SEPARAÇÃO DE VARIÁVEIS E O DETERMINANTE DE STÄCKEL

Este exemplar corresponde a redação final da tese devidamente corrigida e defendida pela Sra. Elizabete Romão Martins e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 20 de dezembro de 1991

Prof. Dr. ______________________

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação, UNICAMP, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Matemática Aplicada.

SEPARAÇÃO DE VARIÁVEIS E O DETERMINANTE DE STÄCKEL

AUTORA: ELIZABETE ROMÃO MARTINS

ORIENTADOR: PROF. DR. EDMUNDO CAPELAS DE OLIVEIRA

IMECC - UNICAMP

dezembro 1991

CAMPINAS - SP

A minha família

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Edmundo Capelas de Oliveira pela valiosa orientação.

Ao Prof. Dr. José Luis Boldrini pelos conhecimentos transmitidos e pela disponibilidade em atender-me continuamente.

Ao Prof. Dr. Waldir A. Rodrigues pela leitura preliminar do trabalho.

Aos monitores do Laboratório de Matemática Aplicada do IMECC, pela orientação na utilização dos micros.

Ao Departamento de Matemática Aplicada pelas facilidades concedidas para a realização deste trabalho.

Aos amigos: José Emílio, pela indicação de referências oportunas e pela presteza em ajudar-me em vários momentos; Luis Alberto, responsável por alguns desenhos; Lílian que me ensinou a usar o Chiwriter.

Às instituições CNPQ e CAPES pelo suporte financeiro.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO

No campo da Física-Matemática existe uma série de equações a derivadas parciais envolvendo o Laplaciano. Dentre estas equações podemos citar: a equação de onda, a equação de Helmholtz, a equação de Laplace, a equação de difusão, a equação de Poisson e a equação de Schrödinger.

Uma vez que, em análise, a equação de onda e a equação de difusão, podem ser reduzidas à equação de Helmholtz, separando a parte temporal, e a equação de Poisson pode ser reduzida à equação de Laplace por uma mudança de variáveis, somente três das equações acima mencionadas requerem um tratamento diferenciado, a saber: a equação de Helmholtz, a equação de Laplace e a equação de Schrödinger.

Destas três equações podemos ainda, a partir da equação de Schrödinger, que descreve uma partícula num campo de potencial, reduzí-la à equação de Helmholtz, bastando para tal considerar o potencial nulo e a energia sendo uma constante. Tomando esta constante nula, reduzimos a equação de Helmholtz à equação de Laplace, portanto o estudo do operador de Laplace joga um papel fundamental no estudo das equações a derivadas parciais emergentes em inúmeros problemas importantes da Física-Matemática.

O método clássico para resolver uma equação a derivadas parciais lineares é o método de separação de variáveis, também chamado método de Fourier. A equação a derivadas parciais em n variáveis independentes é levada a n equações diferenciais ordinárias. Então, o estudo da separabilidade é importante uma vez que, em muitos sistemas de coordenadas tal processo é impossível, mesmo para a equação de Laplace. Na presente dissertação discutiremos apenas equações a derivadas parciais de segunda ordem, lineares e com três variáveis independentes.

O estudo da separabilidade de uma equação a derivadas parciais foi tema para vários autores, dentre estes podemos citar Eisenhart[1] que na década de trinta mostrou que existem somente onze sistemas de coordenadas no espaço euclideano tridimensional, para os quais a equação de Helmholtz é completamente separável; Robertson[2] discutiu as condições de separabilidade para a equação de Schrödinger e, na década de cinquenta Moon-Spencer[3] discutiram as condições para a separabilidade das equações de Helmholtz e de Laplace. Todos estes estudos estão baseados no clássico trabalho desenvolvido por Stäckel[4].

Destacamos ainda os trabalhos de Moon-Spencer[5] e Levinson-Bogert-Redheffer[6] os quais, independentemente, discutiram a separabilidade da equação de Laplace de modos diversos e encontraram resultados também diversos. O confronto entre estes resultados encontra-se num trabalho de Moon-Spencer[7]. Na década de sessenta Makarov - Smorodinsk - Valiev-Winternitz[8] recuperaram os resultados de Eisenhart[1], quando do estudo da separabilidade da equação de Schrödinger em termos de dois operadores quadráticos no momento linear. E, finalmente, Boyer-Kalnins-Miller[9] discutiram o problema em termos de técnicas de Teoria de Grupo.

A presente dissertação tem como objetivo discutir estes onze sistemas de coordenadas para os quais a equação de Helmholtz é completamente separável e, em consequência a separabilidade da equação de Laplace, bem como apresentar a forma mais geral para o potencial a fim de que a equação de Schrödinger seja, ainda, completamente separável, a partir das propriedades da chamada matriz de Stäckel. Para estes onze sistemas de coordenadas apresentamos as respectivas equações diferenciais ordinárias bem como suas soluções e a forma mais geral para o potencial.

Esta dissertação está disposta do seguinte modo: No primeiro capítulo discutem-se as coordenadas curvilíneas e a partir destas escreve-se a forma mais geral para o operador de Laplace; no segundo capítulo, discute-se a separabilidade das equações de Helmholtz e de Laplace, a partir do método de separação de variáveis, usando a matriz de Stäckel, apresentando as equações diferenciais ordinárias; no capítulo três discute-se, em detalhes, a equação de Helmholtz em coordenadas esféricas; no capítulo quatro, apresenta-se a forma mais geral para o potencial a fim de que a equação de Schrödinger seja completamente separável; no capítulo cinco discutimos, em detalhes, o sistema de coordenadas parabólicas, resolvendo a equação de Schrödinger para o efeito Stark. No capítulo seis apresentamos, a equação de Helmholtz, as equações separadas, as respectivas soluções e a forma mais geral para o potencial nos outros nove sistemas de coordenadas. No apêndice, discutimos a maneira em que são obtidos os onze sistemas de coordenadas para os quais a equação de Helmholtz é completamente separável, e, finalmente, apresentamos as conclusões.

1. COORDENADAS CURVILÍNEAS

Em todos os problemas que emergem do contexto da física-matemática, a escolha do sistema de coordenadas é fator preponderante no que concerne seu tratamento . A correta escolha do sistema de coordenadas - simetria do problema - acarreta uma grande simplificação.

Entre esses problemas citamos: para uma partícula quântica confinada em uma caixa devemos usar coordenadas retangulares , para um fio condutor ao longo de um eixo carregando corrente , ondas elétromagnétics num guia de ondas co-axial , usamos coordenadas cilíndricas , para uma esfera num capo elétrico uniforme , as coordenadas devem ser esféricas , descrevemos o campo gravitacional terrestre usando coordenadas esferoidais , etc...

Como trabalharemos com outros sistemas de coordenadas nosso objetivo neste capítulo é exprimir o operador de Laplace tridimensional em coordenadas curvilíneas, com esse propósito discutiremos: transformação de coordenadas , vetores unitários , elemento de comprimento de arco e o laplaciano em coordenadas curvilíneas .

TRANSFORMAÇÃO DE COORDENADAS

Sejam as coordenadas (x,y,z) de um ponto qualquer do $\mathbb{R}^3$ expressas em função de (u_1,u_2,u_3) de modo que :

$$x = x(u_1,u_2,u_3) \qquad y = y(u_1,u_2,u_3) \qquad z = z(u_1,u_2,u_3) \quad (1.1)$$

Suponhamos que as equações (1.1) possam ser resolvidas dando u_1,u_2,u_3 em função de x,y,z , isto é :

$$u_1 = u_1(x,y,z) \qquad u_2 = u_2(x,y,z) \qquad u_3 = u_3(x,y,z) \quad (1.2)$$

As funções (1.1) e (1.2) são consideradas unívocas com derivadas contínuas, num certo domínio, de modo que há uma única correspondência entre (x,y,z) e (u_1,u_2,u_3) . Esta hipótese pode não ser verificada em certos pontos e então há necessidade de considerações especiais[10].

Dado um ponto P de coordenadas retangulares (x,y,z) podemos, com as equações (1.2) associá-lo a um conjunto único de coordenadas (u_1,u_2,u_3) chamadas coordenadas curvilíneas de P . Os sistemas (1.1) ou (1.2) definem uma transformação de coordenadas.

COORDENADAS CURVILÍNEAS ORTOGONAIS

As superfícies $u_1 = c_1$, $u_2 = c_2$, $u_3 = c_3$, onde c_1, c_2 e c_3 são constantes , chamam-se superfícies coordenadas e cortam-se aos pares em curvas chamadas curvas coordenadas .

Se as superfícies se interceptam em ângulos retos o sistema de coordenadas curvílineas é dito ortogonal .

As curvas coordenadas u_1, u_2, u_3 de um sistema curvilíneo são análogas aos eixos coordenados x,y,z de um sistema retangular .

VETORES UNITÁRIOS

Seja $r = xi + yj + zk$ o vetor posição de um ponto P.
De (1.1) podemos escrever $r = r(u_1,u_2,u_3)$

Um vetor tangente à curva u_1 em P (para a qual u_2 e u_3 são constantes) é $\frac{\partial r}{\partial u_1}$, logo um vetor tangente unitário nessa direção é :

$$e_1 = \frac{\dfrac{\partial r}{\partial u_1}}{\left| \dfrac{\partial r}{\partial u_1} \right|}$$

ou ainda:

$$\frac{\partial r}{\partial u_1} = \left| \frac{\partial r}{\partial u_1} \right| e_1 \quad \text{e, considerando } h_1 = \left| \frac{\partial r}{\partial u_1} \right| \text{, temos: } \frac{\partial r}{\partial u_1} = h_1 e_1$$

Analogamente, se e_2 e e_3 são os vetores tangentes unitários às curvas u_2 e u_3 em P, respectivamente, temos:

$$\frac{\partial r}{\partial u_2} = h_2 e_2 \qquad \text{e} \qquad \frac{\partial r}{\partial u_3} = h_3 e_3$$

onde $h_2 = \left| \dfrac{\partial r}{\partial u_2} \right|$ e $h_3 = \left| \dfrac{\partial r}{\partial u_3} \right|$

Logo, com:

$$r = x(u_1, u_2, u_3) i + y(u_1, u_2, u_3) j + z(u_1, u_2, u_3) k$$

temos:

$$\frac{\partial r}{\partial u_1} = \frac{\partial x}{\partial u_1} i + \frac{\partial y}{\partial u_1} j + \frac{\partial z}{\partial u_1} k$$

$$h_1 = \left| \frac{\partial r}{\partial u_1} \right| = \left[\left(\frac{\partial x}{\partial u_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u_1} \right)^2 \right]^{1/2}$$

Assim:

$$h_n = \left| \frac{\partial r}{\partial u_n} \right| = \left[\left(\frac{\partial x}{\partial u_n} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u_n} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u_n} \right)^2 \right]^{1/2} \qquad (1.3)$$

As quantidades h_1, h_2, h_3 são chamadas fatores de proporcionalidade. Os vetores unitários e_1, e_2, e_3 têm o sentido do crescimento de u_1, u_2, u_3 respectivamente.

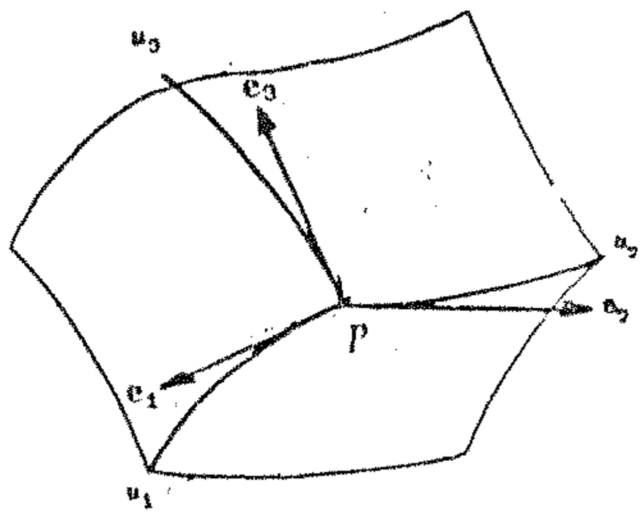

fig 1 vetores unitários e_1, e_2, e_3 no ponto P

Assim, em cada ponto P de um sistema de coordenadas curvilíneas existe um conjunto de vetores unitários e_1, e_2, e_3 tangentes às curvas coordenadas (fig.1). Este conjunto é análogo aos vetores i,j,k unitários, do sistema de coordenadas retangulares, mas difere deste pelo fato de poder mudar de direção de ponto para ponto.

Logo, podemos representar um vetor A em função dos vetores básicos unitários e_1, e_2, e_3, da seguinte forma:

$$A = A_1e_1 + A_2e_2 + A_3e_3$$

ELEMENTO DE COMPRIMENTO DE ARCO

A partir de $r = r(u_1, u_2, u_3)$,temos:

$$dr = \frac{\partial r}{\partial u_1}du_1 + \frac{\partial r}{\partial u_2}du_2 + \frac{\partial r}{\partial u_3}du_3 = h_1du_1e_1 + h_2du_2e_2 + h_3du_3e_3$$

A diferencial do comprimento de arco ds, é dada por:

$ds^2 = dr.dr$, portanto

$ds^2 = (h_1du_1e_1 + h_2du_2e_2 + h_3du_3e_3).(h_1du_1e_1 + h_2du_2e_2 + h_3du_3e_3)$

Para sistemas ortogonais temos : $e_i . e_j = \delta_{ij}$, onde : $\delta_{ij} = 1$ se $i=j$, $\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$, portanto :

$$ds^2 = h_1^2\, du_1^2 + h_2^2\, du_2^2 + h_3^2\, du_3^2 \qquad (1.4)$$

Como estamos interessados em exprimir o operador de Laplace em coordenadas curvilíneas e $\nabla^2\phi = \nabla.\nabla\phi$ (o divergente do gradiente), vamos primeiro exprimir o gradiente ($\nabla\phi$) e depois o divergente ($\nabla.A$) ,onde $A = \nabla\phi$.

EXPRESSÃO PARA O GRADIENTE ($\nabla\phi$)

Seja $\phi = \phi(u_1, u_2, u_3)$ uma função escalar. Façamos :

$$\nabla\phi = f_1 e_1 + f_2 e_2 + f_3 e_3$$

onde f_1, f_2, f_3 são funções a serem determinadas. Como:

$$dr = \frac{\partial r}{\partial u_1} du_1 + \frac{\partial r}{\partial u_2} du_2 + \frac{\partial r}{\partial u_3} du_3 = h_1 du_1 e_1 + h_2 du_2 e_2 + h_3 du_3 e_3 \qquad (1.5)$$

temos :

$$d\phi = \nabla\phi \,.dr = h_1 f_1 du_1 + h_2 f_2 du_2 + h_3 f_3 du_3 \qquad (1.6)$$

$$d\phi = \frac{\partial\phi}{\partial u_1} du_1 + \frac{\partial\phi}{\partial u_2} du_2 + \frac{\partial\phi}{\partial u_3} du_3 \qquad (1.7)$$

Identificando (1.6) com (1.7), temos :

$$f_1 = \frac{\partial\phi}{\partial u_1} du_1 \qquad f_2 = \frac{\partial\phi}{\partial u_2} du_2 \qquad f_3 = \frac{\partial\phi}{\partial u_3} du_3 \qquad (1.8)$$

Logo, $\nabla\phi = \frac{1}{h_1}\frac{\partial\phi}{\partial u_1} e_1 + \frac{1}{h_2}\frac{\partial\phi}{\partial u_2} e_2 + \frac{1}{h_3}\frac{\partial\phi}{\partial u_3} e_3$

EXPRESSÃO PARA O DIVERGENTE DIV A = ∇ . A

Seja $A = A_1 e_1 + A_2 e_2 + A_3 e_3$ uma função vetorial das coordenadas curvilíneas ortogonais.

Considerando $\phi = u_1$, temos $\nabla u_1 = \frac{1}{h_1} e_1$, analogamente

$$\nabla u_2 = \frac{1}{h_2} e_2 \qquad \nabla u_3 = \frac{1}{h_3} e_3$$

Fazendo $\quad \nabla u_2 \times \nabla u_3 = \frac{e_2 \times e_3}{h_2 h_3} = \frac{e_1}{h_2 h_3}$

temos $\quad e_1 = h_2 h_3 (\nabla u_2 \times \nabla u_3)$, analogamente:

$$e_2 = h_1 h_3 (\nabla u_3 \times \nabla u_1)$$

$$e_3 = h_2 h_1 (\nabla u_1 \times \nabla u_2)$$

Assim :

$$\nabla \cdot (A_1 e_1) = \nabla \cdot (A_1 h_2 h_3 (\nabla u_1 \times \nabla u_3))$$

Como $\nabla \cdot (\phi A) = \nabla \phi \cdot A + \phi \, \nabla \cdot A$, temos:

$$\nabla \cdot (A_1 e_1) = \nabla (A_1 h_2 h_3) \cdot (\nabla u_2 \times \nabla u_3) + A_1 h_2 h_3 \nabla \cdot (\nabla u_2 \times \nabla u_3)$$

$$= \nabla (A_1 h_2 h_3) \cdot \frac{e_1}{h_2 h_3}$$

pois $\nabla \cdot (\nabla u_2 \times \nabla u_3) = 0$

Portanto :

$$\nabla \cdot (A_1 e_1) = \nabla (A_1 h_2 h_3) \cdot \frac{e_1}{h_2 h_3} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial u_1} (A_1 h_2 h_3)$$

Analogamente :

$$\nabla \cdot (A_2 e_2) = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial u_2} (A_2 h_1 h_3)$$

$$\nabla \cdot (A_3 e_3) = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial u} (A_3 h_2 h_1)$$

Então, como,

div $A = \nabla \cdot A = \nabla \cdot (A_1 e_1) + \nabla \cdot (A_2 e_2) + \nabla \cdot (A_3 e_3)$, temos para o divergente:

$$\text{div } A = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial u_1} (A_1 h_2 h_3) + \frac{\partial}{\partial u_2} (A_2 h_1 h_3) + \frac{\partial}{\partial u_3} (A_3 h_1 h_2) \right] \tag{1.9}$$

EXPRESSÃO PARA O LAPLACIANO $(\nabla^2\phi)$

A partir de $\nabla \cdot \phi = \frac{1}{h_1}\frac{\partial\phi}{\partial u_1}e_1 + \frac{1}{h_2}\frac{\partial\phi}{\partial u_2}e_2 + \frac{1}{h_3}\frac{\partial\phi}{\partial u_3}e_3$

Fazendo-se $A = \nabla \cdot \phi$, temos :

$$A_1 = \frac{1}{h_1}\frac{\partial\phi}{\partial u_1} \qquad A_2 = \frac{1}{h_2}\frac{\partial\phi}{\partial u_2} \qquad A_3 = \frac{1}{h_3}\frac{\partial\phi}{\partial u_3}$$

Como $\nabla \cdot A = \nabla \cdot \nabla\phi = \nabla^2\phi$, temos :

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{h_1h_2h_3}\left[\frac{\partial}{\partial u_1}\left(\frac{h_2h_3}{h_1}\frac{\partial\phi}{\partial u_1}\right) + \frac{\partial}{\partial u_2}\left(\frac{h_1h_3}{h_2}\frac{\partial\phi}{\partial u_2}\right) + \frac{\partial}{\partial u_3}\left(\frac{h_2h_1}{h_3}\frac{\partial\phi}{\partial u_3}\right)\right]$$

Logo o laplaciano de ϕ é dado por :

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{h_1h_2h_3}\sum_{n=1}^{3}\frac{\partial}{\partial u_n}\left(\frac{h_1h_2h_3}{(h_n)^2}\frac{\partial\phi}{\partial u_n}\right) \qquad (1.10)$$

Uma outra maneira de escrever o laplaciano é usando em vez dos fatores de proporcionalidade (h_i's), os coeficientes métricos g_{ij} definidos por :

$$g_{ij} = \frac{\partial r}{\partial u_i}\cdot\frac{\partial r}{\partial u_j}$$

Em sistemas ortogonais temos:

$$g_{ii} = \frac{\partial r}{\partial u_i} \cdot \frac{\partial r}{\partial u_i} = \left|\frac{\partial r}{\partial u_i}\right|^2 e_i \cdot e_i = (h_i)^2 \ , \ i = 1,2,3 \quad (1.11)$$

$$g_{ij} = \frac{\partial r}{\partial u_i} \cdot \frac{\partial r}{\partial u_j} = \left|\frac{\partial r}{\partial u_i}\right| \cdot \left|\frac{\partial r}{\partial u_j}\right| e_i \cdot e_j = 0 \ , \ \text{se } i \neq j \quad (1.12)$$

com

$$g = \begin{vmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{vmatrix} = (h_1)^2 (h_2)^2 (h_3)^2 = g_{11}\, g_{22}\, g_{33} \qquad (1.13)$$

$(g)^{1/2} = h_1 h_2 h_3$, bem como

$$\frac{(g)^{1/2}}{g_{11}} = \frac{h_1 h_2 h_3}{(h_1)^2} \qquad \frac{(g)^{1/2}}{g_{22}} = \frac{h_1 h_2 h_3}{(h_2)^2} \qquad \frac{(g)^{1/2}}{g_{33}} = \frac{h_1 h_2 h_3}{(h_3)^2}$$

g_{ij} são chamados coeficientes métricos.

Então, a expressão para o laplaciano toma a seguinte forma

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{(g)^{1/2}} \left[\frac{\partial}{\partial u_1}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{11}} \frac{\partial\phi}{\partial u_1}\right) + \frac{\partial}{\partial u_2}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{22}} \frac{\partial\phi}{\partial u_{22}}\right) + \frac{\partial}{\partial u_3}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{33}} \frac{\partial\phi}{\partial u_3}\right)\right]$$

ou ainda, na forma compacta:

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{(g)^{1/2}} \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} \frac{\partial\phi}{\partial u_i} \right) \qquad (1.14)$$

2. CONDIÇÕES DE SEPARABILIDADE PARA AS EQUAÇÕES DE HELMHOLTZ E DE LAPLACE

O propósito deste capítulo é apresentar condições necessárias e suficientes para a separabilidade das equações de Helmholtz $(\nabla^2\varphi+k^2\varphi=0)$ e de Laplace $(\nabla^2\varphi=0)$ tridimensionais.

Definiremos a matriz de Stäckel, que tem um papel importante na separabilidade.

Como, na maioria dos problemas práticos, utilizam-se sistemas de coordenadas cilíndricos ou rotacionais, apresentaremos os coeficientes métricos nestes sistemas e mostraremos que as condições de separabilidade são simplificadas.

Definição: Se a suposição $\varphi = U^1(u_1).U^2(u_2)\ldots\ \ldots U^n(u_n)$

$$\varphi = \prod_{i=1}^{n} U^i(u_i)$$

permite a separação da equação diferencial parcial em n equações diferenciais ordinárias, a equação é dita *simplesmente separável*.

Definição: Se a suposição $\varphi = \dfrac{U^1(u_1).U^2(u_2)\ldots\ldots U^n(u_n)}{R\,(u_1,u_2,\ldots\ldots\ldots u_n)}$

permite a separação da equação diferencial parcial em n equações diferenciais ordinárias e $R\neq0$ a equação é dita *R-separável*.

R-separação da equação de Laplace foi estudada por C. Neumann[11] (1.862), Wangerin[12] (1.875), Darboux[13] (1878) Böcher[14] (1.891)

R-separação da equação de Helmholtz foi estudada por Domina Eberle Spencer[8] (1.952), e outros.

Ressaltamos, entretanto, que estamos interessados em separação simples e daqui para frente esta palavra, simples, será omitida.

A- SEPARABILIDADE DA EQUAÇÃO DE HELMHOLTZ

Teorema 2.1: As condições necessárias e suficientes para que a equação de Helmholtz, para a função $\varphi = \varphi(u_1, u_2, u_3)$, num espaço euclideano tridimensional, com um sistema de coordenadas ortogonais, seja separável são que os coeficientes métricos satisfaçam as equações:

$$g_{ii} = \frac{S}{M_{i1}}$$

$$\frac{(g)^{1/2}}{S} = \prod_{i=1}^{3} f_i(u_i)$$

onde S é o determinante da matriz de Stäckel $[S] = [\phi_{ij}(u_i)]$, M_{i1}, i=1,2,3 são os cofatores dos elementos da primeira coluna da matriz [S] e f_i é função quando muito de u_i, sendo:

$$\phi_{ij}(u_i) = \frac{-1}{f_i(u_i)} \frac{\partial}{\partial \alpha_j} \left[\frac{1}{U^i} \frac{d}{du_i}\left(f_i \frac{dU^i}{du_i}\right) \right]$$

Prova: A equação de Helmholtz $(\nabla^2\varphi+k^2\varphi=0)$ é dada por:

$$\frac{1}{(g)^{1/2}} \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial u_i}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} \frac{\partial \varphi}{\partial u_i}\right) + k^2\varphi = 0 \qquad (2.1)$$

Sendo:

$$g_{ij} = 0 \quad \text{se} \quad i \neq j$$

$$g_{ii} = (h_i)^2 \quad i=1,2,3 \qquad (2.2)$$

$$g = g_{11} \cdot g_{22} \cdot g_{33}$$

Se $\varphi = \varphi(u_1,u_2,u_3)$ pode ser escrito como o produto:

$$\varphi = U^1(u_1).U^2(u_2).U^3(u_3) \qquad (2.3)$$

substituindo na equação (2.1), obtemos:

$$\frac{1}{(g)^{1/2}} \left[U^2U^3 \frac{\partial}{\partial u_1}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{11}} \frac{dU^1}{du_1} \right) + U^1U^3 \frac{\partial}{\partial u_2}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{22}} \frac{dU^2}{du_2} \right) + \right.$$

$$\left. + U^1U^2 \frac{\partial}{\partial u_3}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{33}} \frac{dU^3}{du_3} \right)\right] + k^2 U^1U^2U^3 = 0$$

multiplicando por: $\dfrac{(g)^{1/2}}{U^1U^2U^3}$, temos:

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{U^i} \frac{\partial}{\partial u_i}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} \frac{dU^i}{du_i}\right) + k^2 (g)^{1/2} = 0 \qquad (2.4)$$

Uma condição necessária para separabilidade é que $\dfrac{(g)^{1/2}}{g_{ii}}$ na eq.(2.4) possa ser expresso como o produto:

$$\frac{(g)^{1/2}}{g_{11}} = f_1(u_1) \cdot F_1(u_2,u_3)$$

$$\frac{(g)^{1/2}}{g_{22}} = f_2(u_2) \cdot F_2(u_1,u_3) \qquad (2.5)$$

$$\frac{(g)^{1/2}}{g_{33}} = f_3(u_3) \cdot F_3(u_1,u_2)$$

Se esta condição é satisfeita a eq.(2.4) toma a seguinte forma

$$\frac{F_1}{U^1}\frac{d}{du_1}\left(f_1\frac{dU^1}{du_1}\right) + \frac{F_2}{U^2}\frac{d}{du_2}\left(f_2\frac{dU^2}{du_2}\right) + \frac{F_3}{U^3}\frac{d}{du_3}\left(f_3\frac{dU^3}{du_3}\right) + k^2(g)^{1/2} = 0$$

ou ainda,

$$\sum_{i=1}^{3}\frac{F_i}{U^i}\frac{d}{du_i}\left(f_i\frac{dU^i}{du_i}\right) + k^2\,(g)^{1/2} = 0 \qquad (2.6)$$

As derivadas parciais desapareceram mas a equação ainda não está na forma separável por causa da presença de F_i e $(g)^{1/2}$.

As quantidades $(g)^{1/2}$ F_i e f_i são características do sistema de coordenadas e são inteiramente independentes das condições de contorno.

Por outro lado, U^i depende do sistema de coordenadas e das constantes de separação $\alpha_1=k^2$, α_2 e α_3 as quais são determinadas pelas condições de contorno.

Como as funções envolvidas dependem de α_1, α_2, α_3, diferenciando a eq.(2.6) com respeito a α_i, i = 1,2,3, temos as três equações:

$$\frac{\partial}{\partial\alpha_1}\left[\sum_{i=1}^{3} \frac{F_i}{U^i} \frac{d}{du_i}\left(f_i \frac{dU^i}{du_i}\right)\right] + (g)^{1/2} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial\alpha_2}\left[\sum_{i=1}^{3} \frac{F_i}{U^i} \frac{d}{du_i}\left(f_i \frac{dU^i}{du_i}\right)\right] = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial\alpha_3}\left[\sum_{i=1}^{3} \frac{F_i}{U^i} \frac{d}{du_i}\left(f_i \frac{dU^i}{du_i}\right)\right] = 0$$

Da primeira equação:

$$F_1 \frac{\partial}{\partial\alpha_1}\left[\frac{1}{U^1} \frac{d}{du_1}\left(f_1 \frac{dU^1}{du_1}\right)\right] + F_2 \frac{\partial}{\partial\alpha_1}\left[\frac{1}{U^2} \frac{d}{du_2}\left(f_2 \frac{dU^2}{du_2}\right)\right] +$$

$$+ F_3 \frac{\partial}{\partial\alpha_1}\left[\frac{1}{U^3} \frac{d}{du_3}\left(f_3 \frac{dU^3}{du_3}\right)\right] + (g)^{1/2} = 0$$

Multiplicando por (-1) e considerando, por conveniência:

$$\phi_{11}(u_1) = \frac{-1}{f_1(u_1)} \; \frac{\partial}{\partial\alpha_1}\left[\frac{1}{U^1}\,\frac{d}{du_1}\left(f_1\,\frac{dU^1}{du_1}\right)\right]$$

$$\phi_{21}(u_2) = \frac{-1}{f_2(u_2)} \; \frac{\partial}{\partial\alpha_1}\left[\frac{1}{U^2}\,\frac{d}{du_2}\left(f_2\,\frac{dU^2}{du_2}\right)\right]$$

$$\phi_{31}(u_3) = \frac{-1}{f_3(u_3)} \; \frac{\partial}{\partial\alpha_1}\left[\frac{1}{U^3}\,\frac{d}{du_3}\left(f_3\,\frac{dU^3}{du_3}\right)\right]$$

temos:

$$f_1F_1\phi_{11}(u_1) + f_2F_2\phi_{21}(u_2) + f_3F_3\phi_{31}(u_3) = (g)^{1/2}$$

Analogamente para a segunda e terceira equações:

$$f_1F_1\phi_{12}(u_1) + f_2F_2\phi_{22}(u_2) + f_3F_3\phi_{32}(u_3) = 0$$

sendo $\phi_{i2}(u_i) = \dfrac{-1}{f_i(u_i)} \; \dfrac{\partial}{\partial\alpha_2}\left[\dfrac{1}{U^i}\,\dfrac{d}{du_i}\left(f_i\,\dfrac{dU^i}{du_i}\right)\right] \qquad i = 1,2,3$

$$f_1F_1\phi_{13}(u_1) + f_2F_2\phi_{23}(u_2) + f_3F_3\phi_{33}(u_3) = 0$$

sendo $\phi_{i3}(u_i) = \dfrac{-1}{f_i(u_i)} \; \dfrac{\partial}{\partial\alpha_3}\left[\dfrac{1}{U^i}\,\dfrac{d}{du_i}\left(f_i\,\dfrac{dU^i}{du_i}\right)\right] \qquad i = 1,2,3$

Assim:

$$\begin{aligned} f_1F_1\phi_{11}(u_1) + f_2F_2\phi_{21}(u_2) + f_3F_3\phi_{31}(u_3) &= (g)^{1/2} \\ f_1F_1\phi_{12}(u_1) + f_2F_2\phi_{22}(u_2) + f_3F_3\phi_{32}(u_3) &= 0 \\ f_1F_1\phi_{13}(u_1) + f_2F_2\phi_{23}(u_2) + f_3F_3\phi_{33}(u_3) &= 0 \end{aligned} \qquad (2.7)$$

onde

$$\phi_{ij}(u_i) = \frac{-1}{f_i(u_i)} \frac{\partial}{\partial \alpha_j}\left[\frac{1}{U^i} \frac{d}{du_i}\left(f_i \frac{dU^i}{du_i}\right)\right] \qquad (2.8)$$

Temos um sistema de três equações nas incógnitas $f_i F_i$, $i = 1,2,3$

Para resolvê-lo, usaremos o determinante de Stäckel:

$$S = \begin{vmatrix} \phi_{11}(u_1) & \phi_{12}(u_1) & \phi_{13}(u_1) \\ \phi_{21}(u_2) & \phi_{22}(u_2) & \phi_{23}(u_2) \\ \phi_{31}(u_3) & \phi_{32}(u_3) & \phi_{33}(u_3) \end{vmatrix} \qquad (2.9)$$

Se $S \neq 0$, o sistema (2.7) tem solução

$$f_1 F_1 = \frac{\begin{vmatrix} (g)^{1/2} & \phi_{21} & \phi_{31} \\ 0 & \phi_{22} & \phi_{32} \\ 0 & \phi_{23} & \phi_{33} \end{vmatrix}}{S} = \frac{(g)^{1/2}(\phi_{22}\phi_{33} - \phi_{23}\phi_{32})}{S}$$

$$f_1 F_1 = \frac{(g)^{1/2}}{S} M_{11}$$

onde M_{11} é o cofator de ϕ_{11} no determinante de Stäckel, e é função de u_2 e u_3, mas não de u_1.

Analogamente:

$$f_2 F_2 = \frac{(g)^{1/2}}{S} M_{21}$$

onde $M_{21} = \phi_{32}\phi_{13} - \phi_{12}\phi_{33}$ é o cofator de ϕ_{21}, e é função de u_3 e u_1 mas não de u_2.

$$f_3\, F_3 = \frac{(g)^{1/2}}{S} \;\; M_{31}$$

onde $M_{31} = \phi_{12}\phi_{23} - \phi_{22}\phi_{13}$ é o cofator de ϕ_{31}, e é função de u_1 e u_2 mas não de u_3.

Ou ainda:

$$f_i\, F_i = \frac{(g)^{1/2}}{S} \;\; M_{i1} , \qquad i = 1,2,3 \tag{2.10}$$

onde M_{i1} é o cofator de ϕ_{i1} no determinante de Stäckel, e M_{i1} não é função de u_i

Comparando as equações (2.5) com (2.10), temos:

$$\frac{(g)^{1/2}}{g_{11}} = \frac{(g)^{1/2}}{S} \; M_{11} , \quad \text{portanto:} \;\; g_{11} = \frac{S}{M_{11}}$$

Analogamente: $g_{22} = \dfrac{S}{M_{21}}$ e $g_{33} = \dfrac{S}{M_{31}}$

$$\text{Portanto:} \qquad g_{ii} = \frac{S}{M_{i1}} \qquad , \quad i = 1,2,3 \tag{2.11}$$

a qual é a primeira condição de separabilidade

Também, das equações (2.10), temos:

$$\frac{f_1 F_1}{M_{11}} = \frac{f_2 F_2}{M_{21}} = \frac{f_3 F_3}{M_{31}} = \frac{(g)^{1/2}}{S} \tag{2.12}$$

a qual somente é possível se:

$$\frac{(g)^{1/2}}{S} = f_1(u_1) \; . \; f_2(u_2) \; . \; f_3(u_3) \qquad (2.13)$$

a qual constitui a segunda condição de separabilidade

Mostramos que as eq. (2.11) e (2.13) são condições necessárias.

Falta mostrar que estas condições são também suficientes.

Das eq. (2.11) e (2.13)

$$g_{ii} = \frac{S}{M_{i1}} \qquad\qquad \frac{(g)^{1/2}}{S} = f_1\, f_2\, f_3 \qquad ,\text{temos:}$$

$$\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} = \prod_{i=1}^{3} f_i\, M_{i1} \quad , \text{ substituindo na eq.(2.4), temos:}$$

$$\frac{1}{U^1}\frac{\partial}{\partial u_1}\left(f_1 f_2 f_3\, M_{11}\, \frac{dU^1}{du_1}\right) + \frac{1}{U^2}\frac{\partial}{\partial u_2}\left(f_1 f_2 f_3\, M_{21}\, \frac{dU^2}{du_2}\right) +$$

$$+ \frac{1}{U^3}\frac{\partial}{\partial u_3}\left(f_1 f_2 f_3\, M_{31}\, \frac{dU^3}{du_3}\right) + k^2\, f_1 f_2 f_3\, S = 0$$

Lembrando que M_{i1} não é função de u_i, $i = 1,2,3$, temos:

$$\frac{f_2 f_3}{U^1}\, M_{11}\, \frac{d}{du_1}\left(f_1\, \frac{dU^1}{du_1}\right) + \frac{f_1 f_3}{U^2}\, M_{21}\, \frac{d}{du_2}\left(f_2\, \frac{dU^2}{du_2}\right) +$$

$$+ \frac{f_1 f_2}{U^3}\, M_{31}\, \frac{d}{du_3}\left(f_3\, \frac{dU^3}{du_3}\right) + k^2\, f_1\, f_2\, f_3\, S = 0$$

Multiplicando por $\dfrac{1}{f_1 f_2 f_3 S}$ e usando (2.11), obtemos:

$$\frac{1}{f_1 U^1 g_{11}} \frac{d}{du_1}\left(f_1 \frac{dU^1}{du_1}\right) + \frac{1}{f_2 U^2 g_{22}} \frac{d}{du_2} \left(f_2 \frac{dU^2}{du_2}\right) +$$

$$+ \frac{1}{f_3 U^3 g_{33}} \frac{d}{du_3}\left(f_3 \frac{dU^3}{du_3}\right) + k^2 = 0$$

ou ainda:

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{f_i U^i g_{ii}} \frac{d}{du_i}\left(f_i \frac{dU^i}{du_i}\right) + k^2 = 0 \qquad (2.14)$$

onde $\qquad k^2 = \alpha_1$

Por outro lado, usando a propriedade de ortogonalidade que relaciona os elementos do determinante de Stäckel e seus menores:

$$\phi_{11} M_{11} + \phi_{21} M_{21} + \phi_{31} M_{31} = S$$

$$\phi_{12} M_{11} + \phi_{22} M_{21} + \phi_{32} M_{31} = 0$$

$$\phi_{13} M_{11} + \phi_{23} M_{21} + \phi_{33} M_{31} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{3} \phi_{i1} \frac{M_{i1}}{S} = 1 \quad , \quad \sum_{i=1}^{3} \phi_{i2} \frac{M_{i1}}{S} = 0 \quad , \quad \sum_{i=1}^{3} \phi_{i3} \frac{M_{i1}}{S} = 0$$

e, usando a eq. (2.11)

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{\phi_{i1}}{g_{ii}} = 1 \quad , \quad \sum_{i=1}^{3} \frac{\phi_{i2}}{g_{ii}} = 0 \quad , \quad \sum_{i=1}^{3} \frac{\phi_{i3}}{g_{ii}} = 0 \qquad (2.15)$$

de modo que podemos escrever:

$$\alpha_1 = \alpha_1 \sum_{i=1}^{3} \frac{\phi_{i1}}{g_{ii}} + \alpha_2 \sum_{i=1}^{3} \frac{\phi_{i2}}{g_{ii}} + \alpha_3 \sum_{i=1}^{3} \frac{\phi_{i3}}{g_{ii}} \qquad (2.16)$$

Substituindo na eq. (2.14), obtemos:

$$\frac{1}{g_{11} f_1 U^1} \frac{d}{du_1}\left(f_1 \frac{dU^1}{du_1}\right) + \frac{1}{g_{22} f_2 U^2} \frac{d}{du_2}\left(f_2 \frac{dU^2}{du_2}\right) +$$

$$+ \frac{1}{g_{33} f_3 U^3} \frac{d}{du_3}\left(f_3 \frac{dU^3}{du_3}\right) + \alpha_1 \left(\frac{\phi_{11}}{g_{11}} + \frac{\phi_{21}}{g_{22}} + \frac{\phi_{31}}{g_{33}}\right) +$$

$$+ \alpha_2 \left(\frac{\phi_{12}}{g_{11}} + \frac{\phi_{22}}{g_{22}} + \frac{\phi_{32}}{g_{33}}\right) + \alpha_3 \left(\frac{\phi_{13}}{g_{11}} + \frac{\phi_{23}}{g_{22}} + \frac{\phi_{33}}{g_{33}}\right) = 0$$

$$\frac{1}{g_{11}} \left[\frac{1}{f_1 U^1} \frac{d}{du_1}\left(f_1 \frac{dU^1}{du_1}\right) + \alpha_1\phi_{11} + \alpha_2\phi_{12} + \alpha_3\phi_{13}\right] +$$

$$+ \frac{1}{g_{22}} \left[\frac{1}{f_2 U^2} \frac{d}{du_2}\left(f_2 \frac{dU^2}{du_2}\right) + \alpha_1\phi_{21} + \alpha_2\phi_{22} + \alpha_3\phi_{23}\right] +$$

$$+ \frac{1}{g_{33}} \left[\frac{1}{f_3 U^3} \frac{d}{du_3}\left(f_3 \frac{dU^3}{du_3}\right) + \alpha_1\phi_{31} + \alpha_2\phi_{32} + \alpha_3\phi_{33}\right] = 0$$

ou ainda,

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{g_{ii}} \left[\frac{1}{f_i U^i} \frac{d}{du_i}\left(f_i \frac{dU^i}{du}\right) + \sum_{j=1}^{3} \alpha_j \, \phi_{ij}(u_i)\right] = 0$$

Esta equação só é satisfeita em geral se cada colchete é zero

$$\frac{1}{f_i} \frac{d}{du_i}\left[f_i \frac{dU^i}{du}\right]_i + U^i \sum_{j=1}^{3} \alpha_j \, \phi_{ij}(u_i) = 0 \qquad (2.17)$$

$i = 1,2,3$

A equação de Helmholtz foi reduzida a três equações diferenciais ordinárias, portanto as equações (2.11) e (2.13) são suficientes para separação.

As equações separadas são dadas por (2.17).

B- SEPARABILIDADE DA EQUAÇÃO DE LAPLACE

A equação de Laplace pode ser considerada como uma forma degenerada da equação de Helmholtz com $k^2 = 0$, então poderíamos supor que as condições para separabilidade fossem as mesmas da equação de Helmholtz. A diferença entre os dois casos consiste na troca de equações não homogêneas para homogêneas, resultando condições menos exigentes de separabilidade.

Teorema 2.2: As condições necessárias e suficientes para separabilidade da equação de Laplace tridimensional com um sistema de coordenadas ortogonal, e $\varphi = \varphi(u_1,u_2,u_3)$ são :

$$\frac{g_{ii}}{g_{jj}} = \frac{M_{j1}}{M_{i1}}$$

$$\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} = \left[\prod_{i=1}^{3} f_i(u_i) \right] M_{i1}$$

Prova:

Procedendo como na seção anterior, a equação de Laplace ($\nabla\varphi$ =0) é dada por:

$$\frac{1}{(g)^{1/2}} \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial u_i}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} \frac{\partial \varphi}{\partial u_i} \right) = 0 \qquad (2.18)$$

Supondo $\varphi = U^1(u_1) \cdot U^2(u_2) \cdot U^3(u_3)$

Uma condição necessária e suficiente para separabilidade é que $\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}}$ possa ser expresso como o produto dado pelas equações (2.5). Se esta condição é satisfeita a eq.(2.18) se torna:

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{F_i}{U^i} \frac{d}{du_i}\left(f_i \frac{dU^i}{du_i} \right) = 0 \qquad (2.19)$$

A equação ainda não está na forma separável por causa da presença de F_i .

Diferenciando a eq.(2.19) com respeito a α_2 e α_3 temos duas equações:

$$F_1 \frac{\partial}{\partial \alpha_2}\left[\frac{1}{U^1}\frac{d}{du_1}\left(f_1 \frac{dU^1}{du_1}\right) + F_2 \frac{\partial}{\partial \alpha_2}\left(\frac{1}{U^2}\frac{d}{du_2}\left(f_2 \frac{dU^2}{du_2}\right) + \right.\right.$$

$$\left. + F_3 \frac{\partial}{\partial \alpha_2}\left(\frac{1}{U^3}\frac{d}{du_3}\left(f_3 \frac{dU^3}{du_3}\right)\right)\right] = 0$$

e

$$F_1 \frac{\partial}{\partial \alpha_3}\left[\frac{1}{U^1}\frac{d}{du_1}\left(f_1 \frac{dU^1}{du_1}\right) + F_2 \frac{\partial}{\partial \alpha_3}\left(\frac{1}{U^2}\frac{d}{du_2}\left(f_2 \frac{dU^2}{du_2}\right) + \right.\right.$$

$$\left. + F_3 \frac{\partial}{\partial \alpha_3}\left(\frac{1}{U^3}\frac{d}{du_3}\left(f_3 \frac{dU^3}{du_3}\right)\right)\right] = 0$$

Considerando, como anteriormente, ϕ_{ij} definido pela equação (2.8), obtemos duas equações homogêneas, com três incógnitas $f_i F_i$, $i = 1,2,3$

$$f_1 F_1 \ \phi_{12}(u_1) + f_2 F_2 \ \phi_{22}(u_2) + f_3 F_3 \ \phi_{32}(u_3) = 0$$

$$f_1 F_1 \ \phi_{13}(u_1) + f_2 F_2 \ \phi_{23}(u_2) + f_3 F_3 \ \phi_{33}(u_3) = 0$$

ou ainda:

$$f_1 F_1 = - f_2 F_2 \ \frac{\phi_{22}}{\phi_{12}} - f_3 F_3 \ \frac{\phi_{32}}{\phi_{12}}$$

$$f_1 F_1 = - f_2 F_2 \ \frac{\phi_{23}}{\phi_{13}} - f_3 F_3 \ \frac{\phi_{33}}{\phi_{13}}$$

identificando e rearranjando temos:

$$\frac{f_2 F_2}{f_3 F_3} = \frac{\phi_{13}\phi_{22} - \phi_{33}\phi_{12}}{\phi_{23}\phi_{12} - \phi_{22}\phi_{12}} = \frac{M_{21}}{M_{31}}$$

Analogamente:

$$\frac{f_1F_1}{f_2F_2} = \frac{M_{11}}{M_{21}} \qquad e \qquad \frac{f_1F_1}{f_3F_3} = \frac{M_{11}}{M_{31}}$$

Isto é:

$$\frac{f_jF_j}{f_iF_i} = \frac{M_{j1}}{M_{i1}} \qquad i,j = 1,2,3 \tag{2.20}$$

Mas, das equações (2.5),temos:

$$\frac{f_jF_j}{f_iF_i} = \frac{g_{ii}}{g_{jj}}$$

Assim uma condição necessária para separabilidade é :

$$\frac{g_{ii}}{g_{jj}} = \frac{M_{j1}}{M_{i1}} \tag{2.21}$$

Também das eq. (2.20), temos:

$$\frac{f_1F_1}{M_{11}} = \frac{f_2F_2}{M_{21}} = \frac{f_3F_3}{M_{31}}$$

que somente é satisfeita se cada termo é igual a: $\prod_{i=1}^{3} f_i(u_i)$

Isto é:

$$f_1F_1 = f_1f_2f_3\ M_{11}$$
$$f_2F_2 = f_1f_2f_3\ M_{21}$$
$$f_3F_3 = f_1f_2f_3\ M_{31}$$

Das equações (2.5)

$$f_i F_i = \frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} \qquad i = 1,2,3$$

Temos:

$$\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} = \left[\prod_{i=1}^{3} f_i(u_i)\right] \quad M_{i1} \qquad i = 1,2,3 \tag{2.22}$$

que constitui a segunda condição necessária para a separabilidade.

Para mostrar que as equaçoes (2.21) e (2.22) são suficientes procedemos analogamente à seção A e chegamos às mesmas equações separadas (eq.(2.17) com $\alpha_1 = 0$).

Como na maioria dos problemas são utilizados sistemas de coordenadas cilíndricos ou rotacionais, mostramos que nesses casos as condições de separabilidade são simplificadas.

C- SISTEMAS DE COORDENADAS

Um dos mais convenientes caminhos de construir sistemas de coordenadas é por transformação do plano complexo, usando uma transformação analítica.

A função resultante é então transladada ou rodada para construir uma tripla família ortogonal de superfícies.

Sejam: $w = u + i\,v$ e $z = x + i\,y$ e transformemos a família de linhas (u=cte e v=cte) por meio de uma função arbitrária:

$$z = \mathscr{F}(w) \qquad (2.23)$$

onde $\mathscr{F}$ é uma função analítica.

A parte real e a parte imaginária são separadas dando origem a duas equações:

$$\begin{aligned} x &= \xi_1(u,v) \\ y &= \xi_2(u,v) \end{aligned} \qquad (2.24)$$

Estas equações representam (no plano complexo z) uma família de curvas u=cte , as quais interceptam ortogonalmente a família de curvas v = cte.

Agora formamos sistemas de coordenadas para cada função $\mathscr{F}$: um sistema cilíndrico e um ou dois sistemas rotacionais.

O *sistema cilíndrico* (u_1, u_2, u_3) é formado transladando a família de curvas u_1= cte, u_2= cte do plano z na direção perpendicular ao gráfico, formando assim duas famílias de superfícies cilíndricas ortogonais, cujas diretrizes são as curvas u_1=cte, u_2=cte. A terceira família de superfícies coordenadas consiste de planos paralelos z=cte. O eixo coordenado que é paralelo à geratriz dos cilindros é chamado eixo z.

O sistema cilíndrico é representado pelas equações:

$$\begin{aligned} x &= \xi_1(u_1,u_2) \\ y &= \xi_2(u_1,u_2) \\ z &= u_3 \end{aligned} \qquad (2.25)$$

onde ξ_1 e ξ_2 são as funções da eq.(2.24).

As superfícies coordenadas são u_i = cte com i = 1,2,3.

Como exemplo, considere a transformação:

$$z = \frac{1}{2} w^2 \quad \text{onde } z = x + i\,y \text{ e } w = u + i\,v \text{ ,temos:}$$

$$x = \frac{1}{2} (u^2 - v^2) = \xi_1(u,v)$$

$$y = u\,v = \xi_2(u,v)$$

As curvas u=cte e v=cte (parábolas) estão representadas na fig.2

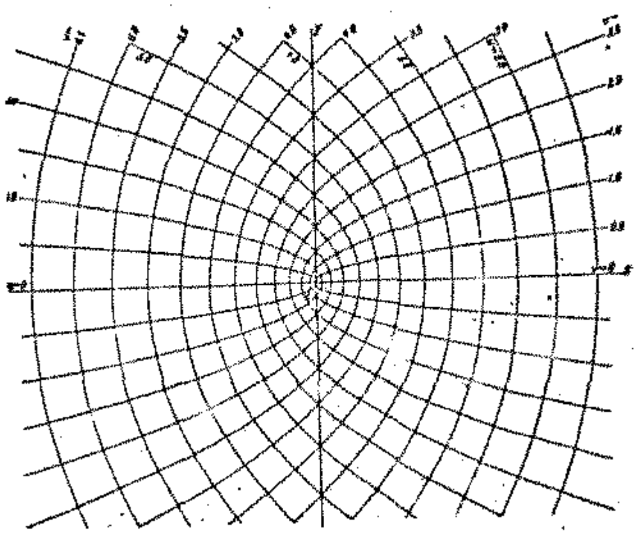

fig 2 Parábolas $z = \frac{1}{2} w^2$

O sistema cilíndrico gerado pela transformação $z = \frac{1}{2} w^2$ é obtido transladando as parábolas da fig.2 na direção perpendicular ao gráfico, denominado sistema de coordenadas cilíndrico-parabólicas (u,v,z), representado na fig.3, definido pelas equações:

$$x = \frac{1}{2}(u^2 - v^2) \qquad 0 \leq u < \infty$$

$$y = u\,v \qquad -\infty < v < \infty$$

$$z = z \qquad -\infty < z < \infty$$

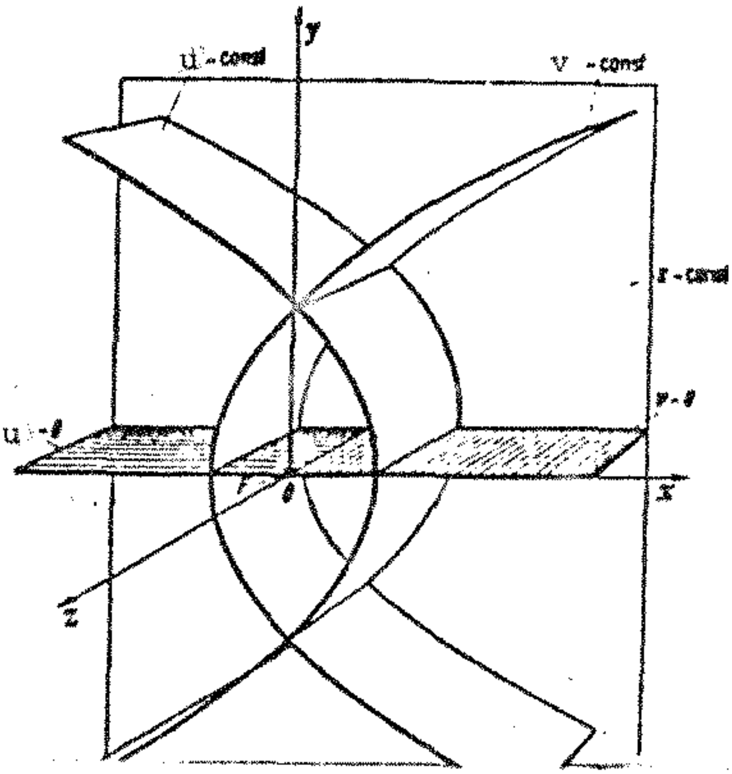

fig 3 Coordenadas cilíndrico-parabólicas (u,v,z)

Se rodarmos as curvas u_1= cte, u_2= cte do plano z em torno do eixo y, obtemos o sistema de coordenadas rotacional (u_1, u_2, ψ).

Para representá-lo devemos observar que ao rodarmos a curva u = cte, representada na fig.4, em torno do eixo y, a abscissa do ponto P =(ξ_1, ξ_2) permanece constante. O eixo y, que originalmente era o eixo de rotação, recebe agora o nome de eixo z, e denotamos por ψ o ângulo em torno desse eixo.

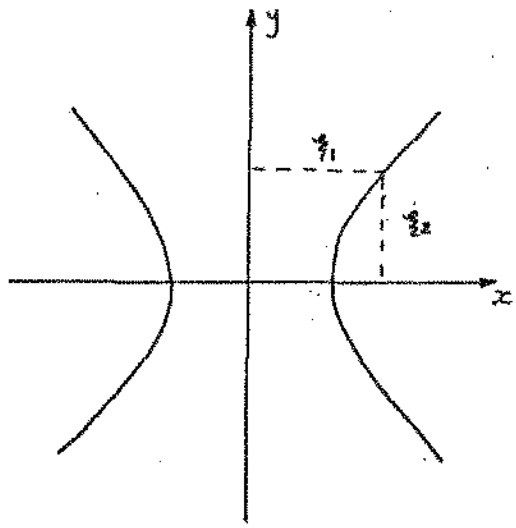

fig 4 Curva u = cte

A rotação da curva u = cte em torno do eixo y, produz a superfície da fig.5

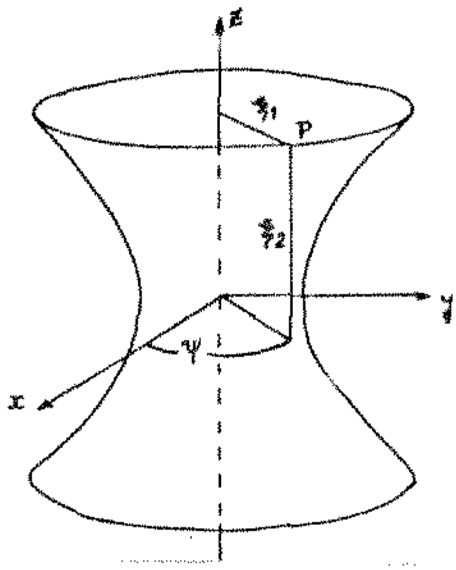

fig 5 Superfície gerada pela rotação da curva u = cte em torno do eixo y

As coordenadas de um ponto P sobre a superfície são:

$$x = \xi_1 \cos\psi \qquad y = \xi_1 \operatorname{sen}\psi \qquad z = \xi_2$$

Generalizando, representamos o sistema de coordenadas rotacional (u_1,u_2,ψ) gerado pela rotação das curvas u_1=cte, u_2=cte em torno do eixo y pelas equações:

$$x = \xi_1(u_1,u_2)\cos\psi$$
$$y = \xi_1(u_1,u_2)\operatorname{sen}\psi \qquad (2.26)$$
$$z = \xi_2$$

Se rodarmos agora, a curva u = cte da fig 4 em torno do eixo x, observamos que ξ_2, a ordenada do ponto, P permanece constante. Analogamente, o eixo x, que originalmente era o eixo de rotação, recebe o nome de eixo z e denotamos por ψ o ângulo em torno desse eixo.

A rotação da curva u = cte da fig 4, em torno do eixo x, gera a superfície representada na fig 6

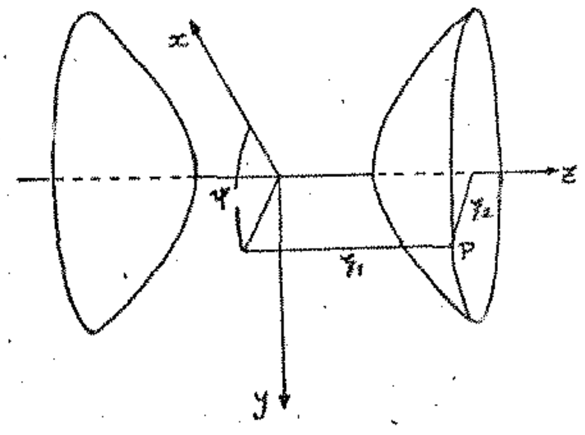

fig 6 Superfície gerada pela rotação da curva u = cte em torno do eixo x

As coordenadas de um ponto P sobre a superfície são:

$$x = \xi_2 \cos\psi \qquad y = \xi_2 \operatorname{sen}\psi \qquad z = \xi_1$$

Generalizando, representamos o sistema de coordenadas rotacional (u_1,u_2,ψ), gerado pela rotação das curvas u_1=cte, u_2=cte em torno do eixo x, pelas equações:

$$x = \xi_2(u,v)\ \cos\psi$$
$$y = \xi_2(u,v)\ \mathrm{sen}\psi \qquad (2.27)$$
$$z = \xi_1(u,v)$$

Como exemplo, apresentamos a transformação:

$z = a \cosh w$ onde $z = x + i\, y$ e $w = \eta + i\, \theta$

dando origem a dois sistemas de coordenadas rotacionais:

Sistema de coordenadas esferoidais alongadas e achatadas.

A partir da equação $z = a \cosh w$, temos:

$$x = a \cosh \eta \cos\theta = \xi_1(\eta,\theta)$$
$$y = a\ \mathrm{senh}\ \eta\ \mathrm{sen}\theta = \xi_2(\eta,\theta)$$

As curvas η = cte, θ = cte estão representadas na fig 7

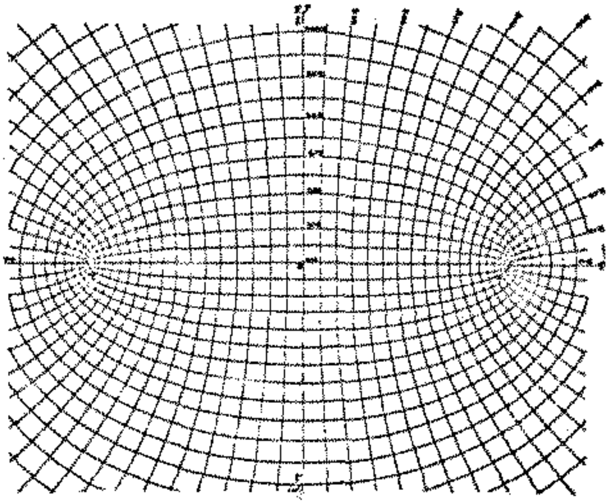

fig 7 Elipses e hipérboles $z = a \cosh w$

Rodando as curvas η=cte, θ=cte em torno do eixo x, obtemos elipsóides e hiperbolóides de duas folhas que são superfícies coordenadas do Sistema de coordenadas esferoidais alongadas (η,θ,ψ) da fig 8, dado pelas equações:

$$x = a\ \mathrm{senh}\eta \cos\theta \cos\psi \qquad 0 \le \eta < \infty$$
$$y = a\ \mathrm{senh}\eta \cos\theta\ \mathrm{sen}\psi \qquad 0 \le \theta < \infty$$
$$z = a \cosh\eta\ \mathrm{sen}\theta \qquad 0 \le \psi < 2\pi$$

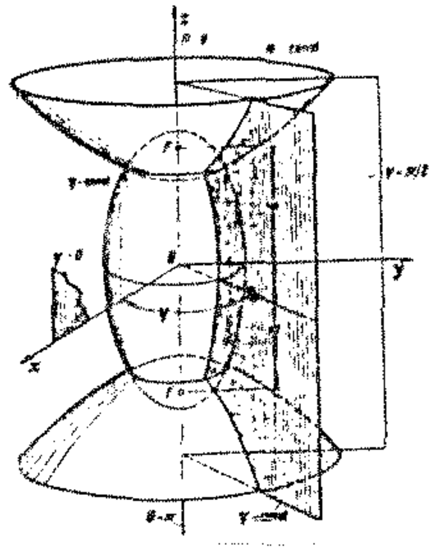

fig 8 Coordenadas esferoidais alongadas (η,θ,ψ)

Rodando as curvas η = cte, θ = cte da fig 7 em torno do eixo y, obtemos elipsóides e hiperbolóides de uma folha, que são superfícies coordenadas do Sistema de Coordenadas esferoidais achatadas (η,θ,ψ), representado na fig 9, dado pelas equações:

$$x = a \cosh\eta \cos\theta \cos\psi \qquad 0 \le \eta < \infty$$

$$y = a \cosh\eta \cos\theta \operatorname{sen}\psi \qquad 0 \le \theta < \infty$$

$$z = a \operatorname{senh}\eta \operatorname{sen}\theta \qquad 0 \le \psi < 2\pi$$

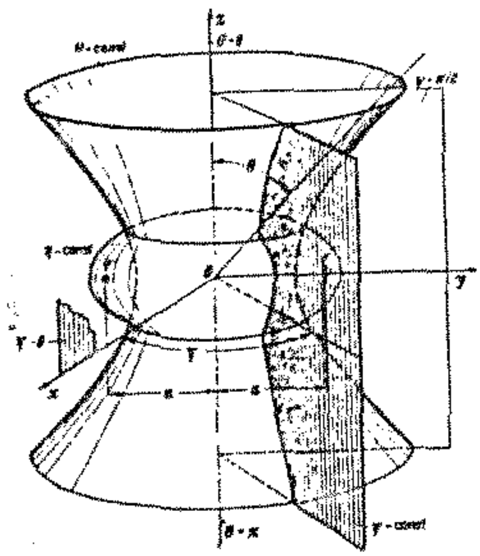

fig 9 Coordenadas Esferoidais Achatadas (η,θ,ψ)

Teorema (2.3): para qualquer sistema de coordenada cilíndrico (2.25) obtido diretamente da equação $z=\mathcal{F}(w)$, g_{11} e g_{22} são iguais, e o mesmo do sistema plano original (2.24) enquanto $g_{33}= 1$.

Prova: Como $\mathcal{F}$ é uma função analítica as equações de Cauchy-Riemann se aplicam ,

$$\frac{\partial \xi_1}{\partial u_1} = \frac{\partial \xi_2}{\partial u_2} \qquad \frac{\partial \xi_1}{\partial u_2} = - \frac{\partial \xi_2}{\partial u_1} \tag{2.28}$$

$$\frac{\partial^2 \xi_1}{\partial u_1^2} = \frac{\partial^2 \xi_2}{\partial u_1 \partial u_2} \qquad \frac{\partial^2 \xi_1}{\partial u_2^2} = - \frac{\partial^2 \xi_2}{\partial u_2 \partial u_1}$$

As derivadas parciais de ξ_1 e ξ_2 de todas as ordens existem e são funções contínuas de u_1 e u_2, segue que as derivadas mistas são iguais, adicionando-se temos:

$$\frac{\partial^2 \xi_1}{\partial u_1^2} + \frac{\partial^2 \xi_1}{\partial u_2^2} = 0$$

$$\frac{\partial^2 \xi_i}{\partial u_1^2} + \frac{\partial^2 \xi_i}{\partial u_2^2} = 0 \qquad i = 1,2 \tag{2.29}$$

e

$$\left(\frac{\partial \xi_1}{\partial u_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial u_1} \right)^2 = \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial u_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial u_2} \right)^2 =$$

$$= \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial u_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial u_2} \right)^2 = \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial u_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial u_1} \right)^2 \tag{2.30}$$

Os coeficientes métricos são dados pelas equações:

$$g_{ii} = \left(\frac{\partial x}{\partial u_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u_i}\right)^2 \qquad i = 1,2,3 \qquad (2.31)$$

Para os sistemas cilíndricos eq.(2.25), os coeficientes métricos assumem a simples forma:

$$g_{11} = \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial u_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial u_1}\right)^2 \qquad g_{22} = \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial u_2}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial u_2}\right)^2 \qquad g_{33} = 1$$

Das eq.(2.30), temos $g_{11} = g_{22}$

Teorema (2.4): para qualquer sistema rotacional (2.26) ou (2.27) obtido diretamente da equação $z=\mathcal{F}(w)$, g_{11} e g_{22} são iguais e os mesmos da transformação plana eq.(2.24). O terceiro coeficiente g_{33} é sempre igual ao quadrado de uma das funções planas originais (2.24).

Prova: Para o sistema rotacional dado pelas eq.(2.26), temos:

$$g_{11} = \left[\frac{\partial}{\partial u_1}(\xi_1 \cos\psi)\right]^2 + \left[\frac{\partial}{\partial u_1}(\xi_1 \operatorname{sen}\psi)\right]^2 + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial u_1}\right)^2$$

$$g_{11} = \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial u}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial u}\right)^2$$

$$g_{22} = \left[\frac{\partial}{\partial u_2}(\xi_1 \cos\psi)\right]^2 + \left[\frac{\partial}{\partial u_2}(\xi_1 \operatorname{sen}\xi)\right]^2 + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial u_2}\right)^2$$

$$g_{22} = \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial u_2}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial u_2}\right)^2$$

$$g_{33} = \left[\frac{\partial}{\partial\psi} (\xi_1 \cos\psi) \right]^2 + \left[\frac{\partial}{\partial\psi} (\xi_1 \operatorname{sen}\psi) \right]^2 + 0$$

$$g_{33} = \xi_1^2$$

Das eq.(2.30), temos: $g_{11} = g_{22}$

Analogamente para os sitemas rotacionais dados pelas eq.(2.27), obtemos:

$$g_{11} = g_{22} \quad e \quad g_{33} = \xi_2^2$$

Observação: algumas vezes é conveniente modificar um sistema de coordenadas obtido diretamente de uma transformação complexa $z = \mathcal{F}(w)$.

A variável u pode ser substituída, se desejado, por uma função de u, e a variável v, por uma função de v.

Estas transformações não afetam a ortogonalidade nem a separabilidade.

Em geral, entretanto, elas alteram os coeficientes métricos, de modo que $g_{11} \neq g_{22}$.

D- MATRIZES EQUIVALENTES DE STÄCKEL

A matriz $[\phi_{ij}(u_i)]$ cujos elementos correspondem aqueles do determinante de Stäckel é chamada matriz de Stäckel. Evidentemente não existe uma correspomdência um a um entre matriz de Stäckel e sistema de coordenada e é isto que vamos considerar agora.

Duas matrizes de Stäckel são equivalentes se as razões:

$\frac{S}{M_{i1}}$ são iguais e, portanto, os coeficientes métricos g_{ii} são os mesmos para cada matriz.

Duas matrizes de Stäckel são equivalentes se uma pode ser obtida da outra por uma ou mais das seguintes operações:

1) Troca da i-ésima e j-ésima colunas i,j = 2,3.

2) Multiplicação de cada elemento da j-ésima coluna por uma constante diferente de zero.

3) Adição de cada elemento na i-ésima coluna ao correspondente elemento na j-ésima coluna i,j = 2,3.

Note que as operações sobre linha não são permitidas e também que a primeira coluna ocupa um lugar privilegiado e não deve ser alterada.

E- MATRIZ DE STÄCKEL E CONDIÇÕES DE SEPARABILIDADE EM SISTEMAS DE COORDENADAS CILÍNDRICOS

Nos sistemas cilíndricos as superfícies coordenadas são constituídas de duas famílias de cilindros mutuamente ortogonais mais uma família de planos paralelos.

Na seção C vimos que os coeficientes métricos dependem somente de duas coordenadas em vez de três.

$$g_{11} = g_{11}(u_1,u_2)$$

$$g_{22} = g_{22}(u_1,u_2)$$

$$g_{33} = 1$$

Uma troca de variáveis permite escrever

$$g_{11} = g_{22} = (g)^{1/2}$$

As condições de separabilidade da equação de Helmholtz tornam-se:

$$g_{11} = g_{22} = \frac{S}{M_{11}} = \frac{S}{M_{21}} \qquad (2.11i)$$

$$g_{33} = 1 = \frac{S}{M_{31}} \qquad (2.11ii)$$

$$\frac{(g)^{1/2}}{S} = \frac{g_{11}}{S} = f_1(u_1).f_2(u_2) \qquad (2.13i)$$

onde S é dado por:

$$S = \begin{vmatrix} \phi_{11}(u_1) & \phi_{12}(u_2) & \phi_{13}(u_3) \\ \phi_{21}(u_2) & \phi_{22}(u_2) & \phi_{23}(u_2) \\ \phi_{31}(u_1) & \phi_{32}(u_2) & \phi_{33}(u_3) \end{vmatrix}$$

De (2.11ii) $S = M_{31}$, e tomando $\phi_{11}=\phi_{21}=0$ e $\phi_{31}=1$, desde que os coeficientes métricos não contêm u_3, a terceira linha de S deve conter apenas constantes.

Usando as operações permitidas da seção D, podemos colocar a matriz de Stäckel na forma equivalente:

$$[S] = \begin{bmatrix} 0 & \phi_{12} & \phi_{13} \\ 0 & \phi_{22} & \phi_{23} \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.32}$$

Ainda mais, das equações (2.11i), temos:
$M_{11}(u_2)=M_{21}(u_1)=$ cte, portanto, $\phi_{22} = -\phi_{12}$ e o determinante associado à matriz de Stäckel para qualquer sistema de coordenadas cilíndrico pode ser escrito como:

$$S = \begin{vmatrix} 0 & -1 & \phi_{13} \\ 0 & 1 & \phi_{23} \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = -[\ \phi_{13}(u_1) + \phi_{23}(u_2)] \tag{2.33}$$

Além disso, $M_{11} = M_{21} = 1$,de modo que podemos escrever: $f_1=f_2=1$ nas equações (2.13i) e a única condição para separabilidade é que g_{11} possa ser expresso como a soma

$$g_{11} = g_{22} = S = -[\phi_{13}(u_1) + \phi_{23}(u_2)]$$

Resultado este que pode ser expresso no seguinte teorema:

Teorema 2.5 : A condição necessária e suficiente para separabilidade da equação de Helmholtz, num espaço euclideano tridimensional com um sistema cilíndrico ortogonal de coordenadas $\varphi=\varphi(u_1,u_2,u_3)$ é: $g_{11}=-[\phi_{13}(u_1)+\phi_{23}(u_2)]$ as equações separadas são:

$$\frac{dU^i}{du_i} + U^i \sum_{i=1}^{3} \alpha_j\ \phi_{ij} = 0$$

onde o determinante de Stäckel é dado pela equação (2.33).

Para separabilidade da equação de Laplace usamos o mesmo determinante de Stäckel e o teorema (2.2) e obtemos a condição:

$$g_{11} = g_{22} = \frac{M_{31}}{M_{11}} = - [\ \phi_{13}(u_1) + \phi_{23}(u_2)]$$

F- MATRIZ DE STÄCKEL E CONDIÇÕES DE SEPARABILIDADE EM SISTEMAS DE COORDENADAS ROTACIONAIS

Nos sistemas de coordenadas rotacionais, podemos escrever os coeficientes métricos como:

$$g_{11}(u_1,u_2) = g_{22}(u_1,u_2) \qquad g_{33} = g_{33}(u_1,u_2)$$

Então a terceira linha do determinante de Stäckel deve conter apenas constantes.

Usando as eq.(2.11) e (2.13), temos:

$$g_{11} = g_{22} = \frac{S}{M_{11}} = \frac{S}{M_{21}}$$

$$g_{33} = \frac{S}{M_{31}}$$

$$\frac{(g)^{1/2}}{S} = f_1(u_1)\ .\ f_2(u_2)$$

Usando as operações permitidas da seção D podemos colocar o determinante de Stäckel na forma :

$$S = \begin{vmatrix} \phi_{11} & -1 & \phi_{13} \\ \phi_{21} & 1 & \phi_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \phi_{11}(u_1) + \phi_{21}(u_2) \qquad (2.34)$$

Da eq.(2.11), para separabilidade da equação de Helmholtz

$$g_{11} = S = [\phi_{11}(u_1) + \phi_{21}(u_2)] \qquad (2.35)$$

Ainda mais, das eq.(2.11), temos:

$$\frac{g_{11}}{g_{33}} = -[\ \phi_{13}(u_1) + \phi_{23}(u_2)] \qquad (2.36)$$

e, das eq.(2.13):

$$g_{33} = [\ f_1(u_1)\ .\ f_2(u_2)]^2 \qquad (2.37)$$

Expressamos esses resultados no seguinte teorema:

Teorema 2.6: As condições necessárias e suficientes para separabilidade da equação de Helmholtz num espaço euclidiano tridimensional com um sistema de coordenadas rotacional e $\varphi=\varphi(u_1,u_2,u_3)$ são dadas pelas equações (2.35), (2.36), (2.37) e o determinante de Stäckel é dado pela eq.(2.34).

Considerando a equação de Laplace, em sistemas de coordenadas rotacionais, o determinante de Stäckel é o mesmo da eq.(2.34) e as eq. (2.21) e (2.22) dão:

$$\frac{g_{11}}{g_{33}} = \frac{M_{31}}{M_{11}} = -\left[\, \phi_{13}(u_1) + \phi_{23}(u_2) \right]$$

$$\frac{(g)^{1/2}}{S} = g_{33} = (\, f_1 \cdot f_2)^2$$

No próximo capítulo apresentaremos, como exemplo, o sistema de coordenadas esféricas, os coeficientes métricos, a matriz de Stäckel, a expressão do Laplaciano, a separação da equação de Helmholtz, as equações ordinárias obtidas da separação, bem como suas soluções.

3. COORDENADAS ESFÉRICAS

Neste capítulo apresentamos o sistema de coordenadas esféricas, detalhando os coeficientes métricos, o procedimento para obter a matriz de Stäckel, as equações ordinárias obtidas da separação, bem como suas soluções.

Como um exemplo apresentamos a equação de propagação de ondas.

COORDENADAS ESFÉRICAS (r, θ, ψ)

O sistema de coordenadas esféricas é um sistema rotacional gerado pela transformação:

$z = e^{w}$ onde $z = x + iy$ e $w = u + iv$, temos:

$$x = e^{u} \cos v$$
$$y = e^{u} \operatorname{sen} v$$

Tomando-se: $r = e^{u}$ e $\theta = v$, definimos:

$$\begin{aligned} u_1 &= r & 0 &\le r < \infty \\ u_2 &= \theta & 0 &\le \theta \le \pi \\ u_3 &= \psi & 0 &\le \psi < 2\pi \end{aligned} \tag{3.1}$$

Temos as seguintes relações com (x, y, z):

$$\begin{aligned} x &= r \operatorname{sen}\theta \cos\psi \\ y &= r \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\psi \\ z &= r \cos\theta \end{aligned} \tag{3.2}$$

As superfícies coordenadas são:

$x^2 + y^2 + z^2 = r^2$ (esferas, r = cte)

$$\cos\theta = \frac{z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}}$$

(cones circulares, com eixo z e vértice na origem, θ = cte)

$$\operatorname{tg} \psi = \frac{y}{x}$$

(semi-planos passando pelo eixo polar z, ψ = cte)

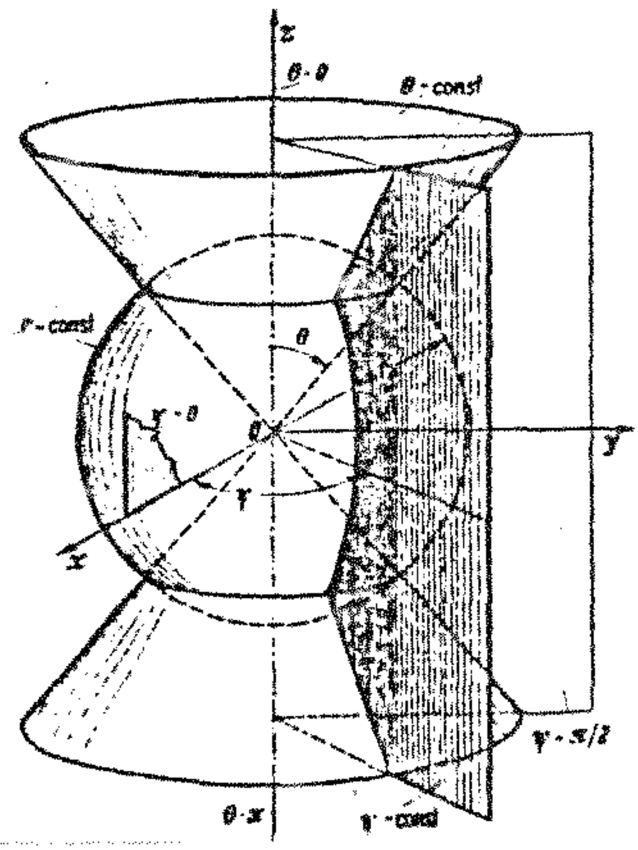

fig 10 Coordenadas Esféricas (r,θ,ψ)

Para determinarmos os coeficientes métricos usamos a eq.(1.10), ou seja:

$$g_{ii} = \left| \frac{\partial s}{\partial u_i} \right|^2$$

Como, em coordenadas esféricas , s é dado por:

$s = r\ \text{sen}\theta\ \cos\psi\ \mathbf{i} + r\ \text{sen}\theta\ \cos\psi\ \mathbf{j} + r\ \cos\theta\ \mathbf{k}$, temos:

$\frac{\partial s}{\partial r} = \text{sen}\theta\ \cos\psi\ \mathbf{i} + \text{sen}\theta\ \text{sen}\psi\ \mathbf{j} + \cos\theta\ \mathbf{k}$, assim:

$\left|\frac{\partial s}{\partial r}\right|^2 = \text{sen}^2\theta\ \cos^2\psi + \text{sen}^2\theta\ \cos^2\psi + \cos^2\theta$, portanto,

$g_{11} = 1$

Também:

$\frac{\partial s}{\partial \theta} = r\ \cos\theta\ \cos\psi\ \mathbf{i} + r\ \cos\theta\ \cos\psi\ \mathbf{j} + r\ \text{sen}\theta\ \mathbf{k}$, assim:

$\left|\frac{\partial s}{\partial \theta}\right|^2 = r^2\ \cos^2\theta\ \cos^2\psi + r^2\ \cos^2\theta\ \text{sen}^2\psi + r^2\ \text{sen}^2\theta$,logo:

$g_{22} = r^2$

Analogamente:

$\frac{\partial s}{\partial \psi} = -r\ \text{sen}\theta\ \text{sen}\psi\ \mathbf{i} + r\ \text{sen}\theta\ \cos\psi\ \mathbf{j}$,então:

$\left|\frac{\partial s}{\partial \psi}\right|^2 = r^2\ \text{sen}^2\theta\ \text{sen}^2\psi + r^2\ \text{sen}^2\theta\ \cos^2\psi$,portanto:

$g_{33} = r^2\ \text{sen}^2\theta$

Resumindo,

$$g_{11} = 1\ ,\qquad g_{22} = r^2\ ,\qquad g_{33} = r^2\ \text{sen}^2\theta \tag{3.3}$$

Usando a eq.(1.13), ou seja:

$g = g_{11} \cdot g_{22} \cdot g_{33}$, substituindo os valores da eq.(3.3), obtemos:

$$(g)^{1/2} = r^2 \operatorname{sen} \theta \tag{3.4}$$

Calculamos as f's, substituindo os valores encontrados nas eq.(3.3) e (3.4) nas eq.(2.5), assim:

De $\dfrac{(g)^{1/2}}{g_{11}} = f_1(u_1) \cdot F_1(u_2,u_3)$,temos:

$$r^2 \operatorname{sen}\theta = f_1(r) \cdot F_1(\theta,\psi) \text{ ,então:}$$

$$f_1(r) = r^2$$

De $\dfrac{(g)^{1/2}}{g_{22}} = f_2(u_2) \cdot F_2(u_1,u_3)$,temos:

$$\operatorname{sen}\theta = f_2(\theta) \cdot F_2(r,\psi) \text{ , então:}$$

$$f_2(\theta) = \operatorname{sen}\theta$$

De $\dfrac{(g)^{1/2}}{g_{33}} = f_3(u_3) \cdot F_3(u_1,u_2)$,temos:

$$\frac{1}{\operatorname{sen}\theta} = f_3(\psi) \cdot F_3(r,\theta) \text{ ,então:}$$

$$f_3(\psi) = 1$$

Resumindo,

$$f_1(r) = r^2 \ , \quad f_2(\theta) = \operatorname{sen}\theta \ , \quad f_3(\psi) = 1 \tag{3.5}$$

Calculamos o determinante de Stäckel, utilizando a eq.(2.13), na qual introduzimos as eq.(3.4) e (3.5), assim:

$$S = \frac{(g)^{1/2}}{f_1 f_2 f_3} = \frac{r^2 \operatorname{sen}\theta}{r^2 \operatorname{sen}\theta} = 1 \text{ , logo:} \tag{3.6}$$

$$S = 1$$

Os cofatores são determinados através das eq.(2.11), na qual introduzimos as eq.(3.6) e (3.3), assim:

$$\begin{aligned} M_{11} &= \frac{S}{g_{11}} = 1 \\ M_{21} &= \frac{S}{g_{22}} = \frac{1}{r^2} \\ M_{31} &= \frac{S}{g_{33}} = \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2\theta} \end{aligned} \tag{3.7}$$

Para determinarmos os elementos ϕ_{ij} de uma matriz de Stäckel, usamos o seguinte procedimento:

Como $M_{11} = 1$, temos a possibilidade:

$$[S] = \begin{bmatrix} \phi_{11} & \phi_{12} & \phi_{13} \\ \phi_{21} & 1 & \phi_{23} \\ \phi_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Como $M_{21} = \dfrac{1}{r^2}$, temos a possibilidade:

$$[S] = \begin{bmatrix} \phi_{11} & -1/r^2 & \phi_{13} \\ \phi_{21} & 1 & \phi_{23} \\ \phi_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Como $M_{31} = \dfrac{1}{r^2 \ \text{sen}\theta}$, temos a possibilidade:

$$[S] = \begin{bmatrix} \phi_{11} & -1/r^2 & 0 \\ \phi_{21} & 1 & -1/\text{sen}^2\theta \\ \phi_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

De $\phi_{11}(r).M_{11} + \phi_{21}(\theta).M_{21} + \phi_{31}(\psi).M_{31} = S$, temos:

$$\phi_{11}(r) + \phi_{21}(\theta).(1/r^2) + \phi_{31}(\psi).[1/(r^2\text{sen}^2\theta)] = 1$$

Podemos escolher:

$\phi_{11} = 1$, $\phi_{21} = 0$, $\phi_{31} = 0$

Logo, escrevemos a matriz de Stäckel como:

$$[S] = \begin{bmatrix} 1 & -1/r^2 & 0 \\ 0 & 1 & -1/\text{sen}^2\theta \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad (3.8)$$

Obtemos a expressão para o laplaciano substituindo na eq.(1.14) as eq.(3.1), eq.(3.3) e eq.(3.4).

Assim, de: $$\nabla^2\phi = \frac{1}{(g)^{1/2}}\left[\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial u_i}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}}\frac{\partial\phi}{\partial u_i}\right)\right]$$

Temos:

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\operatorname{sen}\theta\,\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\,\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial}{\partial\psi}\left(\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\,\frac{\partial\phi}{\partial\psi}\right)\right]$$

Logo, a expressão para o laplaciano é:

$$\nabla^2\phi = \frac{\partial^2\phi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2} + \frac{\operatorname{cotg}\theta}{r^2}\frac{\partial\phi}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\phi}{\partial\psi^2} \tag{3.9}$$

Para separarmos a equação de Helmholtz ($\nabla^2\phi+k^2\phi=0$), sendo $\phi=\phi(r,\theta,\psi)$, usamos as eq.(2.17), e substituímos as eq.(3.1) e (3.5) bem como os elementos da matriz de Stäckel dados por (3.8)

De (2.17), temos:

$$\frac{1}{f_i}\frac{d}{du_i}\left(f_i\,\frac{dU^i}{du_i}\right) + U^i\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\,\phi_{ij} \qquad ,i = 1,2,3$$

onde $\alpha_1 = k^2$ e $U^1 = R(r)$, $U^2 = \Theta(\theta)$, $U^3 = \Psi(\psi)$

Assim para i = 1, temos:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\,\frac{dR}{dr}\right] + \left[\alpha_1 + \alpha_2\left(\frac{-1}{r^2}\right) + \alpha_3\,0\right]R = 0 \tag{3.10}$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left(k^2 - \frac{\alpha_2}{r^2}\right)R = 0$$

Para i=2, temos:

$$\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right]+\left[\alpha_2-\frac{\alpha_3}{\operatorname{sen}^2\theta}\right]\Theta=0 \text{ ,logo}$$

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}+\operatorname{cotg}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}+\left[\alpha_2-\frac{\alpha_3}{\operatorname{sen}^2\theta}\right]\Theta=0 \qquad (3.11)$$

Para i=3, temos:

$$\frac{d}{d\psi}\left[\frac{d\Psi}{d\psi}\right]+\alpha_3.\Psi=0 \text{ ,logo}$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2}+\alpha_3.\psi=0 \qquad (3.12)$$

Se $\alpha_2 = p\ (p+1)$ e $\alpha_3 = q^2$

A primeira equação toma a forma:

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\left[k^2-\frac{p(p+1)}{r^2}\right]R=0$$

cuja solução é:

$$R(r) = r^{-1/2}\ [A\ J_{p+1/2}(kr) + B\ J_{-(p+1/2)}(kr)\quad]$$

que é uma equação de Bessel:

$$\frac{d^2X}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dX}{dr}+\left[k^2-\frac{s^2}{r^2}\right]X=0$$

cuja solução é:

$$X(r) = A\ J_s(kr) + B\ J_{-s}(kr) \quad \text{ou} \quad X(r) = A\ J_n(kr) + Y_n(kr)$$

fazendo a transformação:

$$X = R\ r^{1/2}\ ,\ s = p + 1/2$$

A segunda equação, torna-se:

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \cot g\theta \frac{d\Theta}{d\theta} + \left[k^2 - \frac{q^2}{\operatorname{sen}^2\theta} \right] \Theta = 0$$

cuja solução é:

$$\Theta(\theta) = A\ \mathcal{P}_p^q(\cos\theta) + B\ \mathcal{Q}_p^q(\cos\theta)$$

que é a equação de Legendre:

$$(z^2 - 1)\frac{d^2Z}{dz^2} + 2z\frac{dZ}{dz} - \left[p(p+1) - \frac{q^2}{z^2 - 1} \right] Z = 0\ ,$$

cuja solução é dada por:

$Z(z) = A\ \mathcal{P}_p^q\ (z) + B\ \mathcal{Q}_p^q\ (z)$, fazendo $z = \cos\theta$

Se p e q são inteiros, $p = n$, $q = m$, a solução é:

$Z(z) = A\ P_n^m(z) + B\ Q_n^m(z)$, onde $P_n^m(z)$ e $Q_n^m(z)$ são as funções associadas de Legendre.

A terceira equação:

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2} + q^2\ \Psi = 0,$$ cuja solução é:

$$\Psi(\psi) = A\ \operatorname{sen}(q\psi) + B\ \cos(q\psi)$$

Como exemplo, consideramos a equação de ondas em coordenadas esféricas:

$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{c^2}\ \frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} \tag{3.13}$$

onde $\varphi = \varphi(s,t)$

Separamos o fator tempo fazendo:

$$\varphi(s,t) = \phi(s).T(t)$$

Isso conduz às equações:

$$\frac{d^2T}{dt^2} = \lambda\ c^2\ T \qquad (3.14)$$

$$\nabla^2\phi = \lambda\ \phi \qquad (3.15)$$

Na maioria dos casos, estamos interessados em soluções que variem harmonicamente com o tempo, de maneira que:

$$T(t) = e^{-iwt} \quad \text{,onde } k = \frac{w}{c} \quad \text{, sendo } \lambda = -k^2$$

E escrevemos como solução possível, a expressão:

$$\varphi_k(s,t) = \phi_k(s).e^{-iwt}$$

Permitir ou não que w tome valores arbitrários depende das condições de contorno impostas sobre $\phi_k(s)$ este problema será resolvido pelo estudo da equação de Helmholtz $(\nabla^2+k^2\phi)=0$

No sistema esférico, usando a expressão para o laplaciano dada pela eq.(3.9), sendo $\phi(r,\theta,\psi)$, temos:

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial\phi^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2} + \frac{\text{cotg}\theta}{r^2}\frac{\partial\phi}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\ \text{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\phi}{\partial\phi^2} + k^2\phi = 0$$

As equações separadas são dadas pelas eq.(3.10), (3.11) e (3.12)

Também, exige-se geralmente que $\phi(r,\theta,\psi)$ seja periódica em ψ, isso conduz ao resultado que em:

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2} + \alpha_3 \Psi = 0$$, a constante de separação $\alpha_3 = q^2$ com $q = 0,1,2,3,...$

As funções $\Psi(\psi)$ serão trigonométricas ou exponenciais complexas

A equação para $\Theta(\theta)$ torna-se então:

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \cot g\theta \frac{d\Theta}{d\theta} + \left(\alpha_2 - \frac{q^2}{sen^2\theta} \right) \Theta = 0$$

Fazendo a mudança de variável $x = \cos\theta$, $y(x) = \Theta(\theta)$, transformamos esta equação em :

$$(1-x^2) \frac{d^2y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + \left(\alpha_2 - \frac{q^2}{1-x^2} \right) y = 0$$, que é conhecida como equação associada de Legendre

Torna-se uma equação de valores característicos para α_2 se exigirmos que a solução seja finita nos pontos singulares $x = 1$ e $x = -1$.

Transladamos a origem para $x = 1$ e introduzimos uma nova variável independente $z = 1-x$

A equação diferencial se transforma em:

$$z\,(2-z) \frac{d^2y}{dz^2} + 2\,(1-z) \frac{dy}{dz} + \left[\alpha_2 - \frac{q^2}{z(2-z)} \right] y = 0 ,$$

Tentando uma série de Frobenius:

$$y(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \, z^{n+s}$$

A substituição fornece as raízes da equação indicial que serão $s = \pm(q/2)$, considerando q um inteiro não negativo, pois somente q^2 aparece na equação, apenas a raiz $q/2$ será aceitável.

Assim $y(z) = z^{s}.u(z)$ onde $u(z)$ é uma função analítica e não se anula quando $z = 0$, concluímos que as funções características devem ser da forma:

$y(x) = (1-x)^{q/2}f(x)$, onde $f(x)$ é analítica e não se anula em $x = 1$.

Transladando a origem para $x = -1$, introduzindo uma nova variável $z = 1+x$, analogamente temos:

$y(x) = (1+x)^{q/2}g(x)$, onde $g(x)$ é analítica e não se anula em $x = -1$

Consequentemente a solução aceitável para $y(x)$ deve ser da forma:
$y(x) = (1-x^{2})^{q/2}u(x)$ em que $u(x)$ deve ser analítica em todo o plano complexo.
$y(x)$ não pode ter outras singularidades exceto quando $x = \pm 1$ e possivelmente $x = \infty$

A equação diferencial satisfeita por $u(x)$ é:

$$(1-x^{2}) \frac{d^{2}u}{dx^{2}} - 2(q+1)x \frac{du}{dx} + (\alpha_{2} - q - q^{2})u = 0$$

uma série de Frobenius (em torno da origem)

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{n} x^{n+s}$$, conduz à fórmula de recorrência:

$$a_{n+2} = \frac{n(n-1) + 2(q+1)n - \alpha_{2} + q(q+1)}{(n+1)(n+2)} a_{n}$$

a série para $u(x)$ divergirá em $|x| = 1$, a não ser que seja uma série finita, isso acontece quando :

$n(n+1) + 2(q+1)n - \alpha_2 + q(q+1) = 0$, isto é:

$\alpha_2 = (q+n)(q+n+1)$, o que significa que:

α_2 é da forma $p(p+1)$ onde p é um número inteiro não menor que n, a série terminará após o termo de ordem $(p-q)$.

As soluções $u(x)$ são polinômios em x, sua forma explícita pode ser obtida pela fórmula de recorrência.

Verifica-se que são múltiplos das derivadas dos polinomios de Legendre $P_l(x)$.

$$u(x) = \frac{d^m}{dx^m} \; P_l(x)$$

Isso conduz às funções características da equação associada de Legendre sob a forma:

$$P_p^q(x) = (1-x^2)^{q/2} \frac{d^q}{dx^q} P_p(x) \qquad\qquad 0 \leq q \leq p$$

que são conhecidas como as funções associadas de Legendre (de primeira espécie)

Como, de início $x = \cos\theta$, temos:

$$\Theta(\theta) = A\, P_p^q(\cos\theta)$$

é solução aceitável.

A equação radial tem a forma:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[k^2 - \frac{p(p+1)}{r^2} \right] R = 0$$

com $p = 0,1,2,3,4,\ldots$

Se fizermos a substituição $x = k\,r$ $y(x) = R(r)$ esta equação se reduzirá a:

$$x^2 \frac{d^2y}{dx^2} + 2x \frac{dy}{dx} + [\ x^2 - p(p+1)\ ]\ y = 0$$

As soluções desta equação são conhecidas como funções esféricas de Bessel e de Neumann, de ordem p, representadas respectivamente por $j_p(x)$ e $n_p(x)$. A razão destes nomes é que uma substituição:

$$y(x) = \frac{u(x)}{(x)^{1/2}}$$, reduz nossa equação à forma:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{du}{dx} + \left[1 - \frac{(p+1/2)^2}{x^2} \right] u = 0$$

com p = 0,1,2,3...

que é reconhecida como a equação diferencial de Bessel de ordem p+1/2. Segue-se que as soluções da equação diferencial original podem ser escritas na forma

$$y(x) = C_1 \frac{J_{p+1/2}(x)}{x^{1/2}} + C_2 \frac{J_{-(p+1/2)}(x)}{x^{1/2}}$$

e se a função esférica de Bessel $j_p(x)$ for definida como sendo uma solução finita quando x = 0, segue-se que deve ser um múltiplo de $J_{p+1/2}(x)$. O fator de proporcionalidade é escolhido como sendo $(\pi/2)^{1/2}$(abaixo explicaremos),de maneira que:

$$j_p(x) = (\pi/2x)^{1/2} J_{p+1/2}(x)$$

A relação $j_p(x)$ com as funções de Bessel nos permite expressar $j_p(x)$ em termos de $j_0(x)$, assim:

$$j_p(x) = x^p \left(- \frac{1}{x}\frac{d}{dx} \right)^p j_0(x) \qquad (p = 0,1,2,3,\ldots)$$

Esta fórmula define de maneira única, todas as funções j_p, uma vez escolhida j_o. Nossa equação quando p = 0 é:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{dy}{dx} + y = 0 \ .$$

Resolvendo esta equação vemos que senx/x e cosx/x são soluções É costume definir:

$$j_o(x) = \frac{\operatorname{sen} x}{x}$$

e a comparação com $J_{p+1/2}(x)$ mostra que:

$$j_o(x) = \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} J_{p/2}(x)$$

o que explica o fator $(\pi/2)^{1/2}$ mencionado antes.

As funções esféricas de Neumann $n_p(x)$ são geradas semelhantemente a partir de $n_o(x)$, por meio de

$$n_p(x) = x^p \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^p n_o(x)$$

com p = 1,2,3,...

É costume definir

$$n_o(x) = -\frac{\cos x}{x} = -\left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} J_{-1/2}(x) \ .$$

4. SEPARABILIDADE DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER E FORMA MAIS GERAL PARA O POTENCIAL

Neste capítulo mostramos que a forma mais geral para o potencial a fim de que a equação de Schrödinger ($\nabla^2\varphi + k^2(E-V)\varphi = 0$) tridimensional, onde k e E são constantes e $V = V(u_1,u_2,u_3)$, seja separável é:

$$V = \sum_{i=1}^{3} \frac{v_i(u_i)}{g_{ii}}$$

Teorema 4.1: As condições necessárias e suficientes para que a equação de Schrödinger seja separável são que os coeficientes métricos (g_{ii}) e o potencial (V) satisfaçam as equações:

$$g_{ii} = \frac{S}{M_{i1}}$$

$$\frac{(g)^{1/2}}{S} = \prod_{i=1}^{3} f_i(u_i)$$

$$V = \sum_{i=1}^{3} \frac{v_i(u_i)}{g_{ii}}$$

onde S é o determinante de Stäckel dado pela eq.(2.9)

Prova: Em analogia ao teorema 2.1, consideremos a equação de Schrödinger $\nabla^2\varphi + k^2(E-V)\varphi = 0$ no espaço euclidiano tridimensional.

Num sistema de coordenadas curvilíneas ortogonais (u_1,u_2,u_3) onde $\varphi = \varphi(u_1,u_2,u_3)$ e $V = V(u_1,u_2,u_3)$, a equação de Schrödinger é dada por:

$$\frac{1}{(g)^{1/2}} \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial u_i}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} \frac{\partial \varphi}{\partial u_i}\right) + k^2(E - V)\varphi = 0 \tag{4.1}$$

Supondo $\varphi = U^1(u_1).U^2(u_2).U^3(u_3)$, substituindo na eq.(4.1) temos:

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{U^i} \frac{\partial}{\partial u_i}\left(\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} \frac{dU^i}{du_i}\right) + k^2(g)^{1/2}(E - V) = 0 \tag{4.2}$$

Uma condição necessária para separabilidade é que:

$\dfrac{(g)^{1/2}}{g_{ii}}$, $i = 1,2,3,...$ satisfaçam as eq.(2.5)

outra condição é que:

$$V(u_1,u_2,u_3) = \sum_{i=1}^{3} \frac{v_i(u_i)}{g_{ii}} \tag{4.3}$$

se estas condições são satisfeitas a equação (4.2) fica:

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{F_i}{U^i} \frac{d}{du_i}\left(f_i \frac{dU^i}{du_i}\right) + k^2E\,(g)^{1/2} - k^2(g)^{1/2} \sum_{i=1}^{3} \frac{v_i(u_i)}{g_{ii}} = 0 \tag{4.4}$$

Derivando a eq.(4.4) em relação a α_i, $i=1,2,3,...,$onde $\alpha_1=k^2E$, obtemos as eq.(2.7), onde ϕ_{ij} e S são os mesmos dados pelas eq.(2.8) e (2.9), respectivamente, consequentemente obtemos as mesmas condições:

$$g_{ii} = \frac{S}{M_{i1}} \quad (4.5) \qquad \text{e} \qquad \frac{(g)^{1/2}}{S} = \prod_{i=1}^{3} f_i \quad (4,6)$$

Mostramos, então, que as condições (4.3), (4.5) e (4.6) são necessárias.

Para provar que são suficientes, das eq.(4.5) e (4.6), temos:

$$\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} = \prod_{i=1}^{3} f_i \; M_{i1} \qquad (4.7)$$

Substituindo as eq.(4.7) e (4.3) em (4.2):

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{U^i} \frac{\partial}{\partial u_i} \left(f_1 f_2 f_3 \; M_{i1} \frac{dU^i}{du_i} \right) + k^2 E \; f_1 f_2 f_3 \; S - k^2 \sum_{i=1}^{3} f_1 f_2 f_3 \; M_{i1} v_i = 0$$

Lembrando que M_{i1} não é função de u_i, temos:

$$\frac{f_2 f_3 M_{11}}{U^1} \frac{d}{du_1} \left(f_1 \frac{dU^1}{du_1} \right) + \frac{f_1 f_3 M_{21}}{U^2} \frac{d}{du_2} \left(f_2 \frac{dU^2}{du_2} \right) +$$

$$+ \frac{f_1 f_2 M_{31}}{U^3} \frac{d}{du_3} \left(f_3 \frac{dU^3}{du_3} \right) + k^2 \; E \; f_1 f_2 f_3 \; S - k^2 f_1 f_2 f_3 \; -$$

$$- (M_{11} \; v_1 + M_{21} \; v_2 + M_{31} \; v_3) = 0$$

e, usando a eq.(4.6), temos:

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{g_{ii} \; f_i \; U^i} \; \frac{d}{du_i} \left(f_i \frac{dU^i}{du_i} \right) + k^2 E - k^2 \sum_{i=1}^{3} \frac{v_i}{g_{ii}} = 0 \qquad (4.8)$$

e, usando a eq.(2.15), escrevemos:

$$k^2 E = \alpha_1 = \alpha_1 \sum_{i=1}^{3} \frac{\phi_{i1}}{g_{ii}} + \alpha_2 \sum_{i=1}^{3} \frac{\phi_{i2}}{g_{ii}} + \alpha_3 \sum_{i=1}^{3} \frac{\phi_{i3}}{g_{ii}}$$

Substituindo em (4.8), temos:

$$\frac{1}{g_{11}} \left[\frac{1}{f_1 U^1} \frac{d}{du_1} \left(f_1 \frac{dU^1}{du_1} \right) + \alpha_1 \; \phi_{11} + \alpha_2 \; \phi_{12} + \alpha_3 \; \phi_{13} + k^2 v_1 \right] +$$

$$+\frac{1}{g_{22}}\left[\frac{1}{f_2 U^2}\frac{d}{du_2}\left(f_2\frac{dU^2}{du_2}\right)+\alpha_1\phi_{21}+\alpha_2\phi_{22}+\alpha_3\phi_{23}-k^2v_2\right]+$$

$$+\frac{1}{g_{33}}\left[\frac{1}{f_3 U^3}\frac{d}{du_3}\left(f_3\frac{dU^3}{du_3}\right)+\alpha_1\phi_{31}+\alpha_2\phi_{32}+\alpha_3\phi_{33}-k^2v_3\right]=0$$

ou ainda,

$$\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{g_{ii}}\left[\frac{1}{f_i U^i}\frac{d}{du_i}\left(f_i\frac{dU^i}{du_i}\right)+\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\,\phi_{ij}(u_i)+k^2v_i(u_i)\right]=0$$

Esta equação só é satisfeita se cada colchete é zero, isto é:

$$\frac{1}{f_i U^i}\frac{d}{du_i}\left(f_i\frac{dU^i}{du_i}\right)+\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\,\phi_{ij}+k^2v_i=0 \qquad (4.9)$$

i=1,2,3, ou seja, a equação de Schrödinger foi separada em três equações diferenciais ordinárias. As equações separadas são dadas pela equação acima.

No próximo capítulo discutimos o sistema de coordenadas parabólicas e resolvemos, como exemplo, a equação de Schrödinger para o efeito Stark.

5. COORDENADAS PARABÓLICAS

Neste capítulo apresentamos o sistema de coordenadas parabólicas, detalhando os coeficientes métricos, a expressão do laplaciano, as equações ordinárias obtidas da separação, bem como suas soluções e a forma mais geral para o potencial a fim de que a equação de Schrödinger seja separável.

Como exemplo da equação de Schrödinger, discutimos o efeito Stark[15,16].

COORDENADAS PARABÓLICAS (μ, ν, ψ)

O sistema de coordenadas parabólicas é um sistema de coordenadas rotacional gerado pela transformação $z = \frac{1}{2}w^2$, onde $z = x + iy$ e $w = \mu + i\nu$

Tomando-se:

$$\begin{aligned} u_1 &= \mu & 0 \le \mu < \infty \\ u_2 &= \nu & 0 \le \nu < \infty \\ u_3 &= \psi & 0 \le \psi < 2\pi \end{aligned} \tag{5.1}$$

temos as seguintes relações com (x,y,z)

$$\begin{aligned} x &= \mu\ \nu\ \cos\psi \\ y &= \mu\ \nu\ \mathrm{sen}\psi \\ z &= 1/2\ (\mu^2 - \nu^2) \end{aligned} \tag{5.2}$$

As superfícies coordenadas são:

$$x^2 + y^2 = \mu^2(\mu^2 - 2z)$$

(parabolóides de revolução côncavos para cima, μ = cte)

$$x^2 + y^2 = \nu^2(\nu^2 + 2z)$$

(parabolóides de revolução côncavos para baixo, υ = cte)

$$tg\psi = \frac{y}{x}$$

(semi- planos, ψ = cte)

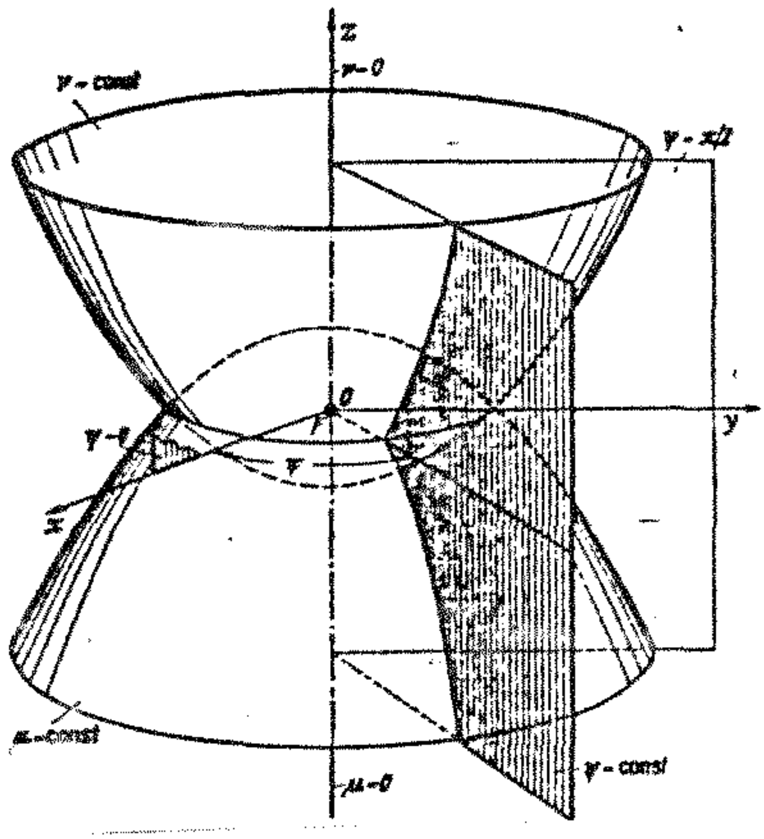

fig 11 Coordenadas Parabólicas (μ,ν,ψ)

Usando as eq.(1.10), determinamos os coeficientes métricos. Como em coordenadas parabólicas , r é dado por:

$$\mathbf{r} = \mu\,\nu\cos\psi\,\mathbf{i} + \mu\,\nu\,\mathrm{sen}\psi\,\mathbf{j} + \frac{1}{2}(\mu^2 - \nu^2)\,\mathbf{k}\ ,\ \text{temos:}$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mu} = \nu\cos\psi\,\mathbf{i} + \nu\,\mathrm{sen}\psi\,\mathbf{j} + \mu\,\mathbf{k}\ ,\ \text{assim:}$$

$$\left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mu}\right|^2 = \nu^2\cos^2\psi + \nu^2\,\mathrm{sen}^2\psi + \mu^2 = \mu^2 + \nu^2\ ,\ \text{portanto:}$$

$$g_{11} = \mu^2 + \nu^2$$

Também:

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \nu} = \mu\cos\psi\,\mathbf{i} + \mu\,\mathrm{sen}\psi\,\mathbf{j} - \upsilon\,\mathbf{k}$$

$$\left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \nu}\right|^2 = \mu^2\cos^2\psi + \mu^2\,\mathrm{sen}^2\psi + \nu^2 = \mu^2 + \nu^2\ ,\ \text{portanto:}$$

$$g_{22} = \mu^2 + \nu^2$$

Analogamente:

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \psi} = -\mu\,\nu\,\mathrm{sen}\psi\,\mathbf{i} + u\,\nu\cos\psi\,\mathbf{j}$$

$$\left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \psi}\right|^2 = \mu^2\nu^2\,\mathrm{sen}^2\psi + \mu^2\nu^2\cos^2\psi = \mu^2\,\nu^2,\ \text{portanto:}$$

$$g_{33} = \mu^2\,\nu^2$$

Resumindo:

$$g_{11} = g_{22} = \mu^2 + \nu^2 \quad , \quad g_{33} = \mu^2\,\nu^2 \qquad (5.3)$$

Substituindo a eq.(5.3) na eq.(1.13), obtemos:

$$(g)^{1/2} = (\mu^2 + \nu^2) \quad \mu \quad \nu \tag{5.4}$$

Calculamos as f's, substituindo os valores encontrados nas eq.(5.3) e eq.(5.4) nas eq.(2.5), assim:

De $$\frac{(g)^{1/2}}{g_{11}} = f_1(u_1).F_2(u_2,u_3)$$

$$\mu \ \nu = f_1(\mu).F_1(\nu,\psi), \text{ então:}$$

$$f_1(\mu) = \mu$$

De $$\frac{(g)^{1/2}}{g_{22}} = f_2(u_2).F_2(u_1,u_3)$$

$$\mu \ \nu = f_2(\nu).F_2(\mu,\psi) \ , \text{ então:}$$

$$f_2(\nu) = \nu$$

De $$\frac{(g)^{1/2}}{g_{33}} = f_3(u_3).F_3(u_1,u_2)$$

$$\frac{(u^2+ \nu^2)}{\mu \ \nu} = f_3(\psi).F_3(\mu,\nu) \ , \text{ então:}$$

$$f_3(\psi) = 1$$

Resumindo,

$$f_1(\mu) = \mu \quad , \quad f_2(\nu) = \nu \quad , \quad f_3(\psi) = 1 \tag{5.5}$$

Calculamos o determinante de Stäckel, utilizando a eq.(2.13), na qual introduzimos as eq.(5.4) e eq.(5.5), assim:

Os cofatores são determinados através das eq.(2.11), na qual introduzimos as eq.(5.3) e eq.(5.6), assim:

$$M_{11} = \frac{S}{g_{11}} = 1$$
$$M_{21} = \frac{S}{g_{22}} = 1 \qquad (5.7)$$
$$M_{31} = \frac{S}{g_{33}} = 1$$

Considerando os cofatores dados pelas eq.(5.7), podemos escrever a matriz de Stäckel como:

$$[S] = \begin{bmatrix} \mu^2 & -1 & -1/\mu^2 \\ \nu^2 & 1 & -1/\nu^2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad (5.8)$$

Obtemos a expressão para o laplaciano substituindo na eq.(1.14) as eq.(5.1), eq.(5.3) e eq.(5.4):

Assim de: $\nabla^2\phi = \frac{1}{(g)^{1/2}} \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial u_i}\left[\frac{(g)^{1/2}}{g_{ii}} \frac{\partial\phi}{\partial u_i}\right]$

Temos:

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{(\mu^2 + \nu^2)\mu\nu}\left[\frac{\partial}{\partial\mu}\left(\mu\nu \frac{\partial\phi}{\partial\mu} \right) + \frac{\partial}{\partial\nu}\left(\mu\nu \frac{\partial\phi}{\partial\nu} \right) + \frac{\partial}{\partial\psi}\left(\frac{\mu^2+\nu^2}{\mu\nu} \frac{\partial\phi}{\partial\upsilon} \right)\right]$$

Logo, a expressão para o laplaciano é:

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{(\mu^2 + \nu^2)}\left[\frac{\partial^2\phi}{\partial\mu^2} + \frac{1}{\mu}\frac{\partial\phi}{\partial\mu} + \frac{\partial^2\phi}{\partial\nu^2} + \frac{1}{\nu}\frac{\partial\phi}{\partial\nu}\right] + \frac{1}{\mu^2\nu^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\psi^2}$$

(5.9)

Para separarmos a equação de Helmholtz $\nabla^2\phi+k^2\phi=0$, onde $\nabla^2\phi$ é dado pela eq.(5.9), e $\phi = \phi(\mu,\nu,\psi)$, usamos as eq.(2.17), e substituímos as eq.(6.1) e eq.(5.5) bem como os elementos da matriz de Stäckel dados pela eq. (5.8)

Da eq.(2.17), temos:

$$\frac{1}{f_i}\frac{d}{du_i}\left[f_i \frac{dU^i}{du_i} \right] + U^i \sum_{i=1}^{3} \alpha_j \, \phi_{ij} \quad , \quad i = 1,2,3$$

onde $\alpha_1 = k^2$ e $U^1 = M(\mu)$, $U^2 = N(\nu)$, $U^3 = \Psi(\psi)$

Assim, para i = 1, temos:

$$\frac{1}{\mu}\frac{d}{d\mu}\left(\mu \frac{dM}{d\mu} \right) + \left(k^2\mu^2 - \alpha_2 - \frac{\alpha_3}{\mu^2} \right) M = 0$$

$$\frac{d^2M}{d\mu^2} + \frac{1}{\mu}\frac{dM}{d\mu} + \left(k^2\mu^2 - \alpha_2 - \frac{\alpha_3}{\mu^2} \right) M = 0 \qquad (5.10)$$

Para i = 2, temos:

$$\frac{1}{\nu}\frac{d}{d\nu}\left(\nu \frac{dN}{d\nu} \right) + \left(k^2\nu^2 + \alpha_2 - \frac{\alpha_3}{\nu^2} \right) N = 0$$

$$\frac{d^2N}{d\nu^2} + \frac{1}{\nu}\frac{dN}{d\nu} + \left(k^2\nu^2 + \alpha_2 - \frac{\alpha_3}{\nu^2} \right) N = 0 \qquad (5.11)$$

Para i = 3, temos:

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2} + \alpha_3 \, \Psi = 0 \qquad (5.12)$$

Se $\alpha_2 = q^2$ e $\alpha_3 = p^2$

A eq. (5.10) toma a forma:

$$\frac{d^2M}{d\mu^2} + \frac{1}{\mu}\frac{dM}{d\mu} + \left(k^2\nu^2 - q^2 - \frac{p^2}{\nu^2} \right) M = 0$$

cuja solução é:

$$M = A\ J_p(k, iq\mu) + B\ J_{-p}(k, iq\mu) \qquad \text{ou}$$

$$M = A\ J_n(k, iq\mu) + B\ Y_n(k, iq\mu)$$

pois é uma equação de onda de Bessel:

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + \frac{1}{z}\frac{dZ}{dz} + \left(k^2z^2 + q^2 - \frac{p^2}{z^2} \right) Z = 0$$

cuja solução é:

$$Z = A\ J_p(k, q, z) + B\ J_{-p}(k, q, z) \qquad \text{, ou}$$
$$Z = A\ J_n(k, q, z) + B\ Y_{-n}(k, q, z) \qquad (5.13)$$

fazendo a mudança de variável $z = i\mu$, $Z(z) = M(\mu)$

A eq. (5.11) toma a forma:

$$\frac{d^2N}{d\nu^2} + \frac{1}{\nu}\frac{dN}{d\nu} + \left(k^2\nu^2 + q^2 - \frac{p^2}{\nu^2} \right) N = 0$$

cuja solução é:

$$N = A\ J_p(k, q\nu) + B\ J_{-p}(k, q\nu) \qquad \text{, ou}$$

$$N = A\ J_n(k, q\nu) + B\ Y_{-n}(k, q\nu)$$

pois é a equação de onda de Bessel, cuja solução é dada pela eq. (5.13)

A eq.(5.12) toma a forma:

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2} + p^2\ \Psi = 0$$

cuja solução é:

$$\Psi = A \text{ sen } p\psi + B \cos p\psi$$

Determinamos a forma mais geral para o potencial (V) na equação de Schrödinger, usando a eq.(4.3), na qual introduzimos as eq.(5.1) e eq.(5.3).

Assim, de:

$$V = \sum_{i=1}^{3} \frac{v_i(u_i)}{g_{ii}} \quad , \text{ temos:}$$

$$V = \frac{v_1(\mu)}{\mu^2 + \nu^2} + \frac{v_2(\nu)}{\mu^2 + \nu^2} + \frac{v_3(\psi)}{\mu^2\ \nu^2} \qquad (5.14)$$

A equação de Schrödinger $[\nabla^2\phi + k^2(E-V)=0]$, onde $\nabla^2\phi$ é dado pela eq.(5.9), com o potencial dado por (5.14), pode ser separada em três equações diferenciais ordinárias , usando a eq.(4.9).

As equações separadas são:

$$\frac{1}{\mu}\frac{d}{d\mu}\left[\mu\frac{dM}{d\mu}\right] + \left[k^2E\ \mu^2 - \alpha_2 - \frac{\alpha_3}{\mu^2}\right] M + k^2\ v_1(\mu) M = 0 \qquad (5.15)$$

$$\frac{1}{\nu}\frac{d}{d\nu}\left[\nu\frac{dN}{d\nu}\right] + \left[k^2E\ \nu^2 + \alpha_2 - \frac{\alpha_3}{\nu^2}\right] N + k^2\ v_2(\nu)\ N = 0 \qquad (5.16)$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\Psi^2} + \alpha_3\Psi + k^2 v_3(\psi) = 0 \qquad (5.17)$$

Como exemplo da equação de Schrödinger, apresentamos o efeito Stark (deslocamento dos níveis de energia que resulta quando um átomo é colocado na presença de um campo elétrico externo).

A presença de um campo elétrico externo E_o, na direção do eixo positivo z, adiciona um termo $- e\, E_o\, z$ à enegia potencial na equação de onda de Schrödinger. Para o átomo de hidrogênio, temos:

$$\frac{-h^2}{2m} \nabla^2 \phi - \frac{e^2}{r} \phi - e\, E_o\, z\, \phi = E\, \phi$$

$$\nabla^2 \phi + \frac{2m}{h^2} \left[\frac{e^2}{r} + e\, E_o\, z + E \right] \phi = 0$$

Identificando com a equação de Schrödinger:

$$\nabla^2 \phi + k^2 (E - V) \phi = 0 \quad , \text{ temos:}$$

$$k^2 = \frac{2m}{h^2} \tag{5.18}$$

$$- V = \frac{e^2}{r} + e\, E_o\, z$$

Usando as eq. (5.2), temos:

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 = \frac{1}{4} (\mu^2 + \nu^2) \text{ , portanto:}$$

$$r = \frac{1}{2} (\mu^2 + \nu^2) \qquad , \text{ e } \quad z = \frac{1}{2} (\mu^2 - \nu^2)$$

Assim,

$$- V = \frac{2e^2}{\mu^2 + \nu^2} + \frac{e\, E_o (\mu^2 - \nu^2)}{2} = \frac{4\, e^2 + e\, E_o (\mu^4 - \nu^4)}{2\, (\mu^2 + \nu^2)}$$

$$- V = \frac{1}{\mu^2 + \nu^2} \left[2e^2 + \frac{eE_o \mu^4}{2} + \frac{eE_o \nu^4}{2} \right]$$

Logo:

$$v_1(\mu) = -(2e^2 + eE_o\mu^4/2) \qquad (5.19)$$

$$v_2(\nu) = eE_o\nu^4/2 \qquad (5.20)$$

$$v_3(\psi) = 0 \qquad (5.21)$$

Introduzindo a eq.(5.21) na eq.(5.17), e considerando como anteriormente, $\alpha_3 = p^2$, temos:

$$\frac{d^2\Psi}{d\Psi^2} + p^2\Psi = 0 \quad , \quad \text{cuja solução é:}$$

$$\Psi(\psi) = A \cos p\psi + B \text{ sen } p\psi$$

Introduzindo a eq.(5.18) e a eq.(5.19) na eq.(5.15) e, considerando $\alpha_2 = q^2$ e $\alpha_3 = p^2$, temos:

$$\frac{d^2M}{d\mu^2} + \frac{1}{\mu}\frac{dM}{d\mu} + \left[\frac{2mE}{h^2}\mu^2 + \frac{4me^2}{h^2} + \frac{meE_o}{h^2}\mu^4 + \frac{p^2}{\mu^2} - q^2\right] M = 0$$

Introduzindo a eq.(5.18) e a eq.(5.20) na eq.(5.16) e, considerando $\alpha_2 = q^2$ e $\alpha_3 = p^2$, temos:

$$\frac{d^2N}{d\nu^2} + \frac{1}{\nu}\frac{dN}{d\nu} + \left(\frac{2mE}{h^2}\nu^2 - \frac{meE_o}{h^2}\nu^4 - \frac{p^2}{\nu^2} + q^2\right) N = 0$$

Para resolvermos esta equação, tomamos $\nu^2 = x$, logo:

$$\frac{dN}{d\nu} = \frac{dN}{dx}\frac{dx}{d\nu} = 2\,(x)^{1/2}\frac{dN}{dx}$$

$$\frac{d^2N}{d\nu^2} = \frac{d}{d\nu}\left[2\,(x)^{1/2}\frac{dN}{dx}\right] = \frac{d}{dx}\left[2\,(x)^{1/2}\frac{dN}{dx}\right]\frac{dx}{d\nu}$$

$$\frac{d^2N}{d\nu^2} = 4x\frac{d^2N}{dx^2} + 2\frac{dN}{dx}$$

e, substituindo temos:

$$4x\,\frac{d^2N}{dx^2} + 4\,\frac{dN}{dx} + \left(\frac{2mE}{h^2}\,x - \frac{meE_o}{h^2}\,x^2 - \frac{p^2}{x} + q^2 \right) N = 0$$

$$x\,\frac{d^2N}{dx^2} + \frac{dN}{dx} + \left(\frac{mE}{2h^2}\,x - \frac{meE_o}{4h^2}\,x^2 - \frac{p^2}{4x} + \frac{q^2}{4} \right) N = 0$$

Considerando $E_o = 0$, uma vez que para $E_o \neq 0$ precisamos de teoria de perturbação[17], temos:

$$\frac{d^2N}{dx^2} + \frac{1}{x}\,\frac{dN}{dx} + \left(\frac{mE}{2h^2} - \frac{p^2}{4x^2} + \frac{q^2}{4x} \right) N = 0$$

Façamos agora: $N(x) = x^{\alpha}.S(x)$, onde α será escolhido convenientemente

$$\frac{dN}{dx} = \alpha\,x^{\alpha}\,S + x^{\alpha}\,S' = x^{\alpha}\,(\alpha\,x^{-1}S + S') \quad , \text{ onde } S' = \frac{dS}{dx}$$

$$\frac{d^2N}{dx^2} = \alpha\,x^{\alpha-1}(\alpha\,x^{-1}S + S') + x^{\alpha}\,(-\,\alpha\,x^{-2}S + \alpha\,x^{-1}S' + S'')$$

$$\frac{d^2N}{dx^2} = x^{\alpha}\left[S'' + \frac{2\alpha}{x}\,S' + \frac{\alpha^2 - \alpha}{x^2}\,S \right] \quad , \text{ onde } S'' = \frac{d^2S}{dx^2}$$

Substituindo e cancelando x^{α}:

$$S'' + \frac{2\alpha}{x}\,S' + \frac{\alpha^2-\alpha}{x^2}\,S + \frac{\alpha}{x^2}\,S + \frac{1}{x}\,S' + \left(\frac{mE}{h^2} - \frac{p^2}{4x^2} + \frac{q^2}{4x} \right) = 0$$

Escolhendo $\alpha^2 - p^2/4 = 0$, $\alpha = p/2$, temos:

$$S'' + \frac{p+1}{x}\,S' + \left(\frac{mE}{2h^2} + \frac{q^2}{4x} \right) S = 0$$

Uma outra mudança do tipo:

$S(x) = e^{-\beta x/2}T(x)$, onde β será escolhido convenientemente

Escolhendo $\alpha^2 - p^2/4 = 0$, $\alpha = p/2$, temos:

$$S'' + \frac{p+1}{x} S' + \left(\frac{mE}{2h^2} + \frac{q^2}{4x}\right) S = 0$$

Uma outra mudança do tipo:

$S(x) = e^{-\beta x/2} T(x)$, onde β será escolhido convenientemente

$$S' = -\beta/2\, e^{-\beta x/2}\, T + e^{-\beta x/2}\, T' = e^{-\beta x/2}(-\beta/2\, T + T')$$

$$S'' = -\beta/2\, e^{-\beta x/2}(-\beta/2\, T + T') + e^{-\beta x/2}(-\beta/2\, T' + T'')$$

$$S'' = e^{-\beta x/2}\, (T'' - \beta\, T' + \beta^2/4\, T)$$

Substituindo e eliminando o termo exponencial temos

$$T'' - \beta\, T' + \frac{\beta^2}{4} T + \frac{p+1}{x}\left(\frac{-\beta}{2} T + T'\right) + \left(\frac{mE}{2h^2} + \frac{q^2}{4x}\right) T = 0$$

Agora, escolhemos:

$$\frac{\beta^2}{4} + \frac{mE}{h^2} = 0 \text{ ,portanto, } \beta = \frac{\sqrt{-2mE}}{h} \quad , \quad E < 0$$

$$T'' - \beta\, T' + \frac{p+1}{x} T' + \left[\frac{q^2}{4x} - \frac{\beta/2(p+1)}{x}\right] T = 0$$

$$x\, T'' + (p+1-\beta x)\, T' + \left(\frac{q^2}{4} - \frac{\beta(p+1)}{2}\right) T = 0$$

fazendo $\beta x = t$

$$\frac{d}{dx} = \frac{dt}{dx}\frac{d}{dt} = \beta \frac{d}{dt} \quad , \quad \frac{d^2}{dx^2} = \beta^2 \frac{d^2}{dt^2}$$

$$\frac{t}{\beta} \beta^2\, T'' + (p+1-t)\beta\, T' + \left[\frac{q^2}{4} - \frac{\beta(p+1)}{2}\right] T = 0$$

$$t\, T'' + (p+1-t)\, T' + \left(\frac{q^2}{4\beta} - \frac{p+1}{2}\right) T = 0$$

$$T(x) = L_n^p(\beta x)$$

$$S(x) = e^{-\beta x/2} \; L_n^p(\beta x)$$

$$N(x) = x^{p/2} \; e^{-\beta x/2} \; L_n^p(\beta x)$$

$$N(\nu) = \nu^p \; e^{-\beta \nu^2/2} \; L_n^p(\beta x)$$

Resolvemos a equação (5.15), para $M(\mu)$ analogamente à anterior, mudando apenas a constante de separação.

No próximo capítulo apresentamos os outros nove sistemas de coordenadas para os quais a equação de Helmholtz é separável, bem como a forma mais geral do potencial a fim de que a equação de Schrödinger seja ainda separável.

6. SISTEMAS SEPARÁVEIS

Neste capítulo apresentamos os onze sistemas de coordenadas, classificados por Eisenhart, que demonstrou serem os únicos (ver apêndice) em que a equação de Helmholtz tridimensional pode ser resolvida por separação de variáveis.

Para cada um desses sistemas, apresentamos os coeficientes métricos, a matriz de Stäckel, a expressão do Laplaciano, a separação da equação de Helmholtz, as equações ordinárias obtidas e suas soluções, a forma mais geral para o potencial a fim de que a equação de Schrödinger seja separável. E, finalmente expressamos o potencial, em sua forma mais geral, quando possível, em coordenadas cartesianas.

Os onze sistemas de coordenadas, deduzidos por Eisenhart são:

Cilíndricos:

1. Coordenadas retangulares (x, y, z)
2. Coordenadas cilíndrico - circulares (r, ψ, z)
3. Coordenadas cilíndrico - elípticas (η, ψ, z)
4. Coordenadas cilíndrico - parabólicas (μ, ν, z)

Rotacionais:

5. Coordenadas esféricas (r, θ, ψ)
6. Coordenadas esferoidais alongadas (η, θ, ψ)
7. Coordenadas esferoidais achatadas (η, θ, ψ)
8. Coordenadas parabólicas (μ, ν, ψ)

Gerais:

9. Coordenadas cônicas (r, θ, λ)
10. Coordenadas elipsoidais (η, θ, λ)
11. Coordenadas Paraboloidais (μ, ν, λ)

SISTEMAS CILÍNDRICOS

O eixo de simetria é tomado como o eixo z.

1. COORDENADAS RETANGULARES (x,y,z)

Este sistema é utilizado, por exemplo, quando estudamos o problema de uma partícula quântica confinada em uma caixa [18].

Tomando-se:

$$u_1 = x \qquad -\infty < x < \infty$$
$$u_2 = y \qquad -\infty < y < \infty$$
$$u_3 = z \qquad -\infty < z < \infty$$

As superfícies coordenadas são planos mutuamente ortogonais

$$x = cte$$
$$y = cte$$
$$z = cte$$

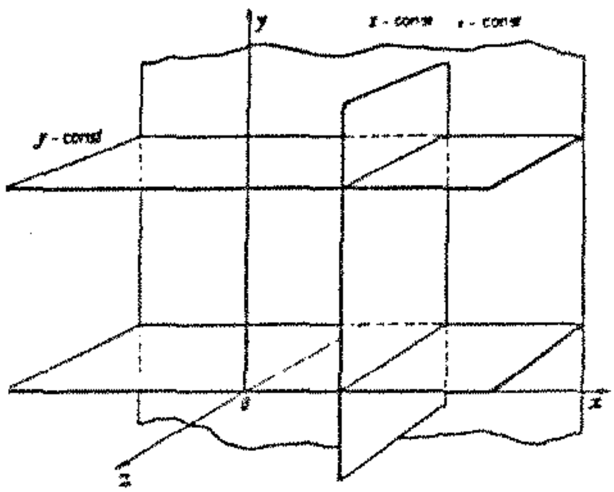

fig 12 Coordenadas Retangulares (x,y,z)

Os coeficientes métricos são calculados a partir da eq(2.2) e as f's são determinadas pela eq.(2.5), então:

$$g_{11} = g_{22} = g_{33} = 1$$

$$(g)^{1/2} = 1$$

$$f_1 = f_2 = f_3 = 1$$

O determinante de Stäckel é dado pela eq.(2.13), logo:

$$S = 1$$

Os cofatores são obtidos da eq.(2.11)

$$M_{11} = M_{21} = M_{31} = 1$$

A matriz de Stäckel pode ser escrita como:

$$[S] = \begin{bmatrix} 0 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A expressão para o Laplaciano é dada pela eq.(1.14)

$$\nabla \phi^2 = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \quad , \ \phi = \phi(x,y,z)$$

Separação da equação de Helmholtz ($\nabla^2\phi + k^2\phi = 0$)

As equações separadas são dadas pela eq.(2.17), isto é:

$$\frac{1}{f_i} \frac{d}{du_i}\left(f_i \frac{dU^i}{du_i} \right) + U^i \sum_{j=1}^{3} \alpha_j \, \phi_{ij} = 0 \qquad , i = 1,2,3$$

onde $\alpha_1 = k^2$ e $U^1 = X(x)$, $U^2 = Y(y)$, $U^3 = Z(z)$

Substituindo, temos:

$$\frac{d^2 X}{dx^2} - (\alpha_2 + \alpha_3) X = 0$$

$$\frac{d^2 Y}{dy^2} + \alpha_2 \, Y = 0$$

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + (k^2 + \alpha_3) Z = 0$$

Se $\alpha_2 = p^2$ e $\alpha_3 = q^2$, temos:

$$\frac{d^2X}{dx^2} - (p^2 + q^2)\ X = 0$$

cuja solução é:

$$X(x) = A\ e^{(p^2+\ q^2)^{1/2}x} + B\ e^{-(p^2+\ q^2)^{1/2}}$$

$$\frac{d^2Y}{dy^2} + p^2\ Y = 0$$

cuja solução é:

$$Y(y) = A \text{ sen } py + B \cos py$$

$$\frac{d\ Z}{dz^2} + (k^2+\ q^2)Z = 0$$

cuja solução é:

$$Z(z) = A \text{ sen}[(k^2+\ q^2)^{1/2}z] + B \cos[(k^2+\ q^2)^{1/2}z]$$

Se $\alpha_2 = -\ p^2$ e $\alpha_3 = -\ q^2$, temos:

$$\frac{d^2X}{dx^2} + (p^2+\ q^2)\ X = 0$$

cuja solução é:

$$X(x) = A \text{ sen}[(p^2+\ q^2)^{1/2}x] + B \cos[(p^2+\ q^2)^{1/2}x]$$

$$\frac{d^2Y}{dy^2} - p^2\ Y = 0$$

cuja solução é: $Y(y) = A\ e^{py} + B\ e^{py}$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + (k^2-\ p^2)\ Z = 0$$

cuja solução é:

$$Z(z) = A \text{ sen}[(k^2-\ p^2)^{1/2}z] + B \cos[(k^2-\ p^2)^{1/2}z]$$

Se $\alpha_2 = \alpha_3 = 0$

$$\frac{d^2X}{dx^2} = 0 \quad \text{, com solução:} \quad X(x) = A + Bx$$

$$\frac{d^2Y}{dy^2} = 0 \quad \text{, com solução:} \quad Y(y) = A + By$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + k^2 Z = 0 \quad \text{, com solução:} \quad Z(z) = A\ \mathrm{sen}(kz) + B \cos(kz)$$

A forma mais geral para o potencial na equação de Schrödinger [$\nabla^2\phi + k^2(E - V)\ \phi = 0$ é:

$$V = v_1(x) + v_2(y) + v_3(z)$$

2. COORDENADAS CILÍNDRICO - CIRCULARES (r, ψ, z)

Usamos este sistema, por exmplo, no caso de um fio condutor ao longo de um eixo carregado de corrente[19]; ondas eletromagnéticas num guia de ondas co-axial[20] e cavidade de ressonância cilíndrica[48].

Tomando-se:

$$u_1 = r \qquad 0 \le r < \infty$$
$$u_2 = \psi \qquad 0 \le \psi < 2\pi$$
$$u_3 = z \qquad -\infty \le z < \infty$$

Temos as relações com (x, y, z):

$$x = r\cos\psi$$
$$y = r\,\mathrm{sen}\psi$$
$$z = z$$

As superfícies coordenadas são:

$x^2 + y^2 = r^2$ (cilindros circulares, r = cte)

$\mathrm{tg}\ \psi = y/x$ (semi-planos contendo o eixo z, ψ = cte)

z = cte (planos paralelos ao plano xoy)

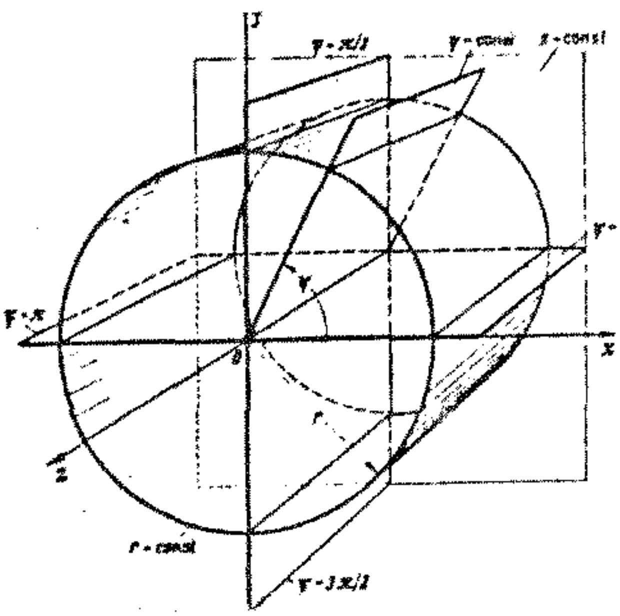

fig 13 Coordenadas Cilíndrico - Circulares (r,ψ,z)

Os coeficientes métricos são:

$$g_{11} = g_{33} = 1 \quad , \quad g_{22} = r^2$$

$$(g)^{1/2} = r$$

$$f_2 = f_3 = 1 \quad , \quad f_1 = r$$

O determinante de Stäckel é:

$$S = 1$$

Os cofatores são:

$$M_{11} = M_{31} = 1 \quad , \quad M_{21} = 1/r^2$$

A matriz de Stäckel pode ser escrita como:

$$[S] = \begin{bmatrix} 0 & -1/r^2 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A expressão para o laplaciano é:

$$\nabla^2\phi = \frac{\partial^2\phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\psi^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2} \qquad , \phi = \phi(r,\psi,z)$$

Separação da equação de Helmholtz ($\nabla^2\phi + k^2\phi = 0$). As equações separadas são dadas pela eq.(2.17), sendo:

$$\alpha_1 = k^2 \quad , \quad U^1 = R(r) \quad , \quad U^2 = \Psi(\psi) \quad , \quad U^3 = Z(z)$$

Temos, então:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dR}{dr} - \left(\frac{\alpha_2}{r^2} + \alpha_3\right) R = 0$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\Psi^2} + \alpha_2\, \Psi = 0$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + (k^2 + \alpha_3)\, Z = 0$$

Se $\alpha_2 = p^2$ e $\alpha_3 = q^2$, temos:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dR}{dr} - \left(\frac{p^2}{r^2} + q^2\right) R = 0 \text{ (Equação de Bessel)}$$

cuja solução é dada por:

$$R(r) = A\, J_p(iqr) + B\, J_{-p}(iqr)$$

ou , se p é inteiro

$$R(r) = A\, J_n(iqr) + B\, Y_{-n}(iqr)$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\Psi^2} + p^2\, \Psi = 0 \quad \text{, com solução:}$$

$$\Psi(\psi) = A \text{ sen } (p\psi) + B \cos (p\psi)$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + (k^2 + q^2)\, Z = 0 \text{ , com solução:}$$

$$Z(z) = A \text{ sen}[(k^2+ q^2)^{1/2}z] + B \cos[(k^2+ q^2)^{1/2}z]$$

Se $\alpha_2 = 0$ e $\alpha_3 = q^2$, temos:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dR}{dr} - q^2\, R = 0 \quad \text{, com solução:}$$

$$R(r) = A\, J_o(iqr) + B\, Y_o(iqr)$$

Pois é obtida da equação:

$$\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{dX}{dx} + q^2\, X = 0 \quad \text{, cuja solução é:}$$

$X(x) = A\, J_o(qx) + B\, Y_o(qx)$ com a substituição: $x = ir$

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2} = 0 \quad , \text{ com solução:}$$

$$\Psi(\psi) = A + B\,\psi$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + (k^2 + q^2)\,Z = 0 \quad , \text{ com solução:}$$

$$Z(z) = A\,\mathrm{sen}[(k^2+q^2)^{1/2}z] + B\,\cos[(k^2+q^2)^{1/2}z]$$

Se $\alpha_2 = \alpha_3 = 0$, temos:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dR}{dr} = 0 \ , \text{ com solução:}$$

$$R(r) = A + B \ln r$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\Psi^2} = 0 \ , \text{ com solução:}$$

$$\Psi(\psi) = A + B\,\psi \ , \text{ com solução:}$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + k^2\,Z = 0 \ , \text{ com solução:}$$

$$Z(z) = A\,\mathrm{sen}(kz) + B\,\cos(kz)$$

Da eq.(4.3) obtemos a forma mais geral para o potencial na equação de Schrödinger, assim:

$$V = v_1(r) + \frac{v_2(\psi)}{r^2} + v_3(z)$$

Sabendo que: $x^2 + y^2 = r^2$, expressamos o potencial em coordenadas cartesianas:

$$V(x,y,z) = v_1(x^2+y^2)^{1/2} + v_2(y/x)/(x^2+y^2) + v_3(z)$$

3. COORDENADAS CILÍNDRICO-ELÍPTICAS (η, ψ, z)

Este sistema foi utilizado por Bonsignori e Salvini[21] na análise do problema matemático do campo de potencial para fibras cilíndrico-elípticas de comprimento infinito.

Tomando-se:

$$u_1 = \eta \qquad 0 \le \eta < \infty$$
$$u_2 = \psi \qquad 0 \le \psi < 2\pi$$
$$u_3 = z \qquad -\infty < z < \infty$$

temos as seguintes relações com (x, y, z):

$$x = a \cosh\eta \cos\psi$$
$$y = a \operatorname{senh}\eta \operatorname{sen}\psi$$
$$z = z$$

As superfícies coordenadas são:

$$\left(\frac{x}{a \cosh\eta}\right)^2 + \left(\frac{y}{a \operatorname{senh}\eta}\right)^2 = 1$$

(cilindros elípticos, η = cte)

$$\left(\frac{x}{a \cos\psi}\right)^2 + \left(\frac{y}{a \operatorname{sen}\psi}\right)^2 = 1$$

(cilindros hiperbólicos, ψ = cte)

z = cte

(planos paralelos ao plano xoy)

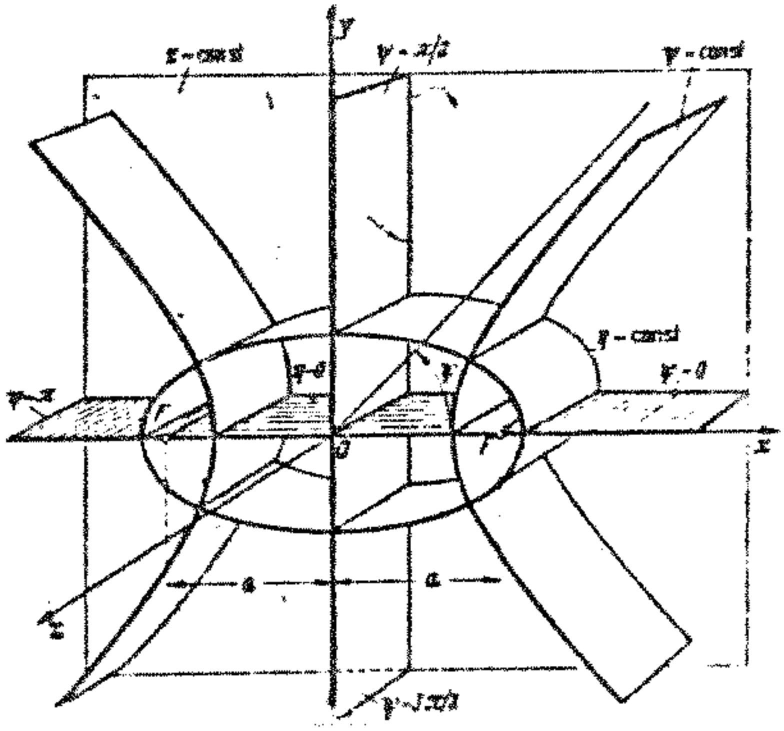

fig 14 Coordenadas Cilíndrico-elípticas (η, ψ, z)

Os coeficientes métricos são calculados a partir da eq.(2.2), e as f's são determinadas pela eq.(2.5), logo:

$$g_{11} = g_{22} = a^2(\cosh^2\eta - \cos^2\psi) \quad , \quad g_{33} = 1$$

$$(g)^{1/2} = a^2(\cosh^2\eta - \cos^2\psi)$$

$$f_1 = f_2 = f_3 = 1$$

O determinante de Stäckel é obtido da eq.(2.13)

$$S = a^2(\cosh^2\eta - \cos^2\psi)$$

Os cofatores são dados pela eq.(2.11)

$$M_{11} = M_{21} = 1 \quad , \quad M_{31} = a^2(\cosh^2\eta - \cos^2\psi)$$

A matriz de Stäckel pode ser escrita como:

$$[S] = \begin{bmatrix} 0 & -1 & -a^2 \cosh^2\eta \\ 0 & 1 & a^2 \cos^2\psi \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A expressão para o Laplaciano é dada pela eq.(1.14)

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{a^2(\cosh^2\eta - \cos^2\psi)} \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial\eta^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial\psi^2} \right) + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}$$

Usando a eq.(2.17), separamos a equação de Helmholtz ($\nabla^2\phi + k^2\,\phi = 0$), onde:

$$\alpha_1 = k^2 \quad , \quad U^1 = H(\eta) \quad , \quad U^2 = \Psi(\psi) \quad , \quad U^3 = Z(z)$$

As equações separadas são:

$$\frac{d^2H}{d\eta^2} - (\alpha_2 + \alpha_3\, a^2 \cosh^2\eta)\, H = 0$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2} + (\alpha_2 + \alpha_3\, a^2 \cos^2\psi)\, \Psi = 0$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + (k^2 + \alpha_3)\, Z = 0$$

Se $q = \alpha_3 \dfrac{a^2}{4}$ e $\lambda = \alpha_2 + \alpha_3 \dfrac{a^2}{2}$, temos:

A primeira equação toma a forma:

$$\frac{d^2H}{d\eta^2} - (\lambda + 2q \cosh 2\eta)\, H = 0 \text{ , com solução:}$$

$$H(\eta) = A\, ce_m(i\eta,-q) + B\, fe_m(i\eta,-q)$$

ou

$$H(\eta) = A\, se_m(i\eta,-q) + B\, ge_m(i\eta,-q)$$

pois é obtida da equação:

$$\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{x} + \frac{1}{x-1}\right)\frac{dX}{dx} + \frac{1}{4}\left(\frac{4qx - (2q+\lambda)}{x(x-1)}\right) Z = 0$$

cuja solução é:

$$X(x) = A\ ce_m(x,-q) + B\ fe_m(x,-q)$$

ou

$$X(x) = A\ se_m(x,-q) + B\ ge_m(x,-q)$$

com a substituição: $x = \cosh^2\eta$.

A segunda equação toma a forma:

$$\frac{d^2\Psi}{d\Psi^2} + (\lambda + 2q\cos 2\psi)\,\Psi = 0$$, com solução:

$$\Psi(\psi) = A\ ce_m(i\psi,-q) + B\ fe_m(i\psi,-q)$$

ou

$$\Psi(\psi) = A\ se_m(i\psi,-q) + B\ ge_m(i\psi,-q)$$

pois é obtida da equação para X, com a substituição: $x = \cos^2\psi$

A terceira equação toma a forma:

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + \left(k^2 + \frac{4q}{a^2}\right) Z = 0$$

cuja solução é:

$$Z(z) = A\ \mathrm{sen}\left[\left(k^2 + \frac{4q}{a^2}\right)^{1/2} z\right] + B\cos\left[\left(k^2 + \frac{4q}{a^2}\right)^{1/2} z\right]$$

Se $q = -\alpha_3 \frac{a}{4}$ e $\lambda = \alpha_2 + \alpha_3 \frac{a}{4}$, temos:

$$\frac{d^2H}{d\eta^2} - (\lambda - 2q\cosh 2\eta)\,H = 0$$,com solução:

$$H(\eta) = A\ ce_m(i\eta,q) + B\ fe_m(i\eta,q)$$

ou

$$H(\eta) = A\ se_m(i\eta,q) + B\ ge_m(i\eta,q)$$

pois é obtida da equação para X, fazendo $x = \cosh^2\eta$.

$$\frac{d^2\Psi}{d\Psi^2} + (\lambda - 2q\cos^2\psi)\,\Psi = 0 \qquad \text{(equação de Mathieu)}$$

com solução:

$\Psi(\psi) = A\, ce_m(\psi,q) + B\, fe_m(\psi,q)$

ou

$\Psi(\psi) = A\, se_m(\psi,q) + B\, ge_m(\psi,q)$

pois é obtida da equação para X, fazendo $x = \cos^2\psi$.

$$\frac{d\,Z^2}{dz^2} + \left(k^2 - \frac{4q}{a^2} \right) Z = 0 \text{ , com solução:}$$

$$Z(z) = A \operatorname{sen} \left[\left(k^2 - \frac{4q}{a^2} \right)^{1/2} z \right] + B \cos \left[\left(k^2 - \frac{4q}{a^2} \right)^{1/2} z \right]$$

Se $\alpha_2 = \alpha_3 = 0$, temos:

$$\frac{d^2H}{d\eta^2} = 0 \quad \text{, com solução: } H(\eta) = A + B\,\eta$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2} = 0 \quad \text{, com solução: } \Psi(\psi) = A + B\,\psi$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + k^2\, Z = 0 \text{ , com solução:}$$

$Z(z) = A \operatorname{sen}(kz) + B\cos(kz)$

Usando a eq.(4.3), determinamos a forma mais geral para o potencial na equação de Schrödinger $[\nabla^2\phi + k^2\,(E - V)\,\phi = 0]$

$$V(\eta,\psi,z) = \frac{v_1(\eta) + v_2(\psi)}{a^2(\operatorname{senh}^2\eta + \operatorname{sen}^2\psi)} + v_3(z)$$

Expressamos o potencial em coordenadas cartesianas, usando:

$$\operatorname{senh}^2\eta = A + B \quad , \quad \operatorname{sen}^2\psi = -A + B \quad \text{, onde:}$$

$$A = (1/2a^2)(x^2 + y^2 - a^2), \qquad B = (A^2 + (y^2/a^2))^{1/2}$$

$$V(x,y,z) = [a^2/(A^2 + (y^2/a^2)^{1/2})]\,[v_1(A + B) + v_2(-A + B)] + v_3(z)$$

4. COORDENADAS CILÍNDRICO - PARABÓLICAS (μ, ν, z)

Usado, por exemplo, na análise do processo de espalhamento de elétrons relativísticos por um centro dispersor com simetria associada às coordenadas cilíndrico-parabólicas[22].

Tomando-se:

$$
\begin{aligned}
u_1 &= \mu & 0 \le \mu < \infty \\
u_2 &= \nu & -\infty < \nu < \infty \\
u_3 &= z & -\infty < z < \infty
\end{aligned}
$$

temos as relações com (x, y, z):

$$
\begin{aligned}
x &= 1/2\ (\mu^2 - \nu^2) \\
y &= \mu\ \nu \\
z &= z
\end{aligned}
$$

As superfícies coordenadas são:

$y^2 = \mu^2\ (\mu^2 - 2x\ )$

(cilindros parabólicos, μ = cte)

$y^2 = \nu^2\ (\nu^2 + 2x)$

(cilindros parabólicos, ν =cte)

z = cte

(planos paralelos ao plano xoy)

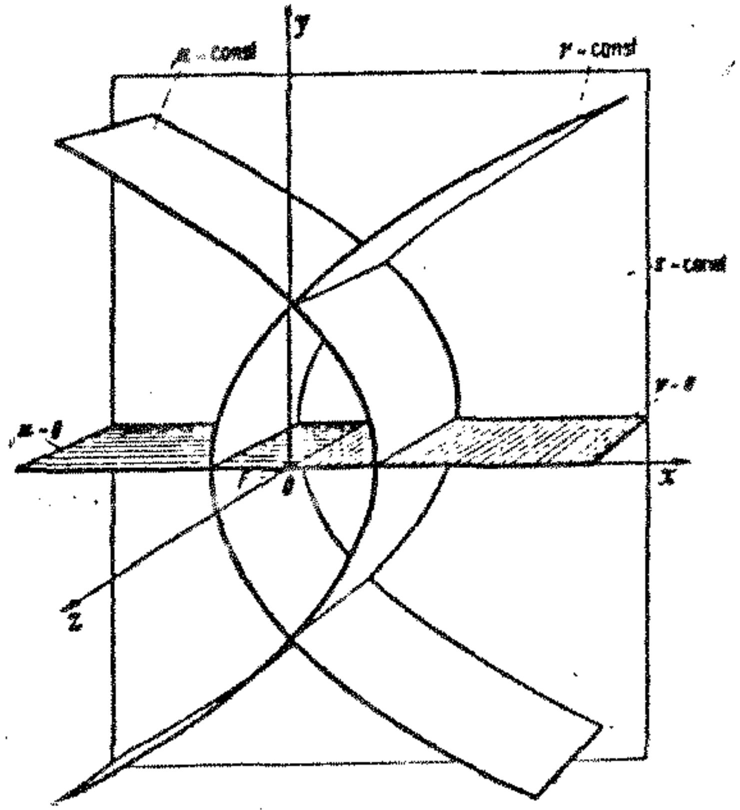

fig 15 Coordenadas Cilíndrico-Parabólicas (μ,ν,z)

Os coeficientes métricos são calculados a partir da eq.(2.2), e as f's são determinadas pela eq.(2.5)

$$g_{11} = g_{22} = \mu^2 + \nu^2 \quad , \quad g_{33} = 1$$

$$(g)^{1/2} = \mu^2 + \nu^2$$

$$f_1 = f_2 = f_3 = 1$$

O determinante de Stäckel é obtido da eq.(2.13)

$$S = \mu^2 + \nu^2$$

Os cofatores são dados pela eq.(2.11)

$$M_{11} = M_{21} = 1 \quad , \quad M_{31} = \mu^2 + \nu^2$$

A matriz de Stäckel pode ser escrita como:

$$[S] = \begin{bmatrix} 0 & -1 & -\mu^2 \\ 0 & 1 & -\nu^2 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A expressão para o laplaciano é dada pela eq.(1.14)

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{\mu^2 + \nu^2} \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial\mu^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial\nu^2} \right) + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}$$

Usando a eq.(2.17), separamos a equacão de Helmholtz,

onde $\alpha_1 = k^2$, $U^1 = M(\mu)$, $U^2 = N(\nu)$, $U^3 = Z(z)$

$$\frac{d^2M}{d\mu^2} - (\alpha_2 + \alpha_3\,\mu^2)\ M = 0$$

$$\frac{d^2N}{d\nu^2} + (\alpha_2 - \alpha_3\,\nu^2)\ N = 0$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + (k^2 + \alpha_3)\ Z = 0$$

Se $\alpha_2 = q^2\,(p + 1/2)$ e $\alpha_3 = q^2/4$

A primeira equação toma a forma:

$$\frac{d^2M}{d\mu^2} - \left[q^2(p + 1/2) + \frac{q^2\mu^2}{4} \right] M = 0$$

cuja solução é:

$$M(\mu) = A\ W_0(p,iq\mu) + B\ W_0(p,iq\mu)$$

pois é obtida da equação:

$$\frac{d^2X}{dx^2} + [\ C + D\ x^2]\ X = 0\ ,\ \text{cuja solução é:}$$

$$X(x) = A\ W_o(p,qx) + B\ W_o(p,qx)$$

sendo:

$$C = q^2\ (p + 1/2) \qquad e \qquad D = -\ \frac{q^2}{4}$$

fazendo a mudança de variável: $x = i\mu$.

A segunda equação toma a forma:

$$\frac{d^2N}{d\nu^2} + \left[\ q^2(p + 1/2) - \frac{q^2\nu^2}{4}\ \right] N = 0 \text{ (equação de Weber)}$$

cuja solução é:

$$N(\nu) = A\ W_o(p,qz) + B\ W_o(p,qz)$$

A terceira equação toma a forma:

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + (k^2 + q^2/4)\ Z = 0$$

cuja solução é:

$$Z(z) = A\ \text{sen}[(\ k^2 + q^2/4)^{1/2} z] + B\ \cos[(\ k^2+q^2/4)^{1/2} z]$$

Se $\alpha_2 = -\ q^2(p + 1/2)$ e $\alpha_3 = q^2/4$

$$\frac{d^2M}{d\mu^2} + \left[\ q^2(p + 1/2) - \frac{q^2}{4}\ \right] M = 0 \text{ (eq. de Weber)}$$

com solução:

$$M(\mu) = A\ W_o(p,q\mu) + B\ W_o(p,q\mu)$$

$$\frac{d^2N}{d\nu^2} - \left[\ q^2(p + 1/2) + \frac{q^2}{4}\ \right] N = 0$$

com solução:

$$N(\nu) = A\ W_o(p,iq\nu) + B\ W_o(p,iq\nu)$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + (k^2 + q^2/4) Z = 0 \text{ , cuja solução é:}$$

$$Z(z) = A \operatorname{sen}[(k^2 + q^2/4)^{1/2} z] + B \cos[(k^2 + q^2/4)^{1/2} z]$$

Se $\alpha_2 = 0$ e $\alpha_3 = - q^2$

$$\frac{d^2M}{d\mu^2} + q^2\mu^2 M = 0 \text{ , com solução:}$$

$$M(\mu) = \mu^{1/2} [A J_1(q\mu^2/2) + B J_{-1}(q\mu^2/2)]$$

$$\frac{d^2N}{d\nu^2} + q^2\nu^2 N = 0 \text{ , com solução:}$$

$$N(\nu) = \nu^{1/2} [A J_1(q\nu^2/2) + B J_{-1}(q\nu^2/2)$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + q^2z^2 Z = 0 \text{ , com solução:}$$

$$Z(z) = z^{1/2} [A J_1(qz^2/2) + B J_{-1}(qz^2/2)$$

A forma mais geral para o potencial na equação de Schrödinger é obtida da eq.(4.3),assim:

$$V(\mu,\nu,z) = \frac{v_1(\mu) + v_2(\nu)}{\mu^2 + \nu^2} + v_3(z)$$

Lembrando que:

$$\mu^2 = x + (y^2 - x^2)^{1/2}$$

$$\nu^2 = - x + (y^2 - x^2)^{1/2}$$

expressamos o potencial em coordenadas cartesianas:

$$V(x,y.z) = \frac{1}{2(y^2 - x^2)} \left[v_1(x + (y^2 - x^2))^{1/2} + v_2(-x+(y^2-x^2))^{1/2}\right] + v_3(z)$$

SISTEMAS ROTACIONAIS

6. COORDENADAS ESFEROIDAIS ALONGADAS (η, θ, ψ)

São usadas no tratamento de problemas de dois centros, por exemplo o íon da molécula de hidrogênio é um sistema de dois prótons os quais pensamos fixos nos pontos focais e um elétron, e em problemas de esferóides condutores ou dielétricos colocados na presença de um campo elétrico[18].

Tomando-se:

$$\begin{aligned} u_1 &= \eta & 0 &\le \eta < \infty \\ u_2 &= \theta & 0 &\le \theta \le \pi \\ u_3 &= \psi & 0 &\le \psi < 2\pi \end{aligned}$$

temos as seguintes relacões com (x, y, z):

$$\begin{aligned} x &= a \operatorname{senh}\eta \operatorname{sen}\theta \cos\psi \\ y &= a \operatorname{senh}\eta \operatorname{sen}\theta \cos\psi \\ z &= a \cosh\eta \cos\theta \end{aligned}$$

As superfícies coordenadas são:

$$\frac{x^2}{a^2 \operatorname{senh}^2\eta} + \frac{y^2}{a^2 \operatorname{senh}^2\eta} + \frac{z^2}{a^2 \cosh^2\eta} = 1$$

(esferóides alongadas, η = cte)

$$\frac{x^2}{a^2 \operatorname{sen}^2\theta} + \frac{y^2}{a^2 \operatorname{sen}^2\theta} + \frac{z^2}{a^2 \cos^2\theta} = 1$$

(hiperbolóides de duas folhas θ = cte)

$$\operatorname{tg} \psi = \frac{y}{x} \quad \text{(semi-planos, } \psi = \text{cte)}$$

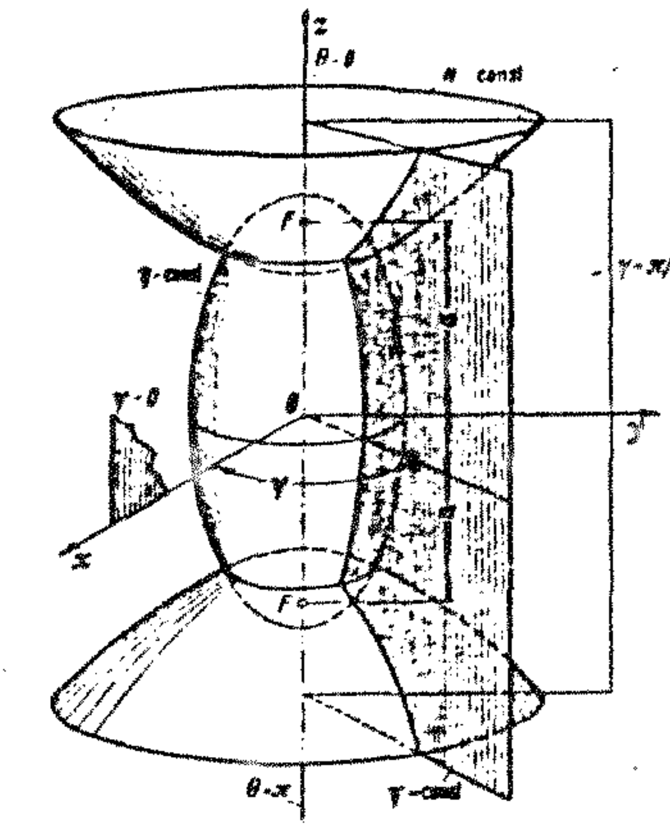

fig 16 Coordenadas Esferoidais Alongadas (η,θ,ψ)

Os coeficientes métricos são calculados a partir da eq.(2.2), usamos também a eq.(2.5) para determinar as f's:

$$g_{11} = g_{22} = a^2(\mathrm{senh}^2\eta + \mathrm{sen}^2\theta) \;, \qquad g_{33} = a^2\mathrm{senh}^2\eta\ \mathrm{sen}^2\theta$$

$$(g)^{1/2} = a^2(\mathrm{senh}^2\eta + \mathrm{sen}^2\theta)\ \mathrm{senh}\eta\ \mathrm{sen}\theta$$

$$f_1 = \mathrm{senh}\eta \;, \quad f_2 = \mathrm{sen}\theta \;, \quad f_3 = a$$

O determinante de Stäckel é calculado a partir da eq.(2.13):

$$S = a^2(\mathrm{senh}^2\eta + \mathrm{sen}^2\theta) = a^2(\cosh^2\eta - \cos^2\theta)$$

Os cofatores são dados pela eq.(2.11)

$$M_{11} = M_{21} = 1 \quad , \quad M_{31} = \frac{\operatorname{senh}^2\eta + \operatorname{sen}^2\theta}{\operatorname{senh}^2\eta \ \operatorname{sen}^2\theta}$$

A matriz de Stäckel pode ser escrita como:

$$[S] = \begin{bmatrix} a^2\operatorname{senh}^2\eta & -1 & -1/\operatorname{senh}^2\eta \\ a^2\operatorname{sen}^2\theta & 1 & -1/\operatorname{senh}^2\eta \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Obtemos a expressão para o laplaciano usando a eq.(1.14)

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{a^2(\operatorname{senh}^2\eta + \operatorname{sen}^2\theta)} \left[\frac{\partial^2\phi}{\partial\eta^2} + \operatorname{cotgh}\eta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + \frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2} + \operatorname{cotg}\theta \frac{\partial\phi}{\partial\theta} \right]$$

$$+ \frac{1}{a^2 \ \operatorname{senh}^2\eta \ \operatorname{sen}^2\theta} \ \frac{\partial^2\phi}{\partial\psi^2}$$

Separação da equação de Helmholtz($\nabla^2\phi + k^2\phi = 0$)
As equações separadas são obtidas da eq.(2.17), sendo:

$$\alpha_1 = k^2 \quad , \quad U^1 = H(\eta) \quad , \quad U^2 = \Theta(\theta) \quad , \quad U^3 = \Psi(\psi)$$

$$\frac{d^2H}{d\eta^2} + \operatorname{cotg}\eta \ \frac{dH}{d\eta} + (k^2a^2\operatorname{senh}^2\eta - \alpha_2 - \alpha_3/\operatorname{senh}^2\eta)H = 0$$

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \operatorname{cotg}\theta \ \frac{d\Theta}{d\theta} + (k^2a^2\operatorname{sen}^2\theta + \alpha_2 - \alpha_3/\operatorname{sen}^2\theta)\Theta = 0$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2} + \alpha_3 \ \Psi = 0$$

Se $\alpha_2 = p(p+1)$ e $\alpha_3 = q^2$, temos:

A primeira equação toma a forma:

$$\frac{d^2H}{d\eta^2} + \mathrm{cotg}\eta\,\frac{dH}{d\eta} + \left[k^2a^2\mathrm{senh}^2\eta - p(p+1) - \frac{q^2}{\mathrm{senh}^2\eta}\right] H = 0$$

que é a equação de onda de Legendre[28].

$$(z^2 - 1)\,\frac{d^2Z}{dz^2} + 2z\,\frac{dZ}{dz} + \left[k^2a^2(z^2 - 1) - p(p+1) - \frac{q^2}{z^2 - 1}\right] Z = 0$$

cuja solução é:

$$Z(z) = A\,\mathcal{P}^q_p(ka,z) + B\,\mathcal{L}^q_p(ka,z)$$

substituindo $z = \cosh\eta$, logo:

$$H(\eta) = A\,\mathcal{P}^q_p(ka,\cosh\eta) + B\,\mathcal{L}^q_p(ka,\cosh\eta)$$

A segunda equação toma a forma:

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \mathrm{cotg}\theta\,\frac{d\Theta}{d\theta} + \left[k^2a^2\mathrm{sen}^2\theta + p(p+1) - \frac{q^2}{\mathrm{sen}^2\theta}\right] \Theta = 0$$

que é a equação de onda de Legendre ,

substituindo $z = \cos\theta$, logo:

$$\Theta(\theta) = A\,\mathcal{P}^q_p(ka,\cos\theta) + B\,\mathcal{L}^q_p(ka,\cos\theta)$$

A terceira equação toma a forma:

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2} + q^2\,\Psi = 0$$

cuja solução é:

$$\Psi(\psi) = A\,\mathrm{sen}(q\psi) + B\,\cos(q\psi)$$

A forma mais geral para o potencial na equação de Schrödinger é dada pela eq.(4.3)

$$V(\eta,\theta,\psi) = \frac{v_1(\eta) + v_2(\theta)}{a^2\,(\mathrm{senh}^2\eta + \mathrm{sen}^2\theta)} + \frac{v_3(\psi)}{a^2\,\mathrm{senh}^2\eta\,\mathrm{sen}^2\theta}$$

e, em coordenadas cartesianas, com:

$$\operatorname{senh}^2\eta = A + B \quad , \quad \operatorname{sen}^2\theta = -A + B \quad , \text{ onde:}$$

$$A = \frac{(r^2 - a^2)}{2a^2} \quad , \quad B = \left[A^2 + \frac{x^2 + y^2}{a^2}\right]^{1/2}$$

$$r = x^2 + y^2 + z^2 = a^2(\cos^2\theta + \operatorname{senh}^2\eta)$$

temos:

$$V = \frac{1}{2a^2B}\left[v_1(A + B)^{1/2} + v_2(-A + B)^{1/2}\right] + \frac{v_3(y/x)}{x^2 + y^2}$$

7. COORDENADAS ESFEROIDAIS ACHATADAS (η, θ, ψ)

Este sistema foi usado para descrever o campo gravitacional terrestre por J.P. Vinti[24]. Nos problemas de esferóides condutores ou dielétricos num campo elétrico uniforme[18].

Tomando-se:

$$u_1 = \eta \qquad 0 \le \eta < \infty$$
$$u_2 = \theta \qquad 0 \le \theta < \pi$$
$$u_3 = \psi \qquad 0 \le \psi < 2\pi$$

temos as seguintes relações com (x,y,z):

$$x = a \cosh\eta \ \mathrm{sen}\theta \ \cos\psi$$
$$y = a \cosh\eta \ \mathrm{sen}\theta \ \mathrm{sen}\psi$$
$$z = a \ \mathrm{senh}\eta \ \cos\theta$$

As superfícies coordenadas são:

$$\frac{x^2}{a^2 \cosh^2\eta} + \frac{y^2}{a^2\cosh^2\eta} + \frac{z^2}{a^2\mathrm{senh}^2\eta} = 1$$

(esferóides achatados, η = cte)

$$\frac{x^2}{a^2\mathrm{sen}^2\theta} + \frac{y^2}{a^2\mathrm{sen}^2\theta} - \frac{z^2}{a^2\cos^2\theta} = 1$$

(hiperbolóide de uma folha, θ = cte)

$$\mathrm{tg}\ \psi = \frac{y}{x}$$

(semi-planos, ψ = cte)

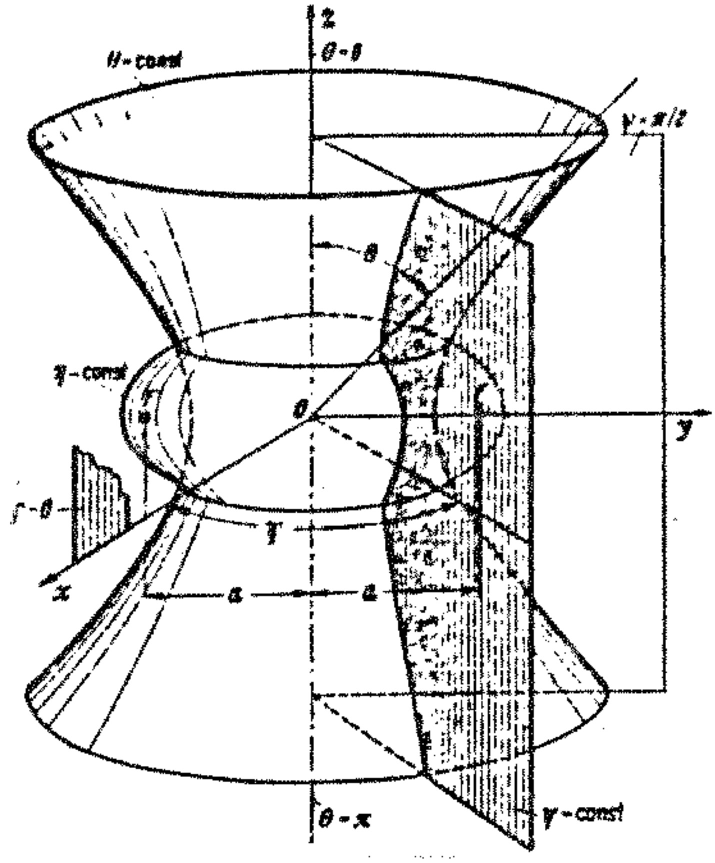

fig 17 Coordenadas Esferoidais Achatadas (η, θ, ψ)

Os coeficientes métricos são calculados a partir da eq.(2.2), e o valor das f's são dados pela eq.(2.5)

$$g_{11} = g_{22} = a^2(\cosh^2\eta - \operatorname{sen}^2\theta) \quad , \quad g_{33} = a^2\cosh^2\eta \operatorname{sen}^2\theta$$

$$(g)^{1/2} = a^2(\cosh^2\eta - \operatorname{sen}^2\theta) \cosh\eta \operatorname{sen}\theta$$

$$f_1 = \cosh\eta \quad , \quad f_2 = \operatorname{sen}\theta \quad , \quad f_3 = a$$

O determinante de Stäckel é obtido da eq.(2.13)

$$S = a^2(\cosh^2\eta - \operatorname{sen}^2\theta) = a^2(\operatorname{senh}^2\eta + \cos^2\theta)$$

Os cofatores são determinados pela eq.(2.11)

$$M_{11} = M_{21} = 1 \quad , \quad M_{31} = \frac{\cosh^2\eta - \operatorname{sen}^2\theta}{\cosh^2\eta \operatorname{sen}^2\theta}$$

A matriz de Stäckel pode ser escrita como:

$$[S] = \begin{bmatrix} a^2\cosh^2\eta & -1 & 1/\cosh^2\eta \\ -a^2\operatorname{sen}^2\theta & 1 & -1/\operatorname{sen}^2\theta \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A expressão para o laplaciano é dada pela eq.(1.14)

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{a^2(\cosh^2\eta - \operatorname{sen}^2\theta)} \left[\frac{\partial^2\phi}{\partial\eta^2} + \operatorname{tgh}\eta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + \frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2} + \operatorname{cotg}\theta \frac{\partial\phi}{\partial\theta} \right] + \frac{1}{a^2\cosh^2\eta \operatorname{sen}^2\theta} \frac{\partial^2\phi}{\partial\psi^2}$$

A separação da equação de Helmholtz é dada pela eq.(2.17), sendo:

$\alpha_1 = k^2 \quad , \quad U^1 = H(\eta) \quad , \quad U^2 = \Theta(\theta) \quad , \quad U^3 = \Psi(\psi)$

$$\frac{d^2H}{d\eta^2} + \operatorname{tgh}\eta \frac{dH}{d\eta} + \left(k^2a^2\cosh^2\eta - \alpha_2 + \frac{\alpha_3}{\cosh^2\eta}\right) H = 0$$

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \operatorname{cotg}\theta \frac{d\Theta}{d\theta} + \left(-k^2a^2\operatorname{sen}^2\theta + \alpha_2 - \frac{\alpha_3}{\operatorname{sen}^2\theta}\right) \Theta = 0$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2} + \alpha_3 \Psi = 0$$

Se $\alpha_2 = p(p+1)$ e $\alpha_3 = q^2$

A primeira equação torna-se:

$$\frac{d^2H}{d\eta^2} + \operatorname{tgh}\eta \frac{dH}{d\eta} + \left(k^2a^2\cos^2\eta - p(p+1) + \frac{q^2}{\cosh^2\eta}\right) H = 0$$

que é a equação de onda de Legendre, dada na seção anterior substituindo $z = i$ senhη, logo:

$$H(\eta) = A\ \mathcal{P}_p^q(ika, i\,\mathrm{senh}\eta) + B\ \mathcal{L}_p^q(ika, i\,\mathrm{senh}\eta)$$

A segunda equação torna-se:

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \mathrm{cotg}\theta\,\frac{d\Theta}{d\theta} + \left[-k^2a^2\mathrm{sen}^2\theta + p(p+1) - \frac{q^2}{\mathrm{sen}^2\theta}\right]\Theta = 0$$

que é a equação de onda de Legendre, substituindo $z = \cos\theta$, assim:

$$\Theta(\theta) = A\ \mathcal{P}_p^q(ika, \cos\theta) + B\ \mathcal{L}_p^q(ika, \cos\theta)$$

A terceira equação torna-se:

$$\frac{d^2\Psi}{d\psi^2} + q^2\ \Psi = 0$$, cuja solução é:

$$\Psi(\psi) = A\ \mathrm{sen}(q\psi) + B\cos(q\psi)$$

A forma mais geral para o potencial é dada pela eq.(4.3)

$$V(\eta,\theta,\psi) = \frac{v_1(\eta) + v_2(\theta)}{a^2(\cosh^2\eta - \mathrm{sen}^2\theta)} + \frac{v_3(\psi)}{a^2\cosh^2\eta\ \mathrm{sen}^2\theta}$$

Em coordenadas cartesianas, com:

$\cosh^2\eta = A + B$, $\cos^2\theta = -A + B$, onde:

$$A = \frac{r^2 - a^2}{2a^2} \quad , \quad B = \left[A^2 + \left(\frac{z^2}{a^2}\right)\right]^{1/2}$$

temos:

$$V(x,y,z) = \frac{1}{2a^2B}\left[v_1(A + B)^{1/2} + v_2(-A + B)^{1/2}\right] +$$

$$+ \frac{v_3(y/x)}{x^2 + y^2}$$

9. COORDENADAS CÔNICAS (r, θ, λ)

Este sistema foi usado para descrever as auto funções do momento angular de um rotor assimétrico[25].

Tomando-se:

$$u_1 = r \qquad 0 \le r < \infty$$
$$u_2 = \theta \qquad b^2 \le \theta^2 < c^2$$
$$u_3 = \lambda \qquad 0 \le \lambda^2 < b^2$$

temos as relações com (x, y, z):

$$x^2 = \left(\frac{r\ \theta\ \lambda}{b\ c} \right)^2$$

$$y^2 = \frac{r^2(\theta^2 - b^2)(b^2 - \lambda^2)}{b^2(c^2 - b^2)}$$

$$z^2 = \frac{r^2(c^2 - b^2)(c^2 - \lambda^2)}{c^2(c^2 - b^2)}$$

onde $c^2 > \theta^2 > \lambda^2 > 0$

As superfícies coordenadas são:

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2$$

(esferas, r = cte)

$$\frac{x^2}{\theta^2} + \frac{y^2}{\theta^2 - b^2} - \frac{z^2}{c^2 - \theta^2} = 0$$

(cones elípticos, θ = cte)

$$\frac{x^2}{\lambda^2} + \frac{y^2}{b^2 - \lambda^2} - \frac{z^2}{c^2 - \lambda^2} = 0$$

(cones elípticos, λ = cte)

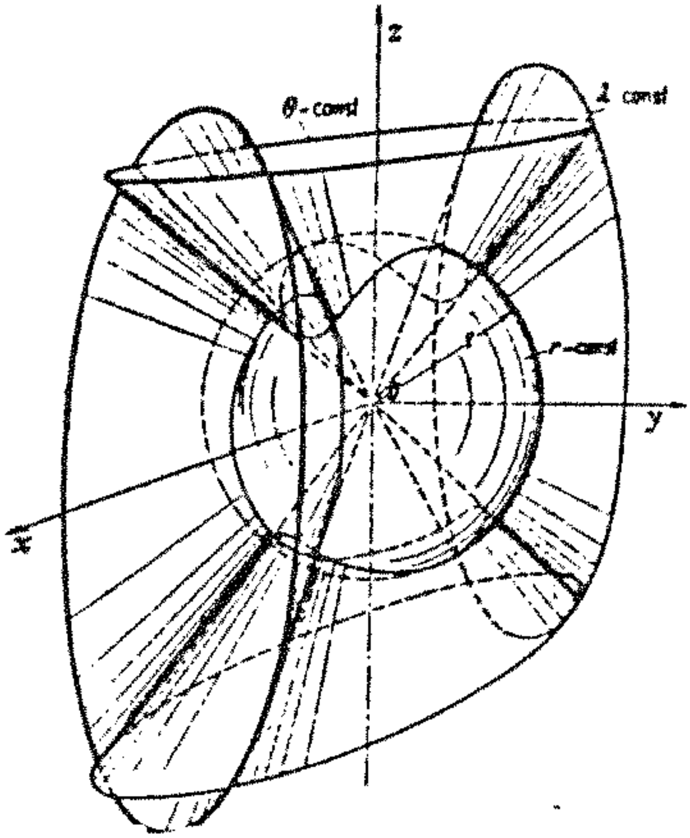

fig 18 Coordenadas Cônicas (r, θ, λ)

Os coeficientes métricos são calculados a partir da eq.(2.2), e as f's são determinadas pela eq.(2.5), logo:

$$g_{11} = 1 \ , \quad g_{22} = \frac{r^2(\theta^2 - \lambda^2)}{(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)} \ , \quad g_{33} = \frac{r^2(\theta^2 - \lambda^2)}{(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)}$$

$$(g)^{1/2} = \frac{r^2(\theta^2 - \lambda^2)}{[(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)]^{1/2}}$$

$$f_1 = r^2, \ f_2 = [(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)]^{1/2}, \ f_3 = [(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)]^{1/2}$$

O determinante de Stäckel é obtido da eq.(2.13)

$$S = \frac{\theta^2 - \lambda^2}{(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)}$$

Os cofatores são dados pela eq.(2.11)

$$M_{11} = S \quad , \quad M_{21} = \frac{1}{r^2(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)} \quad , \quad M_{31} = \frac{1}{r^2(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)}$$

A matriz de Stäckel pode ser escrita como:

$$[S] = \begin{bmatrix} 1 & -1/r^2 & 0 \\ 0 & \dfrac{\theta^2}{(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)} & \dfrac{-1}{(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)} \\ 0 & \dfrac{-\lambda^2}{(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)} & \dfrac{1}{(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)} \end{bmatrix}$$

Obtemos a expressão para o laplaciano a partir da eq.(1.14)

$$\nabla^2\phi = \frac{\partial^2\phi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2(\theta^2 - \lambda^2)}\Big[(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2} +$$

$$-\theta\,[2\theta^2 - (b^2 + c^2)]\frac{\partial\phi}{\partial\theta} + (b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)\frac{\partial\,\phi^2}{\partial\lambda^2} + \lambda\,[2\lambda^2 - (b^2 + c^2)]\frac{\partial\phi}{\partial\lambda}\Big]$$

Separação da equação de Helmholtz

As equações separadas são obtidas da eq.(2.17), considerando:

$$\alpha_1 = k^2 \quad , \quad U^1 = R(r) \quad , \quad U^2 = \Theta(\theta) \quad , \quad U^3 = L(\lambda)$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[k^2 - \frac{\alpha_2}{r^2}\right] R = 0$$

$$(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} - \theta\,[2\theta^2 - (b^2 + c^2)]\frac{d\Theta}{d\theta} + (\alpha_2\theta^2 - \alpha_3)\Theta = 0$$

$$(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)\frac{d\ L}{d\lambda^2} + \lambda\,[2\lambda^2 - (b^2 - c^2)]\frac{dL}{d\lambda} - (\alpha_2\lambda^2 - \alpha_3)\ L = 0$$

Se $\alpha_2 = p\,(p+1)$ e $\alpha_3 = q\,(b^2 + c^2)$, temos:

A primeira equação toma a forma:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left(k^2 - \frac{p(p+1)}{r^2}\right)R = 0$$

cuja solução é:

$$R(r) = r^{-1/2}\ A\ J_{p+1/2}(kr) + B\ J_{-(p+1/2)}(kr)$$

pois é a equação de Bessel:

$$\frac{d^2X}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dR}{dr}\frac{dX}{dr} + \left[k^2 - \frac{s^2}{r^2}\right] X = 0$$

cuja solução é:

$$X(r) = A\ J_s(kr) + B\ J_{-s}(kr)$$

após a mudança de variável: $X = R\ r^{1/2}$ e tomando-se $s = p+1/2$.

A segunda equação toma a forma:

$$(\theta^2 - b^2)(\theta^2 - c^2)\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \theta\,[2\theta^2 - (b^2 + c^2)]\frac{d\Theta}{d\theta} - [p(p+1)\theta^2 - q(b^2 + c^2)]\ \Theta = 0$$

(Equação de Lamé) cuja solução é:

$$\Theta(\theta) = A\ \mathscr{E}^q_p(\theta) + B\ \mathscr{F}^q_p(\theta)$$

Uma vez que é um caso particular da equação:

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + \frac{1}{z}\left[\frac{1}{z} + \frac{1}{z-b} + \frac{1}{z-c}\right]\frac{dZ}{dz} + \frac{1}{4}\left[\frac{(b^2+c^2)q - p(p+1)}{z(z-b)(z-c)}\right] Z = 0$$

com solução: $Z(z) = A\,\mathscr{E}_p^q(z^{1/2}) + B\,\mathscr{F}_p^q(z^{1/2})$, substituindo $z = \theta^2$

A terceira equação:

$$(\lambda^2 - b^2)(\lambda^2 - c^2)\frac{d^2L}{d\lambda^2} + \lambda\,[2\lambda^2 - (b^2+c^2)]\frac{dL}{d\lambda} - [p(p+1)\lambda^2 - q(b^2+c^2)]\,L = 0$$

tem solução:

$$L(\lambda) = A\,\mathscr{E}_p^q(\lambda) + B\,\mathscr{F}_p^q(\lambda)$$

Se $\alpha_2 = \alpha_3 = 0$,temos:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + k^2R = 0 \text{ , com solução:}$$

$$R(r) = \frac{1}{r}\,[A\,\mathrm{sen}(kr) + B\cos(kr)]$$

pois é obtida da equação:

$$\frac{d^2Z}{dr^2} + k^2 Z = 0 \quad , \quad Z(r) = A\,\mathrm{sen}(kr) + B\cos(kr)$$

com a substituição: $Z = R\,r$.

Então, para as outras duas equações temos:

$$\frac{d}{d\theta}\left([(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)]^{1/2}\frac{d\Theta}{d\theta}\right) = 0 \text{ e } \frac{d}{d\lambda}\left([(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)]^{1/2}\frac{dL}{d\lambda}\right) = 0$$

com soluções:

$$\Theta(\theta) = A + B\,\mathrm{sn}^{-1}\left(\frac{\theta}{b}\ ,\ \frac{b}{c}\right) \qquad L(\lambda) = A + B\,\mathrm{sn}^{-1}\left(\frac{\lambda}{b}\ ,\ \frac{b}{c}\right)$$

pois ambas são obtidas da equação:

$$\frac{d^2Z}{dz^2} = 0 \quad , \quad Z(z) = A + B\,z \quad , \quad \text{substituindo: } z = \mathrm{sn}^{-1}\left(\frac{\xi}{b}\ ,\frac{\xi}{c}\right)$$

Usando a eq.(4.3), obtemos a forma mais geral para o potencial na equação de Schrödinger.

$$V(r,\theta,\lambda) = v_1(r) + \frac{v_2(\theta)\,(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)}{(\theta^2 - c^2)} + \frac{v_3(\lambda)\,(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)}{(\theta^2 - \lambda^2)}$$

Ou ainda, usando a notação de Eisenhart [26]

$$x = x_3 \,\mathrm{dn}\,(x_1,k)\,\mathrm{sn}\,(x_2,k')$$
$$y = x_3 \,\mathrm{sn}\,(x_1,k)\,\mathrm{dn}\,(x_2,k')$$
$$z = x_3 \,\mathrm{cn}\,(x_1,k)\,\mathrm{cn}\,(x_2,k')$$

onde k e k' satisfazem a relação: $k^2 + k'^2 = 1$

Usando as relações: $\mathrm{sn}^2 + \mathrm{cn}^2 = 1$, $\mathrm{dn}^2 + k^2\mathrm{sn}^2 = 1$, $\mathrm{dn}^2 - k^2\mathrm{cn}^2 = k'^2$ obtemos:

$k^2\mathrm{cn}^2(x_1,k) = A + B$, $k'^2\mathrm{cn}^2(x_2,k') = -A + B$, $x_3 = r^2$, onde:

$$A = \frac{1}{2r^2}\,[k^2x^2 - k'^2y^2 + (k^2 - k'^2)z^2]$$

$$B = \left(A^2 + \frac{k^2\ k'^2\ z^2}{r^2} \right)^{1/2}$$

e daí o potencial é dado por:

$$V = \frac{1}{2r^2B}\left[v_1((A+B)^{1/2})/k + v_2((-A+B)^{1/2})/k'\right] + v_3(r)$$

10. COORDENADAS ELIPSOIDAIS (η, θ, λ)

Este sistema tem sido usado em Mecânica, teoria do potencial, eletrodinâmica e hidrodinâmica.[27]

Tomando-se:

$$\begin{aligned} u_1 &= \eta & \qquad c^2 &< \eta^2 < \infty \\ u_2 &= \theta & \qquad b^2 &< \theta^2 < c^2 \\ u_3 &= \lambda & \qquad 0 &\le \lambda^2 < b^2 \end{aligned}$$

temos as relações com (x, y, z)

$$x^2 = \left(\frac{\eta\ \theta\ \lambda}{b\ c}\right)^2$$

$$y^2 = \frac{(\eta^2 - b^2)(\theta^2 - c^2)(b^2 - \lambda^2)}{b^2\ (c^2 - b^2)}$$

$$z^2 = \frac{(\eta^2 - c^2)(c^2 - \theta^2)(c^2 - \lambda^2)}{c^2\ (c^2 - b^2)}$$

onde $\eta^2 > c^2 > \theta^2 > b^2 > \lambda^2 > 0$

As superfícies coordenadas são:

$$\frac{x^2}{\eta^2} + \frac{y^2}{\eta^2 - b^2} + \frac{z^2}{\eta^2 - c^2} = 1$$

(elipsóides, η = cte)

$$\frac{x^2}{\theta^2} + \frac{y^2}{\theta^2 - b^2} + \frac{z^2}{c^2 - \theta^2} = 1$$

(hiperbolóides de uma folha, θ = cte)

$$\frac{x^2}{\lambda^2} - \frac{y^2}{b^2 - \lambda^2} - \frac{z^2}{c^2 - \lambda^2} = 1$$

(hiperbolóides de duas folhas, λ = cte)

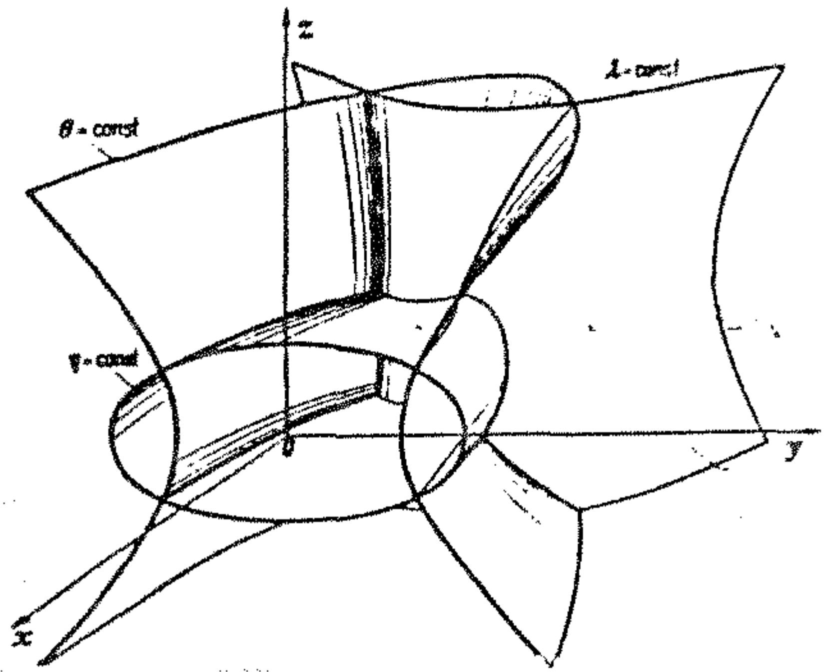

fig 19 Coordenadas Elipsoidais (η,θ,λ)

Os coeficientes métricos são calculados a partir da eq.(2.2),e as f's são determinadas pela eq.(2.5), logo:

$$g_{11} = \frac{(\eta^2-\theta^2)(\eta^2-\lambda^2)}{(\eta^2-b^2)(\eta^2-c^2)} \quad , \quad g_{22} = \frac{(\theta^2-\lambda^2)(\eta^2-\theta^2)}{(\theta^2-b^2)(c^2-\theta^2)}$$

$$g_{33} = \frac{(\eta^2-\lambda^2)(\theta^2-\lambda^2)}{(b^2-\lambda^2)(c^2-\lambda^2)}$$

$$(g)^{1/2} = \frac{(\eta^2-\theta^2)(\eta^2-\lambda^2)(\theta^2-\lambda^2)}{[(\eta^2-b^2)(\eta^2-c^2)(\theta^2-b^2)(c^2-\theta^2)(b^2-\lambda^2)(c^2-\lambda^2)]^{1/2}}$$

$$f_1 = [(\eta^2 - b^2)(\eta^2 - c^2)]^{1/2} \quad , \quad f_2 = [(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)]^{1/2}$$

$$f_3 = [(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)]^{1/2}$$

O determinante de Stäckel é dado pela eq.(2.13):

$$S = \frac{(\eta^2 - \theta^2)(\eta^2 - \lambda^2)(\theta^2 - \lambda^2)}{(\eta^2 - b^2)(\eta^2 - c^2)(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)}$$

Os cofatores são obtidos da eq.(2.11)

$$M_{11} = \frac{(\theta^2 - \lambda^2)}{(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)}$$

$$M_{21} = \frac{(\eta^2 - \lambda^2)}{(\eta^2 - b^2)(\eta^2 - c^2)(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)}$$

$$M_{31} = \frac{(\eta^2 - \theta^2)}{(\eta^2 - b^2)(\eta^2 - c^2)(\theta^2 - c^2)(c^2 - \theta^2)}$$

A matriz de Stäckel pode ser escrita como:

$$[S] = \begin{bmatrix} \dfrac{\eta^2}{(\eta^2 - b^2)(\eta^2 - c^2)} & \dfrac{1}{(\eta^2 - b^2)(\eta^2 - c^2)} & \dfrac{\eta^2}{(\eta^2 - b^2)(\eta^2 - c^2)} \\ \dfrac{-\theta^2}{(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)} & \dfrac{-1}{(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)} & \dfrac{-\theta^2}{(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)} \\ \dfrac{\lambda^2}{(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)} & \dfrac{1}{(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)} & \dfrac{\lambda^2}{(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)} \end{bmatrix}$$

A expressão para o laplaciano é obtida da eq.(1.14)

$$\nabla^2\phi = \frac{[(\eta^2-b^2)(\eta^2-c^2)]^{1/2}}{(\eta^2-\theta^2)(\eta^2-\lambda^2)}\frac{\partial}{\partial\eta}\left[[(\eta^2-b^2)(\eta^2-c^2)]^{1/2}\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right]+$$

$$+\frac{[(\theta^2-b^2)(c^2-\theta^2)]^{1/2}}{(\eta^2-\theta^2)(\eta^2-\lambda^2)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[[(\theta^2-b^2)(c^2-\theta^2)]^{1/2}\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\right]+$$

$$+\frac{[(b^2-\lambda^2)(c^2-\lambda^2)]^{1/2}}{(\eta^2-\lambda^2)(\theta^2-\lambda^2)}\frac{\partial}{\partial\lambda}\left[[(b^2-\lambda^2)(c^2-\lambda^2)]^{1/2}\frac{\partial\phi}{\partial\lambda}\right]$$

Separação da equação de Helmholtz.

As equações separadas são obtidas da eq.(2.17), considerando:

$$\alpha_1 = k^2 \quad , \quad U^1 = H(\eta) \quad , \quad U^2 = \Theta(\theta) \quad , \quad U^3 = L(\lambda)$$

$$(\eta^2-b^2)(\eta^2-c^2)\frac{d^2H}{d\eta^2} + \eta\,[2\eta^2-(b^2-c^2)]\frac{dH}{d\eta} + [k^2\eta^4+\alpha_2\eta^2+\alpha_3]\,H = 0$$

$$(\theta^2-b^2)(c^2-\theta^2)\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} - \theta\,[2\theta^2-(b^2+c^2)]\frac{d\Theta}{d\theta} - [k^2\theta^4+\alpha_2\theta^2+\alpha_3]\,\Theta = 0$$

$$(b^2-\lambda^2)(c^2-\lambda^2)\frac{d^2L}{d\lambda^2} + \lambda\,[2\lambda^2-(b^2+c^2)]\frac{dL}{d\lambda} + [k^2\lambda^4+\alpha_2\lambda^2+\alpha_3]\,L = 0$$

Se $\alpha_2 = -p(p+1)$ e $\alpha_3 = q\,(b^2+c^2)$

A primeira equação toma a forma:

$$(\eta^2-b^2)(\eta^2-c^2)\frac{d^2H}{d\eta^2} + \eta[2\eta^2-(b^2+c^2)]\frac{dH}{d\eta} + [k^2\eta^4-p(p+1)\eta^2+q(b^2+c^2)]\,H=0$$

com solução:

$$H(\eta) = A\,\mathscr{F}^q_p(k,\eta) + B\,\mathscr{F}^q_p(k,\eta)$$

pois é a equação de onda de Lamé[29]:

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + \frac{1}{2}\left[\frac{1}{z} + \frac{1}{z-b^2} + \frac{1}{z-c^2}\right]\frac{dZ}{dz} + \frac{1}{4}\left[\frac{(b^2+c^2)q - p(p+1)z + k^2z^2}{z(z-b^2)(z-c^2)}\right]Z=0$$

com solução:

$$Z(z) = A\, \mathscr{E}^q_p(k, z^{1/2}) + B\, \mathscr{F}^q_p(k, z^{1/2})$$

após a substituição $z^2 = \eta$.

Analogamente para a segunda e terceira equações:

$$(\theta^2 - b^2)(\theta^2 - c^2)\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \theta\, [2\theta^2 - (b^2+c^2)]\, \frac{d\Theta}{d\theta} + [k^2\theta^4 - p(p+1)\theta^2 + q(b^2+c^2)]\, \Theta=0$$

com solução:

$$\Theta(\theta) = A\, \mathscr{E}^q_p(k, \theta) + B\, \mathscr{F}^q_p(k, \theta)$$

pois é a equação de onda de Lamé, com a substituição $z = \theta^2$.

$$(\lambda^2 - b^2)(\lambda^2 - c^2)\frac{d^2L}{d\lambda^2} + \lambda\, [2\lambda^2 - (b^2+c^2)]\, \frac{dL}{d\lambda} + [k^2\lambda^4 - p(p+1)\lambda^2 + q(b^2+c^2)]\, L=0$$

com solução:

$$L(\lambda) = A\, \mathscr{E}^q_p(k, \lambda) + B\, \mathscr{F}^q_p(k, \lambda)$$

pois é a equação de Lamé, com a substituição $z = \lambda^2$

A forma mais geral para o potencial na equação de Schrödinger é obtida da eq.(4.3), logo:

$$V(\eta,\theta,\lambda) = \frac{v_1(\eta)(\eta^2 - b^2)(\eta^2 - c^2)}{(\eta^2 - \theta^2)(\eta^2 - c^2)} + \frac{v_2(\theta)(\theta^2 - b^2)(c^2 - \theta^2)}{(\theta^2 - \lambda^2)(\eta^2 - \theta^2)} + \frac{v_3(\lambda)(b^2 - \lambda^2)(c^2 - \lambda^2)}{(\eta^2 - \lambda^2)(\theta^2 - \lambda^2)}$$

Neste caso, não é possível obter uma expressão para o potencial em função das coordenadas cartesianas.[26]

11. COORDENADAS PARABOLOIDAIS (μ, ν, λ)

Em Maxwell[10], discute-se a densidade superficial de um parabolóide num campo infinito, (incluindo o caso da linha reta infinita em uma direção), e mostra-se que ela é inversamente proporcional ao quadrado da distância entre os focos.

Tomando-se:

$$u_1 = \mu \qquad b < \mu < \infty$$

$$u_2 = \nu \qquad 0 < \nu < c$$

$$u_3 = \lambda \qquad c < \lambda < b$$

temos as relações com (x,y,z):

$$(x)^2 = \frac{4}{(b-c)} (\mu-b)(b-\mu)(b-\lambda)$$

$$(y)^2 = \frac{4}{(b-c)} (\mu-c)(c-\nu)(\lambda-c)$$

$$z = \mu + \nu + \lambda - b - c$$

onde $\mu > b > \lambda > c > \nu > 0$

As superfícies coordenadas são:

$$\frac{x^2}{\mu - b} + \frac{y^2}{\mu - c} = -4(z - \mu)$$

(parabolóides elípticos côncavos para cima, μ = cte)

$$\frac{x^2}{b - \nu} + \frac{y^2}{c - \nu} = 4(z - \nu)$$

(parabolóides elípticos côncavos para baixo, ν = cte)

$$\frac{z^2}{b - \lambda} - \frac{y^2}{\lambda - c} = 4(z - \lambda)$$

(parabolóide hiperbólico, λ = cte)

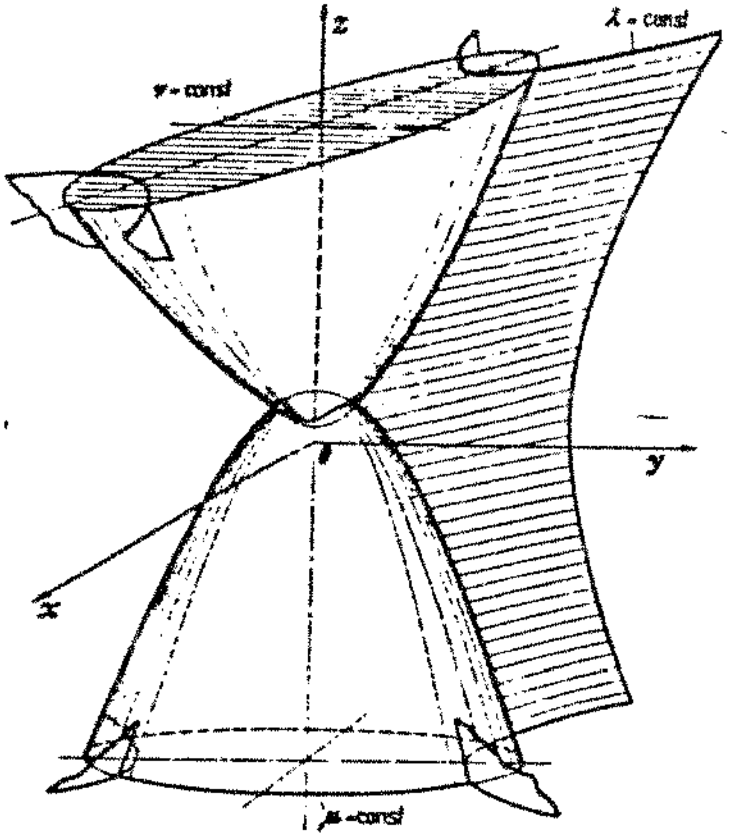

fig 20 Coordenadas Paraboloidais (μ,ν,λ) λ

Os coeficientes métricos são calculados a partir da eq.(2.2), e o valor das f's são dados pela eq.(2.5),logo:

$$g_{11} = \frac{(\mu - \nu)(\mu - \lambda)}{(\mu - b)(\mu - c)}$$

$$g_{22} = \frac{(\mu - \nu)(\lambda - \nu)}{(b - \nu)(c - \nu)}$$

$$g_{33} = \frac{(\lambda - \nu)(\mu - \lambda)}{(b - \lambda)(\lambda - c)}$$

$$(g)^{1/2} = \frac{(\mu - \nu)(\mu - \lambda)(\lambda - \nu)}{[(\mu - b)(\mu - c)(b - \nu)(c - \nu)(b - \lambda)(c - \lambda)]^{1/2}}$$

$$f_1 = (\mu - b)^{1/2}(\mu - c)^{1/2}$$

$$f_2 = (b - \nu)^{1/2}(c - \nu)^{1/2}$$

$$f_3 = (b - \lambda)^{1/2}(c - \lambda)^{1/2}$$

O determinante de Stäckel é obtido da eq.(2.13)

$$S = \frac{(\mu - \nu)(\mu - \lambda)(\lambda - \nu)}{(\mu - b)(\mu - c)(b - \nu)(c - \nu)(b - \lambda)(\lambda - c)}$$

Os cofatores são determinados pela eq.(2.11)

$$M_{11} = \frac{(\lambda - \nu)}{(b - \nu)(c - \nu)(b - \lambda)(c - \lambda)}$$

$$M_{21} = \frac{(\mu - \lambda)}{(\mu - b)(\mu - c)(b - \lambda)(\lambda - c)}$$

$$M_{31} = \frac{(\mu - c)}{(\mu - b)(\mu - c)(b - \nu)(c - \nu)}$$

A matriz de Stäckel pode ser escrita como:

$$[S] = \begin{bmatrix} \frac{\mu^2}{(\mu-b)(\mu-c)} & \frac{-1}{(\mu-b)(\mu-c)} & \frac{\mu}{(\mu-b)(\mu-c)} \\ \frac{\nu^2}{(b-\nu)(c-\nu)} & \frac{-1}{(b-\nu)(c-\nu)} & \frac{\nu}{(b-\nu)(c-\nu)} \\ \frac{-\lambda^2}{(b-\lambda)(\lambda-c)} & \frac{1}{(b-\lambda)(\lambda-c)} & \frac{-\lambda}{(b-\lambda)(\lambda-c)} \end{bmatrix}$$

A expressão para o laplaciano é obtida da eq.(1.14)

$$\nabla^2\phi = \left[\frac{(\mu-b)(\mu-c)}{(\mu-\nu)(\mu-\lambda)} \right]^{1/2} \frac{\partial}{\partial\mu} \left[(\mu-b)^{1/2}(\mu-c)^{1/2} \frac{\partial\phi}{\partial\mu} \right] +$$

$$+ \left[\frac{(b-\nu)(c-\nu)}{(\mu-\nu)(\lambda-\nu)} \right]^{1/2} \frac{\partial}{\partial\nu} \left[(b-\nu)^{1/2}(c-\nu)^{1/2} \frac{\partial\phi}{\partial\nu} \right] +$$

$$+ \left[\frac{(b-\lambda)(\lambda-c)}{(\mu-\lambda)(\lambda-\nu)} \right]^{1/2} \frac{\partial}{\partial\lambda} \left[(b-\lambda)^{1/2}(\lambda-c)^{1/2} \frac{\partial\phi}{\partial\lambda} \right]$$

A separação da equação de Helmholtz é dada pela eq.(2.17), sendo:

$$\alpha_1^2 = k \qquad , U^1 = M(\mu) \qquad U^2 = N(\nu) \qquad U^3 = L(\lambda)$$

$$(\mu-b)(\mu-c)\ \frac{d^2M}{d\mu^2} + \frac{1}{2}\ [2\mu - (b+c)]\ \frac{dM}{d\mu} + [k^2\mu^2 + \alpha_2\mu - \alpha_3]\ M = 0$$

$$(b-\nu)(c-\nu)\ \frac{d^2N}{d\nu^2} + \frac{1}{2}\ [2\nu - (b+c)]\ \frac{dN}{d\nu} + [k^2\nu^2 + \alpha_2\nu - \alpha_3]\ N = 0$$

$$(b-\lambda)(c-\lambda)\ \frac{d^2L}{d\lambda^2} - \frac{1}{2}\ [2\lambda - (b+c)]\ \frac{dL}{d\lambda} - [k^2\lambda^2 + \alpha_2\lambda - \alpha_3]\ L = 0$$

Se $\alpha_2 = (b+c)q$ e $\alpha_3 = -p(p+1)$

A primeira equação toma a forma:

$$(\mu-b)(\mu-c)\ \frac{d^2M}{d\mu^2} + \frac{1}{2}\ [2\mu - (b+c)]\ \frac{dM}{d\mu} + [k^2\mu^2 - p(p+1) - q(b+c)]\ M = 0$$

que é a equação de onda de Baer, cuja solução é:

$$M(\mu) = A\ \mathcal{B}_p^q(k,\mu) + \mathcal{E}_p^q(k,\mu)$$

Analogamente para $N(\nu)$ e $L(\lambda)$, temos:

$$(\nu-b)(\nu-c)\ \frac{d^2N}{d\nu^2} + \frac{1}{2}\ [2\nu - (b+c)]\ \frac{dN}{d\nu} + [k^2\nu^2 - p(p+1) - q(b+c)]\ N = 0$$

com solução:

$$N(\nu) = A\ \mathcal{B}_p^q(k,\nu) + \mathcal{E}_p^q(k,\nu)$$

$$(\lambda-b)(\lambda-c)\ \frac{d^2L}{d\lambda^2} + \frac{1}{2}\ [2\lambda - (b+c)]\ \frac{dL}{d\lambda} + [k^2\lambda^2 - p(p+1) - q(b+c)]\ L = 0$$

com solução:

$$L(\lambda) = A\ \mathcal{B}_p^q(k,\lambda) + B\ \mathcal{E}_p^q\ (k,\lambda)$$

A forma mais geral para o potencial é dada pela eq.(4.3)

$$V(\mu,\nu,\lambda) = v_1(\mu)\ \frac{(\mu-b)(\mu-c)}{(\mu-\nu)(\mu-\lambda)} + v_2(\nu)\ \frac{(b-\nu)(c-\nu)}{(\mu-\nu)(\lambda-\nu)} + v_3(\lambda)\ \frac{(b-\lambda)(\lambda-c)}{(\lambda-\nu)(\mu-\lambda)}$$

Também neste caso, não é possível expressar o potencial em termos das coordenadas cartesianas[26]...

APÊNDICE

SISTEMAS SEPARÁVEIS DE STÄCKEL

Em 1891 Stäckel[4] mostrou como determinar as quantidades H_i na equação de Hamilton - Jacobi

$$\sum_i \frac{1}{H_i^2} \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x_i} \right)^2 + k^2 (E - V)\varphi = 0$$

a fim de que a solução fosse completamente separável na forma soma $\sum X_i$ onde X_i é função somente de x_i .

Em 1893 Stäckel[4] mostrou que quando a forma diferencial quadrática $\sum_i H_i^2\, dx_i^2$ assim determinada, é tomada como a métrica Riemanniana de um espaço V_n , as equações das geodésicas de V_n admitem $(n-1)$ primeiras integrais quadráticas independentes além da forma fundamental.

Em 1927 Robertson[2] mostrou que para uma equação da forma

$$\sum_i H_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{H}{H_i^2} \frac{\partial\varphi}{\partial x_i^2} \right] + k^2 (E - V)\varphi = 0$$

admitir uma solução em forma de produto $\prod X_i$, onde X_i é função apenas de x_i, as funções H_i^2 devem ser da forma de Stäckel e

$$V = \sum \frac{f(x_i)}{H_i^2}$$

como no caso da equação de Hamilton - Jacobi. Neste caso, existe uma condição adicional:

$\varphi = \prod \dfrac{H_i}{\psi_i(x_i)}$ onde φ é o determinante das funções de Stäckel φ_{ij} e ψ_i é função quando muito de x_i .

Em 1934 Eisenhart[1] mostrou que:

Uma condição necessária e suficiente para que a forma quadrática fundamental de Vn possa ser dada na forma de Stäckel é que as equações das geodésicas admitam (n-1) primeiras integrais quadráticas independentes; que as raízes das equações características $| a_{ij} - \rho\, g_{ij} | = 0$ para cada uma destas integrais sejam simples; que $| \rho_i^{\alpha} - \rho_j^{\alpha} | \neq 0$ e que o campo de vetores determinado por $(a_{ij} - \rho_h\, g_{ij})\, \lambda^{i}_{h1} = 0$ seja normal e ser o mesmo campo de vetores para todas as integrais primeiras.

Uma condição necessária e suficiente para que

$$ds^2 = e_1\, H_1^2\, (dx_1)^2 + e_2\, H_2^2\, (dx_2)^2 + \ldots\ldots + e_n\, H_n^2\, (dx_n)^2$$

esteja na forma de Stäckel é que as equações

$$\frac{\partial^2 \ln H_i^2}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial \ln H_i^2}{\partial x_j}\ \frac{\partial \ln H_j^2}{\partial x_i} = 0 \qquad (a.1)$$

$$\frac{\partial^2 \ln H_i^2}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial \ln H_i^2}{\partial x_j}\ \frac{\partial \ln H_i^2}{\partial x_k} + \frac{\partial \ln H_i^2}{\partial x_j}\ \frac{\partial \ln H_j^2}{\partial x_k} + \frac{\partial \ln H_i^2}{\partial x_k}\ \frac{\partial \ln H_k^2}{\partial x_k} = 0$$

$$(a.2)$$

sejam satisfeitas.

A condição $\varphi = \prod \dfrac{H_i}{\psi_i(x_i)}$ é equivalente às equações $R_{ij} = 0$ $(i \neq j)$, num dado sistema de coordenadas, sendo R_{ij} as componentes do tensor de Ricci.

Eisenhart[1] determinou todos os tipos de formas reais a fim de que o espaço, com a forma fundamental:

$$ds^2 = H_1^2\, dx_1^2 + H_2^2\, dx_2^2 + H_3^2\, dx_3^2$$

seja euclidiano, e mostrou que eles satisfazem a condição:

$$\varphi = \prod \frac{H_i}{\psi_i(x_i)}$$

e encontrou que, em cada caso, as superfícies coordenadas são obtidas das superfícies quádricas confocais, incluindo os casos onde uma ou mais famílias consistem de planos.

Estas formas e as relações entre as coordenadas cartesianas e as coordenadas x_i são mostradas a seguir.

SISTEMAS DE STÄCKEL NO ESPAÇO EUCLIDIANO

As componentes do tensor de Riemann formado com respeito à forma quadrática[28]

$$ds^2 = \sum_{i=1}^{n} e_i\, H_i^2\, (dx_i)^2 \quad \text{são dadas por}$$

$$R_{jiik} = \frac{e_i\, H_i^2}{4} \left[2\, \frac{\partial^2 \ln H_i^2}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial \ln H_i^2}{\partial x_j} \frac{\partial \ln H_i^2}{\partial x_k} - \frac{\partial \ln H_i^2}{\partial x_j} \frac{\partial \ln H_j^2}{\partial x_k} - \frac{\partial \ln H_i^2}{\partial x_k} \frac{\partial \ln H_k^2}{\partial x_j} \right] \quad (a.3)$$

que, em consêquencia de (a.2) pode ser escrito como:

$$R_{jiik} = \frac{3}{4}\, e_i\, H_i^2\, \frac{\partial^2 \ln H_i^2}{\partial x_j \partial x_k} \qquad (a.4)$$

$$R_{ijkl} = 0 \qquad \text{(a.5)}$$

$$R_{jiij} = e_i H_i^2 \left(\frac{\partial^2 \ln H_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial \ln H_i}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\ln \frac{H_i}{H_j} \right] + \right.$$

$$+ e_j H_j^2 \left(\frac{\partial^2 \ln H_j^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial \ln H_j}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\ln \frac{H_j}{H_i} \right] + \right.$$

$$+ \sum_{k \neq (i,j)} e_i e_j e_k \frac{H_i^2 H_j^2}{H_k^2} \frac{\partial \ln H_i}{\partial x_k} \frac{\partial \ln H_j}{\partial x_k} \qquad \text{(a.6)}$$

De (a.1), temos:

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \ln \frac{H_i^2}{H_j^2} = 0$$

do que segue que:

$$H_i^2 = \varphi_{ij}^2 \, \theta_{ij} \qquad H_j^2 = \varphi_{ji}^2 \, \theta_{ij} \qquad \text{(a.7)}$$

onde φ_{ij} é independente de x_j e φ_{ji} de x_i. Substituindo em (a.1), temos:

$$\theta_{ij} = \tau_{ij} + \tau_{ji} \qquad \text{(a.8)}$$

onde τ_{ij} é independente de x_j e τ_{ji} de x_i

Igualando a zero o lado direito de (a.4), temos em consequência de (a.2):

$$\frac{\partial^2 \ln H_i^2}{\partial x_j \partial x_k} = 0 \qquad (a.9)$$

$$\frac{\partial \ln H_i}{\partial x_j}\frac{\partial \ln H_i}{\partial x_k} - \frac{\partial \ln H_i}{\partial x_j}\frac{\partial \ln H_j}{\partial x_k} - \frac{\partial \ln H_i}{\partial x_k}\frac{\partial \ln H_k}{\partial x_j} = 0 \qquad (a.10)$$

onde $(i,j,k \neq)$

Substituindo (a.7) e (a,8) em (a.9), temos:

$$\frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} = (\tau_{ij} + \tau_{ji})\ \psi_{ji}(x_i, x_j) \qquad (a.11)$$

$$\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} = (\tau_{ij} + \tau_{ji})\ \psi_{ij}(x_i, x_j) \qquad (a.12)$$

Diferenciando estas equações em relação a x_i e a x_j respectivamente, temos:

$$\frac{\partial \psi_{ji}}{\partial x_i} + \psi_{ji}\ \psi_{ij} = 0 \qquad\qquad \frac{\partial \psi_{ij}}{\partial x_j} + \psi_{ji}\ \psi_{ij} = 0$$

ou ainda:

$$\psi_{ji} = \frac{\partial \ln \alpha}{\partial x_j} \qquad\qquad \psi_{ij} = \frac{\partial \ln \alpha}{\partial x_i}$$

sendo $\alpha = \alpha_i + \alpha_j$ onde α_i e α_j são funções de x_i e x_j respectivamente

De (a.11) e (a.12), segue:

$$\tau_{ij} + \tau_{ji} = (\alpha_i + \alpha_j)\ \omega_{ij}$$

onde ω_{ij} é independente de x_i e de x_j

Em consequência deste resultado e de (a.7), temos:

$$H_i^2 = X_i \prod_{j(\neq i)} (\sigma_{ij} + \sigma_{ji}) \qquad (i = 1,2,\dots,n) \qquad (a.13)$$

onde σ_{ij} é função quando muito de x_i e σ_{ji} quando muito de x_j

Estas expressões satisfazem (a.1) e para que (a.10) seja satisfeita devemos ter:

$$\sigma'_{ji}\sigma'_{ki}(\sigma_{jk} + \sigma_{kj}) - \sigma'_{ji}\sigma'_{kj}(\sigma_{ki} + \sigma_{ik}) - \sigma'_{ki}\sigma'_{jk}(\sigma_{ij} + \sigma_{jk}) = 0$$

(a.14)

onde (') denota derivada. Permutando os índices ciclicamente, temos:

$$\sigma'_{kj}\sigma'_{ij}(\sigma_{ki} + \sigma_{ik}) - \sigma'_{kj}\sigma'_{ik}(\sigma_{ij} + \sigma_{ji}) - \sigma'_{ij}\sigma'_{ki}(\sigma_{jk} + \sigma_{kj}) = 0$$

$$\sigma'_{ik}\sigma'_{jk}(\sigma_{ij} + \sigma_{ji}) - \sigma'_{ik}\sigma'_{ji}(\sigma_{jk} + \sigma_{kj}) - \sigma'_{jk}\sigma'_{ij}(\sigma_{ki} + \sigma_{ik}) = 0$$

(a.15)

Igualando a zero o determinante associado a estas equações temos:

$$\sigma'_{ij}\sigma'_{jk}\sigma'_{ki}+\sigma'_{ji}\sigma'_{kj}\sigma'_{ik}=0 \qquad (a.16)$$

Uma vez que nenhum dos termos da expressão acima é zero, segue que: $\sigma'_{ij} / \sigma'_{ik}$ é uma constante. Colocando $\sigma_{ij} = a_{ij}\, \sigma_i$ onde

a_{ij} é uma constante e σ_i envolve, quando muito, x_i. As constantes devem satisfazer a relação:

$$a_{ij}\, a_{jk}\, a_{ki} + a_{ji}\, a_{kj}\, a_{ik} = 0 \qquad (a.17)$$

As equações (a.14) e (a.15) são satisfeitas em consequência da equação acima.
Logo, temos:

$$H_i^2 = X_i \prod_{j(\neq i)} (a_{ij}\sigma_i + a_{ji}\sigma_j)$$

Se colocarmos:

$$\sigma_i = a_{jk}\ a_{ki}\ \bar{\sigma}_i \qquad\qquad \sigma = a_{kj}\ a_{ik}\ \bar{\sigma}_j$$

e, introduzindo em (a.17), temos:

$$a_{ij}\ \sigma_i + a_{ji}\ \sigma_j = a_{ij}\ a_{jk}\ a_{ki}(\bar{\sigma}_i - \bar{\sigma}_j)$$

e o fator constante pode ser incorporado em X_i. Tomando: $a_{ij} = - a_{ji} = 1$,temos de (a.17):

$$a_{jk}\ a_{ki} - a_{kj}\ a_{ik} = 0$$

Se, agora, colocamos: $a_{ki}\ \sigma_k = - a_{ik}\ \bar{\sigma}_k$, temos:

$$a_{ki}\ \sigma_k + a_{ik}\ \bar{\sigma}_i = a_{ik}(\bar{\sigma}_i - \bar{\sigma}_k)$$

tomando $a_{ki} = - 1$, $a_{ik} = 1$. Então: $a_{jk}\sigma_j + a_{kj}\sigma_k = a_{jk}(\bar{\sigma}_j - \bar{\sigma}_k)$

e assim $a_{jk} = - a_{kj} = 1$, temos:

$$H_i^2 = X_i \prod_{j(\neq i)} (\sigma_i - \sigma_j) \qquad (a.18)$$

Consideremos os casos que podem aparecer quando algum dos σ's é constante. Suponhamos que $\sigma_{ij} = a_{ij}$, onde a_{ij} é constante. Da primeira equação de (a.15), segue que:
ou $\sigma_{ik} = a_{ik}$ ou $\sigma_{kj} = a_{kj}$, os a's sendo constantes.
Se $\sigma_{ik} = a_{ik}$, a segunda equação de (a.15) é satisfeita, restando somente (a.14),.que é satisfeita nos seguintes casos:

(i) $\sigma_{ji} = a_{ji}$ $\sigma_{jk} = a_{jk}$ (ii) $\sigma_{ji} = a_{ji}$ $\sigma_{ki} = a_{ki}$

(iii) $\sigma_{ki} = a_{ki}$ $\sigma_{kj} = a_{kj}$ (a.19)

A última segue de (i) quando j e k são trocados.

Se σ_{ji} e σ_{ki} não são constantes, escrevemos (a.14) na forma:

$$\sigma_{jk} + \sigma_{kj} - \frac{\sigma'_{kj}}{\sigma'_{ki}} (\sigma_{ki} + a_{ik}) - \frac{\sigma'_{jk}}{\sigma'_{ji}} (\sigma_{ji} + a_{ij}) = 0 \qquad (a.20)$$

Disto temos:

$$\sigma_{ij} + a_{ij} = b\,(\sigma_{jk} - c)\ , \qquad \sigma_{ki} + a_{ik} = d\,(\sigma_{kj} + c)$$

onde b, c, d são constantes. Daqui $\sigma'_{ji} = b\,\sigma'_{jk}$, $\sigma'_{ki} = d\,\sigma'_{kj}$ de modo que podemos colocar:

$\sigma_{ji} = a_{ji}\,\sigma_j$, $\sigma_{jk} = a_{jk}\,\sigma_j$, $\sigma_{ki} = a_{ki}\,\sigma_k$, $\sigma_{kj} = a_{kj}\,\sigma_k$

Então de (a.20), temos a condição (a.17). Assim temos três tipos distintos:

$\sigma_{ij} = a_{ij}$ $\sigma_{ji} = a_{ji}$ $\sigma_{ik} = a_{ik}$ $\sigma_{jk} = a_{jk}$ (a.21)

$\sigma_{ij} = a_{ij}$ $\sigma_{ji} = a_{ji}$ $\sigma_{ik} = a_{ik}$ $\sigma_{ki} = a_{ki}$ (a.22)

$\sigma_{ij} = a_{ij}$ $\sigma_{ik} = a_{ik}$ $\sigma_{ji} = a_{ji}\sigma_j$ $\sigma_{jk} = a_{jk}\sigma_j$ $\sigma_{ki} = a_{ki}\sigma_k$

$\sigma_{kj} = a_{kj}\sigma_k$ (a.23)

Nos dois primeiros casos os a's são arbitrários e no último caso deve satisfazer (a.17).

Quando $\sigma_{kj}=a_{kj}$ e $\sigma_{ij}=a_{ij}$ temos de (a.14) e (a.15) o caso (a.19iii) ou:

$$\sigma'_{ji}(\sigma_{jk} + a_{kj}) - \sigma'_{jk}(\sigma_{ji} + a_{ij}) = 0$$

Se $\sigma_{ji} = a_{ji}$, $\sigma_{jk} = a_{jk}$, temos (a.22) trocando os índices i,j.

Por outro lado temos o tipo:

$$\sigma_{ij} = a_{ij} \quad \sigma_{kj} = a_{kj} \quad \sigma_{ji} = a_{ji}\sigma_j \quad \sigma_{jk} = a_{jk}\sigma_j \tag{a.24}$$
$$a_{ji}\, a_{kj} - a_{jk}\, a_{ij} = 0$$

Para $n = 3$, $i = 3$, $j = 2$, $k = 1$, temos de (a.13) e (a.21):

$$H_3^2 = X_3 \prod_{j\neq 3} (\sigma_{3j} + \sigma_{j3}) = X_3\, (\sigma_{31} + \sigma_{13})\, (\sigma_{32} + \sigma_{23})$$

$$\sigma_{32} = a_{32} \quad \sigma_{23} = a_{23} \quad \sigma_{31} = a_{31} \quad \sigma_{21} = a_{21}$$

escolhendo $a_{23} = a_{31} = 0$, temos:

$$H_3^2 = X_3\, \sigma_{13}\, \sigma_{32} = \sigma_{13} = \psi_1 \quad , \text{ onde } X_3\, \sigma_{32} = 1$$

$$H_2^2 = X_2 \prod_{j\neq 2} (\sigma_{2j} + \sigma_{j2}) = X_2\, (\sigma_{21} + \sigma_{12})\, (\sigma_{23} + \sigma_{32})$$

escolhendo $a_{21} = a_{32} = 0$, temos:

$$H_2^2 = X_2\, \sigma_{12}\, \sigma_{23} = \sigma_{12} = \varphi_1 \text{ , onde } X_2\, \sigma_{23} = 1$$

$$H_1^2 = X_1 \prod_{j\neq 1} (\sigma_{1j} + \sigma_{j1}) = X_1\, (\sigma_{12} + \sigma_{21})\, (\sigma_{13} + \sigma_{31})$$

escolhendo $a_{31} = a_{21} = 0$, temos:

$$H_1^2 = X_1\, \sigma_{12}\, \sigma_{13} = 1$$

Portanto, as coordenadas podem ser escolhidas de modo que:

$$H_1^2 = 1 \qquad H_2^2 = \varphi_1 \qquad H_3^2 = \psi_1 \tag{a.25}$$

onde φ_1 e ψ_1 são funções quando muito de x_1.

Para o caso (a.24) podemos escolher $a_{ij}=a_{kj}=0$, então de (a.13), para $i = 2$, $j = 1$, $k = 3$, para uma conveniente escolha de coordenadas, temos:

$$H_1^2 = 1 \qquad H_2^2 = X_2\ \sigma_1(\ \sigma_{23} + \sigma_{32}) \qquad H_3^2 = X_3\ \sigma_1(\sigma_{23} + \sigma_{32})$$

onde σ_1 é função quando muito de x_1 (a.26)

Quando σ_1 é constante, para $i = 1,\ j = 2,\ k = 3$, temos o caso (a.22).

Para o caso (a.23), podemos escolher $a_{ij} = a_{ik} = 0$, para: $i = 2,\ j = 1,\ k = 3$, temos:

$$H_1^2 = H_3^2 = \sigma_1 + e\ \sigma_3 \qquad H_2^2 = \sigma_1\ \sigma_3 \tag{a.27}$$

onde $e = 1$ ou $e = -1$, subentendendo que σ_1 e σ_3 são positivos.

Finalmente direto de (a.18), temos o caso:

$$H_i^2 = X_i\ (x_i - x_j)\ (x_i - x_k) \qquad (i,j,k = 1,\ 2,3\ ,\ i,j,k \neq) \tag{a.28}$$

Para as funções que aparecem em (a.25,26,27,28), temos de (a.6) tomando todos os e's iguais à unidade, as condições:

$$\frac{1}{H_j^2}\left[2\ \frac{\partial^2 \ln H_i^2}{\partial x_j^2} + \frac{\partial \ln H_i^2}{\partial x_j}\ \frac{\partial}{\partial x_j}\ \ln \frac{H_i^2}{H_j^2} \right] + \frac{1}{H_k^2}\ \frac{\partial \ln H_j^2}{\partial x_k}\ \frac{\partial \ln H_j^2}{\partial x_k} +$$

$$+ \frac{1}{H_i^2}\left[2\ \frac{\partial^2 \ln H_j^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial \ln H_j^2}{\partial x_i}\ \frac{\partial}{\partial x_i}\ \ln \frac{H_j^2}{H_i^2} \right] = 0 \qquad (i,j,k \neq) \tag{a.29}$$

Em consequência temos:

Uma condição necessária e suficiente para que a equação:

$$\sum_i H \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{H}{H_i^2} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) + k^2 (E - V)\varphi = 0 \quad \text{com} \qquad H = H_1 H_2 \ldots H_n$$

seja solúvel por separação de variáveis para $n = 3$, é que os H's estejam em uma das formas (a.25),(a.26),(a.27),(a.28).

Passemos agora a discutir os vários tipos:

Tipos 1 : Sendo $i = 1$, $j = 2$ e $k = 3$, temos de (a.25):

$\varphi_1 = a\ x_1 + b \qquad\qquad \psi_1 = c\ x_1 + d$

onde a, b, c, d são constantes.

Tomamos: $\quad a = 0, \quad b = 1, \quad \varphi_1 = 1$

(1.1)Se $c=0 \quad d=1$, temos as COORDENADAS RETANGULARES (pag.77)

$$H_i^2 = 1 \qquad (i = 1,2,3)$$

(1.2)Se $c \neq 0$, escolhemos $a = 0, \quad b = 1,$

$$H_1^2 = H_2^2 = 1 \qquad\qquad H_3^2 = x_1$$

Neste caso, as transformações de coordenadas são:

$$x = x_1 \cos x_3 \qquad y = x_1 \operatorname{sen} x_3 \qquad z = x_3$$

Temos as COORDENADAS CILÍNDRICO - CIRCULARES (pag.81)

Tipos 2: Na discussão das formas (a.26) consideramos primeiro o caso σ_{32} = constante, a qual tomamos igual a zero. Logo:

$$H_1^2 = 1 \qquad H_2^2 = \varphi^2(x_1) \qquad H_3 = \varphi^2(x_1)\ \psi^2(x_2)$$

Para $i = 1$, $j = 2,3$ $(k = 2,3)$ temos: $\varphi = a\ x_1 + b$

Para $i = 2$, $j = 3$ em (a.29), temos:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + a^2\ \psi = 0$$

Se $a = 0$ temos tipo 1. Se $a \neq 0$, podemos tomar:

(2.1) $\quad a = 1 \quad b = 0$

$$H_1^2 = 1 \qquad H_2^2 = x_1^2 \qquad H_3^2 = x_1^2 \operatorname{sen}^2 x_2$$

obtemos as COORDENADAS ESFÉRICAS (pag. 44)

Se nem σ_{23} nem σ_{32}. é constante, podemos escolher as coordenadas de modo que:

$$H_1^2 = 1 \qquad H_2^2 = X_2\ \sigma_1\ (x_2 - x_3) \qquad H_3^2 = X_3\ \sigma_1\ (x_2 - x_3)$$

Para i = 1. j = 2,3 em (a.29), temos: $\sigma_1 = (a\ x_1 + b)^2$.

Para i = 2, j = 3, obtemos:

$$2\left(\frac{1}{X_2} + \frac{1}{X_3}\right) + (x_2 - x_3)\left[\left(\frac{1}{X_3}\right)' - \left(\frac{1}{X_2}\right)'\right] - 4a^2(x_2 - x_3)^2 = 0$$

Diferenciando com relação a x_3, temos:

$$\left(\frac{1}{X_2}\right)' + \left(\frac{1}{X_3}\right)' + (x_3 - x_2)\left(\frac{1}{X_2}\right)'' - 12a^2(x_2 - x_3)^2 = 0$$

Diferenciando novamente em relação a x_3:

$$\left(\frac{1}{X_2}\right)''' = -24a^2$$

Consequentemente:

$$\frac{1}{X_2} = -4\ a^2\ x_2^2 + c\ x_2^2 + d\ x_2 + e = f(x_2)$$

substituindo na segunda equação acima, temos:

$$\left(\frac{1}{X_3}\right)' = 12\ a^2\ x_3^2 - 2\ c\ x_3 - d$$

e, da primeira, temos: $\dfrac{1}{X_3} = -\ f(x_3)$

Existem dois casos a serem considerados: a = 0 e a ≠ 0. Tomando a = 0, b = 1 e no segundo caso a = 1, b = 0, temos as duas formas:

$$(*) \qquad H_1^2 = 1 \qquad H_2^2 = \frac{x_2 - x_3}{f(x_2)} \qquad H_3^2 = \frac{x_3 - x_2}{f(x_3)}$$

$$f(x_i) = c\, x_i^2 + d\, x_i + e$$

$$(**) \qquad H_1^2 = 1 \qquad H_2^2 = \frac{x_1^2\,(x_2 - x_3)}{f(x_2)} \qquad H_3^2 = \frac{x_1^2\,(x_3 - x_2)}{f(x_2)}$$

$$f(x_i) = -\,4\, x_i^3 + c\, x_i^2 + d\, x_i + e$$

Se na equação (*) assumimos que f(x) tem duas raízes distintas, podemos escrever: $f(x) = 4\,(x^2 - a\,x)$, onde $a > 0$, e $x_2 > a > x_3 > 0$, então as expressões para H_2^2 e H_3^2 são positivas.

Se colocarmos:

$$x_2 - \frac{a}{2} = \frac{1}{2}\, a \cosh 2\xi \qquad x_3 - \frac{a}{2} = \frac{1}{2}\, a \cos 2\eta$$

temos, substituindo a por a^2:

$$(2.2) \quad ds^2 = dx_1^2 + \frac{1}{2}\, a^2\, (\cosh 2\xi - \cos 2\eta)\,(d\xi^2 + d\eta^2)$$

a transformação de coordenadas é:

$$x = x_1 \qquad y = a \cosh \xi \cos\eta \qquad z = a \,\mathrm{senh}\, \xi \,\mathrm{sen}\, \eta$$

que são as COORDENADAS CILÍNDRICO - ELÍPTICAS (pag. 85)

Nenhum caso real existe quando as raízes de $f(x) = 0$ são iguais, nem quando f(x) é constante.

No caso $c = 0$, podemos tomar $f(x) = 4\,x$ e $x_2 > 0 > x_3$. Se escolhemos:

$$x_2 = \xi^2 \qquad x_3 = -\,\eta^2 \text{ , temos:}$$

$$(2.3) \quad ds^2 = dx^2 + (\xi^2 + \eta_1^2)\,(d\xi^2 + d\eta^2)$$

e a transformação de coordenadas é:

$$x = x_1 \qquad y = \frac{1}{2}\,(\xi^2 - \eta^2) \qquad z = \xi\,\eta$$

temos as COORDENADAS CILÍNDRICO - PARABÓLICAS (pag.90)

Se na equação (**) tomarmos:

$$f(x) = 4\,(a-x)(b-x)(c-x) \quad \text{com } a > b > c \text{ onde}$$

$$\frac{a-b}{a-c} = k^2 \qquad \frac{b-c}{a-c} = k'^2 \qquad k^2 + k'^2 = 1$$

$$x_2 = a + (b-a)\,sn^2(\xi, k) \qquad x_3 = c + (b-c)\,sn^2(\eta, k')$$

onde sn θ é uma função elíptica, a forma (**) fica:

$$(2.4)\quad ds^2 = dx_1^2 + x_1^2\,[k^2\,cn^2(\xi,k) + k'^2\,cn^2(\eta,k')]\,(d\xi^2 + d\eta^2)$$

a transformação de coordenadas é:

$$x = x_1\,dn(\xi,k)\,sn(\eta,k') \qquad y_1 = x_1\,sn(\xi,k)\,dn(\eta,k')$$

$$z = x_1\,cn(\xi,k)\,cn(\eta,k')$$

temos as COORDENADAS CÔNICAS (pag.104)

Pode ser mostrado que se duas das raízes de $f(x) = 0$ são iguais, ou todas são iguais, não há solução real.

Tipos 3: Considerando agora (a.27), substituindo em (a.29) para $i = 1$, $j = 2$, temos:

$$(*)\quad 2\left(\sigma_1'' - \frac{\sigma_1'^2}{\sigma_1}\right) + e\,\sigma_3\left(2\,\frac{\sigma_1''}{\sigma_1} - \frac{\sigma_1'^2}{\sigma_1^2}\right) + e\,\frac{\sigma_3'^2}{\sigma_3} = 0$$

Diferenciando com relação a x_3, temos:

$$2\,\frac{\sigma_1''}{\sigma_1} - \frac{\sigma_1'^2}{\sigma_1^2} + \left(\frac{\sigma_3'^2}{\sigma_3}\right)'\frac{1}{\sigma_3'} = 0 \quad , \text{ então:}$$

$$2\,\frac{\sigma_1''}{\sigma_1} - \frac{\sigma_1'^2}{\sigma_1^2} = c \quad , \quad \left(\frac{\sigma_3'^2}{\sigma_3}\right)' = -\,c\,\sigma_3'$$

onde c é constante.

Da segunda igualdade acima temos:

$$(**)\quad \sigma_3'^2 = -c\,\sigma_3 + d\,\sigma_3 \text{ , onde } d \text{ é constante.}$$

De (*), temos:

$$(***)\quad \sigma_1'^2 = c\,\sigma_1^2 + d\,e\,\sigma_1$$

Estas expressões satisfazem (a.29), para $i = 1$, $j = 3$, e $i = 2$ $j = 3$, sem imposição de quaisquer condições sobre c e d.

Considerando o caso $c = 0$, o que somente é possível quando $e = 1$ e $d > 0$, de modo que as coordenadas são reais.

$$\text{Obtemos:}\quad (\sigma_i)^{1/2} = \frac{1}{2}(d)^{1/2} x_i + f_i$$

Escolhendo as coordenadas convenientemente, temos:

$$(3.1)\quad H_1^2 = H_3^2 = x_1^2 + x_3^2 \qquad H_2^2 = x_1^2\, x_3^2$$

Sendo a transformação de coordenadas:

$$x = x_1\, x_3 \cos x_2 \qquad y = x_1\, x_3 \operatorname{sen} x_2$$

$$z = \frac{1}{2}(x_1^2 - x_3^2)$$

que são as COORDENADAS PARABÓLICAS (pag.63)

Quando $c \neq 0$, podemos considerar $c > 0$ e o substituímos por. $4c^2$

Tomando $c = 1$ e substituindo σ_1 e σ_3 por $\dfrac{\sigma_1 d}{4c^2}$ e $\dfrac{\sigma_3 d}{4c^2}$ de (**), temos que $d > 0$ e a solução de (**) e (***) é :

$$\sigma_1 = \operatorname{senh}^2(c\, x_1 + b) \qquad \sigma_3 = \operatorname{sen}^2(c\, x_3 + f)$$

Escolhendo convenientemente as coordenadas:

$$(3.2)\quad H_1^2 = H_3^2 = a^2(\operatorname{senh}^2 x_1 + \operatorname{sen}^2 x_3)$$

$$H_2^2 = a^2 \operatorname{senh}^2 x_1 \operatorname{sen}^2 x_3$$

a transformação de coordenadas é:

$$x = a \operatorname{senh} x_1 \operatorname{sen} x_3 \cos x_2 \qquad y = a \operatorname{senh} x_1 \operatorname{sen} x_3 \operatorname{sen} x_2$$

$$z = a \cosh x_1 \cos x_3$$

que são as COORDENADAS ESFEROIDAIS ALONGADAS (pag.95)

Quando $e = -1$, obtemos analogamente:

(3.3) $H_1^2 = H_3^2 = a^2\,(\operatorname{senh}^2 x_1 + \cos^2 x_3)$

$$H_2^2 = a^2 \cosh x_1^2 \operatorname{sen}^2 x_3$$

a transformação de coordenadas é:

$x = a \cosh x_1 \operatorname{sen} x_3 \cos x_2$ $\qquad$ $y = a \cosh x_1 \operatorname{sen} x_3 \operatorname{sen} x_2$

$z = a \operatorname{senh} x_1 \cos x_3$

que são as COORDENADAS ESFEROIDAIS ACHATADAS (pag.100)

Tipo 4: Considerando finalmente (a.28) supondo que: $x_1 > x_2 > x_3$, substituindo em (a.29) para $i=1$, $j=2$, obtemos a equação:

$$(*)\quad \frac{1}{X_3} + \frac{1}{(x_2-x_1)^2}\left[(x_3-x_2)^2\left((x_1-x_3)\left(\frac{1}{X_1}\right)' - \left(\frac{2(x_3-x_1)}{x_2-x_1}+1\right)\frac{1}{X_1}\right)+\right.$$

$$\left. + (x_3-x_1)^2\left((x_2-x_3)\left(\frac{1}{X_2}\right)' - \left(\frac{2(x_3-x_2)}{x_1-x_2}+1\right)\frac{1}{X_2}\right)\right] = 0$$

Diferenciando com relação a x_3, obtemos um polinômio do terceiro grau em x_3. Cada um dos seus coeficientes deve desaparecer. Igualando a zero o coeficiente do de x_3^2, temos:

$$(**)\qquad (x_1-x_2)^2\left(\frac{1}{X_2}\right)'' + 4(x_1-x_2)\left(\frac{1}{X_2}\right)' + 6\,\frac{1}{X_2} +$$

$$+ 2(x_1-x_2)\left(\frac{1}{X_1}\right)' - 6\,\frac{1}{X_1} = 0$$

Diferenciando com relação a x_3 duas vezes, temos:

$$\left(\frac{1}{X_3}\right)'''' = 0\ , \text{ e consequentemente:}$$

$$(***)\quad \frac{1}{X_2} = a_0\, x_2^3 + a_1\, x_2^2 + a_2\, x_2 + a_3 = f(x_2)$$

Substituindo em (**), encontramos:

$$\frac{1}{X_1} = f(x_1) \text{ e de } (**) \text{, temos: } \frac{1}{X_3} = f(x_3)$$

Estas expressões satisfazem as condições (a.29)

Quando $a_0 \neq 0$ em (***) e as raízes de $f(x)=0$ são distintas escrevemos:

$$f(x) = 4(\alpha - x)(\beta - x)(\gamma - x)$$

onde $\alpha > \beta > \gamma$ e temos:

$$(4.1) \quad H_i^2 = \frac{(x_i - x_j)(x_i - x_k)}{f(x_i)} \qquad (i,j,k \neq)$$

As equações de transformação de coordenadas são:

$$x^2 = \frac{(\alpha - x_1)(\alpha - x_2)(\alpha - x_3)}{(\alpha - \beta)(\alpha - \gamma)}$$

$$y^2 = \frac{(\beta - x_1)(\beta - x_2)(\beta - x_3)}{(\beta - \alpha)(\beta - \gamma)}$$

$$z^2 = \frac{(\gamma - x_1)(\gamma - x_2)(\gamma - x_3)}{(\gamma - \alpha)(\gamma - \beta)}$$

onde $\alpha > x_1 > \beta > x_2 > \gamma > x_3$

que são as COORDENADAS ELIPSOIDAIS (pag.110)

Pode ser mostrado que não há possibilidade de raízes duplas ou triplas de $f(x) = 0$ dando solução real para (a.29).

Quando $a_0 = 0$, em (***),escrevemos:

$f(x) = 4(a - x)(b - x)$. Neste caso, temos:

$$(4.2) \quad H_i^2 = \frac{(x_i - x_j)(x_i - x_k)}{f(x_i)} \quad , \quad f(x_i) = 4(a - x_i)(b - x_i)$$

$$(i,j,k \neq)$$

supomos: $x_1 > b > x_2 > a > x_3$

As equações de transformação de coordenadas são:

$$x = \frac{x_1 + x_2 + x_3 - a - b}{2} \qquad y^2 = \frac{(a - x_1)(a - x_2)(a - x_3)}{(b - a)}$$

$$z^2 = \frac{(b - x_1)(b - x_2)(b - x_3)}{(a - b)}$$

que são as COORDENADAS PARABOLOIDAIS (pag.115)

Não existe solução real quando as raízes a, b são iguais e também quando $a_0 = a_1 = 0$ e quando $a_2 = 0$.

Em todos esses onze sistemas, as superfícies coordenadas são obtidas das superfícies quádricas confocais[29].

CONCLUSÕES

Um sistema de coordenadas pode ser "construído", em princípio, de modo arbitrário, conveniente ou mesmo privilegiado. Desta infinidade de sistemas de coordenadas ao menos em sessenta deles, a equação de Laplace é R-separável bem como em dezessete tal equação é simplesmente separável.

Neste trabalho discutimos a equação de Laplace tridimensional num espaço euclidiano como sendo um caso degenerado da equação de Helmholtz, que é simplesmente separável em apenas onze sistemas de coordenadas, os quais foram classificados por Eisenhart.

Para a resolução das equações utilizamos o método de separação de variáveis que consiste, essencialmente, de quatro etapas:

a) Transformar a equação diferencial parcial no sistema de coordenadas apropriado à simetria do problema em questão;

b) Separar esta equação diferencial parcial em três equações diferenciais ordinárias;

c) Resolver estas três equações diferenciais ordinárias;

d) Construir a única solução que satisfaça as condições de contorno usando as soluções particulares obtidas no item anterior.

Na presente dissertação nos concentramos apenas nos três primeiros itens, ou seja: para cada um dos onze sistemas de coordenadas, justificamos a necessidade da escolha de um deles através de uma breve citação, bem como apresentamos as condições de separabilidade para as equações de Laplace e de Helmholtz e a forma mais geral para o potencial a fim de que a equação de Schrödinger continue sendo ainda simplesmente separável, utilizando o determinante de Stäckel.

Ainda mais, para cada um destes onze sistemas de coordenadas, apresentamos as relações com as coordenadas cartesianas, a matriz de Stäckel, as equações separadas com suas respectivas soluções e, quando possível o potencial associado à equação de Schrödinger dado em termos das coordenadas cartesianas.

ALGUNS SÍMBOLOS USADOS NO TEXTO

J_p : função de Bessel de 1ª espécie

Y_n :função de Bessel de 2ª espécie

$\mathcal{P}_p^q$:funções generalizadas de Legendre de 1ª espécie

$\mathcal{Q}_p^q$:funções generalizadas de Legendre de 2ª espécie

L_n^p :polinômios de Laguerre associados

ce_m , fe_m , ge_m , se_m : funções de Mathieu

W_o : função de Weber

$\mathcal{E}_p^q$:função generalizada de Lamé

$\mathcal{F}_p^q$: função generalizada de Lamé de 2ª espécie

$\mathcal{B}_p^q$:função de Baer

$\mathcal{C}_p^q$:função de Baer

REFERÊNCIAS

(1) Eisenhart, L.P.: "Separable Systems of Stäckel", Ann. Math., 35 (1934), 284;

(2) Robertson, H.P.: "Bemerkung über separiarbare systeme in der Wellenmechanik", Math. Ann., 98, (1927), 749;

(3) Moon, P. and D. E. Spencer: "Separability Conditions for the Laplace and Helmholtz Equations", J. Franklin Inst., **253**, (1952), 585; "Separability in a Class of Coordinate Systems", J. Franklin Inst., **254**, (1952), 227 e "Cilindrical and Rotacional Coordinate Systems", J. Franklin Inst., **252**, (1951), 327;

(4) Stäckel, P.: "Über die Integration der Hamilton - Jacobchen Diferentialgleichung mittels Separation der Variabelen", Habil. Schr., Halle, (1891); "Sur une classe de problemes de dynamique", C. R. Acad. Sci., **116**, (1893), 485; "Über die Integration der Hamilton - Jacobchen Diferentialgleichung mittels Separation der Variabelen", Math. Ann., **49**, (1897), 145;

(5) Moon, P. an D.E. Spencer: " Theorems on Separability in Riemannian n-space", Ann. Math. Socy Proc. 3, (1952), 635;

(6) Levinson, N.; Bogert, B.; Redheffer, R.M.: "Separation of laplace's Equation", Quarterly of Applied Mathematics, 7, (1949), 241;

(7) Moon, P. and D.E. Spencer: "Recent Investigations of the Separation of Laplace's Equation", Amer. Math. Socy Proc., **4**, (1952), 302;

(8) Makarov, A.A.; Smorodinsk, J.A.; Valiev, K.H.; Winternitz, P.: "A Systematic Search for Nonrelativistic Systems with Dynamical Symetries", Parte 1. The Integrals of Motion. Il Nuovo Cimento, 52A (1967), 1061;

(9) Boyer, C. P.; Kalnins, E. G.; Miller Jr, W.: "Symmetry and Separation of Variables for the Helmholtz and Laplace Equations", Nagoya Math. J., **60**, (1976), 35;

(10) Kaplan, W.: "Advanced Calculus", Addison-Wesley World Student Series Edition, (1970);

(11) Neuman, C.: "Allgemeine Lösung des Problems über den stationaren temperat urzustand eines homogenen körps, welcher von zwei nichit concentrichen kugelflãchen begrenzt wird", Halle (1862);

(12) Wangerin, A.: "Reduction der Potentialgleichung für gewisse Rotations Körps anf eine gewöhnliche Differentialgleichung. Preisschriften der Jablonous Ki'schen ges", Leipzig, nº 18, (1875)

(13) Darboux, G.: "Sur L'application des Méthods de la Phisique Mathématique a L'étude des Corps Terminées par des Cyclides", Compt. Rend., 83, (1876), 1037;

(14) Bôcher, M.: "Über dei Reichenentwickelungen der Potential theorie", Göttingen, B. G. Teubner, (1891);

(15) Schrödinger, E.: "Quantisierung als Eigenwertproblem", Ann. Physik, **80**, (1926), 437;

(16) Epstein, P. S.: "The Stark Effect from the point of view of Schroedinger's Quantum Theory", Phys. Rev., 28, (1926), 695

(17) Bethe, A. and E. S. Salpeter: "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms", New York: Academic Press (1957);

(18) Arfken, G.: " Mathematical Methods for Physicists", Academic Press, N. York and London 2ª edição (1973)

(19) Maxwell, J. C.: A Treatise on Electricity and Magnetism, 3ª edição, Oxford Press (1904)

(20) Lamont, H. R. L.: " Wave Guides", 3ª ed., London, Methuen, (1963);

(21) Bonsignori,F. and M.Salvini: "A Physico-Mathematical Analysis of Elliptical Nerve and Muscle Fibres, Il Nuovo Cimento, **41** B,n° 2, 375(1977)

(22) Villalba,V.M.: "Solution to the Dirac Equation in Curvilinear Orthogonal Coordinate with cylindrical Symmetry", J.Math.Phys.,**31**, 2702(1990)

(23) Moon P. and D.E.Spencer: "Field Theory Handbook", Springer Verlac Berlin Göttingen Heidelberg.(1961)

(24) Vinti,J.P.: "New Approach in the Theory of Satellite Orbits", Physical Review Letters, 3, n°1,pg.8(1959)

(25) Spencer,R.D.: "Angular Momentum in Sphero-Conal Coordinates", American Journal of Physics, 27, 329 (1959)

(26) Eisenhart,L.P.: "Enumeration of Potentials for Which One-Particle Schrödinger Equations Are Separable", Physical Review, **74**, n°1 (1948)

(27) Mc Millan,W.D.: "Statics and Dinamics of a Particle", Mc Graw Hill Book Co., (1927); "The Theory of the Potential", Mc Graw Hill Book Co., (1930)

Kellog,O.D.: "Foundations of Potential Theory", J. Springer, Berlin (1929)

Milne-Thomson,L.M.: "Theoretical Hidrodinamics", Macmillan and Co., London, (1938);

(28) Eisenhart,L.P.: "Riemannian Geometry", Princeton University Press, (1966);

(29) Morse,P.M. and H. Feshbach: "Methods of Theoretical Physics", International Student Edition, Mc Graw Hill Comp. Inc, (1954)