se e somente se o determinante

$$W\{u(x),v(x)\} = u(x') \, v'(x') - v(x') \, u'(\lambda') \equiv W \tag{1.11}$$

for não nulo. Esse determinante é o Wronskiano das duas soluções. Como as duas soluções são linearmente independentes o Wronskiano é diferente de zero e dado por $W=A/p(x')$ onde A é uma constante.

Solucionando-se o sistema de equações para as constantes C_1 e C_2 com $W \neq 0$ obtemos

$$C_1 = v(x')/A \quad \text{e} \quad C_2 = u(x')/A \,. \tag{1.12}$$

Substituindo-se as duas expressões acima na eq.1.8 obtemos para a função de Green

$$G(x,x') = \begin{cases} \dfrac{u(x)\ v(x')}{Wp(x')} & a \leqslant x < x' \\ \\ \dfrac{v(x)\ u(x')}{Wp(x')} & x' < x \leqslant b \end{cases} \tag{1.13}$$

Introduzindo-se na eq.1.5 $G(x,x')$ dado acima podemos verificar que $y(x)$ satisfaz a equação diferencial(1.3), ou seja,

$$y(x)\ Wp(x') = \int_a^x v(x')u(x)f(x')dx' + \int_x^b u(x')v(x)f(x')dx' \ , \tag{1.14}$$

a derivada primeira da função acima é

$$y'(x)Wp(x') = \int_a^x v(x')u'(x)f(x')dx' + \int_x^b u(x')v'(x)f(x')dx' \tag{1.15}$$

e a segunda derivada

$$y''(x) = \frac{f(\ x)}{p(x')} + \frac{1}{W\ p(x')}\{u''(x) \int_a^x v(x')f(x')dx' + v''(x) \int_x^b u(x')f(x')dx \tag{1.16}$$

Aplicando-se o operador Q em $y(x)$ na eq.1.5, e usando-se as duas últimas expressões, temos

$$Qy(x)+f(x) = \frac{Qu(x)}{W\ p(x')} \int_a^x v(x')f(x')dx' + \frac{Qv(x)}{W\ p(x')} \int_x^b u(x')f(x')dx'. \tag{1.17}$$

Como $u(x)$ e $v(x)$ são soluções linearmente independentes da eq.1.3 com $f(x')=0$, temos

$$Qu(x) = Qv(x) = 0 \,. \tag{1.18}$$

Introduzindo-se a eq.1.18 na eq.1.17, vemos que esta se reduz à eq.1.3, logo a eq.1.5 satisfaz a eq.1.3.

Verifiquemos que $y(x)$ dada pela eq.1.14 satisfaz as condições de contorno dadas nas eq.1.6 e eq.1.7.

Partindo-se da eq.1.14 e da eq.1.15, fazendo-se $x=a$, elas se reduzem a

$$y(a) = \frac{v(a)}{Wp(x')} \int_a^b u(x')f(x')dx' = Cv(a) \tag{1.19}$$

e

$$y'(a) = \frac{v'(a)}{Wp(x')} \int_a^b u(x')f(x')dx' = Cv'(a) \,. \tag{1.20}$$

Usando-se estas duas últimas expressões e lembrando-se da eq.1.6, temos

$$\alpha v(a) + \beta v'(a) = 0 \,. \tag{1.21}$$

Portanto $y(x)$ e $v(x)$ satisfazem as mesmas condições de contorno, isto se verifica de modo inteiramente análogo para $u(x)$, no ponto $x=b$.

II - PROBLEMAS UNIDIMENSIONAIS

Nesta secção efetuamos o cálculo da função de Green para a equação de Schrödinger com um potencial de Morse bem como o cálculo da função de Green para a equação diferencial associada de Legendre.

II - 1 FUNÇÃO DE GREEN PARA A EQUAÇÃO DE SCHRODINGER COM UM POTENCIAL DE MORSE

Consideremos uma molécula constituída de dois átomos de massas M_1 e M_2, respectivamente. Se as órbitas eletrônicas em cada átomo forem pouco afetadas pelo movimento dos núcleos e o átomo se mover como um todo, uma tal molécula pode ser considerada como um sistema de duas partículas movendo-se sob a influência de forças interatômicas. Esse problema de dois corpos é redutível ao movimento de uma única partícula de massa reduzida μ, movendo-se no campo de um certo potencial $U(\vec{r})$. Essa consideração nada mais é do que uma aproximação adiabática.

Foi proposto por Morse[4] que, para várias moléculas diatômicas, a função potencial fosse representada por $U(\vec{r})=U(r)=U_0\{\exp(-2(r-r_0)\alpha - 2\exp(-(r-r_0)\alpha)\}$ onde α e U_0 são constantes e o ponto $r=r_0$ constitui um mínimo do potencial. Limitar-nos-emos ao movimento unidimensional que corresponde às vibrações puras da molécula.

A função de Green para a equação de Schrödinger com um potencial de Morse satisfaz a equação

$$(H-\varepsilon)G(x,x';\varepsilon) = -\delta(x-x'). \tag{2.1}$$

onde $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ e $\varepsilon = A(e^{-2Bx} - 2e^{-Bx}) + E$ com A e B constantes.

A equação diferencial para $G(x,x';E)$ é

$$\{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - A(e^{-2Bx} - 2e^{-Bx}) + E\}G(x,x';E) = \delta(x-x') \qquad (2.2)$$

para $0 \leqslant x < \infty$.

Fazendo-se uma mudança de variável na equação acima, do tipo

$$\xi = 2\mu e^{-Bx} \qquad (2.3)$$

com $\mu^2 = \frac{2mA}{B^2\hbar^2}$ e chamando-se $\frac{2mE}{B^2\hbar^2} = -\nu^2$ teremos

$$(\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{d}{d\xi} - \frac{\nu^2}{\xi^2} + \frac{\mu}{\xi} - \frac{1}{4})G(\xi,\xi';\nu) = \frac{2m}{B^2\hbar^2\xi^2}\delta(\xi - \xi'). \qquad (2.4)$$

Vamos aplicar o método discutido na secção anterior. Devemos primeiramente resolver a equação diferencial homogênea

$$(\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{d}{d\xi} - \frac{\nu^2}{\xi^2} + \frac{\mu}{\xi} - \frac{1}{4})\,\psi(\xi) = 0 \; . \qquad (2.5)$$

Introduzindo-se $\psi(\xi) = \xi^{-1/2}\phi(\xi)$ na equação anterior, temos que $\phi(\xi)$ satisfaz a equação diferencial

$$(\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1/4 - \nu^2}{\xi^2} + \frac{\mu}{\xi} - \frac{1}{4})\,\phi(\xi) = 0 \qquad (2.6)$$

que é uma equação diferencial de Whittaker[9] cujas soluções linearmente independentes são as funções de Whittaker, ou seja,

$$\phi_1(\xi)=\mathcal{M}_{\mu;\nu}(\xi) \qquad e \qquad \phi_2(\xi)=\mathcal{W}_{\mu;\nu}(\xi) \tag{2.7}$$

onde $\phi_1(\xi)$ é regular na origem e $\phi_2(\xi)$ é regular no infinito.

As soluções da eq.2.5 são

$$u(\xi) = \xi^{-1/2}\mathcal{M}_{\mu;\nu}(\xi) \tag{2.8}$$

$$v(\xi) = \xi^{-1/2}\mathcal{W}_{\mu;\nu}(\xi) \tag{2.9}$$

onde $u(\xi)$ e $v(\xi)$ são as duas soluções linearmente independentes da equação homogênea.

O Wronskiano[9] dessas soluções é

$$W = \xi^{-1}\{\Gamma(\nu-\mu+1/2)\}^{-1} \quad . \tag{2.10}$$

A partir das eqs. 2.8, 2.9 e 2.10 e usando-se a expressão 1.13, temos

$$G(\xi,\xi';\varepsilon) = -\frac{2m}{B^2\hbar^2}\,\Gamma(\nu-\mu+1/2)\;(\xi\xi')^{-1/2}\,\mathcal{M}_{\mu;\nu}(\xi_<)\;\mathcal{W}_{\mu;\nu}(\xi_>) \tag{2.11}$$

onde $\xi_<(\xi_>)$ é o menor(maior) de ξ e ξ', respectivamente.

A expressão anterior é a solução da equação diferencial não homogênea, ou seja, é a função de Green para a equação de Schrödinger com o potencial de Morse.

Usando-se uma representação em série, conveniente, para o produto das duas funções de Whittaker[9] podemos, também, escrever a função de Green dada em 2.11 como

$$G(\xi,\xi';\varepsilon) = \frac{2m}{B^2\hbar^2} \quad (\xi\xi')^{-1/2} \cdot \tag{2.11'}$$

$$\cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\mu-\nu-n-1/2} \frac{\Gamma(2\nu+n+1)}{\Gamma(n+1)} \mathscr{M}_{n+\nu+1/2;\nu}(\xi_<) \mathscr{M}_{n+\nu+1/2;\nu}(\xi_>) \ .$$

II-2 FUNÇÃO DE GREEN PARA A EQUAÇÃO DIFERENCIAL ASSOCIADA DE LEGENDRE

Como uma segunda aplicação do método de Sturm Liouville para problemas unidimensionais vamos calcular a função de Green para a equação diferencial de Legendre.

A equação diferencial associada de Legendre é

$$\left\{ (1-z^2) \frac{d^2}{dz^2} - 2z \frac{d}{dz} + \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-z^2} \right\} \psi(z) = 0 \tag{2.12}$$

para $0 \leqslant z < \infty$.

Escrevendo-se

$$\psi(z) = \left\{\frac{1-z}{1+z}\right\}^{m/2} \phi(z) \tag{2.13}$$

temos que $\phi(z)$ satisfaz a seguinte equação diferencial

$$\left\{ (1-z^2) \frac{d^2}{dz^2} - 2(m+z) \frac{d}{dz} + \ell(\ell+1) \right\} \phi(z) = 0 \,. \tag{2.14}$$

Vamos calcular a função de Green $G(z,z')$ para a eq.2.14 que satisfaz a equação diferencial não homogênea

$$\left\{ (1-z^2) \frac{d^2}{dz^2} - 2(m+z) \frac{d}{dz} + \ell(\ell+1) \right\} G(z,z') = \delta(z-z') \tag{2.15}$$

Calculando-se a transformada de Fourier da equação anterior, obtemos no espaço de momentos

$$\{\frac{d^2}{dp^2} + \frac{2}{p}\frac{d}{dp} + 1 - \frac{2im}{p} - \frac{\ell(\ell+1)}{p^2}\} F(p,p') = -\frac{1}{pp'}\delta(p-p') . \qquad (2.16)$$

Escrevendo-se

$$F(p,p') = p^{-1} G(p,p') \qquad (2.17)$$

e substituindo-se na eq.2.16 obtemos a equação diferencial não homogênea para $G(p,p')$, ou seja,

$$\{\frac{d^2}{dp^2} + 1 - \frac{2im}{p} - \frac{\ell(\ell+1)}{p^2}\} G(p,p') = -\frac{1}{\sqrt{pp'}}\delta(p-p') \qquad (2.18)$$

Para aplicarmos o método de expansão tipo Sturm Liouville devemos encontrar as duas soluções linearmente independentes da equação diferencial homogênea

$$\{\frac{d^2}{dp^2} + 1 - \frac{2im}{p} - \frac{\ell(\ell+1)}{p^2}\}\Psi(p) = 0 \qquad (2.19)$$

A equação acima é uma equação diferencial de Whittaker[9] e tem como soluções

$$\Psi_1(p) = \mathcal{M}_{-m;\frac{2\ell+1}{2}}(2ip) \qquad (2.20)$$

$$\Psi_2(p) = \mathcal{W}_{-m;\frac{2\ell+1}{2}}(2ip) \qquad (2.21)$$

O Wronskiano[9] dessas duas soluções é

$$W = 2i\{\Gamma(1+m+\ell)\}^{-1} . \qquad (2.22)$$

Usando-se a expressão 1.13, podemos escrever para $F(p,p')$

$$F(p,p') = -\frac{1}{2i}(pp')^{-1}\Gamma(1+m+\ell)\,\mathcal{M}_{-m;\,\frac{2\ell+1}{2}}(2ip_<)\ \mathcal{W}_{-m;\,\frac{2\ell+1}{2}}(2ip_>) \cdot \qquad (2.23)$$

Usando-se uma representação integral[9] para o produto de funções de Whittaker

$$\mathcal{M}_{\nu;\mu/2}(a_2 t)\ \mathcal{W}_{\nu;\mu/2}(a_1 t) = \frac{t\sqrt{a_1 a_2}}{\Gamma(\frac{1+\mu}{2}-\nu)} \cdot$$

$$\cdot \int_0^\infty dv\ \exp\{-\frac{a_1+a_2}{2}\ t\ \mathrm{ch}v\}\ \mathrm{cth}^{2\nu}v/2\ I_\mu(t\sqrt{a_1 a_2}\,\mathrm{sh}v) \qquad (2.24)$$

com $\mathrm{Re}(\frac{1+\mu}{2}-\nu)>0$; $\mathrm{Re}(\mu)>0$ e $a_1>a_2$, podemos escrever

$$F(p,p') = -\ (pp')^{-1/2} \ .$$

$$.\ \int_0^\infty dv\ \mathrm{cth}^{-2m}v/2\ \exp\{-i(p+p')\mathrm{ch}v\}\ I_{2\ell+1}(2i\sqrt{pp'}\,\mathrm{sh}v) \qquad (2.25)$$

onde I_μ é a função modificada de Bessel.

Devemos calcular a transformada de Fourier de

$F(p,p')$. A função de Green $G(z,z')$ será dada por

$$G(z,z') = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dp \int_0^\infty dp' \exp(ipz)\ F(p,p')\ \exp(-ip'z') . \qquad (2.26)$$

Introduzindo-se a expressão 2.25 na expressão 2.26, obtemos

$$G(z,z') = -\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dv\ cth^{-2m} v/2 \int_0^\infty \frac{dp}{\sqrt{p}} \exp(-ipchv + ipz) \cdot$$

$$\cdot \int_0^\infty \frac{dp'}{\sqrt{p'}} \exp(-ip'chv - ip'z')\ I_{2\ell+1}(2i\sqrt{pp'}shv) . \qquad (2.27)$$

Calculemos primeiramente a integral em p'. Usando-se a expressão[10]

$$\int_0^\infty J_{2\nu}(at) \exp(-p^2t^2)\ dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2p} \exp\left(-\frac{a^2}{8p^2}\right) I_\nu\left(\frac{a^2}{8p^2}\right) \qquad (2.28)$$

obtemos para a integral em p'

$$I^1 = \sqrt{\pi}\ \frac{\exp(-i\pi\ell - i\pi/2)}{\{i(chv + z')\}^{1/2}} \exp\left\{-\frac{p\ sh^2 v}{2i(chv + z')}\right\} I_{\ell+1/2}\left\{\frac{p\ sh^2 v}{2i(chv + z')}\right\}$$

$$(2.29)$$

Para calcularmos a integral em p façamos uma mudança de variável do tipo

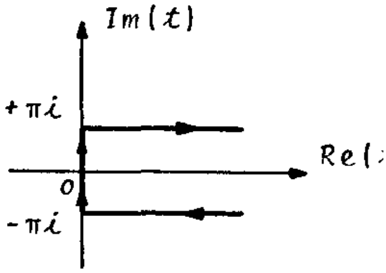
$$chv = \frac{1 + \xi^2}{1 - \xi^2} \qquad (2.30)$$

teremos para $G(z,z')$

$$G(z,z') = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i\pi\ell - i\pi/2) \int_0^1 d\xi \quad \xi^{2m-1} \quad \cdot$$

$$\cdot \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{x}} I_{\ell+1/2}(x) \exp\left\{\left[zz' + \frac{(1+z')(1-z)}{2\xi^2} + \frac{(1+z)(1-z')}{2}\xi^2\right]x\right\} \qquad (2.31)$$

onde $\quad x = \dfrac{sh^2 v}{2i(chv + z')}\, p$.



Uma nova mudança de variável do tipo $\xi = \exp(-t/2)$ nos permite fazer uma continuação analítica na expressão 2.31 e integrar segundo o contorno dado pela figura ao lado.

Podemos escrever para $G(z,z')$

$$G(z,z') = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{x}} \exp(-zz'x) \quad I_{\ell+1/2}(x) \quad \left(\frac{\alpha_+}{\beta_+}\right)^m \frac{1}{2\pi i} \int_{\infty-\pi i}^{\infty+\pi i} dt \; e^{-mt+\alpha_+\beta_+ x\,cht}$$

$$(2.32)$$

A última integral da expressão anterior nada mais é do que uma representação integral para a função modificada de Bessel[10]

$$I_\nu(y) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\infty-\pi i}^{\infty+\pi i} e^{y\,chw - \nu w}\, dw \qquad (2.33)$$

teremos para a função de Green

$$G(z,z') = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{\alpha_+}{\beta_+}\right)^m \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{x}} \exp(-zz'x) \quad I_{\ell+1/2}(x) \quad I_{-m}(\alpha_+\beta_+ x) \qquad (2.34)$$

onde $\quad \alpha_+^2 = (z-1)(z'+1) \quad$ e $\quad \beta_+^2 = (z+1)(z'-1)$;

Para resolvermos a integral da expressão anterior, lembremos[11] que

$$\int_0^\infty e^{-pt}\, t^{-1/2}\, I_\mu(at)\, I_\nu(bt) =$$

$$= \sqrt{c}\ \Gamma(\mu+\nu+1/2)\ P^{-\mu}_{\nu-1/2}(ch\alpha)\ P^{-\nu}_{\mu-1/2}(ch\beta) \qquad (2.35)$$

com $Re(p\pm a\pm b)>0$ e, sendo $sh\alpha=ac$; $sh\beta=bc$ e $ch\alpha ch\beta=pc$.

Comparando-se as duas últimas expressões, podemos escrever para a função de Green, $G(z,z')$

$$G(z,z') = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\ \left(\frac{\alpha}{\beta}_{\dagger}^{\dagger}\right)^m\ (z^2-1)^{-1/4}\ \Gamma(\ell-m+1)\ P^{-\ell-1/2}_{-m-1/2}\left(\frac{z}{\sqrt{z^2-1}}\right)\ P^m_\ell(z')\,. \qquad (2.36)$$

Podemos simplificar a expressão anterior lembrando a relação entre os polinômios de Legendre[12]

$$(z^2-1)^{-1/4}\ P^{-\nu-1/2}_{-\mu-1/2}\left(\frac{z}{\sqrt{z^2-1}}\right) = \frac{1}{\Gamma(\nu+\mu+1)}\ \sqrt{\frac{2}{\pi}}\ e^{-i\pi\mu}\ Q^\mu_\nu(z) \qquad (2.37)$$

onde $Q^\mu_\nu(z)$ é a segunda solução da equação diferencial associada de Legendre, logo

$$G(z,z') = e^{-i\pi m}\ \left(\frac{\alpha}{\beta}_{\dagger}^{\dagger}\right)^m\ \frac{\Gamma(\ell-m+1)}{\Gamma(\ell+m+1)}\ P^m_\ell(z')\ Q^m_\ell(z) \qquad (2.38)$$

mas da relação[13]

$$Q_\nu^\mu(z) = \frac{\Gamma(\nu+\mu+1)}{\Gamma(\nu-\mu+1)}\, e^{2i\pi\mu}\, Q_\nu^{-\mu}(z) \qquad (2.39)$$

obtemos para a função de Green

$$G(z,z') = \left(\frac{\alpha}{\beta}\dagger\right)^m e^{i\pi m}\, P_\ell^m(z')\, Q_\ell^{-m}(z') \quad . \qquad (2.40)$$

Lembrando-se da transformação dada pela eq. 2.13, podemos escrever, para a eq.2.12

$$G^0(z,z') = (-1)^m\, P_\ell^m(z_<)\, Q_\ell^{-m}(z_>) \qquad (2.41)$$

que é a função de Green para a equação diferencial associada de Legendre.

Podemos, também, obter o mesmo resultado lembrando-se que a eq.2.16 é uma equação similar à equação radial para o problema de Coulomb no espaço de configuração. Como mostrado por Bellandi-Caetano Neto[14], esta função de Green pode ser calculada por meio da função de Green radial para o oscilador harmônico logo, podemos escrever a representação integral para $F(p,p')$

$$F(p,p') = -\,(pp')^{-1/2}\,\cdot$$

$$\cdot \int_0^\infty dv\, \mathrm{cth}^{-2m} v/2\; e^{-i(p+p')\mathrm{ch}v}\; I_{2\ell+1}(2i\sqrt{pp'}\,\mathrm{sh}v) \qquad (2.42)$$

onde $I_{2\ell+1}$ é a função modificada de Bessel.

Para a função de Green $G(z,z')$ basta introduzir a expressão 2.42 na expressão 2.26.

Transformando-se a integral em 2.42 numa integral no plano complexo[15], usando-se a expressão 2.28 e a integral[10]

$$\int_0^\infty \frac{du}{\sqrt{u}} \exp(-ux)\ I_{\ell+1/2}(u) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, Q_\ell(x) \qquad (2.43)$$

obtemos uma representação integral para $G(z,z')$

$$G(z,z') = \left(\frac{\alpha_+}{\beta_+}\right)^m \frac{1}{2\pi i} \int_{\infty-\pi i}^{\infty+\pi i} dy\ e^{-my}\ Q_\ell(zz'-t\,ch\,y) \qquad (2.44)$$

onde $Q_\ell(x)$ é a função de Legendre de segunda espécie e $t=\alpha_+\beta_+$.

Introduzindo-se a expressão 2.43 na expressão 2.44, obtemos

$$G(z,z') = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{\alpha_+}{\beta_+}\right)^m \int_0^\infty \frac{du}{\sqrt{u}}\, e^{-uzz'}\ I_{\ell+1/2}(u)\ \cdot$$

$$\cdot\ \frac{1}{2\pi i} \int_{\infty-\pi i}^{\infty+\pi i} \exp(-my + tu\,ch\,y)\ dy\ . \qquad (2.45)$$

A segunda integral é uma representação integral para a função modificada de Bessel[10] $I_m(tu)$. a integral na variável u pode ser calculada mediante a expressão 2.35 e, usando-se a expressão 2.13 podemos escrever para a função de

Green para a equação diferencial associada de Legendre

$$G^{0}(z,z') = (-1)^{m}\, P_{\ell}^{m}(z_{<})\, Q_{\ell}^{-m}(z_{>}) \qquad (2.46)$$

dada pela expressão 2.40.

III - FUNÇÃO DE GREEN PARA A EQUAÇÃO DE SCHRODINGER COM UM POTENCIAL TIPO OSCILADOR HARMÔNICO ISOTRÓPICO

O método de expansão tipo Sturm-Liouville pode ser usado também para problemas à uma dimensão qualquer, desde que conheçamos a priori uma simetria do problema. Vamos nesta secção calcular uma representação integral para a função de Green para a equação de Schrödinger com um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico tridimensional, bem como uma representação fechada em termos das funções de Whittaker. E, finalmente, uma representação integral para a função de Green para a equação de Schrödinger com um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico multidimensional analisando, também, as suas singularidades.

III - 1 REPRESENTAÇÃO INTEGRAL

Consideremos o cálculo da função de Green para a equação de Schrödinger com um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico tridimensional.

O Hamiltoniano para tal problema é

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + \frac{kr^2}{2} . \tag{3.1}$$

A função de Green satisfaz a equação diferencial não homogênea

$$(H - E)G(\vec{r},\vec{r}\,';E) = -\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') . \tag{3.2}$$

Usando-se o Laplaciano em coordenadas esféricas, podemos escrever para a eq.3.2

$$\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \Theta^2} + \frac{\cot\Theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\Theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}) +$$

$$+ \frac{kr^2}{2} - E\} G(r,r';E) = -\frac{1}{rr'}\delta(\cos\Theta-\cos\Theta')\delta(\phi-\phi')\ \delta(r-r'). \qquad (3.3)$$

Dada a simetria esférica do problema, podemos expandir $G(\vec{r},\vec{r}';E)$ em ondas parciais(10)

$$G(\vec{r},\vec{r}';E) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\cos\gamma)\ G_\ell(r,r';E) \qquad (3.4)$$

onde $P_\ell(x)$ são os polinômios de Legendre, $\cos\gamma = \vec{r}\cdot\vec{r}'/rr'$ e $G_\ell(r,r';E)$ é a função de Green radial.

Introduzindo-se a expressão 3.4 na eq.3.2, obtemos

$$\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{\vec{L}^2}{r^2}) + \frac{kr^2}{2} - E\} \cdot$$

$$\cdot \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\cos\gamma)\ G_\ell(r,r';E) = -\frac{1}{rr'}\delta(r-r')\ \delta(\cos\Theta-\cos\Theta')\delta(\phi-\phi') \qquad (3.5)$$

onde $\vec{L}$ é o momento angular.

Usando-se o teorema de adição e a relação de completeza para os harmônicos esféricos(16)

$$P_\ell(\cos\gamma) \doteq \frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_{m=-\infty}^{+\infty} Y_\ell^m(\Theta,\phi)\; Y_\ell^{*m}(\Theta',\phi') \qquad (3.6)$$

$$\delta(\cos\Theta-\cos\Theta')\;\delta(\phi-\phi') = \sum_{\ell=0}^{\infty}\;\sum_{m=-\infty}^{\infty} Y_\ell^m(\Theta,\phi)\; Y_\ell^{*m}(\Theta',\phi') \qquad (3.7)$$

obtemos a seguinte equação diferencial para a função de Green radial

$$\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}) + \frac{kr^2}{2} - E + \frac{\hbar^2}{2\mu}\,\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\}\; G_\ell(r,r';E) = -\frac{1}{rr'}\;\delta(r-r'). \qquad (3.8)$$

Fazendo-se uma mudança de variável $z^2 = \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2$ na equação anterior, obtemos

$$\{\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z}\frac{d}{dz} - z^2 + 2\lambda - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2}\}\; g(z,z';\lambda) = \frac{1}{zz'}\;\delta(z-z') \qquad (3.9)$$

onde $\lambda = E/h\omega$, $\omega^2 = k/\mu$ e $g(z,z';\lambda)$ está dado por

$$g(z,z';\lambda) = (\frac{\hbar^5}{4\mu^3\omega})^{1/2}\; G(z,z';E)\;. \qquad (3.10)$$

Agora estamos em condições de aplicar o método de expansão tipo Sturm-Liouville discutido na secção I, para isso necessitamos das duas soluções linearmente independentes da equação diferencial homogênea

$$\{\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z}\frac{d}{dz} - z^2 + 2\lambda - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2}\}\;\psi(z) = 0\;. \qquad (3.11)$$

Introduzindo-se $\psi(z) = z^{-3/2}\Phi(z)$ na equação anterior, obtemos

$$\left\{\frac{d^2}{dz^2} - \frac{1}{z}\frac{d}{dz} + \frac{3/4 - \ell(\ell+1)}{z^2} - z^2 + 2\lambda\right\} \Phi(z)=0. \qquad (3.12)$$

Na equação acima façamos uma mudança de variável do tipo $z^2=x$, $\Phi(x)$ satisfaz a equação

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + \frac{3/4 - \ell(\ell+1)}{4x^2} - \frac{1}{4} + \frac{\lambda}{2x}\right\} \Phi(x)=0, \qquad (3.13)$$

que é uma equação diferencial de Whittaker[9] e tem como soluções as funções de Whittaker

$$\Phi_1(x) = \mathcal{M}_{\lambda/2;\ \frac{2\ell+1}{4}}(x) \qquad (3.14)$$

$$\Phi_2(x) = \mathcal{W}_{\lambda/2;\ \frac{2\ell+1}{4}}(x)\ . \qquad (3.15)$$

Voltando-se à variável z, temos que as duas soluções linearmente independentes da eq.3.11, sendo uma regular na origem e a outra no infinito, são

$$u(z) = z^{-3/2}\ \mathcal{M}_{\lambda/2;\ \frac{2\ell+1}{4}}(z^2) \qquad (3.16)$$

$$v(z) = z^{-3/2}\ \mathcal{W}_{\lambda/2;\ \frac{2\ell+1}{4}}(z^2). \qquad (3.17)$$

O Wronskiano[7] dessas duas soluções é

$$W = 2z^{-2} \{\Gamma(\frac{2\ell+3-2\lambda}{4})\}^{-1} . \quad (3.18)$$

Com as três últimas expressões e lembrando-se da expressão 1.13, podemos escrever para $g(z,z';\lambda)$

$$g(z,z';\lambda) = \frac{1}{2} \Gamma(\frac{2\ell+3-2\lambda}{4}) (zz')^{-3/2} \mathscr{M}_{\lambda/2;\frac{2\ell+1}{4}}(z^2) \mathscr{W}_{\lambda/2;\frac{2\ell+1}{4}}(z'^2) . \quad (3.19)$$

Voltando-se a variável r, temos

$$G_\ell(r,r';E) = \frac{(rr')^{-3/2}}{\hbar} \Gamma(\frac{2\ell+3-2\lambda}{4}) \mathscr{M}_{\lambda/2;\frac{2\ell+1}{4}}(\frac{\mu\omega}{\hbar}r^2) \mathscr{W}_{\lambda/2;\frac{2\ell+1}{4}}(\frac{\mu\omega}{\hbar}r^2) \quad (3.20)$$

que é a função de Green radial.

Para determinarmos a função de Green total, introduzimos a expressão 3.20 na expressão 3.4. Usando-se uma representação integral para o produto das funções de Whittaker[9] dada pela expressão 2.24, obtemos

$$G(\vec{r},\vec{r}';E) = \mu\hbar^{-2} (rr')^{-1/2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\cos\gamma) \cdot \quad (3.21)$$

$$\cdot \int_0^\infty dv \, cth^\lambda v/2 \, \exp\{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}(r^2+r'^2) chv\} \, I_{\ell+1/2}(\frac{\mu\omega}{\hbar} rr' shv) .$$

Fazendo-se uma mudança de variável do tipo 2.30, obtemos, já invertendo o signo de integral com o de somatório

$$G(\vec{r},\vec{r}\,';E) = \frac{\mu(rr')^{-1/2}}{\pi\hbar^2} \int_0^1 d\xi\ \xi^{-\lambda}(1-\xi^2)^{-1}\ \exp\{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}(r^2+r'^2)\ (\frac{1+\xi^2}{1-\xi^2})\}\ \cdot$$

$$\cdot \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2}\ P_\ell(\cos\gamma)\ I_{\ell+1/2}(\frac{2\mu\omega}{\hbar}rr'\ \frac{\xi}{1-\xi^2})\ . \qquad (3.22)$$

Para efetuarmos esta soma usamos uma expansão tipo Neumann(13)

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2}\ P_\ell(\cos\gamma)\ I_{\ell+1/2}(z) = (\frac{z}{2})^{1/2}\ \frac{\exp(z\cos\gamma)}{\Gamma(1/2)}\ . \qquad (3.23)$$

Introduzindo-se a expressão 3.23 na expressão 3.21, podemos escrever

$$G(\vec{r},\vec{r}\,';E) = \frac{1}{\hbar\omega}\ (\frac{\mu\omega}{\pi\hbar})^{3/2}\ \exp(-\frac{\mu\omega}{\hbar}\ \frac{r^2+r'^2}{2})\ \cdot$$

$$\cdot \int_0^1 d\xi\ \xi^{-\lambda+1/2}(1-\xi^2)^{-3/2}\ \exp[\{\frac{2\vec{r}\cdot\vec{r}\,'\xi - (\vec{r}^{\,2}+\vec{r}\,'^2)\xi^2}{1-\xi^2}\}\frac{\mu\omega}{\hbar}] \qquad (3.24)$$

com $Re(\frac{3+2\ell-2\lambda}{4})>0$ e $Re(\ell+1/2)>0$.

A expressão anterior é uma representação integral para a função de Green total para a equação de Schrödinger com um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico tridimensional. Esta expressão é a mesma que a encontrada por Bellandi-Caetano Neto(7), via fórmula de Mehler generalizada.

Para compararmos os dois métodos podemos usar na expressão 3.20 o seguinte teorema de adição para o produto de funções de Whittaker[9]

$$\Gamma(-\nu+\mu+1/2)\,\mathcal{M}_{\nu;\mu}(x)\,\mathcal{W}_{\nu;\mu}(y) =$$

$$= -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\nu-\mu-n-1/2}\;\frac{\Gamma(2\mu+n+1)}{n!}\,\mathcal{M}_{n+\mu+1/2;\mu}(x)\;\mathcal{M}_{n+\mu+1/2;\mu}(y) \tag{3.25}$$

e lembrar que a função de Whittaker $\mathcal{M}$ está relacionada com os polinômios de Laguerre pela relação[9].

$$\mathcal{M}_{n+1/2+\mu/2;\mu/2}(z) = \frac{n!}{\Gamma(1+n+\mu)}\; z^{\frac{1+\mu}{2}}\; e^{-z^2/2}\; L_n^{\mu}(z) \tag{3.26}$$

e comparando-se com a função de onda radial do oscilador harmônico isotrópico tridimensional[17], podemos transformar a expressão 3.4 em

$$G(\vec{r},\vec{r}\,';E) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{E_n - E}\;\psi_n(\vec{r})\;\psi_n^*(\vec{r}\,') \tag{3.27}$$

que é a usual decomposição espectral da função de Green em termos de funções de onda.

III - 2 REPRESENTAÇÃO FECHADA EM TERMOS DE FUNÇÕES DE WHITTAKER

Podemos escrever a função de Green total $G(\vec{r},\vec{r}\,';E)$ dada na expressão 3.21 na forma[15]

$$G(\vec{r},\vec{r}\,';E) = -\frac{\mu(rr')^{-1/2}}{\pi\hbar^2}\frac{1}{2\pi i}\int_{\infty}^{1+} dy\,(y+1)^{\frac{\lambda}{2}-\frac{1}{2}}(y-1)^{-\frac{\lambda}{2}-\frac{1}{2}}e^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{r^2+r'^2}{2}y}\,\cdot$$

$$\cdot\sum_{\ell=0}^{\infty}\{\frac{2\ell+1}{4}P_\ell(\cos\gamma)\Gamma(\frac{2\ell+3-2\lambda}{4})\exp[i\pi(\lambda/2-\ell/2+1/4)]\,\cdot$$

$$\cdot\,\Gamma(\lambda/2-\ell/2+1/4)\,I_{\ell+1/2}(\frac{\mu\omega}{\hbar}rr'\sqrt{y^2-1})\} \qquad (3.28)$$

onde o contorno de integração começa em $y=\infty$, contorna o eixo real positivo até o ponto à direita de $y=+1$, circula o ponto $y=+1$ no sentido positivo e volta ao longo do eixo real positivo até $y=\infty$.

Para escrevermos a expressão anterior usamos o fato que o produto das duas funções de Whittaker[15] pode ser escrito como

$$\mathcal{M}_{\nu;\mu}(x)\mathcal{W}_{\nu;\mu}(y)=-xy\,\exp\{i\pi(\nu-\mu+1/2)\}\,\Gamma(\nu-\mu+1/2)\,\cdot$$

$$\cdot\frac{1}{2\pi i}\int_{\infty}^{1+}dv\,(v+1)^{\nu-1/2}(v-1)^{-\nu-1/2}\exp(-\frac{x+y}{2}v)\,I_{2\mu}(xy\sqrt{v^2-1}) \qquad (3.29)$$

com $y>x>0$ e $-\nu+\frac{1}{2}(1+2\mu)\neq 1,2\ldots.$

Usando-se as propriedades da função gama[13], podemos escrever para a soma que aparece em 3.28

$$S = \pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4} P_{\ell}(\cos\gamma) \frac{\exp\{i\pi(\lambda/2-\ell/2+1/4)\}}{\mathrm{sen}\{\pi(\lambda/2-\ell/2+1/4)\}} I_{\ell+1/2}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} rr'\sqrt{y^2-1}\right). \tag{3.30}$$

Para efetuarmos essa soma vamos separá-la numa soma somente de ℓ-pares e numa outra somente de ℓ-ímpares, lembrando-se das seguintes relações para os polinômios de Legendre[13]

$$P_{2n}(z) = \frac{\pi^{1/2}}{n!\Gamma(1/2-n)}\ {}_2F_1(-n,n+1/2,1/2;z^2) \tag{3.31}$$

$$P_{2n+1}(z) = -\frac{2z\pi^{1/2}}{n!\ \Gamma(-1/2-n)}\ {}_2F_1(-n,n+3/2,3/2;z^2) \tag{3.32}$$

onde ${}_2F_1$ são as funções hipergeométricas.

Calculemos de forma explícita a soma com ℓ-par, $\ell=2n$

$$S_p = \pi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4n+1}{4} P_{2n}(x) \frac{\exp\{i\pi(\lambda/2-n+1/4)\}}{\mathrm{sen}\{\pi(\lambda/2-n+1/4)\}} I_{2n+1/2}(\beta) \tag{3.33}$$

onde $x=\cos\gamma$ $\quad \beta=\frac{\mu\omega}{\hbar}rr'\sqrt{y^2-1}$.

Usando-se uma outra expansão tipo Neumann[10] para as funções modificadas de Bessel

$$\left(\tfrac{1}{2}kz\right)^{\mu-\nu} I_{\nu}(kz) = k^{\mu} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\Gamma(\mu+n)}{\Gamma(\nu+1)} (2n+\mu)\ {}_2F_1(-n,n+\mu,\nu+1;k^2)\, I_{2n+\mu}(z) \tag{3.34}$$

encontramos para a soma S_p a expressão

$$S_p = \frac{\pi}{4}\,\frac{\exp\{\pi i(\lambda/2+1/4)\}}{sen\{\pi(\lambda/2+1/4)\}}\,x^{1/2}\ \beta\ I_{-1/2}(x\beta)\ . \tag{3.35}$$

De maneira inteiramente análoga, encontramos para a soma S_i, com ℓ-ímpar,

$$S_i = -\frac{\pi}{4}\,\frac{\exp\{\pi i(\lambda/2-1/4)\}}{sen\{\pi(\lambda/2-1/4)\}}\,x^{1/2}\ \beta\ I_{1/2}(x\beta)\ . \tag{3.36}$$

Usando-se a seguinte relação para a função modificada de Bessel[10]

$$\sqrt{x}\ \beta I_{\pm 1/2}(x\beta) = \frac{d}{dx}\{\sqrt{x}\ I_{\mp 1/2}\ (x\beta)\} \tag{3.37}$$

podemos escrever para a soma total, $S=S_p+S_i$

$$S=\frac{\pi}{4}\,\frac{d}{dx}\{\sqrt{x}\ \frac{\exp[\pi i(\lambda/2+1/4)]}{sen[\pi(\lambda/2+1/4)]}I_{1/2}(x\beta)\ -\sqrt{x}\ \frac{\exp[\pi i(\lambda/2-1/4)]}{sen[\pi(\lambda/2-1/4)]}I_{-1/2}(x\beta)\}\ . \tag{3.38}$$

Introduzindo-se a expressão 3.38 na expressão 3.28, obtemos

$$G(\vec{r},\vec{r}\,';E) = -\frac{\mu(rr')^{-1/2}}{\pi\hbar^2}\,\frac{1}{2\pi i}\int_{\infty}^{1+} dy\ (y+1)^{\frac{\lambda}{2}-\frac{1}{2}}(y-1)^{-\frac{\lambda}{2}-\frac{1}{2}}\ e^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\,\frac{r^2+r'^2}{2}\,y}\ \cdot S \tag{3.39}$$

Como na soma, vamos separar a integral dada na expressão anterior em duas integrais, calcularemos a primeira explicitamente, sendo a segunda calculada de modo inteiramente análogo, logo

$$I_1 = -\frac{\mu (rr')^{-1/2}}{4\hbar^2} \frac{\exp\{\pi i(\lambda/2+1/4)\}}{\operatorname{sen}\{\pi(\lambda/2+1/4)\}} \frac{d}{dx}\{\sqrt{x}\ \frac{1}{2\pi i}\ \cdot$$

$$\cdot \int_{\infty}^{1+} dy\ (y+1)^{\frac{\lambda}{2}-\frac{1}{2}} (y-1)^{-\frac{\lambda}{2}-\frac{1}{2}} \exp(-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{r^2+r'^2}{2}y)\ I_{1/2}(x\frac{\mu\omega}{\hbar} rr'\sqrt{y^2-1})\}. \qquad (3.40)$$

Definindo-se

$$2\xi = \sqrt{|\vec{r}'+\vec{r}|^2} - \sqrt{|\vec{r}'-\vec{r}|^2} \quad e \quad 2\xi' = \sqrt{|\vec{r}'+\vec{r}|^2} + \sqrt{|\vec{r}'-\vec{r}|^2} \qquad (3.41)$$

podemos escrever

$$\vec{r}^2+\vec{r}'^2 = \xi^2+\xi'^2 \qquad e \qquad \vec{r}\cdot\vec{r}' = \xi\xi' = rr'\cos\theta\ . \qquad (3.42)$$

Introduzindo-se as expressões dadas em 3.42 na expressão 3.40, obtemos

$$I_1 = -\frac{\mu}{4\hbar^2} \frac{\exp\{\pi i(\lambda/2+1/4)\}}{\operatorname{sen}\{\pi(\lambda/2+1/4)\}} \frac{d}{d(\xi\xi')}\{\sqrt{\xi\xi'}\ \frac{1}{2\pi i}\ \cdot$$

$$\cdot \int_{\infty}^{1+} dy\ (y+1)^{\frac{\lambda}{2}-\frac{1}{2}} (y-1)^{-\frac{\lambda}{2}-\frac{1}{2}} \exp(-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{\xi^2+\xi'^2}{2}y)\ I_{1/2}(\frac{\mu\omega}{\hbar}\xi\xi'\sqrt{y^2-1})\}. \qquad (3.43)$$

Comparando-se a última expressão com a expressão 3.29, obtemos para a primeira integral

$$I_1 = \frac{1}{4\pi\hbar\omega}\Gamma(3/4-\lambda/2)\ \frac{d}{d(\xi\xi')}\{\frac{1}{\sqrt{\xi\xi'}}\mathcal{M}_{\lambda/2;1/4}(\frac{\mu\omega}{\hbar}\xi^2)\ \mathcal{W}_{\lambda/2;1/4}(\frac{\mu\omega}{\hbar}\xi'^2)\}. \qquad (3.44)$$

Analogamente, teremos para a segunda integral

$$I_2 = \frac{1}{4\pi\hbar\omega}\,\Gamma(1/4-\lambda/2)\;\frac{d}{d(\xi\xi')}\left\{\frac{1}{\sqrt{\xi\xi'}}\,\mathcal{M}_{\lambda/2;-1/4}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\xi^2\right)\,\mathcal{W}_{\lambda/2;-1/4}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\xi'^2\right)\right\}. \qquad (3.45)$$

A função de Green total para a equação de Schrödinger com um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico tri-dimensional em termos das funções de Whittaker é

$$G(\xi,\xi';E) = \frac{1}{4\pi\hbar\omega}\;\frac{d}{d(\xi\xi')}\,\cdot$$

$$\cdot\left\{\frac{\Gamma(-\lambda/2+3/4)}{\sqrt{\xi\xi'}}\,\mathcal{M}_{\lambda/2;1/4}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\xi^2\right)\,\mathcal{W}_{\lambda/2;1/4}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\xi'^2\right)\right. +$$

$$\left.+\,\frac{\Gamma(-\lambda/2+1/4)}{\sqrt{\xi\xi'}}\,\mathcal{M}_{\lambda/2;-1/4}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\xi^2\right)\,\mathcal{W}_{\lambda/2;-1/4}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\xi'^2\right)\right\}. \qquad (3.46)$$

III - 3 REPRESENTAÇÃO INTEGRAL PARA A FUNÇÃO DE GREEN PARA A EQUAÇÃO DE SCHRODINGER COM UM POTENCIAL TIPO OSCILADOR HARMÔNICO ISOTRÓPICO MULTIDIMENSIONAL

O Hamiltoniano para esse problema é

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_N^2 + \frac{kr^2}{2} \tag{3.47}$$

onde ∇_N^2 é o Laplaciano[13] a uma dimensão N.

A função de Green satisfaz a equação diferencial não homogênea

$$(H - E)\, G^N(\vec{r},\vec{r}\,';E) = -\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \,. \tag{3.48}$$

Dada a simetria esférica do problema, podemos expandir $G^N(\vec{r},\vec{r}\,';E)$ em ondas parciais[18] $(N\geq 3)$

$$G^N(\vec{r},\vec{r}\,';E) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \pi^{-N/2}\, \frac{\Gamma(N/2)}{N-2}\, (\ell-1+N/2)\, C_\ell^{\frac{N-2}{2}}(\cos\theta)\, G_\ell(r,r';E) \tag{3.49}$$

onde $C_\ell^n(x)$ são os polinômios de Gegembauer e $G_\ell(r,r';E)$ é a função de Green radial.

Usando-se o teorema de adição para os hiper-esféricos harmônicos[13], $Y_\ell^n(\vec{u})$

$$\sum_{\alpha=1}^{h(\ell,N)} Y_\ell^\alpha(\vec{u}_2)\, Y_\ell^{*\alpha}(\vec{u}_1) = \pi^{-N/2}\, \frac{\Gamma(N/2)}{N-2}\, (\ell+N/2-1)\, C_\ell^{\frac{N-2}{2}}(\vec{u}_2\cdot\vec{u}_1) \tag{3.50}$$

onde $h(\ell,N) = \frac{(2\ell+N-2)(\ell+N-3)}{\ell!\ (N-2)!}$ com $N=3,4,5,\ldots.$, bem como a relação de completeza para os hiperesféricos harmônicos[13]

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^{h(\ell,N)} Y_\ell^\alpha(\vec{u}_2)\ Y_\ell^\alpha(\vec{u}_1)^* = \delta(\Omega-\Omega') \tag{3.51}$$

onde Ω é uma hipersuperfície, podemos escrever a equação para a função de Green radial

$$\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{N-1}{r}\frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+N-2)}{r^2}] - E + \frac{kr^2}{2}\}\ G_\ell(r,r';E) =$$

$$= -(rr')^{\frac{1-N}{2}}\ \delta(r-r') \ . \tag{3.52}$$

Para esta equação aplicamos o método de expansão tipo Sturm-Liouville. Fazendo-se uma mudança de variável do tipo

$$r^2 = \frac{\hbar}{\mu\omega} z^2 \tag{3.53}$$

e definindo-se $G_\ell(z,z';E) = \frac{2}{\hbar\omega}(\frac{\hbar}{\mu\omega})^{-N/2}\ g(z,z';\lambda)$ com $\mu\omega^2=k$ e $\lambda=E/\hbar\omega$ obtemos

$$\{\frac{d^2}{dz^2} + \frac{N-1}{z}\frac{d}{dz} - \frac{\ell(\ell+N-2)}{z^2} + 2\lambda - z^2\}\ g(z,z';\lambda) = (zz')^{\frac{1-N}{2}}\ \delta(z-z') \ . \tag{3.54}$$

Para aplicarmos o método, devemos primeiramente encontrar as duas soluções linearmente independentes da equação diferencial homogênea

$$\left\{\frac{d^2}{dz^2} + \frac{N-1}{z}\frac{d}{dz} - \frac{\ell(\ell+N-2)}{z^2} + 2\lambda - z^2\right\}\psi(z)=0 \; . \qquad (3.55)$$

Fazendo-se a mudança do tipo $\psi(z)=z^{-N/2}\,\phi(z)$, temos que $\phi(z)$ satisfaz a seguinte equação diferencial

$$\left\{\frac{d^2}{dz^2} - \frac{1}{z}\frac{d}{dz} + \frac{1-(\ell+N/2-1)^2}{z^2} + 2\lambda - z^2\right\}\phi(z)=0 \qquad (3.56)$$

que pode ser identificada com a equação diferencial de Whittaker bastando, para isso, uma mudança do tipo $z^2 = x$, logo,

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1-(\ell+N/2-1)^2}{4x^2} + \frac{\lambda}{2x} - \frac{1}{4}\right\}\phi(x)=0 \qquad (3.57)$$

cujas soluções são as funções de Whittaker

$$\phi_1(x) = \mathcal{M}_{\lambda/2;\frac{1}{2}(\ell+N/2-1)}(x) \quad e \quad \phi_2(x) = \mathcal{W}_{\lambda/2;\frac{1}{2}(\ell+N/2-1)}(x) \; . \qquad (3.58)$$

Na variável z as duas soluções linearmente independentes da equação 3.54 são

$$u(z) = z^{-N/2}\,\mathcal{M}_{\lambda/2;\frac{1}{2}(\ell+N/2-1)}(z^2) \qquad (3.59)$$

$$v(z) = z^{-N/2}\,\mathcal{W}_{\lambda/2;\frac{1}{2}(\ell+N/2-1)}(z^2) \; . \qquad (3.60)$$

O Wronskiano[9] dessas duas soluções é

$$W = 2z^{1-N}\ \{\Gamma(\frac{2\ell+N-2\lambda}{4})\}^{-1}\ . \qquad (3.61)$$

A partir das três últimas expressões e usando-se a expressão 1.13, podemos escrever

$$G_\ell(r,r';E) = \frac{1}{\hbar\omega}\,(rr')^{-N/2}\ \Gamma(\frac{2\ell+N-2\lambda}{4})\,\cdot$$

$$\cdot\ \mathcal{M}_{\lambda/2;\frac{1}{2}(\ell+N/2-1)}(\frac{\mu\omega}{\hbar}r^2)\ \mathcal{W}_{\lambda/2;\frac{1}{2}(\ell+N/2-1)}(\frac{\mu\omega}{\hbar}r^2)$$

$$(3.62)$$

que é a função de Green radial para o oscilador harmônico isotrópico multidimensional.

Para determinarmos a função de Green total escrevemos o produto das duas funções de Whittaker numa representação integral[9] do tipo 2.24,

$$G_\ell(r,r';E) = \frac{\mu}{\hbar^2}\,(rr')^{-N/2+1}\ \cdot$$

$$\cdot\ \int_0^\infty e^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{r^2+r'^2}{2}ch\upsilon}\ I_{\ell+N/2-1}(\frac{\mu\omega}{\hbar}rr'sh\upsilon)\ cth^\lambda\upsilon/2\ d\upsilon.$$

$$(3.63)$$

Fazendo-se uma mudança de variável, como a da expressão 2.30, obtemos

$$G_\ell(r,r';E) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\,(rr')^{-N/2+1}\ \cdot \qquad (3.64)$$

$$\cdot\ \int_0^1 d\xi\ \frac{\xi^{-\lambda}}{1-\xi^2}\ e^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{r^2+r'^2}{2}(\frac{1+\xi^2}{1-\xi^2})}\ I_{\ell+N/2-1}(\frac{2\mu\omega}{\hbar}rr'\ \frac{\xi}{1-\xi^2})$$

Introduzindo-se a expressão 3.64 na expressão 3.49, teremos para a função de Green total

$$G^N(\vec{r},\vec{r}\,';E) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\pi^{-N/2}(rr')^{-N/2+1}\int_0^1 d\xi\frac{\xi^{-\lambda}}{1-\xi^2}\,e^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{r^2+r'^2}{2}\left(\frac{1+\xi^2}{1-\xi^2}\right)}\cdot$$
$$\cdot\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{\Gamma(N/2)}{N-2}(\ell-1+N/2)\,C_\ell^{\frac{N-2}{2}}(\cos\theta)\,I_{\ell+N/2-1}\left(\frac{2\mu\omega}{\hbar}rr'\frac{\xi}{1-\xi^2}\right). \tag{3.65}$$

Para efetuarmos a soma na expressão anterior, façamos uso da expansão tipo Neumann(10)

$$\sum_{\ell=0}^{\infty}(\ell+N/2-1)\,C_\ell^{\frac{N-2}{2}}(\cos\theta)\,I_{\ell+N/2-1}(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^{\frac{N-2}{2}}\frac{\exp(z\cos\theta)}{\Gamma(N/2-1)} \tag{3.66}$$

e usando-se as propriedades da função gama(13), podemos escrever a expressão para $G^N(\vec{r},\vec{r}\,';E)$

$$G^N(\vec{r},\vec{r}\,';E) = \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{N/2} e^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{\vec{r}^{\,2}+\vec{r}\,'^2}{2}}\cdot$$
$$\cdot\int_0^1 d\xi\,\xi^{-\lambda+\frac{N}{2}-1}(1-\xi^2)^{-N/2}\,e^{\frac{\mu\omega}{\hbar}\left(\frac{2\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{1-\xi^2}\xi-\frac{\vec{r}^{\,2}+\vec{r}\,'^2}{1-\xi^2}\xi^2\right)} \tag{3.67}$$

com $Re(-\lambda+N/2)>0$.

A expressão acima é a função de Green total para a equação de Schrödinger com um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico multidimensional e coincide com a expressão obtida por Bellandi-Caetano Neto(7), via fórmula de Mehler generalizada.

III - 4 ESTUDO DAS SINGULARIDADES DA FUNÇÃO DE GREEN PARA O OSCILADOR HARMÔNICO ISOTRÓPICO MULTIDIMENSIONAL

Devemos mostrar que as singularidades da função de Green para a equação de Schrödinger com um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico multidimensional são do tipo $|\vec{r}\,'-\vec{r}|^{-(N-2)}$.

Fazendo-se $\vec{\Delta} = \vec{r}\,'-\vec{r}$ e substituindo-se na expressão 3.67, levando-se em conta somente o integrando, teremos .

$$I = \int_0^1 d\xi \; \xi^{-\lambda+N/2-1} (1-\xi^2)^{-N/2} \exp\{\frac{2\vec{r}^{\,2}\xi}{1+\xi} + \frac{2\vec{r}\cdot\vec{\Delta}\xi}{1+\xi} - \frac{\vec{\Delta}^2\xi^2}{1-\xi^2}\} \;.$$

Com uma mudança de variável do tipo

$$x = \frac{\xi^2}{1-\xi} \vec{\Delta}^2$$

podemos escrever para o integrando

$$I = \frac{1}{2}\,\Delta^{-(N-2)} \int_0^1 dx \; (x+\Delta)^{\lambda/2+N/4-1} \; x^{-\lambda/2+N/4-1} \; \exp\{f(x,\Delta) - x\}$$

onde $f(x,\Delta)$ é uma função não singular.

No limite $\Delta\to 0$, a integral em x é convergente, portanto as singularidades são do tipo $|\vec{r}\,'-\vec{r}|^{-(N-2)}$, as mesmas singularidades do Laplaciano.

Discutiu-se neste trabalho o cálculo da função de Green para a equação de Schrödinger com o potencial de Morse e com o potencial tipo oscilador harmônico isotrópico. Calculou-se também, a função de Green para a equação diferencial associada de Legendre.

O cálculo dessas funções de Green foi efetuado utilizando-se o método de expansão tipo Sturm-Liouville ou de Lagrange, onde a função de Green, solução da equação diferencial não homogênea, é obtida a partir das duas soluções linearmente independentes da equação diferencial homogênea.

Em geral este método é aplicável a problemas unidimensionais. Assim, efetuamos o cálculo da função de Green para a equação de Schrödinger com o potencial de Morse em termos das funções de Whittaker.

O cálculo da função de Green para a equação diferencial associada de Legendre foi efetuado por dois métodos diferentes. Primeiramente calculamos a função de Green no espaço de momento usando-se o método de expansão tipo Sturm-Liouville, calculando a antitransformada de Fourier para a obtenção da função de Green no espaço de configuração. A mesma função de Green foi calculada observando que a equação diferencial no espaço de momento é formalmente idêntica à equação radial para o problema de Kepler ou potencial Coulombiano.

Devemos ainda observar que essa função de Green pode ser calculada diretamente no espaço de configuração pelo método de expansão tipo Sturm-Liouville, uma vez que as duas soluções linearmente independentes são conhecidas.

O procedimento anterior foi escolhido para ressaltar a viabilidade de cálculos de funções de Green via função de Green para um oscilador harmônico isotrópico[7].

Efetuou-se, também, o cálculo da função de Green para o oscilador harmônico isotrópico tridimensional, obtendo-se uma representação integral, bem como uma expressão fechada para a função de Green em termos das funções de Whittaker. Ressaltamos aqui a importância da função de Green na representação fechada, uma vez que não temos a restrição no parâmetro de energia que encontramos na representação integral devido à convergência da integral.

Como uma extensão deste método a uma dimensão genérica N, efetuamos o cálculo da função de Green para a equação de Schrödinger com o potencial tipo oscilador harmônico isotrópico multidimensional, obtendo-se uma representação integral fechada.

O método de expansão tipo Sturm-Liouville para cálculo de funções de Green é bastante poderoso pois obtém-se representações fechadas para a função de Green que são analíticas na região de interesse do plano complexo, prestando para se estender a cálculos para equações relativísticas.

Um exemplo, é o cálculo da função de Green para a equação de Dirac com um potencial Coulombiano como efetuado por Martin & Glauber[19].

Outro exemplo é o caso do cálculo do propagador para um elétron livre de Dirac na presença de um campo magnético uniforme, realizado por Bellandi-Caetano-Pavão[3]. Esse propagador tem aplicações em cálculos de processos eletromagnéticos envolvendo elétrons na presença de campos magnéticos intensos, como os processos de produção de neutrinos na superfície de estrelas de nêutrons[20].

Uma continuação natural deste trabalho seria calcular a função de Green para certas funções especiais da física matemática, por exemplo, para as funções de Jacobi, Tchebichef e Gegembauer. Essas funções são, bem como a própria função de Legendre, soluções particulares da equação diferencial para o pião simétrico, conforme valores específicos atribuídos aos parâmetros da equação diferencial.

As soluções da equação diferencial para o pião simétrico em termos dos ângulos de Euler constituem representações irredutíveis do grupo de rotações[21]. Calculando-se a função de Green primeiramente no espaço de momento, usando-se o método de expansão tipo Sturm-Liouville, bem como do procedimento via função de Green do oscilador harmônico isotrópico, nos permitem estabelecer teoremas de adição para essas representações irredutíveis do grupo de rotações. Esses cálculos já estão sendo realizados.

1. L.C. Hostler, J.Math. Phys., 11, 2966(1970).
2. J.Bellandi Filho e A.H. Zimerman, Lett. Nuovo Cimento, 14, 520(1975).
3. J.Bellandi Filho, E.S. Caetano Neto e S.M.L.Pavão, The Green's function of a relativistic free-eletron in a uniform magnetic field, Revista Brasileira de Física(1978).
4. P.M.Morse, Physical Review, 34, 57(1929).
5. Titchmarsh, E.C., Eigenfunction Expansion Associated with Second-Order Diferencial Equation(Oxford-Clarendon-1946).
6. V.L. Bakhrakh, S.I. Vetchinkin e S.V. Kristenko, Teor.Mat. Fiz., 12, 223(1972).
7. J.Bellandi Filho e E.S.Caetano Neto, J. Phys. A Math.Gen., 9, 683(1976).
8. Arfken, G., Mathematical Methods for Physicists - Academic Press - 2º Edição (1970).
9. Buchholz, H., The Confluent Hypergeometric Function(Springer - Verlag - Berlin - 1969).
10. Watson, G.N., A Treatise on the Theory of Bessel Function 2º Edição (Cambridge at the University Press - 1966).
11. Bateman Manuscript Projects, Tables of Integral Transforms Edited by A. Erdélyi (vol.1-2-3), (New York-NY-1954).
12. Abramowitz, M. & Stegun, I.A., Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications, 5º Edição, N.Y. (1968).
13. Bateman Manuscript Projects, Higher Transcedental Function Edited by A. Erdélyi (vol.1-2), (New York-NY-1953).
14. J.Bellandi Filho e E.S.Caetano Neto, Lett. al Nuovo Cimento, 16, 331(1976).
15. L.C. Hostler, J. Math. Phys., 5, 591(1964).
16. Messiah, A., Mecanica Cuantica, (vol.1e2), (Editorial Tecnos S.A., 2º Edição, 1973).

17. Powell, J.L. & Crasemann, B., Quantum Mechanics (Addison-Wesley - Londres - 1961).

18. Ver referência 13, bem como apêndice da referência 1.

19. P.C. Martin and R.J. Glauber, Phys. Rev., 109, 1307(1958).

20. Pavão, S.M.L., Tese de Mestrado, Instituto de Física Teórica - São Paulo (1978).

21. Talman, J.D., Special Functions, (W.A. Benjamin, Inc. 1968).