

O OPERADOR DE EVOLUÇÃO TEMPORAL E A
FUNÇÃO DE GREEN PARA O POTENCIAL $1/r$ BIDIMENSIONAL

Candidato: Hamilton Germano Pavão

Orientador: Prof. Dr. José Bellandi Filho

Tese apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Ciências

julho/1983

SUMMARY

Utilizing the operator of temporal evolution and the method of time ordering, the propagators for a free particle and for a harmonic oscillator are calculated.

Also, a connection between the propagator for a bi-dimensional potential of the type $1/r$ and a propagator of a bi-dimensional harmonic oscillator is established.

Through an adequate transformation of co-ordinates, the operator of temporal evolution for a problem with a potential $1/r$ is transformed into an operator of temporal evolution for a harmonic oscillator where a determination of the propagator is done utilizing the technique of time ordering.

Also, an addition theorem, for the associated Legendre functions is demonstrated.

RESUMO

Utilizando-se o operador de evolução temporal e o método de ordenação temporal, calcula-se os propagadores para uma partícula livre e para o oscilador harmônico.

Estabelece-se, também, a conexão entre o propagador para um potencial bidimensional tipo $1/r$ e o propagador do oscilador harmônico bidimensional.

Através de uma transformação adequada de coordenadas, transforma-se o operador de evolução temporal para o problema do potencial $1/r$ em um operador de evolução temporal para o oscilador harmônico, onde a determinação do propagador é feita, utilizando-se a técnica de ordenação temporal.

Demonstra-se, também, um teorema de adição para as funções associadas de Legendre.

A meus pais
Germano e Lindaura

AGRADECIMENTOS

- Ao prof.Dr. José Bellandi Filho pela sugestão e orientação deste trabalho além da amizade transmitida.
- Ao prof.Dr. Cesare Mansueto Giulio Lattes, de sua acolhida quando chefe do Depto. de Raios Cômicos, Cronologia, Altas Energias e Léptons, pelas facilidades concedidas para realização deste trabalho.
- Ao prof.Dr. Edmundo Capelas de Oliveira pelas discussões e estímulo
- Aos professores, funcionários e colegas do Depto. de Raios Cômicos, Cronologia, Altas Energias e Léptons, em especial aos professores Reinaldo e Márcio.
- Aos meus familiares pelo apoio humano.
- Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico-CNPq pelo suporte financeiro.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO	1
I. O OPERADOR DE EVOLUÇÃO TEMPORAL	
A. Definição	4
B. Representação de $\hat{G}(t)$ em autofunções	6
C. Aplicações	
C.1 Propagador para uma partícula livre	10
C.2 Propagador para o oscilador harmônico unidimensional	12
II. MÉTODO DE ORDENAÇÃO TEMPORAL E O PROPAGADOR PARA O OSCILADOR HARMÔNICO ISOTRÓPICO	
Descrição do método	15
Propagador para o oscilador harmônico	21
Obtenção dos níveis de energia e as autofunções do oscilador harmônico unidimensional a partir do propagador	22
III. TEOREMA DE GRAFF PARA AS FUNÇÕES DE BESSEL DE ORDEM ZERO	
Função de Green na forma de operadores	24
Representação integral da função de Green para uma partícula livre em duas dimensões	25
Caso particular do teorema de Graff para a função de Bessel modificada	26
IV. O OPERADOR DE EVOLUÇÃO TEMPORAL E A FUNÇÃO DE GREEN PARA O POTENCIAL TIPO $1/r$ BIDIMENSIONAL	
A. Função de Green bidimensional	28
Equação diferencial para a função de Green do potencial $1/r$ bidimensional	28

Equação diferencial para a função de Green de um oscilador harmônico isotrópico bidimensional	29
Propagador para o potencial $1/r$ bidimensional	30
Função de Green radial para o potencial $1/r$ bidimensional	31
Cálculo dos níveis de energia a partir da função de Green radial	32
B3 Teorema de adição para as funções de Legendre	33
-Função de Green no espaço de momentos	36
-Teorema de Adição	37
CONCLUSÕES	38
REFERÊNCIAS	39

INTRODUÇÃO

O estudo do movimento de uma partícula na presença de um potencial central teve um papel importante no desenvolvimento da mecânica quântica.

O modelo atômico de Bohr para o átomo de hidrogênio descreve o átomo de uma forma bastante simples, onde o movimento do elétron se dá pela ação de um potencial coulombiano, central, gerado pelo próton do núcleo do átomo. Isso permite uma simples explicação das raías espectrais do átomo de hidrogênio.

A dedução de uma equação dinâmica para descrever o átomo de hidrogênio foi realizada por Schrödinger⁽¹⁾, estabelecendo uma equação de autovalores para a descrição dinâmica do átomo de hidrogênio onde os autovalores de finem os níveis de energia e conseqüentemente as diferentes raías espectrais.

Essa equação, conhecida como equação de Schrödinger, é generalizada para outros sistemas dinâmicos e particularmente quando aplicada a um sistema sujeito a um potencial tipo oscilador harmônico, revela a correta quantização dos osciladores de Planck, supostos na explicação da radiação do corpo negro.

O potencial coulombiano e o potencial tipo oscilador harmônico são de grande importância no contexto da mecânica quântica. Em 1941, Schrödinger⁽²⁾ mostrou que existe uma conexão entre as autofunções radiais de um oscilador quadridimensional e as autofunções do movimento de uma partícula na presença de um potencial coulombiano em coordenadas espaciais.

Bergmann e Frishmann⁽³⁾ mostraram que é possível transformar-se algebricamente a equação radial de Schrödinger para o potencial coulombiano tridimensional numa equação radial para um oscilador harmônico, com os níveis do átomo de hidrogênio sendo expressos em função dos níveis de energia do oscilador harmônico. A extensão para problemas a uma dimensão qualquer foi feita por Giovannini e Tonietti⁽⁴⁾.

A nível de função de Green, que é outra forma de fazer quantização⁽⁵⁾ Bellandi e Caetano⁽⁶⁾ mostraram a existência dessa conexão em termos de funções de Green radiais.

No contexto da Física Matemática a função de Green radial para o potencial coulombiano ou para o oscilador harmônico foi exaustivamente estudada por Capelas de Oliveira⁽⁷⁾ como um algoritmo de cálculo para o estudo de funções especiais. Desenvolveu-se um método global de cálculo de funções de Green e estabeleceu-se novas representações integrais e teoremas de adição para as funções hipergeométricas e para as hipergeométricas confluentes.

Neste trabalho retoma-se o problema da conexão entre o potencial tipo $1/r$ e o oscilador harmônico isotrópico a nível de função de Green, mostrando-se que é possível estabelecer uma conexão entre as funções de Green totais e não somente entre as radiais, pelo menos no caso bidimensional.

Isso é feito utilizando-se o operador de evolução temporal da mecânica quântica, que permite estender, também, a conexão a nível de propagador, ou seja, função de Green dependente do tempo.

A definição do operador de evolução temporal da mecânica quântica⁽⁹⁾, suas propriedades e algumas aplicações, na determinação de propagadores, são apresentadas no capítulo I.

Como se pretende calcular o propagador para um potencial do tipo $1/r$, utilizando-se o propagador para um potencial x^2 faz-se, no capítulo II, um retrospecto de como se calcula o propagador para o oscilador harmônico isotrópico utilizando-se a técnica devido a Feynmann, conhecida como ordenação temporal.

Uma aplicação do operador de evolução temporal em Física Matemática é apresentada no capítulo III, onde demonstra-se o teorema de Graff para as funções de Bessel modificada de ordem zero.

E, finalmente, no capítulo IV mostra-se como estabelecer a conexão entre os propagadores bidimensionais para o potencial tipo $1/r$ e o

potencial do oscilador harmônico isotrópico, a seguir demonstra-se um teorema de adição para as funções associadas de Legendre.

Apresenta-se também as conclusões e discute-se as possibilidades de extensão da conexão para problemas em dimensões maiores do que dois.

1. O OPERADOR DE EVOLUÇÃO TEMPORAL

Em mecânica quântica, o estudo da evolução temporal de um sistema pode ser feito mediante duas representações perfeitamente equivalentes: a de Schrödinger e a de Heisenberg⁽⁸⁾.

Na representação de Schrödinger, estuda-se a evolução temporal mediante uma equação de autovalores, em que a dependência temporal aparece explícita na função de onda e os operadores são independentes do tempo.

Na representação de Heisenberg, toda dependência temporal aparece explícita nos operadores sendo, portanto, as funções de onda independente do tempo.

Estas duas apresentações são equivalentes e existe um operador que transforma os operadores na representação de Schrödinger para a representação de Heisenberg, através de uma transformação de equivalência. O operador que realiza esta transformação é o operador de evolução temporal-

Neste capítulo faz-se um estudo do operador de evolução temporal⁽⁹⁾, discutindo-se algumas aplicações simples; calcula-se os propagadores para os casos da partícula livre e de uma partícula na presença de um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico.

A. DEFINIÇÃO

A informação dinâmica completa de um sistema quântico está contida no operador de evolução temporal, que é definido como⁽⁹⁾

$$(1.1) \quad \hat{G}(t) = \exp\{-i\hat{H}t/\hbar\}$$

onde $\hat{H}$ é o operador hamiltoniano, com $\partial\hat{H}/\partial t = 0$, t é o tempo e $\hbar$ é a constante de Planck.

Essa forma para o operador de evolução temporal aparece quando se considera funções dependentes do tempo e determina-se o operador que gera as translações infinitesimais no tempo

$$\hat{G} \psi(t) = \psi(t+\Delta t) = \left\{ 1 + \frac{\partial}{\partial t} \Delta t + \dots \right\} \psi(t)$$

tomando-se $\frac{\partial}{\partial t} = -i \hat{H}/\hbar$ tem-se:

$$\hat{G}\psi(t) = \exp\left\{-\frac{i\hat{H}}{\hbar} \Delta t\right\} \psi(t).$$

O operador de evolução temporal aparece como uma solução formal de uma equação de operadores equivalente à equação de Schrödinger:

$$(1.2) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{G}(t) = \hat{H} \hat{G}(t)$$

Seja um observável definido por um operador $\hat{A}$. Na representação de Schrödinger este operador não depende explicitamente do tempo e na representação de Heisenberg tem-se: $\hat{A} \equiv \hat{A}(t)$

Passa-se de uma representação para a outra mediante a transformação de equivalência:

$$(1.3) \quad \hat{A}(t) = \hat{G}(t) \hat{A} \hat{G}^{-1}(t).$$

Se este observável tem um conjunto de autoestados $|\psi(t)\rangle$ na representação de Schrödinger e $|\psi(0)\rangle$ na representação de Heisenberg, então:

$$(1.4) \quad |\psi(t)\rangle = \hat{G}(t) |\psi(0)\rangle.$$

Da equação (1.1) vê-se que o operador $\hat{G}(t)$ satisfaz as seguintes propriedades:

$$(1.5) \quad \hat{G}(0) = \hat{I}$$

onde $\hat{I}$ é o operador identidade

$$(1.6) \quad \hat{G}(t_1+t_2) = \hat{G}(t_2) \hat{G}(t_1)$$

$$(1.7) \quad \hat{G}(t) \hat{G}^\dagger(t) = \hat{I}, \text{ se } \hat{H} \text{ é hermitiano.}$$

As propriedades acima revelam uma estrutura de grupo associada a $\hat{G}(t)$.

B. REPRESENTAÇÃO DE $\hat{G}(t)$ EM AUTOFUNÇÕES

Considere um hamiltoniano $\hat{H}$, tal que:

$$(1.8) \quad \hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

sendo $\{|\psi_n\rangle\}$ um conjunto completo de autoestados de $\hat{H}$:

$$(1.9) \quad \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \hat{I}$$

e ortonormal:

$$(1.10) \quad \langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{n,m}.$$

Introduzindo-se estados completos no segundo membro da eq. (1.1) e utilizando-se a relação de completeza, eq. (1.9), tem-se:

$$(1.11) \quad \hat{G}(t) = \sum_m \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \exp(-i\hat{H}t/\hbar) |\psi_m\rangle\langle\psi_m|$$

como $|\psi_m\rangle$ são autoestados de $\hat{H}$, tem-se para o elemento de matriz:

$$\begin{aligned}\langle \psi_n | \exp(-i\hat{H}t/\hbar) | \psi_m \rangle &= \exp(-iE_m t/\hbar) \langle \psi_n | \psi_m \rangle \\ &= \exp(-iE_m t/\hbar) \delta_{n,m}\end{aligned}$$

portanto

$$(1.12) \quad \hat{G}(t) = \sum_n |\psi_n\rangle \exp(-iE_n t/\hbar) \langle \psi_n|$$

A expressão (1.12) define a expansão do operador $\hat{G}(t)$ em termos de autoestados e autovalores do hamiltoniano $\hat{H}$. A soma sobre os estados compreende tanto a soma sobre os estados discretos como sobre os estados contínuos. Neste último caso a soma deve ser substituída por uma integral.

A seguir obter-se-á $\hat{G}(t)$ numa representação de coordenadas de posição. Seja $\hat{q}$ o operador de posição e $|q\rangle$ um conjunto completo de autoestados de $\hat{q}$,

$$(1.13) \quad \hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$$

com a normalização

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q-q')$$

e a relação de completeza expressa por:

$$(1.14) \quad \int |q\rangle\langle q| dq = \hat{I}$$

Um vetor $|\psi_n\rangle$ pode ser obtido na representação de coordenadas na forma

$$(1.15) \quad |\psi_n\rangle = \int dq |q\rangle\langle q|\psi_n\rangle$$

A projeção $\langle q|\psi_n\rangle$ do estado $|\psi_n\rangle$ na base $|q\rangle$ define a

função de onda do sistema:

$$(1.16) \quad \psi_n(q) = \langle q | \psi_n \rangle .$$

Seja o produto escalar de dois elementos do conjunto $\{|\psi_n\rangle\}$ representado por

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle$$

e, utilizando-se a expressão (1.15) tem-se:

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \iint \langle \psi_n | q \rangle \langle q | q' \rangle \langle q' | \psi_m \rangle dq dq'$$

da condição de ortonormalização obtêm-se:

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int \langle \psi_n | q \rangle \langle q | \psi_m \rangle dq$$

ou

$$(1.17) \quad \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int dq \psi_n^*(q) \psi_m(q)$$

Obtêm-se o operador de evolução temporal numa representação de coordenadas, calculando-se o valor esperado de $\hat{G}(t)$ entre dois estados $|q_2\rangle$ e $|q_1\rangle$

$$(1.18) \quad G(q_2, q_1, t) = \langle q_2 | \hat{G}(t) | q_1 \rangle$$

que define a função de Green dependente do tempo ou propagador.

Introduzindo-se conjuntos completos de estados $|\psi_n\rangle$ tem-se

$$G(q_2, q_1, t) = \sum_n \sum_m \langle q_2 | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{G}(t) | \psi_m \rangle \langle \psi_m | q_1 \rangle$$

lembrando-se que: $\hat{H}|\psi_m\rangle = E_m|\psi_m\rangle$ e utilizando-se a expressão (1.10) tem-se:

$$G(q_2, q_1, t) = \sum_n \langle q_2 | \psi_n \rangle \exp(-iE_n t/\hbar) \langle \psi_n | q_1 \rangle$$

ou

$$(1.19) \quad G(q_2, q_1, t) = \sum_n \psi_n(q_2) \exp(-iE_n t/\hbar) \psi_n^*(q_1)$$

Esta expressão define a decomposição espectral da função de Green em termos das funções de onda do hamiltoniano $\hat{H}$ na representação de coordenadas.

Das expressões (1.6) e (1.18) determina-se a estrutura de grupo de $\hat{G}(t)$ na representação de coordenadas

$$\begin{aligned} G(q_2, q_1, t_1+t_2) &= \langle q_2 | \hat{G}(t_1+t_2) | q_1 \rangle \\ &= \langle q_2 | \hat{G}(t_2) \hat{G}(t_1) | q_1 \rangle \end{aligned}$$

inserindo-se estados completos no segundo membro obtêm-se

$$(1.20) \quad \begin{aligned} G(q_2, q_1, t_1+t_2) &= \iiint dq \, dq' \, dq'' \langle q_2 | q'' \rangle \langle q'' | \hat{G}(t_2) | q \rangle \cdot \\ &\cdot \langle q | \hat{G}(t_1) | q' \rangle \langle q' | q_1 \rangle \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned} G(q_2, q_1, t_1+t_2) &= \iiint dq \, dq' \, dq'' \langle q_2 | q'' \rangle G(q'', q, t_2) \cdot \\ &\cdot G(q, q', t_1) \langle q' | q_1 \rangle \end{aligned}$$

utilizando-se a condição de normalização $\langle q' | q \rangle = \delta(q-q')$ obtêm-se

$$(1.21) \quad G(q_2, q_1, t_1+t_2) = \int dq \, G(q_2, q, t_2) G(q, q_1, t_1)$$

Um sistema dinâmico fica caracterizado quando se conhece os

autovalores e as autofunções de $\hat{H}$.

Do ponto de vista do operador de evolução temporal, conhecendo-se o propagador $G(q_1, q_2, t)$ descreve-se, também, o estado dinâmico do sistema pois pode-se determinar tanto o espectro de energia como as autofunções de $\hat{H}$.

Determina-se o espectro de energia a partir da função de Green independente do tempo. Esta função é obtida, calculando-se a transformada de Laplace do operador $\hat{G}(t)$, ou seja:

$$(1.22) \quad \hat{G}(\epsilon) = i/\hbar \int_0^\infty \hat{G}(t) \exp(i\epsilon t/\hbar) dt$$

utilizando-se a expressão (1.1), tem-se

$$\hat{G}(\epsilon) = i/\hbar \int_0^\infty \exp\{-it/\hbar(\hat{H} - \epsilon)\} dt$$

O cálculo formal desta integral fornece:

$$(1.23) \quad \hat{G}(\epsilon) = (\hat{H} - \epsilon)^{-1}$$

Na representação de coordenadas tem-se:

$$(1.24) \quad \langle q_1 | \hat{G}(\epsilon) | q_2 \rangle = \langle q_1 | (\hat{H} - \epsilon)^{-1} | q_2 \rangle$$

Obtêm-se os autovalores de energia, determinando-se os polos da função de Green independente do tempo. Conhecendo-se esses polos, a expansão da função de Green em torno destes polos fornece as autofunções;

C. APLICAÇÕES

C.1 PROPAGADOR PARA UMA PARTÍCULA LIVRE

Calcula-se o propagador unidimensional para uma partícula livre, utilizando-se o operador $\hat{G}(t)$.

O hamiltoniano para a partícula livre é

$$(1.25) \quad \hat{H} = \hat{p}^2/2m$$

Sejam as autofunções do operador de momento $\hat{p}$:

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad \text{com} \quad \int dp |p\rangle\langle p| = \hat{I}$$

Na representação de coordenadas, as autofunções são⁽⁸⁾:

$$(1.26) \quad \langle q|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ipq/\hbar)$$

Na representação de momentos, o propagador é dado por

$$\begin{aligned} G(p_2, p_1, t) &= \langle p_2 | \hat{G}_{\text{livre}}(t) | p_1 \rangle \\ &= \langle p_2 | \exp(-i\hat{H}t/\hbar) | p_1 \rangle \end{aligned}$$

ou

$$(1.27) \quad G(p_2, p_1, t) = \delta(p_2 - p_1) \exp(-ip_1^2 t / 2m\hbar)$$

e na representação de coordenadas por:

$$G(q_2, q_1, t) = \langle q_2 | \hat{G}(t) | q_1 \rangle$$

Utilizando-se a relação de completeza para os estados $|p\rangle$, tem-se:

$$G(q_2, q_1, t) = \iint \langle q_2 | p_2 \rangle \langle p_2 | \hat{G}(t) | p_1 \rangle \langle p_1 | q_1 \rangle dp_1 dp_2$$

da expressão (1.27) escreve-se

$$G(q_2, q_1, t) = \iint \langle q_2 | p_2 \rangle \delta(p_2 - p_1) \exp(-ip_1^2 t / 2m\hbar) \langle p_1 | q_1 \rangle dp_1 dp_2$$

Utilizando-se a expressão (1.26), tem-se:

$$(1.28) \quad G(q_2, q_1, t) = (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(q_2 - q_1)p_1/\hbar] \exp(-ip_1^2 t / 2m\hbar) dp_1$$

O cálculo da integral anterior fornece:

$$(1.29) \quad G(q_2, q_1, t) = (2\pi i \hbar t / \mu)^{-1/2} \exp\{i\mu (q_2 - q_1)^2 / 2\hbar t\}$$

que é o propagador ou função de Green dependente do tempo para uma partícula livre.

A função de Green a uma dimensão qualquer é obtida a partir da expressão (1.29), fazendo-se a produtória das funções de Green unidimensionais para cada grau de liberdade, ou seja,

$$(1.30) \quad G^n(q_2, q_1, t) = \prod_{n=1}^f (2\pi i \hbar t / \mu)^{-n/2} \exp\{i\mu (q_{2n} - q_{1n})^2 / 2\hbar t\}$$

onde f é o número de graus de liberdade.

Note-se que, na expressão (1.29), a exponencial contém o termo $\frac{i}{\hbar} A(q_2, q_1, t)$, onde A é a ação clássica.

C.2 PROPAGADOR PARA O OSCILADOR HARMÔNICO UNIDIMENSIONAL

Como uma segunda aplicação do método, calcula-se o propagador unidimensional para uma partícula na presença de um potencial tipo oscilador harmônico.

O hamiltoniano para este sistema⁽⁸⁾ é:

$$(1.31) \quad \hat{H} = p^2 / 2\mu + \frac{1}{2} \mu \omega^2 q^2$$

onde μ é a massa da partícula e ω é a frequência de oscilação.

Escrevendo-se $\hat{G}(t)$ na representação de coordenadas, eq. 1.19, tem-se:

$$G(q_2, q_1, t) = \sum_n \psi_n(q_2) \psi_n^*(q_1) \exp(-iE_n t / \hbar)$$

A função de onda do oscilador harmônico isotrópico devidamente normalizada é dada por⁽⁸⁾:

$$(1.32) \quad \psi_n(q) = (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1/2} (\mu\omega/\hbar)^{1/4} \exp(-\mu\omega q^2/2\hbar) H_n\{(\mu\omega/\hbar)^{1/2} q\}$$

onde $H_n(y)$ são os polinômios de Hermite.

O espectro de energia é dado por:

$$(1.33) \quad E_n = (n+1/2)\hbar\omega$$

com $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Introduzindo-se as expressões (1.32) e (1.33) na expressão (1.19) tem-se:

$$(1.34) \quad G(q_2, q_1, t) = (\mu\omega/\pi\hbar)^{1/2} \exp\{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}(q_1^2 + q_2^2)\} \exp(-i\omega t/2) \cdot \\ \cdot \sum_{n=0}^{\infty} (2^n n!)^{-1} \exp(-i\omega t n) H_n\{(\mu\omega/\hbar)^{1/2} q_2\} H_n\{(\mu\omega/\hbar)^{1/2} q_1\}$$

utilizando-se a fórmula de Mehler⁽¹⁰⁾ para as funções de Hermite

$$(1.35) \quad \sum_{n=0}^{\infty} z^n / 2^n n! H_n(x) H_n(y) = \\ = (1-z^2)^{-1/2} \exp\{[2xyz - (x^2+y^2)z^2]/(1-z^2)\}$$

obtem-se

$$(1.36) \quad G(q_2, q_1, t) = (2\pi i \hbar \sin \omega t / \mu\omega)^{-1/2} \cdot \\ \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} (2 \sin \omega t / \mu\omega)^{-1} \cdot \{(q_1^2 + q_2^2) \cos \omega t - 2q_1 q_2\}\right]$$

que é a função de Green dependente do tempo ou propagador unidimensional para uma partícula na presença de um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico.

Note-se que o termo

$$(2\text{sen}\omega t/\mu\omega)^{-1} \{(q_1^2 + q_2^2) \cos\omega t - 2q_1q_2\}$$

nada mais é do que a ação clássica.

A função de Green a uma dimensão qualquer é obtida fazendo-se a produtória das funções de Green unidimensionais para cada grau de liberdade, ou seja:

$$G^n(q_2, q_1, t) = \prod_{n=1}^f (2\pi i \hbar \text{sen}\omega t/\mu\omega)^{-n/2} \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar} (2\text{sen}\omega t/\mu\omega)^{-n} [(q_{1n}^2 + q_{2n}^2) \cos\omega t - 2q_{1n}q_{2n}]\right\}$$

onde f é o número de graus de liberdade.

II. MÉTODO DE ORDENAÇÃO TEMPORAL E O PROPAGADOR PARA UM OSCILADOR HARMÔNICO

Neste capítulo, calcula-se o propagador para um oscilador harmônico unidimensional. Usando-se o operador de evolução temporal, e a partir do propagador, determinam-se as autofunções e os autovalores de energia.

Calcula-se o propagador utilizando-se a técnica de cálculo de operadores de Feynmann⁽¹²⁾, conhecida como método de ordenação temporal.

Como visto no capítulo anterior, o propagador é definido como o elemento de matriz do operador de evolução temporal

$$(2.1) \quad G(q, q', t) = \langle q' | \hat{G}(t) | q \rangle$$

onde $\hat{G}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ sendo $\hat{H}$ o operador hamiltoniano do oscilador harmônico, que por conveniência escreve-se na forma

$$(2.2) \quad \hat{H} = i\hbar\omega(\hat{P} + \hat{Q})$$

$$\text{com } \hat{P} = \hat{p}^2/2mi\hbar\omega \quad \text{e} \quad \hat{Q} = m\omega\hat{q}^2/2i\hbar.$$

O operador de evolução temporal não pode ser escrito simplesmente na forma de um produto de exponenciais, pois os operadores envolvidos no hamiltoniano não comutam e, conseqüentemente, o elemento de matriz do operador de evolução temporal não pode ser calculado pela simples inserção de conjuntos completos de estados.

Necessita-se assim usar uma técnica, da qual Feynmann⁽¹²⁾ chama de Desembrulhamento da Exponencial.

Nesta sistemática, toma-se o hamiltoniano $\hat{H}$, como função de um parâmetro λ real e um número qualquer de operadores constantes, os quais apresentam regras de comutação bem definidas.

Define-se um operador de transformação gerado por $\hat{H} \equiv \hat{H}(\lambda)$, com λ definido num intervalo infinitesimal, $\sigma < \lambda < \tau$, como um produto de

transformações infinitesimais ordenadas, da direita para a esquerda, correspondendo a sucessão de valores de λ , ordenados no intervalo (σ, τ) .

Quando expandimos numa série de potências, o operador é denominado *Expansional* e definido por

$$(2.3) \quad \text{Exp}\left\{\int_{\sigma}^{\tau} d\lambda H(\lambda)\right\} = E^{\int_{\sigma}^{\tau} d\lambda H(\lambda)} \\ = I + \sum_{n=1}^{\infty} \text{Exp}^{(n)}\left\{\int_{\sigma}^{\tau} d\lambda H(\lambda)\right\}$$

onde usa-se a letra maiúscula E para diferenciar da letra e minúscula, quando da notação da exponencial.

Com $H(\lambda)$ na forma $H(\lambda) = F(\lambda) + G(\lambda)$, decompõe-se este operador na seguinte forma

$$(2.4) \quad \text{Exp}\left\{\int_{\sigma}^{\tau} d\lambda [F(\lambda) + G(\lambda)]\right\} = \\ = \text{Exp}\left[\int_{\sigma}^{\tau} d\lambda \text{Exp}\left[\int_{\sigma}^{\tau} d\lambda G(\nu)\right] F(\lambda) \text{Exp}\left[\int_{\sigma}^{\tau} d\mu G(\mu)\right]\right] \text{Exp}\left[\int_{\sigma}^{\tau} d\lambda G(\lambda)\right]$$

A essência deste método consiste em escrever o operador $\hat{G}(t)$ numa forma desembrulhada, calculando-se o operador de transformação que nos permite escrever $\hat{G}(t)$ como um produto de três exponenciais.

Para o caso do oscilador harmônico, utilizando-se a expressão (2.3), escreve-se $\hat{G}(t)$ como:

$$(2.5) \quad \hat{G}(t) = \exp\{i\omega t(\hat{P} + \hat{Q})\}$$

onde o operador de transformação para $\hat{G}(t)$ é definido como

$$(2.6) \quad T(\sigma, \tau) = \text{Exp}\left\{\int_{\sigma}^{\tau} d\lambda (\hat{P} + \hat{Q})\right\}$$

com $\lambda = \omega t$.

Expandese este operador em três simples exponenciais

$$(2.7) \quad \text{Exp} \left[\int_0^T d\lambda (\hat{P} + \hat{Q}) \right] = \\ = \text{exp} \left[\int_0^T d\lambda f'(\lambda) \hat{Q} \right] \text{exp} \left[\int_0^T d\lambda g'(\lambda) \hat{P} \right] \text{exp} \left[\int_0^T d\lambda f'(\lambda) \hat{Q} \right]$$

ou

$$(2.8) \quad T(\lambda) = \text{exp} \{ f(\lambda) \hat{Q} \} \text{exp} \{ g(\lambda) \hat{P} \} \text{exp} \{ f(\lambda) \hat{Q} \}$$

A expressão (2.7) pode ser escrita na forma

$$(2.9) \quad T(\lambda) = \text{Exp} \left[\int_0^T d\lambda \left[f'(\lambda) \hat{Q} + g'(\lambda) e^{f(\lambda) \hat{Q}} \hat{P} e^{-f(\lambda) \hat{Q}} + \right. \right. \\ \left. \left. + f'(\lambda) e^{f(\lambda) \hat{Q}} e^{g(\lambda) \hat{P}} \hat{Q} e^{-g(\lambda) \hat{P}} e^{-f(\lambda) \hat{Q}} \right] \right].$$

Calcula-se as funções $f(\lambda)$ e $g(\lambda)$ utilizando-se os operadores $\hat{P}$, $\hat{Q}$ e $\hat{R}$, onde o operador $\hat{R}$ está definido por

$$(2.10) \quad [\hat{Q}, \hat{P}] = \frac{pq}{\lambda h} + \frac{1}{2} = \hat{R}$$

sendo que estes operadores satisfazem as seguintes regras de comutação

$$[\hat{Q}, \hat{R}] = 2\hat{Q} \quad [\hat{P}, \hat{R}] = -2\hat{P}$$

Utilizando-se estas regras de comutação mostra-se que são válidas as seguintes relações

$$e^{-\lambda \hat{R}} \hat{P} e^{\lambda \hat{R}} = e^{-2\lambda} \hat{P}$$

$$e^{-\lambda \hat{R}} \hat{Q} e^{\lambda \hat{R}} = e^{2\lambda} \hat{Q}$$

$$\begin{aligned}
 e^{-\lambda \hat{P}} \hat{R} e^{\lambda \hat{P}} &= \hat{R} + 2\lambda \hat{P} \\
 e^{-\lambda \hat{Q}} \hat{R} e^{\lambda \hat{Q}} &= \hat{R} - 2\lambda \hat{Q} \\
 e^{-\lambda \hat{Q}} \hat{P} e^{\lambda \hat{Q}} &= \hat{P} - \lambda \hat{R} + \lambda^2 \hat{Q} \\
 e^{-\lambda \hat{P}} \hat{Q} e^{\lambda \hat{P}} &= \hat{Q} + \lambda \hat{R} + \lambda^2 \hat{P}
 \end{aligned}
 \tag{2.11}$$

Substituindo-se as relações (2.11) em (2.9) e comparando-se com (2.7), obtêm-se o seguinte conjunto de equações para as funções $f(\lambda)$ e $g(\lambda)$

$$\tag{2.12} \quad \begin{cases} f'(\lambda) + g'(\lambda) f^2(\lambda) + f'(\lambda) - 2f'(\lambda) g(\lambda) f(\lambda) + f'^2(\lambda) g^2(\lambda) f^2(\lambda) = 1 \\ g'(\lambda) + g^2(\lambda) f'(\lambda) = 1 \\ g'(\lambda) f(\lambda) - f'(\lambda) g(\lambda) + f'(\lambda) g^2(\lambda) f(\lambda) = 0 \end{cases}$$

Resolvendo-se este sistema obtêm-se

$$f(\lambda) = \tan \lambda/2$$

$$g(\lambda) = \sec \lambda$$

Introduzindo-se estas duas funções na expressão (2.8) obtêm-se para o operador $T(\lambda)$

$$\tag{2.13} \quad T(\lambda) = \exp\{(\tan \lambda/2) \hat{Q}\} \exp\{(\sec \lambda) \hat{P}\} \exp\{(\tan \lambda/2) \hat{Q}\}$$

A expressão acima é a forma desembrulhada para o operador de evolução temporal $\hat{G}(t)$, portanto o propagador é dado por

$$\tag{2.14} \quad G(q, q', \lambda) = \langle q' | T(\lambda) | q \rangle$$

fazendo-se as mudanças

$$(2.15) \quad \hat{A} = \exp(i \tan \lambda / 2) \hat{Q}$$

$$(2.16) \quad \hat{B} = \exp(i \sec \lambda) \hat{P}$$

escreve-se para a expressão (2.13)

$$G(q, q', \lambda) = \langle q' | \hat{A} \hat{B} \hat{A} | q \rangle$$

Inserindo-se conjuntos completos de estados $|p\rangle$ e $|q\rangle$, tem-se

$$G(q, q', \lambda) = \langle q' | \hat{A} | q'' \rangle \langle q'' | p \rangle \langle p | \hat{B} | p' \rangle \langle p' | q''' \rangle \langle q''' | \hat{A} | q \rangle$$

ou

$$(2.17) \quad = \int dp \int dp' \int dq'' \int dq''' \langle q' | \hat{A} | q'' \rangle \langle q'' | p \rangle \langle p | \hat{B} | p' \rangle \langle p' | q''' \rangle \langle q''' | \hat{A} | q \rangle$$

utilizando-se as expressões (2.15) e (2.16) e lembrando-se (2.2) obtêm-se

$$(2.18) \quad G(q, q', \lambda) = \int dp \int dp' \int dq'' \int dq''' \langle q' | \exp\{i \tan \lambda / 2\} \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{q}^2 | q'' \rangle \cdot \\ \cdot \langle q'' | p \rangle \langle p | \exp\{i \sec \lambda\} \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} | p' \rangle \langle p' | q''' \rangle \langle q''' | \exp\{i \tan \lambda / 2\} \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{q}^2 | q \rangle$$

Introduzindo-se as expressões

$$(2.19) \quad \langle q | q' \rangle = \delta(q - q')$$

$$(2.20) \quad \langle p | p' \rangle = \delta(p - p')$$

e integrando-se na variável q''' obtêm-se

$$\begin{aligned}
 G(q, q', \lambda) &= \exp\{i(\tan\lambda/2) \frac{m\omega}{2\hbar} q^2\} \int dp \int dp' \int dq'' \cdot \\
 (2.21) \quad &\cdot \langle q' | \exp\{i(\tan\lambda/2) \frac{m\omega}{2\hbar} q^2\} | q'' \rangle \langle q'' | p \rangle \cdot \\
 &\cdot \langle p | \exp\{i(\sec\lambda) \frac{p^2}{2\hbar m\omega}\} | p' \rangle \langle p' | q \rangle
 \end{aligned}$$

Efetuada-se a integral na variável q'' , tem-se

$$\begin{aligned}
 G(q, q', \lambda) &= \exp\{i(\tan\lambda/2) \frac{m\omega}{2\hbar} (q^2 + q'^2)\} \cdot \\
 (2.22) \quad &\cdot \int dp \int dp' \langle q' | p \rangle \langle p | \exp\{i(\sec\lambda) \frac{p^2}{2\hbar m\omega}\} | p' \rangle \langle p' | q \rangle
 \end{aligned}$$

E, agora, na variável p' escreve-se

$$\begin{aligned}
 G(q, q', \lambda) &= \exp\{i(\tan\lambda/2) \frac{m\omega}{2\hbar} (q^2 + q'^2)\} \cdot \\
 (2.23) \quad &\cdot \int dp \langle q' | p \rangle \langle p | q' \rangle \exp\{i(\sec\lambda) \frac{p^2}{2\hbar m\omega}\}
 \end{aligned}$$

Utilizando-se a expressão⁽⁸⁾

$$(2.24) \quad \langle p | q \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(i p q / \hbar)$$

tem-se

$$\begin{aligned}
 G(q, q', \lambda) &= \exp\{i(\tan\lambda/2) \frac{m\omega}{2\hbar} (q^2 + q'^2)\} \cdot \\
 &\cdot \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \, e^{-i p q' / \hbar} e^{i p q / \hbar} \exp\{i(\sec\lambda) \frac{p^2}{2\hbar m\omega}\}
 \end{aligned}$$

Calculando-se esta integral, obtêm-se

$$\begin{aligned}
 G(q, q', \lambda) &= \exp\{i(\tan\lambda/2) \frac{m\omega}{2\hbar} (q^2 + q'^2)\} \cdot \\
 &\cdot \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sec\lambda}\right)^{1/2} \exp\left\{i \frac{m\omega}{2\hbar \sec\lambda} (q' - q)^2\right\}
 \end{aligned}$$

ou, numa forma mais compacta tem-se

$$(2.25) \quad G(q, q', \lambda) = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \operatorname{sen}\lambda} \right)^{1/2} \exp\left\{ \frac{i m \omega}{2\hbar \operatorname{sen}\lambda} [(q^2 + q'^2) \cos\lambda - 2qq'] \right\}$$

que é o propagador para o oscilador harmônico unidimensional, onde $\lambda = \omega t$.

Mostra-se, a seguir, como obtêm-se os níveis de energia e as autofunções do oscilador harmônico unidimensional, a partir da expressão do propagador, equação (2.25), utilizando-se a fórmula de Mehler para o produto de funções de Hermite.

Substituindo-se $\lambda = \omega t$ na expressão (2.25), tem-se

$$(2.26) \quad G(q, q', t) = (m\omega/\pi\hbar)^{1/2} (2i \operatorname{sen}\omega t)^{-1/2} \cdot$$

$$\cdot \exp\left\{ \frac{i m \omega}{2\hbar \operatorname{sen}\omega t} [(q^2 + q'^2) \cos\omega t - 2qq'] \right\}$$

e escrevendo-se

$$\cos\omega t = e^{-i\omega t} + i \operatorname{sen}\omega t$$

$$\operatorname{sen}\omega t = (1 - e^{-2i\omega t}) e^{i\omega t} / 2i$$

tem-se

$$(2.27) \quad G(q, q', t) = (m\omega/\pi\hbar)^{1/2} e^{-i\omega t/2} (1 - e^{-2i\omega t})^{-1/2} \cdot$$

$$\cdot \exp\left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} (q^2 + q'^2) \right\} \exp\left\{ \frac{2m\omega}{\hbar} qq' e^{-i\omega t} - \frac{m\omega}{\hbar} (q^2 + q'^2) e^{-2i\omega t} \right\} (1 - e^{-2i\omega t})^{-1/2}$$

Utilizando-se a fórmula de Mehler, equação (1.35) e identificando-se com a expressão (2.27), tem-se

$$x = q (m\omega/\hbar)^{1/2} \quad y = q' (m\omega/\hbar)^{1/2} \quad z = \exp(-i\omega t)$$

logo, escreve-se para expressão (2.27)

$$(2.29) \quad G(q, q', t) = (m\omega/\pi\hbar)^{1/2} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(q^2 + q'^2)\right\} \cdot \\ \sum_{n=0}^{\infty} (2^n n!)^{-1} \exp\{-i\omega t(n+1/2)\} H_n\{(m\omega/\hbar)^{1/2}q\} H_n\{(m\omega/\hbar)^{1/2}q'\}$$

ou

$$(2.30) \quad G(q, q', t) = \sum_{n=0}^{\infty} (2^n n!)^{-1/2} (m\omega/\pi\hbar)^{1/4} \exp(-m\omega q^2/2\hbar) \cdot \\ \cdot H_n\{(m\omega/\hbar)^{1/2}q\} e^{i\omega t(n+1/2)} (2^n n!)^{-1/2} (m\omega/\pi\hbar)^{1/4} \cdot \\ \cdot \exp(-m\omega q'^2/2\hbar) H_n\{(m\omega/\hbar)^{1/2}q'\}$$

Comparando-se a expressão (2.30) com a expressão (1.19) tem-se

$$\psi_n(q) = (2^n n!)^{-1/2} (m\omega/\pi\hbar)^{1/4} \exp(-m\omega q^2/2\hbar) H_n\{(m\omega/\hbar)^{1/2}q\}$$

e

$$E_n = (n + 1/2) \hbar\omega$$

As expressões acima são, respectivamente, a função de onda e os níveis de energia para o oscilador harmônico unidimensional.

III. TEOREMA DE GRAFF PARA AS FUNÇÕES DE BESSEL DE ORDEM ZERO

Nos capítulos anteriores fez-se algumas aplicações do operador de evolução temporal, calculando-se propagadores e mostrando-se como o estudo dinâmico de um sistema pode ser realizado no particular caso do oscilador harmônico isotrópico.

O conhecimento do propagador implica, também, no conhecimento direto da função de Green estacionária, a qual dá informações necessárias sobre a dinâmica do sistema. Isso equivale, no formalismo de Schrödinger, a resolver equações de autovalores.

Essas equações diferenciais são, em geral, as usuais equações da Física Matemática, solúveis pelos métodos tradicionais. Assim, a determinação da função de Green é, também, uma forma indireta de se obter as soluções dessas equações diferenciais.

Uma vez obtida a função de Green pode-se estudar, também, propriedades das funções especiais, tais como representações integrais e teoremas de adição⁽⁷⁾.

Neste capítulo faz-se uma aplicação para as funções de Bessel, deduzindo-se um particular caso do teorema de Graff⁽¹⁰⁾, que permite escrever uma função de Bessel como um produto de duas outras funções de Bessel.

Seja uma partícula livre em duas dimensões. A função de Green satisfaz a seguinte equação diferencial

$$(3.1) \quad (\hat{H} - E) G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

onde $\hat{H} = \vec{p}^2/2$, tomado a massa $m=1$.

Introduzindo-se $\epsilon^2 = -2E$, tem-se

$$(3.2) \quad \frac{1}{2}(\vec{p}^2 + \epsilon^2) G(\vec{r}, \vec{r}'; \epsilon) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

A solução na forma de operadores é

$$\hat{G}(\epsilon) = 2(\vec{p}^2 + \epsilon^2)^{-1}$$

O elemento de matriz de $\hat{G}(\epsilon)$, na representação de coordenadas, define a função de Green, que é solução da equação (3.2), ou seja

$$(3.3) \quad G(\vec{r}, \vec{r}'; \epsilon) = \langle \vec{r}' | (\vec{p}^2/2 + \epsilon^2/2)^{-1} | \vec{r} \rangle$$

Introduzindo-se os autoestados $|\vec{p}\rangle$ e $|\vec{p}'\rangle$, tem-se

$$(3.4) \quad G(\vec{r}, \vec{r}'; \epsilon) = \iint d\vec{p} d\vec{p}' \langle \vec{r}' | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | (\vec{p}^2/2 + \epsilon^2/2)^{-1} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle$$

Utilizando-se a expressão⁽⁸⁾

$$\langle \vec{p} | \vec{r} \rangle = (2\pi\hbar)^{-1} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}/\hbar), \quad \text{com } \hbar=1$$

e introduzindo-se na equação (3.4) obtêm-se

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; \epsilon) = (2\pi)^{-2} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{p} \exp[i\vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] (\vec{p}^2/2 + \epsilon^2/2)^{-1}$$

Escrevendo-se $(\vec{p}^2/2 + \epsilon^2/2)^{-1}$ numa representação integral

$$(\vec{p}^2/2 + \epsilon^2/2)^{-1} = \int_0^1 d\rho \frac{\vec{p}^2/2 + \epsilon^2/2 - 1}{\rho}$$

pode-se escrever a função de Green na forma

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; \epsilon) = (2\pi)^{-2} \int_0^1 d\rho \frac{\epsilon^2/2 - 1}{\rho} \cdot$$

(3.4)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{p} \exp\{\vec{p}^2/2 |\ln \rho| + i\vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')\}$$

Calculando-se a integral na variável p , tem-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{p} \exp\{\vec{p}^2/2|\ln\rho| + i\vec{p}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')\} = \frac{2\pi}{|\ln\rho|} \exp\{-\frac{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}{2\ln\rho}\}$$

e, substituindo-se na expressão (3.4), pode-se escrever

$$(3.5) \quad G(\vec{k}, \vec{k}'; \epsilon) = (2\pi)^{-1} \int_0^1 d\rho \rho^{\epsilon^2/2-1} \frac{1}{|\ln\rho|} \exp(-\frac{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}{2\ln\rho})$$

Fazendo-se a mudança de variável $\rho = \exp(-t)$ tem-se

$$(3.6) \quad G(\vec{k}, \vec{k}'; \epsilon) = (2\pi)^{-1} \int_0^{\infty} d(t\epsilon^2/2) \exp\{-\frac{t\epsilon^2}{2} - \frac{\epsilon^2|\vec{k}-\vec{k}'|^2}{4t\epsilon^2/2}\} (\frac{t\epsilon^2}{2})^{-1}$$

A integral que aparece na expressão acima nada mais é do que uma função de Bessel⁽¹⁴⁾, logo

$$(3.7) \quad G(\vec{k}, \vec{k}'; \epsilon) = \frac{1}{\pi} K_0[\epsilon|\vec{k}-\vec{k}'|]$$

Note-se que a função $G(\vec{k}, \vec{k}'; \epsilon)$ não está definida para $\vec{k}=\vec{k}'$, uma vez que a função $K_0[\epsilon|\vec{k}-\vec{k}'|]$ não é regular na origem, consistente com a singularidade do laplaciano.

Considerando-se novamente a integral dada por (3.6), tem-se

$$(3.8) \quad G(\vec{k}, \vec{k}'; \epsilon) = (2\pi)^{-1} \int_0^{\infty} \frac{1}{y} e^{-y} \exp\{-\frac{\epsilon^2}{2}(\vec{k}^2 + \vec{k}'^2)\} \exp\{\frac{\epsilon^2}{2y} \vec{k}\vec{k}' \cos\alpha\} dy$$

onde $y = \frac{1}{2} t\epsilon^2$ e α é o ângulo formado por $\vec{k}$ e $\vec{k}'$.

Expandindo-se a exponencial $\exp\{\frac{\epsilon^2}{2y} \vec{k}\vec{k}' \cos\alpha\}$ numa série de Bessel⁽¹⁴⁾,

$$\exp\{\frac{\epsilon^2}{2y} \vec{k}\vec{k}' \cos\alpha\} = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} I_{\ell}(\epsilon^2 \vec{k}\vec{k}'/2y) \exp(i\ell\alpha)$$

e introduzindo-se na expressão (3.8) obtêm-se

$$(3.9) \quad G(\vec{r}, \vec{r}'; \varepsilon) = (2\pi)^{-1} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \exp(i\ell\alpha) \cdot \int_0^{\infty} \frac{1}{y} \exp\left\{-y - \frac{\varepsilon^2(r^2 + r'^2)}{4y}\right\} I_{\ell}(\varepsilon^2 r r' / 2y) dy$$

Calculando-se esta integral⁽¹⁴⁾ obtêm-se para a função de Green

$$(3.10) \quad G(\vec{r}, \vec{r}'; \varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} I_{\ell}(\varepsilon r) K_{\ell}(\varepsilon r') \exp(i\ell\alpha) & 0 < r < r' \\ \frac{1}{\pi} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} I_{\ell}(\varepsilon r') K_{\ell}(\varepsilon r) \exp(i\ell\alpha) & 0 < r' < r \end{cases}$$

Comparando-se as expressões (3.7) e (3.10), obtêm-se

$$K_0(\varepsilon |\vec{r} - \vec{r}'|) = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} I_{\ell}(\varepsilon r) K_{\ell}(\varepsilon r') \exp(i\ell\alpha) \quad 0 < r < r'$$

$$K_0(\varepsilon |\vec{r} - \vec{r}'|) = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} I_{\ell}(\varepsilon r') K_{\ell}(\varepsilon r) \exp(i\ell\alpha) \quad 0 < r' < r$$

que é um particular caso do teorema de Grafß para a função de Bessel modificada.

IV. O OPERADOR DE EVOLUÇÃO TEMPORAL E A FUNÇÃO DE GREEN PARA O POTENCIAL TIPO $1/r$ BIDIMENSIONAL

A determinação da função de Green para a equação de Schrödinger na presença de um potencial $\bar{e}$, geralmente, feita explorando-se a simetria do potencial.

Quando a simetria permite, expande-se a função de Green em ondas parciais e calcula-se a função de Green radial. Em geral, a equação diferencial radial não homogênea é solúvel pelo método de Sturm-Liouville, que consiste em se escrever a função de Green como um produto de duas soluções linearmente independentes da equação diferencial homogênea.

Este método é usado por Hostler⁽¹⁵⁾ para determinar a função de Green coulombiana a uma dimensão qualquer.

Bellandi e Caetano⁽⁶⁾ mostraram que a função de Green radial para o potencial coulombiano pode ser calculada também a partir da função de Green radial do oscilador harmônico isotrópico, uma vez que a equação diferencial radial do potencial coulombiano se reduz a uma equação diferencial de um oscilador harmônico isotrópico, através de uma simples transformação algébrica.

Estes dois métodos de cálculo implicam no conhecimento da função de Green radial.

Neste capítulo mostra-se que a função de Green do potencial tipo $1/r$ pode ser calculada diretamente em termos da função de Green total do oscilador harmônico, sem a necessidade da expansão em ondas parciais.

Obtêm-se a relação entre as funções de Green totais e, não mais unicamente entre as funções radiais. Esta relação é obtida usando-se o operador de evolução temporal.

Neste trabalho faz-se somente o estudo do caso bidimensional, mas a técnica pode ser estendida para problemas multidimensionais.

Demonstra-se também um teorema de adição para os polinômios as-

sociados de Legendre, da mesma forma que se mostrou o teorema de Gralk, no capítulo II.

A. FUNÇÃO DE GREEN BIDIMENSIONAL

A função de Green para um potencial $1/r$ satisfaz a seguinte equação diferencial

$$(4.1) \quad (\hat{H} - E) G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

onde $\hat{H} = \hat{p}^2/2m - \alpha/r$, com $\alpha > 0$ e constante onde $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$.

O interesse, aqui, é procurar transformar a equação (4.1) numa equação em que o hamiltoniano seja o hamiltoniano de um oscilador harmônico.

Giovannini e Tonietti^[4] mostraram que para o caso do potencial $1/r$ bidimensional, o oscilador harmônico correspondente tem dimensão dois.

Deve-se, assim, buscar uma transformação de coordenadas, tal que $1/r$ possa ser escrito na forma $(\gamma^2 + \beta^2)^{-1}$. A transformação que permite escrever $1/r$ desta forma é a transformação que leva x e y em coordenadas parabólicas.

Com efeito, nessas coordenadas

$$(4.2) \quad \begin{aligned} x &= \frac{1}{2} (\lambda^2 - \mu^2) \\ y &= \lambda\mu \end{aligned}$$

$$\text{logo, } r = \frac{1}{2} (\lambda^2 + \mu^2).$$

O Laplaciano nessas coordenadas é dado por

$$(\lambda^2 + \mu^2)^{-1} \{ \partial^2 / \partial \lambda^2 + \partial^2 / \partial \mu^2 \}$$

e a função $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ que aparece no lado direito da equação (4.1) se transforma em

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}') = (\lambda^2 + \mu^2)^{-1} \delta(\lambda - \lambda') \delta(\mu - \mu').$$

Com esta transformação de coordenadas, escreve-se a equação

(4.1) como

$$(4.3) \quad \{(\lambda^2 + \mu^2)^{-1} \cdot [p_\lambda^2 + p_\mu^2]/2m - 2\alpha/(\lambda^2 + \mu^2) - E\} G(\lambda, \mu, \lambda', \mu', E) = \\ = (\lambda^2 + \mu^2)^{-1} \delta(\lambda - \lambda') \delta(\mu - \mu')$$

multiplicando-se esta equação a esquerda por $(\lambda^2 + \mu^2)$ e fazendo-se as mudanças

$$k^2 = -E \quad \text{e} \quad 2\alpha = \varepsilon, \text{ tem-se}$$

$$(4.4) \quad [p_\lambda^2/2m + p_\mu^2/2m + k^2\lambda^2 + k^2\mu^2 - \varepsilon] G(\lambda, \lambda', \mu, \mu', k) = \delta(\lambda - \lambda') \delta(\mu - \mu')$$

A equação acima tem a forma algébrica da equação diferencial para a função de Green de um oscilador harmônico isotrópico bidimensional nas variáveis λ e μ .

Calcula-se a função de Green para o potencial $1/r$ determinando-se primeiramente o propagador para a equação (4.4).

Para utilizar o método de ordenação temporal, escreve-se o hamiltoniano do oscilador na seguinte forma:

$$(4.5) \quad H = i\hbar\omega(P_\mu + Q_\mu + P_\lambda + Q_\lambda)$$

com $P_\mu = p_\mu^2/2m i\hbar\omega$, $Q_\mu = m\omega\mu^2/2i\hbar$, $P_\lambda = p_\lambda^2/2m i\hbar\omega$ e $Q_\lambda = m\omega\lambda^2/2i\hbar$ onde $\omega^2 = -2E/m$.

Com o hamiltoniano escrito dessa forma pode-se escrever o propagador utilizando-se os resultados do cap.11. Tem-se, assim

$$(4.6) \quad G(\lambda, \lambda', \mu, \mu', t) = m\omega/2\pi i\hbar \sin\omega t \cdot \\ \cdot \exp\left\{\frac{i m \omega}{2\hbar \sin\omega t} [(\lambda^2 + \lambda'^2 + \mu^2 + \mu'^2) \cos\omega t - 2(\lambda\lambda' + \mu\mu')]\right\}$$

utilizando-se as coordenadas polares no plano (r, θ) cujas relações com as coordenadas parabólicas são dadas por

$$(4.7) \quad \begin{aligned} \lambda &= \sqrt{2r} \cos \theta / 2 \\ \mu &= \sqrt{2r} \sin \theta / 2 \end{aligned}$$

tem-se

$$G(\vec{r}, \vec{r}', t) = m\omega / 2\pi i \hbar \sin \omega t \cdot$$

(4.8)

$$\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega t} [2(r+r') \cos \omega t - 4\sqrt{rr'} \cos \phi]\right\}$$

com $\phi = (\theta - \theta') / 2$.

Para se verificar que a expressão dada pela equação (4.8) realmente define o propagador para o potencial $1/r$, calcula-se a função de Green e mostra-se que os polos dessa função definem os níveis de energia corretamente.

A solução da equação (4.1), que define a função de Green, pode ser obtida pela transformada de Fourier do propagador. Nas variáveis parabólicas tem-se

$$(4.9) \quad G(\lambda', \mu', \lambda, \mu, \epsilon) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \exp(i\epsilon t / \hbar) G(\lambda', \mu', \lambda, \mu, t) dt$$

para $t > 0$.

Como mostrado no cap. I, pode-se escrever

$$(4.10) \quad G(\lambda', \mu', \lambda, \mu, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \Psi_n^*(\lambda', \mu') \exp(-iE_n t / \hbar) \Psi_n(\lambda, \mu)$$

onde Ψ_n são as funções de onda do oscilador harmônico bidimensional e E_n são os níveis de energia

Substituindo-se a expressão (4.9) na expressão (4.10) tem-se

$$G(\lambda', \mu', \lambda, \mu, \epsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \Psi_n^*(\lambda', \mu') \Psi_n(\lambda, \mu) \cdot$$

(4.11)

$$\cdot \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \exp[-it(E_n - \epsilon) / \hbar] dt$$

calculando-se a integral, que é a transformada de Fourier da função de Heaviside, obtêm-se

$$(4.12) \quad G(\lambda', \mu', \lambda, \mu, \epsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*(\lambda', \mu') \psi_n(\lambda, \mu) (E_n - \epsilon)^{-1}$$

que é a expansão da função de Green em autofunções do oscilador harmônico isotrópico bidimensional.

Essa soma pode ser transformada na seguinte integral^(11;12)

$$(4.13) \quad G(\lambda', \mu', \lambda, \mu, \epsilon) = m/\pi\hbar^2 \int_0^1 d\eta (1-\eta^2)^{-1} \eta^{-\epsilon/\hbar\omega} \cdot$$

$$\cdot \exp \left\{ -m\omega/\hbar \left[\frac{(\lambda^2 + \mu^2 + \lambda'^2 + \mu'^2)}{2} \frac{(1+\eta^2)}{(1-\eta^2)} - 2\eta \frac{(\lambda\lambda' + \mu\mu')}{(1-\eta^2)} \right] \right\}$$

que é a representação integral para a função de Green do oscilador harmônico i sotrópico bidimensional.

Voltando-se às coordenadas polares, tem-se

$$(4.14) \quad G(\vec{r}, \vec{r}', \epsilon) = m/\pi\hbar^2 \int_0^1 d\eta \eta^{-\epsilon/\hbar\omega} (1-\eta^2)^{-1} \cdot$$

$$\cdot \exp \left\{ -m\omega/\hbar \left[(r+r') \frac{(1+\eta^2)}{(1-\eta^2)} - 4\sqrt{rr'} \frac{\eta}{1-\eta^2} \cos\phi \right] \right\}$$

que é análoga à função de Green obtida por Hostler⁽¹⁵⁾ e Bellandi e Caetano⁽⁶⁾.

Obtêm-se, dessa forma, uma relação direta entre as funções de Green bidimensionais para o potencial $1/r$ e o oscilador harmônico isotrópico.

Se as variáveis polares são r e θ , escreve-se a função de Green para o potencial $1/r$ a partir da função de Green de um oscilador harmônico isotrópico, tomando-se, simplesmente, como variáveis polares $\sqrt{2}r$ e $\theta/2$.

A seguir determina-se a função de Green radial e, a partir dessa, calcula-se os níveis de energia.

Expandindo-se a exponencial $\exp\{\frac{m\omega}{\hbar} 4\sqrt{rr'} \frac{\eta}{1-\eta} \cos\phi\}$ numa série de Bessel⁽¹⁴⁾, ou seja,

$$\exp\left\{\frac{m\omega}{\hbar} 4\sqrt{rr'} \frac{\eta}{1-\eta} \cos\phi\right\} = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} I_{\ell}\left\{\frac{m\omega 4\sqrt{rr'}}{\hbar(1-\eta)} \eta \exp(i\ell\phi)\right\}$$

e fazendo-se a mudança de variável $1/\eta = \coth \xi/2$, obtêm-se

$$G(\vec{r}, \vec{r}', \epsilon) = m/2\pi\hbar^2 \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \exp(i\ell\phi) \int_0^{\infty} d\xi \coth \xi/2 \exp(\epsilon/\hbar\omega \xi/2) \cdot$$

(4.15)

$$\cdot \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}(r+r') \operatorname{ch}\xi\right\} I_{\ell}\left\{\frac{2m\omega\sqrt{rr'}}{\hbar} \operatorname{sh}\xi\right\}$$

A integral que aparece nessa expressão é o produto de duas funções de Whittaker⁽¹⁶⁾, ou seja

$$G(\vec{r}, \vec{r}', \epsilon) = (rr')^{-1/2}/4\pi\hbar\omega \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \exp\{i\ell(\theta-\theta')\} \Gamma\left(\frac{1}{2} + |\ell| - \frac{\epsilon}{2\hbar\omega}\right) \cdot$$

(4.16)

$$\cdot \mathcal{M}_{\epsilon/2\hbar\omega, \ell}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}r\right) \mathcal{W}_{\epsilon/2\hbar\omega, \ell}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}r'\right)$$

Utilizando-se a expansão⁽¹⁵⁾

$$(4.17) \quad G(\vec{r}, \vec{r}', \epsilon) = 1/2\pi \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \exp(i\ell\phi) G_{\ell}(r, r', \epsilon)$$

obtêm-se a função de Green radial

$$G_{\ell}(r, r', \epsilon) = \frac{1}{2\hbar\omega} (rr')^{-1/2} \Gamma\left(\frac{1}{2} + |\ell| - \frac{\epsilon}{2\hbar\omega}\right) \cdot$$

(4.18)

$$\cdot \mathcal{M}_{\epsilon/\hbar\omega, \ell}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}r\right) \mathcal{W}_{\epsilon/\hbar\omega, \ell}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}r'\right)$$

onde $\omega^2 = -2E/m$ e $\epsilon = 2\alpha$ que é exatamente a expressão obtida por Hostler⁽¹⁵⁾.

Os polos da função de Green radial fornecem os níveis de energia. Como as funções $\mathcal{M}_{\ell, m}(x)$ e $\mathcal{W}_{\ell, m}(x)$, são analíticas em todo o plano complexo, os polos da função de Green estão contidos na função $\Gamma(\frac{1}{2} + |\ell| - \frac{\epsilon}{2\hbar\omega})$, portanto, pode-se escrever

$$\left(\frac{1}{2} + |\ell| - \epsilon/2\hbar\omega\right) = -n$$

ou seja,

$$E = -m\alpha^2/2\hbar^2(n+|\ell|+1/2)^2$$

que é a expressão para os níveis de energia para o potencial tipo $1/r$ bidimensional.

B. TEOREMA DE ADIÇÃO PARA AS FUNÇÕES DE LEGENDRE

Um teorema de adição para as funções associadas de Legendre será derivado a partir da função de Green para o potencial $1/r$ bidimensional.

As funções de onda do potencial $1/r$ no espaço de momentos são expressas em termos das funções associadas de Legendre⁽¹⁷⁾. Assim, a função de Green será, também, escrita em termos das funções associadas de Legendre.

Este fato é usado aqui para se derivar um teorema de adição para essas funções, da mesma forma que se derivou o teorema de Graf⁴.

Determina-se a função de Green no espaço de momentos calculando-se a transformada de Fourier

$$(4.19) \quad G(\vec{p}, \vec{p}', E) = 1/2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} G(\vec{r}, \vec{r}', E) e^{-i\vec{p}' \cdot \vec{r}'} d\vec{r} d\vec{r}'$$

Calcula-se esta integral, usando-se coordenadas polares no plano e expandindo-se as exponenciais em termos da função de Bessel⁽¹⁴⁾

$$(4.20) \quad G(\vec{p}, \vec{p}', E) = 1/2\pi \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \exp(i n \alpha) \exp(i m \beta) \cdot \\ \cdot G(\vec{r}, \vec{r}', E) J_n(p r) J_m(p' r') d\vec{r} d\vec{r}'$$

onde $\alpha = \theta_p - \theta$ e $\beta = \theta_{p'} - \theta'$.

Utilizando-se a expressão (4.13), escreve-se

$$(4.21) \quad G(\vec{p}, \vec{p}', E) = (2\pi)^{-2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \sum_{n=-\infty}^\infty \sum_{m=-\infty}^\infty \sum_{\ell=-\infty}^\infty G^\ell(r, r', E) \cdot \\ \cdot J_n(pr) J_m(p'r') e^{in\alpha} e^{im\beta} e^{i\ell(\theta-\theta')} r dr r' dr' d\theta d\theta'$$

As integrais angulares fornecem

$$(4.22) \quad G(\vec{p}, \vec{p}', E) = (2\pi)^{-2} \sum_{\ell=-\infty}^\infty \exp[i\ell(\theta_p - \theta_{p'})] \cdot \\ \cdot \int_0^\infty \int_0^\infty dr dr' r r' G^\ell(r, r', E) J_\ell(pr) J_\ell(p'r')$$

Introduzindo-se na expressão anterior a expressão (4.15) obtêm-se

$$(4.23) \quad G(p, p', E) = (2\pi)^{-2} \sum_{\ell=-\infty}^\infty e^{i\ell(\theta_p - \theta_{p'})} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty d\xi dr dr' r r' \cdot \\ \cdot \coth^{E/\hbar\omega} \xi/2 \exp\{-\frac{m\omega}{\hbar}(r+r') \operatorname{ch}\xi\} \cdot \\ \cdot I_{2\ell}(\frac{2m\omega\sqrt{rr'}}{\hbar} \operatorname{sh}\xi) J_\ell(pr) J_\ell(p'r')$$

Utilizando-se as integrais⁽¹⁸⁾

$$(4.24) \quad \int_0^\infty dt t e^{-at} J_\ell(bt) J_{2\ell}(2c\sqrt{t}) = \\ = (a^2+b^2)^{-1/2} \exp\{-ac^2/(a^2+b^2)\} J_\ell\{bc^2/(a^2+b^2)\}$$

$$(4.25) \quad \int_0^\infty e^{-at} J_\nu(bt) J_\nu(ct) dt = \frac{1}{\pi} (bc)^{-1/2} Q_{\nu-1/2}(\frac{a^2+b^2+c^2}{2bc})$$

calcula-se as integrais nas variáveis κ e κ' , obtendo-se

$$(4.26) \quad G(\vec{p}, \vec{p}', E) = -(2\pi)^{-2} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \exp\{i\ell(\theta_p - \theta_{p'})\} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \frac{(pp')^{-3/2}}{w\pi} \int_0^{\infty} d\xi (1 + ch^2 \xi) sh^{-3} \xi \coth^{\varepsilon/\hbar w} \xi/2 Q'_{\ell-1/2}(K) + \right.$$

$$\left. + \frac{(pp')^{-5/2}}{w\pi} (w^2 + p^2)(w^2 + p'^2) \int_0^{\infty} d\xi ch^2 \xi sh^{-5} \xi \coth^{\varepsilon/\hbar w} \xi/2 Q''_{\ell-1/2}(K) \right\}$$

onde $K = \{(p'^2 + w^2 ch^2 \xi)(p^2 + w^2 ch^2 \xi) - w^4 sh^2 \xi (1 + ch^2 \xi) / (-2pp'w^2 sh^2 \xi)\}$ com $\varepsilon = 2\alpha$ e $w^2 = -2E/m$.

Fazendo-se a mudança de variável $\coth \xi/2 = \exp\{t/2\}$ e utilizando-se as relações de recorrência para os polinômios de Legendre⁽¹⁰⁾, obtêm-se

$$(4.27) \quad G(\vec{p}, \vec{p}', E) = -A_1 B^2 / (2\pi)^2 2B \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \exp(i\ell\phi) \int_{0+}^{\infty} dt \exp(bt) Q_{\ell-1/2}(A-Bcht)$$

com $\text{Im}(B) \neq 0$ sendo, $A_1 = (-pp')^{-3/2}/w\pi$, $A = \frac{(p'^2 - w^2)}{2pw} \frac{(p'^2 - w^2)}{2pw}$,

$B = \frac{(p^2 + w^2)}{2pw} \frac{(p'^2 + w'^2)}{2pw}$, $B = \varepsilon/\hbar w$ e $\phi = \theta - \theta'$.

Escrevendo-se os polinômios de Legendre numa representação integral⁽¹⁰⁾

$$Q_{\ell-1/2}(A-Bcht) = (\pi/2)^{1/2} \int_0^{\infty} du u^{-1/2} \exp\{-u(A-Bcht)\} I_{\ell}(u)$$

e introduzindo-se na expressão (4.27), obtêm-se

$$(4.28) \quad G(\vec{p}, \vec{p}', E) = -A_1 B^2 / 2B \sqrt{\frac{\pi}{2}} (2\pi)^{-2} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \exp(i\ell\phi) \cdot$$

$$\cdot \int_0^{\infty} du \exp(-uA) u^{-1/2} \int_{0+}^{\infty} dt \exp\{\beta t + uBcht\} I_{\ell}(u)$$

utilizando-se a integral⁽¹⁴⁾

$$I_v(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{0+} dt \exp\{zcht - vt\}$$

efetua-se a integral na variável t , obtendo-se

$$(4.29) \quad G(\vec{p}, \vec{p}', E) = -\bar{A}_1 \beta^2 / 2B \sqrt{\frac{\pi}{2}} (2\pi)^{-1} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \exp(i\ell\phi) \cdot \\ \cdot \int_0^{\infty} du u^{-1/2} \exp(-uA) I_{\ell}(u) I_{\beta}(Bu)$$

onde $\bar{A}_1 = A_1 \exp(i3\pi/2)$.

Fazendo-se a somatória⁽¹⁴⁾ e integrando-se obtêm-se

$$(4.30) \quad G(\vec{p}, \vec{p}', E) = -\bar{A}_1 \beta^2 / 4\pi B^{3/2} Q_{\beta-1/2}\{(A-\cos\phi)/B\}$$

Definindo-se

$$(p^2 - w^2)/(p^2 + w^2) = ch\alpha \quad e \quad (p'^2 - w^2)/(p'^2 + w^2) = ch\bar{\alpha}$$

tem-se

$$(4.31) \quad G(\vec{p}, \vec{p}', E) = -\bar{A}_1 \beta^2 / 4\pi B^{3/2} Q_{\beta-1/2}(ch\alpha ch\bar{\alpha} + sh\alpha sh\bar{\alpha} \cos\phi)$$

Obtêm-se o teorema de adição, calculando-se a integral da expressão (4.29), sem fazer a somatória, e comparando-se com a expressão (4.31).

Utilizando-se a integral⁽¹⁸⁾

$$(4.32) \quad \int_0^{\infty} \exp(-pt) t^{-1/2} I_u(at) I_v(bt) dt = \\ = \sqrt{c} \Gamma(u+v+1/2) P_{v-1/2}^{-u}(ch\theta) P_{u-1/2}^{-v}(ch\gamma)$$

onde $sh\theta = ac$, $sh\gamma = bc$ e $ch\theta ch\gamma = pc$ e a relação⁽¹⁰⁾

$$(4.33) \quad Q_v^u(x) = e^{iu\pi\sqrt{\pi/2}} \Gamma\{v+u+1\} (x^2-1)^{-1/4} P_{-u-1/2}^{-v-1/2}\{x/(x^2-1)^{-1/2}\}$$

obtêm-se

$$G(\vec{p}, \vec{p}', E) = -\bar{A}_1 \beta^2 / 4\pi \beta^{3/2} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} e^{i\ell\phi} e^{i\ell\pi} \frac{\Gamma(\beta+\ell+1/2)}{\Gamma(\beta-\ell+1/2)} \cdot$$

(4.34)

$$\cdot P_{\beta-1/2}^{-\ell} \{ (p^2 - w^2) / (p^2 + w^2) \} Q_{\beta-1/2}^{-\ell} \{ (p'^2 - w^2) / (p'^2 + w^2) \}$$

utilizando-se a relação⁽¹⁰⁾

$$Q_{\ell}^{-m}(x) = \frac{\Gamma(\ell+1-m)}{\Gamma(\ell+1+m)} (-1)^m Q_{\ell}^m(x)$$

e lembrando-se que $(p^2 - w^2) / (p^2 + w^2) = \text{ch}\alpha$ e $(p'^2 - w^2) / (p'^2 + w^2) = \text{ch}\bar{\beta}$

obtêm-se

$$(4.35) \quad G(\vec{p}, \vec{p}', E) = -\bar{A}_1 \beta^2 e^{i\pi 3/2} / 4\pi \beta^{3/2} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} e^{i\ell\phi} P_{\beta-1/2}^{-\ell}(\text{ch}\alpha) Q_{\beta-1/2}^{\ell}(\text{ch}\bar{\beta})$$

Comparando-se as expressões (4.31) e (4.35) obtêm-se o teorema de adição para os polinômios de Legendre.

$$Q_{\beta-1/2}(\text{ch}\alpha \text{ch}\bar{\beta} + \text{sh}\alpha \text{sh}\bar{\beta} \cos\phi) =$$

(4.36)

$$= \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \exp(i\ell\phi) P_{\beta-1/2}^{-\ell}(\text{ch}\alpha) Q_{\beta-1/2}^{\ell}(\text{ch}\bar{\beta})$$

Teoremas deste tipo foram determinados por Capelas Oliveira⁽⁷⁾.

A diferença com esses resultados é que o teorema aqui determinado é válido para as funções associadas de Legendre com o índice complexo.

Usando-se as relações entre as funções associadas de Legendre e as funções de Gegenbauer e Tchebichef, escreve-se, também, teoremas de adição para essas funções.

O resultado mais importante deste trabalho reside no estabelecimento da conexão entre o propagador para o potencial tipo $1/r$ e o propagador para um oscilador harmônico num espaço bidimensional. Como consequência, obtêm-se a relação entre as funções de Green, que são transformadas de Fourier do propagador na variável temporal.

Essa conexão foi estabelecida usando-se o operador de evolução temporal da mecânica quântica. Em essência mostra-se que, através de uma transformação conveniente de coordenadas o operador de evolução temporal para o potencial $1/r$ pode ser transformado num operador de evolução temporal para um oscilador harmônico isotrópico, cuja determinação do propagador pode ser feita usando-se a técnica de ordenação temporal.

Um problema subsequente, de interesse, será a extensão da técnica para o problema tridimensional e encontrar a transformação adequada que possibilite relacionar o problema coulombiano tridimensional com o do oscilador harmônico isotrópico quadridimensional, dimensão esta, mínima possível, como mostrado por Bergmann e Frischman⁽³⁾.

Uma interpretação física dessas transformações, bem como o seu significado dentro de um contexto de teoria de grupo faz-se necessário.

Estes são alguns dos aspectos que serão abordados num futuro, dando uma continuidade natural a este trabalho.

REFERÊNCIAS

- (1) E. Schrödinger, *Collected Papers on*; 2^o ed. Wave Mechanics: Chelsea Pub. Comp. N.Y. (1978)
- (2) E. Schrödinger, *Proc.R. Irish. Acad.* 46 A, 183 (1941)
- (3) D.Bergmann and V. Frishman, *J.Math. Phys.* 6, 1855 (1965)
- (4) A. Giovannini and T. Tonietti, *Nuovo Cimento* 54 A, 1 (1968)
- (5) R.P.Feynmann and A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw Hill, New York, 1965)
- (6) J.Bellandi Filho and E.S.Caetano Neto, *Lett. al Nuovo Cimento*, 16, 331 (1976)
- (7) E.Capelas de Oliveira, *Tese de Mestrado* (1979) e *Tese de Doutorado* (1982) I.F.G.M. - UNICAMP/SP.
- (8) A.Messiah, *Mécanique Quantique* (Dunod-Paris-1962)
- (9) M.S.Marinov, *Phys. Reports*, 60, 1-57 (1980)
- (10) Bateman Manuscript Projects, *Higher Transcendental Functions*, edited by Erdélyi, vol.2 (New York, N.Y. - 1953)
- (11) J.Bellandi Filho and E.S.Caetano Neto, *J.Phys.A Math.Gen.* 9, 683 (1976)
- (12) G.Berendt and E.Weimar, *Lett. al Nuovo Cimento*, 5, 8, 613 (1972)
- (13) R.P.Feynmann, *Phys.Rev.* 84, 108 (1951)
- (14) G.N.Watson, *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*, second edition (Cambridge at the University Press - 1966)
- (15) L.C.Hostler, *J.Math.Phys.*, 11, 10 (1970)
- (16) H.Bucholtz, *The Confluent Hypergeometric Function* (Springer - Verlag - Berlin - 1969)
- (17) E.A.Hylleraas, *Z.für Physik*, 74, 216 (1932)
- (18) I.S.Gradstein and I.M.Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, Inc. 1980)