

UMA REVISÃO SOBRE AS FUNÇÕES DE GREEN ESTACIONÁRIAS - III

J.BELLANDI F^o, R.J.M.COVOLAN*, A.B.PÁDUA** e J.T.S.PAES***

Instituto de Física "Gleb Wataghin"

Universidade Estadual de Campinas

13081 Campinas, SP

Em continuidade aos artigos anteriores^{1),2)} apresenta-se neste trabalho uma revisão sobre as funções de Green estacionárias para operadores a derivadas parciais, ou seja, para equações diferenciais a mais de uma variável.

§ 5. EXPANSÃO EM AUTOFUNÇÕES

Seja a equação diferencial não homogênea

$$\mathcal{L}G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r}, \vec{r}') \quad (5.1)$$

onde \mathcal{L} é um operador diferencial a derivadas parciais na forma

$$\mathcal{L} = D - \lambda, \quad (5.2)$$

cujas soluções se quer determinar num certo domínio, satisfazendo a condições de contorno bem definidas. Da mesma forma que no caso unidimensional pode-se procurar soluções da Eq.(5.1) em termos das soluções da equação homogênea.

Conhecendo-se duas soluções linearmente independentes da equação homogênea

$$(D - \lambda)u(\vec{r}) = 0, \quad (5.3)$$

$u_1(\vec{r})$ e $u_2(\vec{r})$, a solução geral será uma superposição dessas soluções

$$u(\vec{r}) = Au_1(\vec{r}) + Bu_2(\vec{r}). \quad (5.4)$$

* Bolsista da FAPESP.

** Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina.

*** Departamento de Física, Universidade Federal do Pará.

Supondo-se que as condições de contorno restrinjam essa solução somente para valores particulares de λ ; $\lambda = \nu$ tem-se para cada valor de ν , uma solução $u_\nu(\vec{r})$, ou seja

$$(D - \nu)u_\nu(\vec{r}) = 0 \quad (5.5)$$

com $u_\nu(\vec{r})$ satisfazendo às condições de contorno.

O conjunto de soluções $\{u_\nu(\vec{r})\}$ deve ser determinado de modo a ser um conjunto completo e ortonormal.

Da mesma forma que no caso unidimensional, a função de Green pode ser escrita como

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_\nu C_\nu(\vec{r}') u_\nu(\vec{r}) \quad (5.6)$$

com a determinação de $C_\nu(\vec{r})$ feita de modo análogo ao da Eq. (4.12) da ref.(2)

$$C_\nu(\vec{r}') = \frac{u_\nu^*(\vec{r}')}{\lambda - \nu}. \quad (5.7)$$

A função de Green, para ν assumindo valores discretos, será

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_\nu \frac{u_\nu^*(\vec{r}') u_\nu(\vec{r})}{\lambda - \nu} \quad (5.8)$$

e para ν assumindo valores contínuos

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \int d\nu \frac{u_\nu^*(\vec{r}') u_\nu(\vec{r})}{\lambda - \nu}. \quad (5.9)$$

Quando a equação homogênea admite soluções tanto no discreto como no contínuo, a função de Green será dada pela soma dessas duas soluções.

A diferença com o caso unidimensional é que tanto a soma na Eq.(5.8) como a integral na Eq.(5.9) são múltiplas, ou seja, deve-se somar ou integrar sobre todos os números quânticos necessários para se caracterizar as autofunções.

Considere-se o caso da equação de Schrödinger para uma partícula livre que se move em todo o espaço.

A equação diferencial para a função de Green é

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

com $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$.

A equação homogênea é

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - E\right) \Psi(\vec{r}) = 0$$

ou ainda,

$$(\nabla^2 + k^2) \Psi(\vec{r}) = 0$$

com $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

As soluções da equação homogênea são dadas por

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}]$$

onde $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ e $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$. A função de onda está assim caracterizada pelos três números quânticos, k_x, k_y, k_z , onde $k = \frac{p}{\hbar}$ é o número de onda da partícula.

A função de Green será dada pela integral múltipla

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint d^3k' \frac{\exp[i\vec{k}' \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] }{k'^2 - k^2}. \quad (5.10)$$

Essa integral pode ser calculada pelo método de cálculo de resíduos, obtendo-se

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{1}{(4\pi)} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \exp[ik|\vec{r} - \vec{r}'|]. \quad (5.11)$$

No limite $k \rightarrow 0$, tem-se a solução da equação

$$\begin{aligned} \nabla^2 G(\vec{r}, \vec{r}') &= \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \\ G(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \end{aligned}$$

que define a singularidade do operador laplaciano tridimensional na origem.

Para exemplificar o caso em que os números quânticos estão definidos sobre o conjunto discreto de números, considere-se a equação de Helmholtz

$$\nabla^2 u + \lambda^2 u = 0 \quad (5.12)$$

de forma que a função de Green se anule sobre as faces de um cubo de lado a .

A equação homogênea pode ser resolvida por separação de variáveis. Colocando-se um dos vértices do cubo sobre a origem do sistema de coordenadas, as soluções da equação homogênea que satisfazem as condições de contorno são

$$u_{n,m,s}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x\right) \operatorname{sen} \left(\frac{m\pi}{a} y\right) \operatorname{sen} \left(\frac{s\pi}{a} z\right) \quad (5.13)$$

e os autovalores são dados por

$$\nu^2 = \frac{\pi^2}{a^2} (n^2 + m^2 + s^2) \quad (5.14)$$

com $n, m, s \in \{0, 1, 2, \dots\}$.

A função de Green será dada por

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_n \sum_m \sum_s \frac{u_{n,m,s}^*(x', y', z') u_{n,m,s}(x, y, z)}{\lambda^2 - \frac{z^2}{a^2} (n^2 + m^2 + s^2)}. \quad (5.15)$$

Definindo-se um número N por

$$N^2 = n^2 + m^2 + s^2 \quad (5.16)$$

essa soma pode ser rearranjada na seguinte forma

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_N \frac{1}{\lambda^2 - \frac{z^2}{a^2} N^2} \sum_n \sum_m \sum_s u_{n,m,s}^*(x', y', z') u_{n,m,s}(x, y, z). \quad (5.17)$$

Se os autovalores dessa equação de Helmholtz definem autovalores de energia, essa expressão para a função de Green mostra que seus polos definem os autovalores da energia.

O resíduo da função de Green para $\lambda^2 = \frac{z^2}{a^2} N^2$ é dado agora por

$$\text{Res}_{\lambda^2 = \frac{z^2}{a^2} N^2} G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) = \sum_n \sum_m \sum_s u_{n,m,s}^*(x', y', z') u_{n,m,s}(x, y, z), \quad (5.18)$$

ou seja, não é mais meramente o produto de autofunções, mas sim uma soma de produtos de autofunções, tais que os números quânticos n, m, s , obedecem à condição $n^2 + m^2 + s^2 = N^2$. Essa soma define o que tradicionalmente se chama de matriz densidade.

§ 6. UTILIZAÇÃO DE MÉTODOS UNIDIMENSIONAIS

Para muitas equações diferenciais a derivadas parciais a função de Green pode ser calculada reduzindo-se a um problema unidimensional. Não há uma receita pronta para uma aplicação geral. O processo de resolução depende explicitamente de cada equação diferencial e fundamentalmente da habilidade matemática de quem procura resolvê-la.

A fim de ilustrar esse caso, será determinada a solução da seguinte equação de Helmholtz bidimensional

$$[\nabla^2 + k^2] G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (6.1)$$

tal que a função de Green seja limitada no intervalo $0 \leq r \leq a, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$ e $G(\vec{r}, \vec{r}')|_{r=a} = 0$. Em coordenadas polares no plano a equação será dada por

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + k^2 \right] G(r, r', \varphi, \varphi') = \frac{1}{r} \delta(r - r') \delta(\varphi - \varphi'). \quad (6.2)$$

Pode-se expandir $G(\vec{r}, \vec{r}')$ numa série de Fourier

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{2\pi} \sum_m e^{im\varphi} G_m(r, r', \varphi') \quad (6.3)$$

bem como

$$\delta(\varphi - \varphi') = \frac{1}{2\pi} \sum_m e^{im\varphi - im\varphi'} \quad (6.4)$$

A função $G_m(r, r', \varphi')$ satisfaz a seguinte equação diferencial

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{m^2}{r^2} \right] G_m(r, r', \varphi') = e^{-im\varphi'} \frac{1}{r} \delta(r - r'). \quad (6.5)$$

Dessa maneira, o problema fica reduzido à solução de uma equação unidimensional. Essa equação foi resolvida no § 2 pelo método da variação dos coeficientes¹⁾.

A função de Green será dada por

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \exp[im(\varphi - \varphi')] \frac{J_m(kr)}{J_m(ka)} [J_m(ka)N_m(kr') - J_m(kr')N_m(ka)] \quad (6.6)$$

para $0 \leq r \leq r' \leq a$, onde $J_m(z)$ e $N_m(z)$ são as funções de Bessel de primeira e de segunda espécies, respectivamente. Para $0 \leq r' \leq r \leq a$ basta trocar r por r' nessa expressão.

Pode-se procurar determinar a função $G(\vec{r}, \vec{r}')$ numa expansão em termos das autofunções do operador diferencial. As autofunções que satisfazem as condições de contorno são

$$J_m(kr) \exp(im\varphi)$$

onde $k = \frac{k_{m,s}}{a}$, sendo $k_{m,s}$ os zeros da função de Bessel $J_m(z)$.

Para tal basta se fazer uma expansão de Fourier-Bessel da função $J_m(ka)N_m(kr) - J_m(kr')N_m(ka)$ ²⁾ para se obter a seguinte expressão

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{\pi a^2} \sum_m \sum_s \exp[im(\varphi - \varphi')] \frac{1}{J_{m+1}^2(k_{m,s})} \frac{J_m(k_{m,s}r/a)J_m(k_{m,s}r'/a)}{k^2 - \frac{k_{m,s}^2}{a^2}}. \quad (6.7)$$

Essas expansões sugerem que de partida, ao invés da expansão dada pela Eq.6.3, poder-se-ia ter escrito a expansão de Fourier na forma

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{2\pi} \sum_m \exp[im(\varphi - \varphi')] G_m(r, r'). \quad (6.8)$$

Essa expansão pode ser utilizada, pois a equação original revela uma simetria azimutal. De maneira geral pode-se explorar a simetria da equação diferencial e procurar resolvê-la com a função de Green expandida de forma que a simetria se manifeste claramente. Essas expansões são chamadas de expansões em ondas parciais.

§ 7. EXPANSÃO EM ONDAS PARCIAIS

Para se determinar a função de Green por meio de uma expansão em ondas parciais, deve-se analisar a simetria da equação diferencial. No exemplo discutido no § 6 a simetria era a azimutal e a dependência na componente azimutal era do tipo $e^{im\varphi}$ e portanto permitia a expansão da função de Green na forma da Eq.(6.8).

Quando a simetria é esférica, sabe-se que a parte angular das soluções da equação homogênea é dada pelos harmônicos esféricos, portanto a dependência angular da função de Green também deve depender dessas funções. Pode-se, assim, escrever para $G(\vec{r}, \vec{r}')$ a expansão

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y_l^m(\theta', \varphi') Y_l^m(\theta, \varphi) G_l^m(r, r') \quad (7.1)$$

onde $G_l^m(r, r')$ deve satisfazer a uma equação diferencial radial não homogênea e devido a simetria não depende de m .

Assim,

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \sum_{m=-l}^{+l} Y_l^m(\theta', \varphi') Y_l^m(\theta, \varphi) \right\} G_l(r, r'). \quad (7.2)$$

Lembrando-se que para os harmônicos esféricos vale o seguinte teorema de adição³⁾

$$\sum_{m=-l}^{+l} Y_l^m(\theta', \varphi') Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \gamma) \quad (7.3)$$

com $\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cdot \cos(\varphi - \varphi')$, tem-se

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \gamma) G_l(r, r') \quad (7.4)$$

que é a expressão usual para a expansão em ondas parciais em termos do número quântico de momento angular.

Como exemplo de aplicação dessa expansão, será calculada a função de Green para a equação de Schrödinger para uma partícula livre em coordenadas esféricas, de modo que ela seja regular na origem e no infinito.

Seja a equação

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}').$$

Em coordenadas polares esféricas tem-se

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2} + k^2 \right] G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{r^2} \delta(r - r') \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\varphi - \varphi').$$

onde L^2 é o quadrado do operador de momento angular.

Escrevendo-se

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y_l^m(\theta', \varphi') Y_l^m(\theta, \varphi) G_l(r, r')$$

$$\delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\varphi - \varphi') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y_l^m(\theta', \varphi') Y_l^m(\theta, \varphi),$$

a função de Green radial $G_l(r, r')$ satisfaz à seguinte equação

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] G_l(r, r') = \frac{1}{r^2} \delta(r - r')$$

que pode ser calculada por qualquer um dos métodos unidimensionais.

Aplicando-se, por exemplo, o método de Sturm-Liouville²⁾, a função de Green radial é dada por

$$G_l(r, r') = k J_l(kr_<) N_l(kr_>)$$

onde $J_l(kr)$ é a função esférica de Bessel, regular na origem e $N_l(kr)$ é a esférica de Bessel de segunda espécie, regular no infinito.

Assim

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{k}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \gamma) J_l(kr_<) N_l(kr_>).$$

A fim de comparar com o resultado obtido no § 5 deve-se realizar essa soma. Para isso pode-se escrevê-la da seguinte forma, para $r' > r$

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{k}{4\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \gamma) J_s(kr) N_s(kr') \delta_{s,l}.$$

Escrevendo-se $\delta_{s,l}$ numa representação integral

$$\delta_{s,l} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp[i(s-l)\omega] d\omega$$

pode-se separar as duas somas

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{k}{4\pi} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \gamma) e^{-il\omega} \sum_{s=0}^{\infty} J_s(kr) N_s(kr') e^{is\omega}.$$

Usando-se o teorema de Graff³⁾ para as funções de Bessel, a soma em s é igual a $N_0(z)$, com $z = k|r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \omega|^{1/2}$. A soma em l pode ser realizada usando-se a função geratriz³⁾ para os Polinômios de Legendre, obtendo-se

$$\frac{1}{|1 - 2 \cos \gamma t + t^2|^{3/2}}$$

com $t = e^{-i\omega t}$.

Obtém-se assim

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{k}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega \frac{\mathcal{M}_0(z)}{|1 - 2\gamma t + t^2|^{3/2}}$$

Lembrando-se que $\mathcal{M}_0(z) = \frac{-i \cos z}{z}$, essa integral pode ser calculada por resíduos e o resultado final é

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{\exp[ik|\vec{r} - \vec{r}'|]}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

como determinado no § 5.

Como outro exemplo, apresentar-se-á o procedimento de cálculo da função de Green para a equação de Schrödinger para um elétron na presença de um campo magnético constante na direção do eixo dos z . A hamiltoniana é dada por

$$H = \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{p_z^2 + p_y^2}{2\mu} - \omega L_z + \frac{\mu\omega^2}{2} (x^2 + y^2)$$

onde μ é a massa da partícula e ω é a frequência de Larmor, $\omega = \frac{e\hbar B}{2m\mu}$.

A equação diferencial não homogênea para a função de Green é

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

que pode ser resolúvel em coordenadas cilíndricas. Nessas coordenadas a equação diferencial apresenta simetria azimutal e o movimento ao longo do eixo z é conservado, pois $[H, L_z] = 0$ e $[H, p_z] = 0$. Pode-se expandir $G(\vec{r}, \vec{r}')$ na forma

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda z} e^{i\lambda z'} G(\vec{\rho}, \vec{\rho}', \lambda) d\lambda$$

com $\lambda = E - p_z/2\mu$ e $\vec{\rho} \equiv (x, y)$, $\vec{\rho}' \equiv (x', y')$. A função de Green $G(\vec{\rho}, \vec{\rho}', \lambda)$ satisfaz a seguinte equação diferencial

$$(H_{\perp} - \lambda)G(\vec{\rho}, \vec{\rho}', \lambda) = \delta(\vec{\rho} - \vec{\rho}')$$

onde H_{\perp} é a hamiltoniana referente à parte transversal do movimento com relação à direção do campo magnético

$$H_{\perp} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2\mu} + \omega L_z + \frac{\mu\omega^2}{2} (x^2 + y^2).$$

Note-se que, a menos do termo em L_z , tem-se a hamiltoniana de um oscilador harmônico bidimensional. Como $[H_{\perp}, L_z] = 0$, as autofunções de H_{\perp} são

as autofunções de um oscilador harmônico bidimensional em coordenadas polares no plano. A função de Green $G(\vec{\rho}, \vec{\rho}', \lambda)$ pode ser calculada usando a expansão em autofunções dada pela Eq. (5.8)⁴⁾.

Outra forma de se obter $G(\vec{\rho}, \vec{\rho}', \lambda)$ é explorando-se a simetria azimutal, expandindo-a em ondas parciais

$$G(\vec{\rho}, \vec{\rho}', \lambda) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \exp[i m(\varphi - \varphi')] G_m(\rho, \rho', \lambda)$$

onde $G(\rho, \rho', \lambda)$ satisfaz a seguinte equação diferencial

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \rho^2 - \frac{m^2}{\rho^2} - 2(\lambda - m) \right\} G_m(\rho, \rho', \lambda) = \frac{2}{\rho} \delta(\rho - \rho')$$

que pode ser solúvel pelos métodos unidimensionais. A soma em m e a integral em ρ_2 podem ser realizadas⁵⁾, obtendo-se para a função de Green total a seguinte representação integral

$$G(\vec{r}, \vec{r}', E) = \frac{\mu}{4\pi\hbar} \left[\frac{\mu\omega}{2\pi\hbar} \right]^{1/2} \exp \left[i \frac{\mu\omega}{2\hbar} (xy' - x'y) - \frac{\mu\omega}{2\hbar} (\vec{\rho} - \vec{\rho}')^2 \right] \cdot \int_0^1 d\xi \xi^{-E/\hbar\omega} (1 - \xi^2)^{-1} (2|\log \xi|)^{-1/2} \exp \left[-\frac{\mu\omega}{2\hbar} \frac{(z - z')^2}{2|\log \xi|} - \frac{\mu\omega}{2\hbar} \frac{\xi^2}{1 - \xi^2} (\vec{\rho} - \vec{\rho}')^2 \right]$$

COMENTÁRIOS FINAIS

Neste conjunto de artigos procurou-se apresentar métodos de determinação de funções de Green estacionárias de uma maneira bastante geral. Como o assunto é vasto, muitos aspectos das funções de Green não foram abordados, particularmente no que diz respeito ao caráter distribucional dessas funções.

Não se abordou, também, o problema das aplicações dessas funções no contexto da Física, além daquele sobre as informações dinâmicas de um sistema contidas nos polos e resíduos das funções de Green.

As aplicações de função de Green em Física, hoje, vão muito além daquelas de se resolver equações diferenciais não homogêneas como abordadas nestes artigos. As funções de Green tornaram-se indispensáveis em Física Teórica e, como exemplo disso, pode-se citar a evolução atual do estudo teórico sobre espalhamento entre partículas.

Abordar todos esses tópicos redundaria numa série muito longa de artigos, que estaria muito além de nosso escopo original: o de uma revisão pedagógica sobre métodos de cálculo de funções de Green.

Referências Bibliográficas

- (1) J.Bellandi F^o, R.J.M.Covolán, A.B. de Pádua e J.T.S.Paes
Revista de Ensino de Física vol.10, dez/88, 50/66.
- (2) J.Bellandi F^o, R.J.M.Covolán, A.B. de Pádua e J.T.S.Paes
Revista de Ensino de Física vol.11, dez/89, 74/87.
- (3) J.Bellandi F^o
Funções Especiais - Editora Papyrus/Unicamp - Campinas (1985).
- (4) J.Bellandi F^o and E.S.Caetano Neto
J.Phys. 2A,683 (1976).
- (5) J.Bellandi F^o and A.H.Zimmerman
Lett. al N.Cimento 14,520 (1975).