

FELIPE ANDRADE VELOZO

REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DE SISTEMAS DA MECÂNICA QUÂNTICA

Monografia de graduação apresentada ao Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do curso de Ciência da Computação para obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação

LAVRAS
MINAS GERAIS – BRASIL
2008

FELIPE ANDRADE VELOZO

REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DE SISTEMAS DA MECÂNICA QUÂNTICA

Monografia de graduação apresentada ao Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do curso de Ciência da Computação para obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação

Área de Concentração:
Mecânica Quântica

Orientador:
Prof. Dr. Marcelo Silva de Oliveira

Co-Orientadora:
Prof^ª. Verônica Yumi Kataoka

LAVRAS
MINAS GERAIS – BRASIL
2008

**Ficha Catalográfica preparada pela Divisão de Processos Técnico da Biblioteca
Central da UFLA**

Velozo, Felipe Andrade

Representação Gráfica de Sistemas da Mecânica Quântica / Felipe
Andrade Velozo. Lavras – Minas Gerais, 2008

Monografia de Graduação – Universidade Federal de Lavras.
Departamento de Ciência da Computação.

1. Mecânica Quântica 2. Átomo de Hidrogênio 3. Computação Gráfica. I.
VELOZO, F. A. II. Universidade Federal de Lavras. III. Título.

FELIPE ANDRADE VELOZO

REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DE SISTEMAS DA MECÂNICA QUÂNTICA

Monografia de graduação apresentada ao Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do curso de Ciência da Computação para obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação

Aprovada em 19 de junho de 2008

Prof^a. Maria do Carmo Pacheco de Toledo Costa

Prof. Gilson Dallabona

Prof. Thiago de Souza Rodrigues

Prof^a. Verônica Yumi Kataoka (Co-Orientadora)

Prof. Marcelo Silva de Oliveira (Orientador)

LAVRAS
MINAS GERAIS - BRASIL

*“Como é feliz o homem que acha a sabedoria,
o homem que obtém entendimento,
pois a sabedoria é mais proveitosa do que a prata
e rende mais do que o ouro.
É mais preciosa do que rubis;
nada do que você possa desejar se compara a ela.
Na mão direita, a sabedoria lhe garante vida longa;
na mão esquerda, riquezas e honra.
Os caminhos da sabedoria são caminhos agradáveis,
e todas as suas veredas são paz.
A sabedoria é árvore que dá vida a quem a abraça;
quem a ela se apega será abençoado.”*

Provérbios 3.13-18

*Dedico este trabalho a DEUS, que é a força do meu coração
e a minha herança para sempre*

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao prof. Marcelo Silva de Oliveira por sua paciência em me orientar.

Agradeço ao prof. Cristiano Leite de Castro, também pela sua paciência em me orientar.

Agradeço a todo o corpo docente do DEX, que me ajudou a encontrar as soluções.

Agradeço ao corpo docente do DCC que me apoiou e também aos meus colegas.

Sobretudo agradeço a DEUS e a minha família, por tudo.

REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DE SISTEMAS DA MECÂNICA QUÂNTICA

RESUMO

A mecânica quântica trata-se de uma teoria não muito intuitiva. Seus conceitos dão novas interpretações sobre a matéria e seu comportamento, tornando mais difícil sua compreensão do que a mecânica clássica. Este trabalho foi feito procurando ajudar na compreensão da mecânica quântica, buscando os recursos da computação gráfica para representar o átomo de hidrogênio, buscando melhorar a sua concepção.

Palavras-chave: Mecânica Quântica, Átomo de Hidrogênio, Computação Gráfica

GRAPHIC REPRESENTATION OF SYSTEMS OF THE QUANTUM

MECHANICS

ABSTRACT

The quantum mechanics is treated of a theory not very intuitive. Their concepts give new interpretations about the matter and his behavior, turning more difficult his understanding of what the classic mechanics. This work was made trying to help in the understanding of the quantum mechanics, looking for the resources of the graphic computation to represent the atom of hydrogen, looking for to improve his conception.

Keywords: Quantum Mechanics, Hydrogen Atom, Graphic Computation

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	1
2. FUNÇÕES.....	3
3. SÉRIES INFINITAS.....	4
3.1. Série Geométrica.....	4
3.2. Série de Potências da Função Logarítmica.....	4
3.3. Série de Potências da Função Arco Tangente.....	5
3.4. Série de Taylor.....	6
3.4.1. Série de Taylor da Função Exponencial.....	8
3.4.2. Série de Taylor da Função Seno.....	8
3.4.3. Série de Taylor da Função Co-Seno.....	9
3.4.4. Série de Taylor da Função Seno Hiperbólico.....	9
3.4.5. Série de Taylor da Função Co-Seno Hiperbólico.....	9
3.5. Série Binomial.....	10
3.5.1. Série de Potências da Função Arco Seno.....	13
3.5.2. Série de Potências da Função Arco Co-Seno.....	14
4. SÉRIES E INTEGRAIS DE FOURIER.....	15
4.1. Séries de Fourier.....	15
4.1.1. Fórmulas de Euler.....	15
4.1.2. Funções com Período Arbitrário.....	18
4.2. Integral de Fourier.....	19
5. EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS.....	21
5.1. Equações Diferenciais Ordinárias de Primeira Ordem.....	21
5.2. Equações Diferenciais Lineares de Primeira Ordem.....	21
5.3. Equações Diferenciais Lineares Ordinárias.....	22
5.4. Equações Diferenciais Lineares Homogêneas de Segunda Ordem com Coeficientes Constantes.....	22
5.5. Método Geral para Resolver Equações Não Homogêneas.....	24
6. RESOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS EM SÉRIES DE POTÊNCIAS.....	26
6.1. Método da Série de Potências.....	26

6.1.1.	Equação de Legendre. Polinômios de Legendre.....	26
6.1.2.	Polinômio de Legendre Associado.....	31
6.1.3.	Polinômio de Laguerre Associado.....	32
7.	EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS.....	34
7.1.	Corda Vibrante. Equação de Onda Unidimensional.....	34
7.2.	Separação das Variáveis (Método do Produto).....	35
7.3.	Solução para a Equação de Onda Unidimensional.....	36
7.4.	Difusão Unidimensional do Calor.....	38
7.5.	Difusão do Calor em uma Barra Infinita.....	40
8.	OPERADORES.....	42
8.1.	Espaço de Funções.....	42
8.2.	Operadores Lineares.....	42
9.	COMUTADORES.....	43
10.	ÁLGEBRA LINEAR.....	45
10.1.	Espaço Vetorial.....	45
10.2.	Espaço Dual.....	48
10.3.	Produto Interno.....	49
10.4.	Conjunto Ortonormal e o Procedimento Gram-Schmidt.....	52
11.	MECÂNICA QUÂNTICA.....	54
11.1.	Postulados da Mecânica Quântica.....	54
11.2.	A Equação de Schrödinger Independente do Tempo.....	57
11.3.	Normalização.....	58
11.4.	Operadores.....	59
11.5.	Valores Esperados.....	60
11.6.	Interpretação Estatística.....	62
11.6.1.	O Princípio da Incerteza.....	64
11.7.	O Oscilador Harmônico.....	66
11.7.1.	Método Algébrico.....	67
11.8.	O Átomo De Hidrogênio.....	75
12.	COMPUTAÇÃO GRÁFICA.....	81
12.1.	OpenGL (Open Graphics Library)	81
12.1.1.	Padrão na Nomenclatura.....	82
12.1.2.	Desenho de um Polígono.....	82

12.1.3.	Transformações Geométricas.....	83
12.1.4.	Visualização.....	85
13.	METODOLOGIA.....	90
13.1.	Materiais.....	90
13.2.	Desenvolvimento.....	90
14.	RESULTADOS.....	93
15.	CONCLUSÃO.....	102
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	103

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 Corda vibrante.....	35
Figura 2 Projeção paralela ortográfica.....	87
Figura 3 Projeção perspectiva.....	88
Figura 4 Função de onda dos primeiros quatro estados estacionários do oscilador harmônico simples.....	93
Figura 5 Distribuição de probabilidade dos primeiros quatro estados estacionários do oscilador harmônico simples.....	93
Figura 6 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=1, l=0, m=0$	94
Figura 7 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=2, l=0, m=0$	94
Figura 8 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=2, l=1, m=0$	95
Figura 9 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=2, l=1, m=1$	95
Figura 10 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=3, l=0, m=0$	95
Figura 11 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=3, l=1, m=0$	96
Figura 12 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=3, l=1, m=1$	96
Figura 13 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=3, l=2, m=0$	97
Figura 14 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=3, l=2, m=1$	97
Figura 15 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=3, l=2, m=2$	97
Figura 16 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=4, l=0, m=0$	98
Figura 17 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=4, l=1, m=0$	98

Figura 18 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=4, l=1, m=1$	99
Figura 19 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=4, l=2, m=0$	99
Figura 20 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=4, l=2, m=1$	99
Figura 21 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=4, l=2, m=2$	100
Figura 22 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=4, l=3, m=0$	100
Figura 23 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=4, l=3, m=1$	100
Figura 24 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=4, l=3, m=2$	101
Figura 25 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n=4, l=3, m=3$	101

1. INTRODUÇÃO

Este projeto tem por objetivo contribuir na compreensão dos conceitos da mecânica quântica utilizando-se da computação gráfica para elaborar as representações gráficas de sistemas quânticos como o oscilador harmônico simples e o átomo de hidrogênio. Explorando uma área que vem crescendo e que promete revoluções nas mais diversas áreas.

No campo da computação, a Mecânica Quântica surge com estudos para a aplicação em segurança de transmissão de dados, soluções para compressão de dados, paralelização da computação entre outros.

O conteúdo do projeto começa com a descrição de função [LIMA, 1970], no capítulo de Funções, para definir o que será denominado função.

No capítulo de Séries Infinitas [LEITHOLD], dedica-se a estudar formas de se calcular valores de diversas funções por meio de um número finito de operações de adições e multiplicações. Tal método é empregado como técnica computacional.

As Séries de Fourier [KREYSZIG, 1974] apresentam uma forma mais ampla de se representar funções periódicas e também se apresenta como importante ferramenta na solução de equações diferenciais ordinárias e parciais e em problema de valor de contorno. Sua apresentação é necessária para aplicação nas Equações Diferenciais Parciais.

Logo após apresenta-se uma introdução em Equações Diferenciais Ordinárias [KREYSZIG, 1974], para preparar caminho para a apresentação das Equações Diferenciais Parciais. Neste capítulo se encontrará a solução para Equações Diferenciais Ordinárias de Primeira e de Segunda ordens.

O capítulo de Resolução das Equações Diferenciais em Séries de Potências [KREYSZIG, 1974] é apresentado, pois no decorrer das resoluções das equações dos sistemas quânticos, deparar-se-á com funções não elementares, como por exemplo o polinômio de Legendre.

No capítulo de Equações Diferenciais Parciais [KREYSZIG, 1974] é apresentado a modelagem do problema da corda vibrante, aplicando-se logo após o método de separação de variáveis (que auxiliará na solução das equações que descrevem os sistemas quânticos). Apresenta-se a solução de mais dois problemas físicos: difusão unidimensional do calor e a difusão do calor em uma barra infinita.

O capítulo de Operadores [WEISSTEIN] apresenta o que irá se denominar operador neste projeto. Apesar de operador ser um dos sinônimos de função, a função terá a definição apresentada inicialmente, e o operador se restringirá à definição dada por este capítulo.

O capítulo de Comutadores [WEISSTEIN] e o de Álgebra Linear [McMAHON] é para apresentar a notação de Dirac (bras e kets) e apresentar material que servirá de apoio para as interpretações na área da Mecânica Quântica, como por exemplo o Princípio da Incerteza.

Finalmente é apresentada a Mecânica Quântica, com suas interpretações, sua exótica teorização e resultados sem análogos na Física Clássica.

O capítulo de Mecânica Quântica apresenta os postulados [NORBURY], a equação de Schrödinger independente do tempo [GRIFFITHS, 1994], a normalização [GRIFFITHS, 1994] da função de onda, uma discussão sobre a representação de quantidades físicas como operadores [NORBURY], o significado do valor esperado [GRIFFITHS, 1994] das medidas, a interpretação estatística [GRIFFITHS, 1994], o sistema do oscilador harmônico [GRIFFITHS, 1994] e sua solução e finalmente o sistema do átomo de hidrogênio [GRIFFITHS, 1994] com sua solução.

Por último, no capítulo Computação Gráfica [COHEN, 2006], será apresentado comandos utilizados no desenho dos gráficos.

Na discussão dos resultados, mostrar-se-á gráficos relacionados aos sistemas abordados. Para os gráficos relacionados ao átomo de hidrogênio, se mostrará uma comparação entre os obtidos através da programação em OpenGL e os de um software de renome, o Maple. Tal comparação tem a finalidade de verificar os dados obtidos.

2. FUNÇÕES

Uma *função* $f : A \rightarrow B$ trata-se de um conceito matemático que por meio de uma regra, relaciona elementos de um conjunto A (denominado *domínio* da função) a elementos de um outro conjunto B (denominado *contradomínio*).

Tal regra deve relacionar para todo elemento $x \in A$ um único elemento $f(x) \in B$, onde $f(x)$ trata-se do valor obtido através da regra f (ou função) para o determinado valor x pertencente ao conjunto A .

Duas funções $f : A \rightarrow B$ e $g : C \rightarrow D$ são iguais se, e somente se, $A = C$, $B = D$ e $f(x) = g(x)$ para todo $x \in A$.

3. SÉRIES INFINITAS

3.1. Série Geométrica

A soma dos termos de uma progressão geométrica constitui a série geométrica. Tomando como termo inicial $a=1$ e razão da série $r=x$, tem-se a série geométrica

$\sum_{n=0}^{+\infty} x^n$, da qual podemos obter a seguinte fórmula

$$\begin{aligned} (1+x+x^2+x^3+\dots+x^n) \cdot (1-x) &= 1+x+\dots+x^n - (x+x^2+\dots+x^n+x^{n+1}) \\ &= 1-x^{n+1} \end{aligned} \quad (1)$$

$$1+x+x^2+x^3+\dots+x^n = \frac{1-x^{n+1}}{1-x}$$

Para $|x| < 1$, tem-se

$$\lim_{m \rightarrow \infty} x^m = 0, \quad |x| < 1 \quad (2)$$

assim a série geométrica converge para

$$\boxed{\sum_{n=0}^{+\infty} x^n = 1+x+x^2+\dots+x^n+\dots = \frac{1}{1-x}, \quad |x| < 1} \quad (3)$$

3.2. Série de Potências da Função Logarítmica

Utilizando-se da série geométrica (3) e substituindo x por $(-t)$, pode-se chegar à série de potências para a função logarítmica, através da integração, como está apresentado a seguir

$$\int_0^x \frac{dt}{1+t} = [\ln(1+t)]_{t=0}^{t=x} = \ln(1+x) - \ln 1 = \ln(1+x) \quad (4)$$

Pode-se integrar a série, da seguinte forma

$$\begin{aligned} \int_0^x \frac{dt}{1+t} &= \int_0^x \left(\sum_{n=0}^{+\infty} (-t)^n \right) dt = \sum_{n=0}^{+\infty} \int_0^x (-1)^n t^n dt \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \left[\frac{t^{n+1}}{n+1} \right]_{t=0}^{t=x} = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{x^{n+1}}{n+1}, \quad |x| < 1 \end{aligned} \quad (5)$$

Igualando (4) e (5), tem-se

$$\boxed{\ln(1+x) = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{x^{n+1}}{n+1}, \quad |x| < 1} \quad (6)$$

A série acima possui dois problemas, o primeiro que só é válida para valores $(-1) < x < 1$, e o segundo é o fato de convergir muito lentamente, por isso, utilizando-se da propriedade de logaritmos

$$\ln a - \ln b = \ln\left(\frac{a}{b}\right) \quad (7)$$

obtem-se a seguinte série, simplesmente criando outra série a partir da que já foi desenvolvida, substituindo x por $(-x)$

$$\begin{aligned} \ln\left(\frac{1+x}{1-x}\right) &= \ln(1+x) - \ln(1-x) \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{x^{n+1}}{n+1} - \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{x^{n+1}}{n+1} \\ &= \left(x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots\right) - \left[(-x) - \frac{(-x)^2}{2} + \frac{(-x)^3}{3} - \frac{(-x)^4}{4} + \dots\right] \\ &= 2 \cdot \left(x + \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} + \frac{x^7}{7} + \dots + \frac{x^{2n+1}}{2n+1} + \dots\right), \quad |x| < 1 \end{aligned} \quad (8)$$

Chega-se a

$$\boxed{\ln y = \ln\left(\frac{1+x}{1-x}\right) = 2 \cdot \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{x^{2n+1}}{2n+1}, \quad y = \frac{1+x}{1-x}, \quad x = \frac{y-1}{y+1}, \quad |x| < 1, \quad y \in \mathbb{R}_+^*} \quad (9)$$

onde y pode assumir qualquer valor.

3.3. Série de Potências da Função Arco Tangente

Utilizando-se da série geométrica (3), substituindo x por $(-t^2)$, tem-se

$$\frac{1}{1+t^2} = 1 - t^2 + t^4 - t^6 + \dots + (-1)^n t^{2n} + \dots, \quad |t^2| < 1 \Leftrightarrow |t| < 1 \quad (10)$$

e integrando (10), tem-se

$$\int_0^x \frac{dt}{1+t^2} = [\operatorname{arc\,tg} t]_{t=0}^{t=x} = \operatorname{arc\,tg} x - \operatorname{arc\,tg} 0 = \operatorname{arc\,tg} x, \quad |t| < 1 \Leftrightarrow |x| < 1 \quad (11)$$

$$\int_0^x \frac{dt}{1+t^2} = \int_0^x \left[\sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n t^{2n} \right] dt = \sum_{n=0}^{+\infty} \int_0^x (-1)^n t^{2n} dt$$

$$= \left[\sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{t^{2n+1}}{2n+1} \right]_{t=0}^{t=x} = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{2n+1}, \quad |t| < 1 \Leftrightarrow |x| < 1 \quad (12)$$

Igualando (11) e (12), tem-se

$$\boxed{\text{arc tg } x = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{2n+1} = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \frac{x^7}{7} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{2n+1} + \dots, \quad |x| < 1} \quad (13)$$

Para contornar o fato de que em (13) somente são válidos valores de x entre (-1) e 1 , pode-se utilizar a seguinte relação

$$\boxed{\text{arc tg } x = \frac{1}{2} \pi - \text{arc tg} \left(\frac{1}{x} \right)} \quad (14)$$

3.4. Série de Taylor

Resultados de funções polinomiais podem ser obtidos através de uma quantidade finita de operações de adição e multiplicação, contudo, funções como a logarítmica, a exponencial e a trigonométrica, cujos valores não são obtidos com tal facilidade. Para contornar essa dificuldade, pode-se utilizar-se de polinômios cujo comportamento dos valores se aproximam relativamente com relação à função em questão, apresentando diferença suficientemente pequena entre o valor calculado pelo polinômio e o valor dado pela função.

Um dos métodos para se encontrar o polinômio que se aproxima do comportamento da função é a *série de Taylor*¹, assim chamado em homenagem a Brook Taylor.

Seja $f(x)$ é uma função *infinitamente diferenciável* (ou seja, que possui todas as derivadas definidas) no intervalo aberto $(-R, R)$. Escrevendo a função sob a forma de um polinômio, tem-se

$$f(x) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot x^n = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + \dots + c_n x^n + \dots \quad (15)$$

¹ Brook Taylor (1685-1731), matemático inglês, um proponente da Mecânica Newtoniana e notável por suas contribuições no desenvolvimento do cálculo.

Diferenciando-a sucessivamente, tem-se

$$\frac{df}{dx} = 0 + 1 \cdot c_1 + 2 \cdot c_2 x + 3 \cdot c_3 x^2 + 4 \cdot c_4 x^3 + 5 \cdot c_5 x^4 + \dots \quad (16)$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = 0 + 0 + 1 \cdot 2 \cdot c_2 + 2 \cdot 3 \cdot c_3 x + 3 \cdot 4 \cdot c_4 x^2 + 4 \cdot 5 \cdot c_5 x^3 + \dots \quad (17)$$

$$\frac{d^3 f}{dx^3} = 0 + 0 + 0 + 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot c_3 + 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot c_4 x + 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot c_5 x^2 + \dots \quad (18)$$

$$\frac{d^4 f}{dx^4} = 0 + 0 + 0 + 0 + 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot c_4 + 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot c_5 x + \dots \quad (19)$$

⋮

Agora, fazendo $x = 0$ tem-se para (15)

$$f(0) = c_0 \quad (20)$$

para (16)

$$\frac{df(0)}{dx} = 1 \cdot c_1 \quad (21)$$

para (17)

$$\frac{d^2 f(0)}{dx^2} = 1 \cdot 2 \cdot c_2 \Leftrightarrow c_2 = \frac{1}{2!} \frac{d^2 f(0)}{dx^2} \quad (22)$$

para (18)

$$\frac{d^3 f(0)}{dx^3} = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot c_3 \Leftrightarrow c_3 = \frac{1}{3!} \frac{d^3 f(0)}{dx^3} \quad (23)$$

para (19)

$$\frac{d^4 f(0)}{dx^4} = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot c_4 \Leftrightarrow c_4 = \frac{1}{4!} \frac{d^4 f(0)}{dx^4} \quad (24)$$

E assim tem-se

$$c_n = \frac{1}{n!} \frac{d^n f(0)}{dx^n}, n \in \mathbb{N} \quad (25)$$

E a série de Taylor toma a forma

$$\boxed{f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n f(0)}{dx^n} x^n = f(0) + \frac{1}{1!} \frac{df(0)}{dx} x + \dots + \frac{1}{n!} \frac{d^n f(0)}{dx^n} x^n + \dots} \quad (26)$$

3.4.1. Série de Taylor da Função Exponencial

Como para a função exponencial a derivada é a própria função, ou seja

$$\frac{d^n(e^x)}{dx^n} = e^x, \forall n \in \mathbb{N} \quad (27)$$

e como para $x = 0$ tem-se

$$e^0 = 1 \quad (28)$$

então chega-se a seguinte série para a função exponencial

$$e^x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots \quad (29)$$

3.4.2. Série de Taylor da Função Seno

Derivando sucessivamente a função seno, tem-se

$$\frac{d(\text{sen } x)}{dx} = \cos x \quad (30)$$

$$\frac{d^2(\text{sen } x)}{dx^2} = -\text{sen } x \quad (31)$$

$$\frac{d^3(\text{sen } x)}{dx^3} = -\cos x \quad (32)$$

$$\frac{d^4(\text{sen } x)}{dx^4} = \text{sen } x \quad (33)$$

Verifica-se uma periodicidade nas derivadas, de tal forma que volta à função de origem, o que torna mais fácil a determinação da série de Taylor. Substituindo $x = 0$, tem-se

$$\begin{aligned} \text{sen}(0) &= 0 \\ \cos(0) &= 1 \end{aligned} \quad (34)$$

assim chega-se a seguinte série para a função seno

$$\text{sen } x = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \dots \quad (35)$$

3.4.3. Série de Taylor da Função Co-Seno

Derivando-se sucessivamente a função co-seno tem-se

$$\begin{aligned}\frac{d(\cos x)}{dx} &= -\operatorname{sen} x, & \frac{d^2(\cos x)}{dx^2} &= -\cos x, \\ \frac{d^3(\cos x)}{dx^3} &= \operatorname{sen} x, & \frac{d^4(\cos x)}{dx^4} &= \cos x\end{aligned}\quad (36)$$

e, substituindo $x = 0$, chega-se à seguinte série

$$\cos x = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} + \dots \quad (37)$$

3.4.4. Série de Taylor da Função Seno Hiperbólico

A função *seno hiperbólico* é dada por

$$\operatorname{senh} x = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \quad (38)$$

e sua série pode ser obtida a partir da substituição da série das funções exponenciais do numerador, fornecendo

$$\operatorname{senh} x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^7}{7!} + \dots + \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \dots \quad (39)$$

3.4.5. Série de Taylor da Função Co-Seno Hiperbólico

A função *co-seno hiperbólico* é dada por

$$\operatorname{cosh} x = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad (40)$$

e procedendo da mesma forma feita para a obtenção da série para seno hiperbólico, tem-se

$$\operatorname{cosh} x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{x^{2n}}{(2n)!} = 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^6}{6!} + \dots + \frac{x^{2n}}{(2n)!} + \dots \quad (41)$$

3.5. Série Binomial

Pode-se expressar a potência $(a+b)^m$ sob a forma

$$\begin{aligned} (a+b)^m &= \sum_{p=0}^m \binom{m}{p} \cdot a^{m-p} \cdot b^p \\ &= a^m + ma^{m-1}b + \frac{m(m-1)}{2!} a^{m-2}b^2 + \frac{m(m-1)(m-2)}{3!} a^{m-3}b^3 + \dots \\ &\quad + \frac{m(m-1)(m-2)\dots(m-p+1)}{p!} a^{m-p} \cdot b^p + \dots + b^m, \end{aligned} \quad (42)$$

$$m \in \mathbb{N}$$

Substituindo na equação (42) $a=1$ e $b=x$ para expressar $(1+x)^m$, onde $m \in \mathbb{R}$, tem-se a chamada *série binomial*, dada por

$$\begin{aligned} (1+x)^m &= 1 + mx + \frac{m(m-1)}{2!} x^2 + \frac{m(m-1)(m-2)}{3!} x^3 + \dots \\ &\quad + \frac{m(m-1)(m-2)\dots(m-n+1)}{n!} x^n + \dots \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{m(m-1)\dots(m-n+1)}{n!} x^n, \end{aligned} \quad (43)$$

$$m \in \mathbb{R}$$

Calculando o raio de convergência para esta série, através do teste da razão, tem-se

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \left| \frac{u_{n+1}}{u_n} \right| < 1 \quad (44)$$

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow +\infty} \left| \frac{u_{n+1}}{u_n} \right| &= \lim_{n \rightarrow +\infty} \left| \frac{\frac{m(m-1)\dots(m-n+1) \cdot [m-(n+1)+1]}{(n+1)!} x^{n+1}}{\frac{m(m-1)\dots(m-n+1)}{n!} x^n} \right| \\ &= \lim_{n \rightarrow +\infty} \left| \frac{m \cdot \dots \cdot (m-n+1) \cdot (m-n)}{(n+1)!} \cdot \frac{n!}{m \cdot \dots \cdot (m-n+1)} \cdot \frac{x^{n+1}}{x^n} \right| \\ &= \lim_{n \rightarrow +\infty} \left| \frac{m-n}{n+1} \right| \cdot |x| = \lim_{n \rightarrow +\infty} \left| \frac{\frac{m-1}{n}}{1 + \frac{1}{n}} \right| \cdot |x| = |x| < 1 \end{aligned} \quad (45)$$

Desta forma, a série converge para valores de $-1 < x < 1$, para qualquer valor de $m \in \mathbb{R}$.
A partir do método seguinte, mostra-se que a série binomial converge para $(1+x)^m$, para o intervalo aberto $(-1, 1)$

$$f(x) = 1 + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{n!} x^n, \quad |x| < 1, \quad m \in \mathbb{R} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} \frac{df(x)}{dx} &= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{n!} \cdot n \cdot x^{n-1} \\ &= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{(n-1)!} \cdot x^{n-1} \\ &= m + \sum_{n=2}^{+\infty} \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{(n-1)!} \cdot x^{n-1}, \quad |x| < 1 \end{aligned} \quad (47)$$

Substituindo em (47) n por $n+1$

$$\begin{aligned} \frac{df(x)}{dx} &= m + \sum_{n+1=2}^{+\infty} \frac{m(m-1)\cdots[m-(n+1)][m-(n+1)+1]}{(n+1)!} x^{(n+1)-1} \\ &= m + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{(n+1)!} \cdot (m-n) \cdot x^n, \quad |x| < 1 \end{aligned} \quad (48)$$

Multiplicando (47) por x , tem-se

$$\begin{aligned} x \cdot \frac{df(x)}{dx} &= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{(n-1)!} \cdot x^n \\ &= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{n}{n} \cdot \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{(n-1)!} \cdot x^n \\ &= \sum_{n=1}^{+\infty} n \cdot \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{n!} \cdot x^n, \quad |x| < 1 \end{aligned} \quad (49)$$

Somando (48) e (49)

$$\begin{aligned} \frac{df(x)}{dx} + x \frac{df(x)}{dx} &= \left[m + \sum_{n=1}^{+\infty} (m-n) \cdot \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{n!} x^n \right] + \\ &\quad + \left[\sum_{n=1}^{+\infty} n \cdot \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{n!} x^n \right] \\ &= m + \sum_{n=1}^{+\infty} m \cdot \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{n!} x^n \\ (1+x) \frac{df(x)}{dx} &= m \left[\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{m(m-1)\cdots(m-n+1)}{n!} x^n \right] = m \cdot f(x), \quad |x| < 1 \end{aligned} \quad (50)$$

$$\frac{df(x)}{f(x)} = \frac{m}{1+x}, \quad |x| < 1 \quad (51)$$

O primeiro membro de (51) é igual a seguinte equação

$$\frac{d}{dx}[\ln f(x)] = \frac{1}{f(x)} \cdot \frac{df(x)}{dx} \quad (52)$$

O segundo membro de (51) é igual a seguinte equação

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}[\ln(1+x)^m] &= \frac{d}{dx}[m \cdot \ln(1+x)] = m \cdot \frac{d}{dx}[\ln(1+x)] \\ &= m \cdot \frac{1}{1+x} \end{aligned} \quad (53)$$

então

$$\begin{aligned} \int \frac{d}{dx}[\ln f(x)] dx &= \int \frac{d}{dx}[\ln(1+x)^m] dx \\ \ln f(x) &= \ln(1+x)^m + C, \quad |x| < 1 \end{aligned} \quad (54)$$

Como em (46), para $x=0$ tem-se

$$f(0) = 1 \quad (55)$$

então

$$\begin{aligned} \ln f(0) &= \ln 1 = 0, \\ \ln(1+0)^m + C &= \ln 1 + C = 0 + C \end{aligned} \quad (56)$$

$$\begin{aligned} \ln f(0) &= \ln 1 + C \\ C &= 0 \end{aligned} \quad (57)$$

logo

$$\begin{aligned} \ln f(x) &= \ln(1+x)^m \\ e^{\ln f(x)} &= e^{\ln(1+x)^m} \\ f(x) &= (1+x)^m \end{aligned} \quad (58)$$

Assim conclui-se que

$$\boxed{(1+x)^m = 1 + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{m \cdot (m-1) \cdot (m-2) \cdot \dots \cdot (m-n+1)}{n!} x^n, \quad m \in \mathbb{R}, \quad |x| < 1} \quad (59)$$

3.5.1. Série de Potências da Função Arco Seno

Utilizando-se da série binomial, substituindo em (59) a variável x por $(-x^2)$ e calculando para $m = (-\frac{1}{2})$, tem-se

$$\begin{aligned}
 (1-x^2)^{-1/2} &= 1 + (-\frac{1}{2})x^2 + \frac{(-\frac{1}{2})(-\frac{1}{2}-1)}{2!}x^4 + \frac{(-\frac{1}{2})(-\frac{1}{2}-1)(-\frac{1}{2}-2)}{3!}x^6 + \dots \\
 &\quad + \frac{(-\frac{1}{2})(-\frac{1}{2}-1)(-\frac{1}{2}-2)(-\frac{1}{2}-3)\dots(-\frac{1}{2}-n+1)}{n!}x^{2n} + \dots \\
 &= 1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{(-\frac{1}{2})(-\frac{3}{2})}{2!}x^4 + \frac{(-\frac{1}{2})(-\frac{3}{2})(-\frac{5}{2})}{3!}x^6 + \dots \\
 &\quad + \frac{(-\frac{1}{2})(-\frac{3}{2})(-\frac{5}{2})\dots(-\frac{2n-1}{2})}{n!}x^{2n} + \dots \tag{60} \\
 &= 1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1 \cdot 3}{2^2 \cdot 2!}x^4 - \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{2^3 \cdot 3!}x^6 + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7}{2^4 \cdot 4!}x^8 \dots \\
 &\quad + (-1)^n \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1)}{2^n \cdot n!}x^{2n} + \dots, \\
 &|x| < 1
 \end{aligned}$$

Trocando x por t e integrado, tem-se

$$\int_0^x \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} = [\text{arc sen } x]_0^x = \text{arc sen } x - \underbrace{\text{arc sen } 0}_{=0} = \text{arc sen } x, \quad |x| < 1 \tag{61}$$

$$\begin{aligned}
 \int_0^x \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} &= \int_0^x \left[1 + \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1)}{2^n n!} t^{2n} \right] dt \\
 &= \int_0^x dt + \sum_{n=1}^{+\infty} \int_0^x (-1)^n \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1)}{2^n n!} t^{2n} dt \\
 &= [t]_{t=0}^{t=x} + \left[\sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1)}{2^n n!} \frac{t^{2n+1}}{2n+1} \right]_{t=0}^{t=x} \\
 &= x + \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1)}{2^n n!} \cdot \frac{x^{2n+1}}{2n+1}
 \end{aligned} \tag{62}$$

Igualando o segundo membro de (61) com o segundo membro de (62), tem-se a série de potências para a função arco seno

$$\boxed{\text{arc sen } x = x + \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \cdot \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1)}{2^n n!} \cdot \frac{x^{2n+1}}{2n+1}, \quad |x| < 1} \tag{63}$$

3.5.2. Série de Potências da Função Arco Co-Seno

Utilizando-se da seguinte equação

$$\arccos x = \frac{\pi}{2} - \arcsen x \quad (64)$$

Tem-se a série de potências da função arco co-seno

$$\arccos x = \frac{\pi}{2} - x - \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \cdot \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n-1)}{2^n n!} \cdot \frac{x^{2n+1}}{2n+1}, \quad |x| < 1 \quad (65)$$

4. SÉRIES E INTEGRAIS DE FOURIER

4.1. Séries de Fourier

4.1.1. Fórmulas de Euler

Seja $f(x)$ uma função periódica, que por definição, pode ser representada da seguinte forma

$$f(x+T) = f(x) \quad (66)$$

onde T representa o período da função. A partir de (66) pode-se chegar a seguinte equação

$$\begin{aligned} f(x+2\cdot T) &= f((x+T)+T) = f(x+T) \\ &= f(x) \end{aligned} \quad (67)$$

$$f(x+n\cdot T) = f(x), \quad \forall n \in \mathbb{Z} \quad (68)$$

Supondo que o período de $f(x)$ seja $T = 2\pi$, e supondo a possibilidade de representá-la através da série trigonométrica

$$f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{+\infty} (a_n \cos nx + b_n \operatorname{sen} nx) \quad (69)$$

Começando por determinar o coeficiente a_n , tem-se

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx = \int_{-\pi}^{\pi} \left[a_0 + \sum_{n=1}^{+\infty} (a_n \cos nx + b_n \operatorname{sen} nx) \right] dx \quad (70)$$

$$= a_0 \int_{-\pi}^{\pi} dx + \sum_{n=1}^{+\infty} \left(a_n \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx dx + b_n \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen} nx dx \right)$$

$$a_0 \int_{-\pi}^{\pi} dx = a_0 [x]_{-\pi}^{\pi} = a_0 [\pi - (-\pi)] = a_0 \cdot 2\pi \quad (71)$$

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx dx &= \frac{1}{n} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(nx) (n dx) = \frac{1}{n} [\operatorname{sen} nx]_{-\pi}^{\pi} = \frac{1}{n} \left[\underbrace{\operatorname{sen} n\pi}_{=0} - \underbrace{\operatorname{sen}(-n\pi)}_{=0} \right] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (72)$$

$$\begin{aligned}
\int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen} nx \, dx &= \frac{1}{n} \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen}(nx) (n \, dx) = \frac{1}{n} [-\cos nx]_{-\pi}^{\pi} \\
&= \frac{1}{n} \left\{ -\cos n\pi - \left[\underbrace{-\cos(-n\pi)}_{=\cos n\pi} \right] \right\} = \frac{1}{n} (-\cos n\pi + \cos n\pi) = 0
\end{aligned} \tag{73}$$

Substituindo em (70) os resultados encontrados em (71), (72) e (73), tem-se

$$a_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \, dx \tag{74}$$

Para se determinar o coeficiente a_n , tem-se

$$\begin{aligned}
\int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos mx \, dx &= \int_{-\pi}^{\pi} \left[a_0 + \sum_{n=1}^{+\infty} (a_n \cos nx + b_n \operatorname{sen} nx) \right] \cos mx \, dx \\
&= a_0 \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \, dx}_{=0} + \\
&\quad + \sum_{n=1}^{+\infty} \left(a_n \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \cos mx \, dx + b_n \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen} nx \cos mx \, dx \right), \\
m &\in \mathbb{N}^*
\end{aligned} \tag{75}$$

Partindo para o cálculo de $\int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \cos mx \, dx$ tem-se

$$\begin{aligned}
\int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \cos mx \, dx &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos[(n+m)x] + \cos[(n-m)x]}{2} \, dx \\
&= \frac{1}{2} \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \cos \left[\underbrace{(n+m)x}_{\substack{\in \mathbb{N}^* \\ =0}} \right] \, dx}_{=0} + \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos[(n-m)x] \, dx
\end{aligned} \tag{76}$$

Para $n \neq m$ tem-se

$$n \neq m \Rightarrow \int_{-\pi}^{\pi} \cos \left[\underbrace{(n-m)x}_{\in \mathbb{Z}^*} \right] \, dx = 0 \tag{77}$$

pois $(n-m)$ se torna um número inteiro não nulo, e como em (72), o resultado da integral é nula. Para o caso em que $n = m$, tem-se

$$n = m \Rightarrow \int_{-\pi}^{\pi} \cos \left[\underbrace{(n-m)x}_{=0} \right] \, dx = \int_{-\pi}^{\pi} \underbrace{\cos 0}_{=1} \, dx = [x]_{-\pi}^{\pi} = 2\pi \tag{78}$$

Substituindo na equação (76) os valores encontrados em (77) e (78), tem-se

$$n = m \Rightarrow \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \cos mx \, dx = \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \cos nx \, dx = \frac{1}{2} 2\pi = \pi \tag{79}$$

Agora, calculando a integral $\int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nx \cos mx \, dx$, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nx \cos mx \, dx &= \int_{-\pi}^0 \text{sen } nx \cos mx \, dx + \int_0^{\pi} \text{sen } nx \cos mx \, dx \\ &= -\int_0^{-\pi} \text{sen } nx \cos mx \, dx + \int_0^{\pi} \text{sen } nx \cos mx \, dx \end{aligned} \quad (80)$$

Realizando uma variação de parâmetros

$$x \equiv -u \Rightarrow \begin{cases} \text{sen } nx \equiv \text{sen}[n(-u)] \equiv \text{sen}(-nu) \equiv -\text{sen } nu \\ \cos mx \equiv \cos[m(-u)] \equiv \cos(-mu) \equiv \cos mu \\ x = 0 \Leftrightarrow u = 0 \\ x = -\pi \Leftrightarrow u = \pi \\ dx \equiv -du \end{cases} \quad (81)$$

assim, tem-se

$$\int_{x=0}^{x=-\pi} \text{sen } nx \cos mx \, dx = \int_{u=0}^{u=\pi} (-\text{sen } nu) \cos mu (-du) = \int_0^{\pi} \text{sen } nu \cos mu \, du \quad (82)$$

permitindo, então, que se escreva que

$$\int_0^{-\pi} \text{sen } nx \cos mx \, dx = \int_0^{\pi} \text{sen } nx \cos mx \, dx \quad (83)$$

Substituindo (83) em (80), tem-se que

$$\int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nx \cos mx \, dx = 0 \quad (84)$$

Substituindo na equação (75) os valores encontrados em (79) e em (84), fica determinado o coeficiente a_n

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx \, dx, \quad n \in \mathbb{N}^* \quad (85)$$

Partindo para a determinação do coeficiente b_n , utilizando-se dos resultados já obtidos em (73) e em (84), tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \text{sen } mx \, dx &= \int_{-\pi}^{\pi} \left[a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \text{sen } nx) \right] \text{sen } mx \, dx \\ &= a_0 \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } mx \, dx}_{=0} + \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \text{sen } mx \, dx}_{=0} + b_n \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nx \text{sen } mx \, dx \right), \end{aligned} \quad (86)$$

$m \in \mathbb{N}^*$

Partindo para o cálculo de $\int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nx \text{sen } mx \, dx$, pode-se reescrever da seguinte

forma

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nx \text{sen } mx \, dx &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos[(n-m)x] - \cos[(n+m)x]}{2} \, dx \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos[(n-m)x] \, dx - \frac{1}{2} \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \cos[(n+m)x] \, dx}_{=0} \end{aligned} \quad (87)$$

utilizando-se dos resultados já obtidos anteriormente em (77) e em (79), e procedendo da mesma forma, tem-se

$$n = m \Rightarrow \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nx \text{sen } mx \, dx = \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nx \text{sen } nx \, dx = \pi \quad (88)$$

e assim fica determinado o coeficiente b_n

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \text{sen } nx \, dx, \quad n \in \mathbb{N}^* \quad (89)$$

Substituindo na série trigonométrica (69) os valores dos coeficientes calculados nas equações (74), (85) e (89)

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \, dx + \\ &\quad + \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{+\infty} \left(\cos nx \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx \, dx + \text{sen } nx \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \text{sen } nx \, dx \right), \\ f(x+2\pi) &= f(x) \end{aligned} \quad (90)$$

A série (90) é chamada *série de Fourier*² e as fórmulas dos coeficientes (74), (85) e (89), são chamadas *fórmulas de Euler*³.

4.1.2. Funções com Período Arbitrário

A transição de funções de período 2π para funções de período T qualquer é dada por uma simples mudança de escala. Introduzindo-se uma nova variável de tal maneira que a função $f(t)$ possua período 2π sendo função de x . Fazendo

² Jean Baptiste Fourier (1768 – 1830), matemático francês que contribuiu para a Física Matemática por meio de sua Teoria Analítica do Calor. Seu trabalho também contribuiu grandemente para a teoria de funções de uma variável real.

³ Leonhard Euler (1707 – 1783), matemático e físico suíço, que contribuiu na geometria, no cálculo, na teoria dos números, desenvolveu métodos usados na astronomia e foi um dos fundadores da matemática pura.

$$t = \frac{T}{2\pi} x \Leftrightarrow x = \frac{2\pi}{T} t \quad (91)$$

assim $x = \pm\pi$ corresponde a $t = \pm T/2$, e a série toma a forma

$$\begin{aligned} f(t) &= f\left(\frac{T}{2\pi} x\right) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \operatorname{sen} nx) \\ &= a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{2n\pi t}{T} + b_n \operatorname{sen} \frac{2n\pi t}{T} \right) \end{aligned} \quad (92)$$

e com coeficientes

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) dt \\ a_n &= \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \cos \frac{2n\pi t}{T} dt \\ b_n &= \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \operatorname{sen} \frac{2n\pi t}{T} dt \end{aligned} \quad (93)$$

O intervalo de integração pode ser substituído por qualquer outro com comprimento T .

4.2. Integral de Fourier

As séries de Fourier mostram ser uma ferramenta eficiente para as funções periódicas, mas muitas das funções que aparecem em problemas práticos não são periódicas, é desejável ampliar este método para incluí-las. Ampliando seu período para um comprimento infinito tem-se uma função que não é periódica.

Considerando uma função periódica $f_T(x)$, com período T , tem-se

$$f_T(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos w_n x + b_n \operatorname{sen} w_n x), \quad w_n = \frac{2n\pi}{T} \quad (94)$$

Substituindo os coeficientes (93) e verificando que

$$\Delta w = w_{n+1} - w_n = \frac{2\pi}{T} \Leftrightarrow \frac{2}{T} = \frac{\Delta w}{\pi} \quad (95)$$

pode-se escrever a série de Fourier sob a forma

$$\begin{aligned}
f_T(x) &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) d\xi + \\
&+ \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\cos(w_n x) \Delta w \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \cos w_n \xi d\xi + \right. \\
&\left. + \sin(w_n x) \Delta w \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \sin w_n \xi d\xi \right] \quad (96)
\end{aligned}$$

Fazendo T se aproximar do infinito, Δw se aproximar  de zero, de acordo com a equa o (95), ou seja

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \Delta w = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{T} = 0 \Leftrightarrow \lim_{T \rightarrow \infty} \Delta w = \lim_{\Delta w \rightarrow 0} \Delta w \quad (97)$$

assim, de (96) tem-se

$$\begin{aligned}
f(x) &= \lim_{T \rightarrow \infty} f_T(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) d\xi \right] + \\
&+ \lim_{T \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\cos(w_n x) \Delta w \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \cos w_n \xi d\xi + \right. \right. \\
&\left. \left. + \sin(w_n x) \Delta w \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \sin w_n \xi d\xi \right] \right\} \quad (98) \\
&= 0 + \frac{1}{\pi} \lim_{\Delta w \rightarrow 0} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\cos(w_n x) \Delta w \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \cos w_n \xi d\xi + \right. \\
&\left. + \sin(w_n x) \Delta w \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \sin w_n \xi d\xi \right]
\end{aligned}$$

O somat rio em (98) se transforma numa integral em rela o a w

$$\boxed{f(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left[\cos wx \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \cos w\xi d\xi + \sin wx \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \sin w\xi d\xi \right] dw} \quad (99)$$

que constitui a integral de Fourier. Se $f(x)$ for cont ua em qualquer intervalo finito e possui, para cada ponto, derivadas   esquerda e   direita, e a integral $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| dx$ existir, ent o se pode representar a fun o por uma integral de Fourier

5. EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS

5.1. Equações Diferenciais Ordinárias de Primeira Ordem

Muitas leis físicas aparecem sob a forma de equações diferenciais, por isso sua grande importância na Matemática aplicada a problemas físicos. As equações diferenciais ordinárias são equações que apresentam uma ou mais derivadas em relação à x de uma função y de x não especificada, podendo também apresentar a própria função y , outras funções de x especificadas e constantes.

Uma equação é dita de ordem n se, na equação, a derivada de ordem n de y em relação à x for a derivada de maior ordem encontrada. Uma função $y_1(x)$ é solução de uma equação diferencial num intervalo $a < x < b$ (podendo ser infinito) se for definida e diferenciável em todo o intervalo e se na substituição dela e de suas derivadas na equação diferencial resultar numa identidade.

O principal objetivo da teoria das equações diferenciais é determinar todas as soluções e estudá-las. As equações diferenciais podem ter mais de uma solução, independente de sua ordem, ou até mesmo um número infinito, podem ser representadas unicamente por uma fórmula que envolva uma constante arbitrária c , sendo chamada tal solução como solução geral. Atribuindo valores à constante obtêm-se a chamada solução particular.

5.2. Equações Diferenciais Lineares de Primeira Ordem

Quando uma equação diferencial de primeira ordem pode ser escrita sob a forma

$$\frac{dy(x)}{dx} + f(x) \cdot y(x) = r(x) \quad (100)$$

ela é dita linear. As funções $f(x)$ e $r(x)$ podem ser quaisquer funções.

No caso em que $r(x) \equiv 0$, a equação é dita homogênea, e nos outros casos é dita não homogênea.

A solução da equação diferencial linear homogênea e não homogênea de primeira ordem é dada pela seguinte fórmula

$$y(x) = e^{-\int f(x)dx} \left[\int e^{\int f(x)dx} \cdot r(x) dx + c \right] \quad (101)$$

5.3. Equações Diferenciais Lineares Ordinárias

Existem duas classes em que se podem classificar as equações diferenciais: a das equações lineares e a das não lineares. As lineares são de grande simplicidade havendo para elas métodos já padronizados que abrangem uma grande quantidade de equações, mas as não lineares (de segunda ordem e de ordem superior) são bem mais difíceis. Equações diferenciais de segunda ordem estão presentes em vibrações mecânicas e nos circuitos elétricos.

Uma equação diferencial de segunda ordem é dita linear se puder ser escrita na forma

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + f(x) \cdot \frac{dy(x)}{dx} + g(x) \cdot y(x) \equiv r(x) \quad (102)$$

onde $f(x)$, $g(x)$ e $r(x)$ podem ser quaisquer funções. A equação anterior é uma equação diferencial linear em y e em suas derivadas. Quando $r(x) \equiv 0$, diz-se que a equação diferencial é homogênea. Se $r(x) \neq 0$, então é dita não homogênea.

5.4. Equações Diferenciais Lineares Homogêneas de Segunda Ordem com Coeficientes Constantes

As equações diferenciais lineares de segunda ordem com coeficientes constantes têm aplicação em vibrações mecânicas e também as elétricas, por elas podemos modelar equações que descrevam estas vibrações.

A equação homogênea com coeficientes constantes possui a seguinte forma

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} + a \cdot \frac{dy(x)}{dx} + b \cdot y(x) = 0 \quad (103)$$

onde a e b são constantes.

Lembrando que a solução para a equação diferencial linear homogênea de primeira ordem é

$$y(x) = e^{-\int f(x)dx} \left[\int e^{\int f(x)dx} \cdot r(x) dx + c \right], \quad r(x) \equiv 0 \therefore y(x) = c \cdot e^{-\int f(x)dx} \quad (104)$$

parece natural supor que

$$y(x) = e^{\lambda x} \quad (105)$$

possa ser uma solução para um λ adequado. Substituindo y e suas derivadas

$$\frac{dy(x)}{dx} = \lambda e^{\lambda x}, \quad \frac{d^2y(x)}{dx^2} = \lambda^2 e^{\lambda x} \quad (106)$$

na equação diferencial de segunda ordem chega-se a

$$(\lambda^2 + a\lambda + b)e^{\lambda x} = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 + a\lambda + b = 0 \quad (107)$$

que nada mais é que uma equação do segundo grau que possui as raízes

$$\lambda_1 = \frac{1}{2}(-a + \sqrt{a^2 - 4b}), \quad \lambda_2 = \frac{1}{2}(-a - \sqrt{a^2 - 4b}) \quad (108)$$

Da Álgebra elementar, podem-se ter três casos:

CASO 1 – duas raízes reais distintas λ_1 e λ_2

Neste caso a solução geral é dada por

$$y(x) = c_1 e^{\lambda_1 x} + c_2 e^{\lambda_2 x} \quad (109)$$

CASO 2 – duas raízes complexas conjugadas $\alpha \pm i\beta$

Neste caso a solução geral é obtida transformando a exponencial complexa na série de Taylor, ficando da seguinte forma

$$e^{(\alpha+i\beta)x} = e^{\alpha x} e^{i\beta x},$$

$$e^{i\beta x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\beta)^n}{n!} x^n \quad (110)$$

onde se pode observar expandindo a série da exponencial da parte imaginária $i\beta x$ do número complexo, que é igual à série de Taylor de

$$\cos \beta x + i \operatorname{sen} \beta x \quad (111)$$

e portanto chega-se à seguinte equação

$$e^{(\alpha+i\beta)x} = e^{\alpha x} (\cos \beta x + i \operatorname{sen} \beta x) \quad (112)$$

obtendo assim a solução

$$y(x) = e^{\alpha x} (A \cos \beta x + B \operatorname{sen} \beta x) \quad (113)$$

onde A e B são constantes arbitrárias.

CASO 3 – uma raiz dupla real λ

Neste caso chega-se, de início, a uma única solução

$$y_1(x) = e^{\lambda x}, \quad \lambda = -\frac{a}{2} \quad (114)$$

Para determinar outra solução $y_2(x)$ pode-se aplicar o método de variação dos parâmetros, partindo de

$$y_2(x) = u(x) \cdot y_1(x), \quad y_1(x) = e^{-ax/2} \quad (115)$$

chega-se à outra solução

$$y_2(x) = x e^{\lambda x}, \quad \lambda = -\frac{a}{2} \quad (116)$$

5.5. Método Geral para Resolver Equações Não Homogêneas

Considerando a equação

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + f(x) \frac{dy}{dx} + g(x) y = r(x) \quad (117)$$

supondo que f , g e r sejam contínuas sobre o intervalo I .

Seja a equação homogênea

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + f(x) \frac{dy}{dx} + g(x) y = 0 \quad (118)$$

com solução geral sobre I

$$y_h(x) = c_1 y_1(x) + c_2 y_2(x) \quad (119)$$

O método substitui as constantes c_1 e c_2 por funções $u(x)$ e $v(x)$ dando

$$y_p(x) = u(x)y_1(x) + v(x)y_2(x) \quad (120)$$

que derivando tem-se

$$\frac{dy_p}{dx} = \frac{du}{dx}y_1 + u\frac{dy_1}{dx} + \frac{dv}{dx}y_2 + v\frac{dy_2}{dx} \quad (121)$$

Fazendo

$$\frac{du}{dx}y_1 + \frac{dv}{dx}y_2 = 0 \quad (122)$$

e assim tem-se

$$\frac{dy_p}{dx} = u\frac{dy_1}{dx} + v\frac{dy_2}{dx}, \quad \frac{d^2y_p}{dx^2} = \frac{du}{dx}\frac{dy_1}{dx} + u\frac{d^2y_1}{dx^2} + \frac{dv}{dx}\frac{dy_2}{dx} + v\frac{d^2y_2}{dx^2} \quad (123)$$

que substituindo em (117) e levando em consideração (118), chega-se a

$$\begin{cases} \frac{du}{dx}\frac{dy_1}{dx} + \frac{dv}{dx}\frac{dy_2}{dx} = r \\ \frac{du}{dx}y_1 + \frac{dv}{dx}y_2 = 0 \end{cases} \quad (124)$$

Resolvendo o sistema chega-se a

$$\frac{du}{dx} = -\frac{y_2r}{y_1\frac{dy_2}{dx} - \frac{dy_1}{dx}y_2}, \quad \frac{dv}{dx} = \frac{y_1r}{y_1\frac{dy_2}{dx} - \frac{dy_1}{dx}y_2} \quad (125)$$

Integrando obtém-se

$$u = -\int \frac{y_2r}{y_1\frac{dy_2}{dx} - \frac{dy_1}{dx}y_2} dx, \quad v = \int \frac{y_1r}{y_1\frac{dy_2}{dx} - \frac{dy_1}{dx}y_2} dx \quad (126)$$

e assim chega-se à solução geral

$$y(x) = c_1y_1(x) + c_2y_2(x) - y_1 \int \frac{y_2r}{y_1\frac{dy_2}{dx} - \frac{dy_1}{dx}y_2} dx + y_2 \int \frac{y_1r}{y_1\frac{dy_2}{dx} - \frac{dy_1}{dx}y_2} dx \quad (127)$$

6. RESOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS EM SÉRIES DE POTÊNCIAS

A solução de equações diferenciais homogêneas lineares com coeficientes constantes pode ser obtida através de métodos algébricos, a qual apresenta como solução, funções elementares já conhecidas do cálculo. Mas em equações diferenciais cujos coeficientes são variáveis, pode-se chegar a funções não elementares, e é o que ocorre com equações importantes das áreas da Física.

Para a obtenção da solução, emprega-se o *método da série de potências*, o qual apresenta a solução em forma de série de potências.

6.1. Método da Série de Potências

Teorema 1: Escrevendo-se uma equação diferencial sob a forma

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + f(x) \cdot \frac{dy(x)}{dx} + g(x) \cdot y(x) = r(x) \quad (128)$$

e se as funções $f(x)$, $g(x)$ e $r(x)$ forem analíticas em $x = a$, ou seja, se elas podem ser representadas através de uma série de potências de $(x - a)$ e raio de convergência $R > 0$, então toda a solução $y(x)$ da equação diferencial também é analítica em $x = a$, e dessa forma, pode ser representada por uma série de potências de $(x - a)$ e de raio de convergência $R > 0$.

6.1.1. Equação de Legendre. Polinômios de Legendre

A equação diferencial de Legendre⁴ é dada por

$$(1 - x^2) \cdot \frac{d^2 y(x)}{dx^2} - 2x \cdot \frac{dy(x)}{dx} + n \cdot (n + 1) \cdot y(x) = 0, \quad n \in \mathbb{R} \quad (129)$$

podendo ser escrita também da seguinte forma

⁴ Adrien Marie Legendre (1752 – 1833), matemático francês cujo distinto trabalho em integrais elípticas proveu ferramentas analíticas básicas para a Física Matemática.

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \cdot \frac{dy(x)}{dx} \right] + n \cdot (n+1) \cdot y(x) = 0, \quad n \in \mathbb{R} \quad (130)$$

Escrevendo a equação (129) sob a forma da equação (128)

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} - \frac{2x}{1-x^2} \cdot \frac{dy(x)}{dx} + \frac{n \cdot (n+1)}{1-x^2} \cdot y(x) = 0 \quad (131)$$

verifica-se que os coeficientes são analíticos em $x=0$, podendo-se aplicar então o método da série de potências, a começar por substituir

$$y(x) = \sum_{m=0}^{+\infty} c_m x^m, \quad \frac{dy(x)}{dx} = \sum_{m=1}^{+\infty} m \cdot c_m x^{m-1}, \quad \frac{d^2 y(x)}{dx^2} = \sum_{m=2}^{+\infty} m \cdot (m-1) \cdot c_m x^{m-2} \quad (132)$$

na equação diferencial, obtendo-se

$$(1-x^2) \sum_{m=2}^{+\infty} m(m-1) c_m x^{m-2} - 2x \sum_{m=1}^{+\infty} m c_m x^{m-1} + n(n+1) \sum_{m=0}^{+\infty} c_m x^m = 0 \quad (133)$$

$$\sum_{m=2}^{+\infty} m(m-1) c_m x^{m-2} - \sum_{m=2}^{+\infty} m(m-1) c_m x^m - 2 \sum_{m=1}^{+\infty} m c_m x^m + n(n+1) \sum_{m=0}^{+\infty} c_m x^m = 0 \quad (134)$$

Substituindo $(m-2)$ por m e reescrevendo $\sum_{m=2}^{+\infty} m(m-1) c_m x^{m-2}$ para

$\sum_{m=0}^{+\infty} (m+2)(m+1) c_{m+2} x^m$ e substituindo em (134), tem-se

$$0 = \sum_{m=0}^{+\infty} (m+2)(m+1) c_{m+2} x^m - \sum_{m=2}^{+\infty} m(m-1) c_m x^m - 2 \sum_{m=1}^{+\infty} m c_m x^m + n(n+1) \sum_{m=0}^{+\infty} c_m x^m \quad (135)$$

$$0 = \left[2 \cdot 1 c_2 + 3 \cdot 2 c_3 x + \sum_{m=2}^{+\infty} (m+2)(m+1) c_{m+2} x^m \right] - \sum_{m=2}^{+\infty} m(m-1) c_m x^m + (-2) \cdot \left[1 c_1 x + \sum_{m=2}^{+\infty} m c_m x^m \right] + n(n+1) \left[c_0 + c_1 x + \sum_{m=2}^{+\infty} c_m x^m \right]$$

$$0 = [2c_2 + n(n+1)c_0] + \{6c_3 + [-2 + n(n+1)]c_1\} x + \sum_{m=2}^{+\infty} \{(m+2)(m+1)c_{m+2} + [-m(m-1) - 2m + n(n+1)]c_m\} x^m \quad (136)$$

Para que esta série seja nula, todos os seus coeficientes devem ser nulos, ou seja

$$2c_2 + n(n+1)c_0 = 0 \quad (137)$$

$$6c_3 + [-2 + n(n+1)]c_1 = 0 \quad (138)$$

$$(m+2)(m+1)c_{m+2} + [-m(m-1) - 2m + n(n+1)]c_m = 0, \quad m \in \mathbb{N}, \quad m \geq 2 \quad (139)$$

De (137) tem-se

$$c_2 = -\frac{n(n+1)}{2}c_0 \quad (140)$$

De (138) tem-se

$$c_3 = -\frac{-2+n(n+1)}{6}c_1 \quad (141)$$

Verifica-se que (139) também representa (140) (com $m = 0$) e (141) (com $m = 1$).

De (139), pode-se reescrever o coeficiente que multiplica a constante c_m da seguinte forma

$$\begin{aligned} -m(m-1) - 2m + n(n+1) &= -m^2 + m - 2m + n^2 + n \\ &= -m^2 - m + n^2 + n \\ &= -m^2 - m \underbrace{-mn + mn}_{=0} + n^2 + n \\ &= -m(n+m+1) + n(n+m+1) \\ &= (n-m) \cdot (n+m+1) \end{aligned} \quad (142)$$

Substituindo (142) em (139) tem-se

$$(m+2)(m+1)c_{m+2} - (n-m)(n+m+1)c_m = 0, \quad m \in \mathbb{N}, \quad m \geq 2 \quad (143)$$

$$c_{m+2} = -\frac{(n-m)(n+m+1)}{(m+2)(m+1)}c_m, \quad m \in \mathbb{N}, \quad m \geq 2 \quad (144)$$

A fórmula de recorrência (144) possibilita determinar qualquer coeficiente em termos de c_0 ou c_1 (sendo eles arbitrários)

$$c_2 = -\frac{n(n+1)}{2}c_0, \quad c_3 = -\frac{(n-1)(n+2)}{3 \cdot 2}c_1 = -\frac{(n-1)(n+2)}{3!}c_1 \quad (145)$$

$$\begin{aligned} c_4 &= -\frac{(n-2)(n+3)}{4 \cdot 3}c_2 = -\frac{(n-2)(n+3)}{4 \cdot 3} \cdot \left[-\frac{n(n+1)}{2!}c_0 \right] \\ &= \frac{(n-2)(n+3)n(n+1)}{4!}c_0 \end{aligned} \quad (146)$$

$$\begin{aligned} c_5 &= -\frac{(n-3)(n+4)}{5 \cdot 4}c_3 = -\frac{(n-3)(n+4)}{5 \cdot 4} \cdot \left[-\frac{(n-1)(n+2)}{3!}c_1 \right] \\ &= \frac{(n-3)(n+4)(n-1)(n+2)}{5!}c_1 \end{aligned} \quad (147)$$

A solução da equação diferencial de Legendre pode ser dada através de uma série de potências com coeficientes baseados em c_0 e em c_1

$$\begin{aligned}
y(x) &= c_0 + c_1 x - \frac{n(n+1)}{2!} c_0 x^2 - \frac{(n-1)(n+2)}{3!} c_0 x^3 + \\
&+ \frac{(n-2)n(n+1)(n+3)}{4!} c_0 x^4 + \frac{(n-3)(n-1)(n+2)(n+4)}{5!} c_1 x^5 + \dots \quad (148) \\
&= c_0 \cdot y_0(x) + c_1 \cdot y_1(x)
\end{aligned}$$

Tanto $y_0(x)$ como $y_1(x)$, possuem raio de convergência $-1 < x < 1$. Em casos no qual n é um número inteiro não negativo ($n \in \mathbb{N}$), salienta-se dois casos:

- Quando n é par, a série $y_0(x)$ (série com os termos baseados no coeficiente c_0), a partir de valores de m igual ou maiores que n , seus coeficientes tornam-se nulos, devido ao fator $(n-m)$, se tornando assim um polinômio de grau n .
- Quando n é ímpar, a série $y_1(x)$ (série com os termos baseados no coeficiente c_1), a partir de valores de m igual ou maiores que n , seus coeficientes tornam-se nulos, devido ao fator $(n-m)$, se tornando assim um polinômio de grau n .

Considerando os casos acima, em que $n \in \mathbb{N}$, e considerando somente o polinômio que se reduz ao grau n (fazendo com que o coeficiente sobre o qual o outro polinômio é formulado, seja igual a zero), pode-se então escrever os coeficientes em termos de c_n

$$c_m = -\frac{(m+2)(m+1)}{(n-m)(n+m+1)} c_{m+2} \quad (149)$$

Substituindo em (149) m por $(n-2)$, tem-se

$$c_{n-2} = -\frac{n(n-1)}{2(2n-1)} c_n \quad (150)$$

sendo agora o coeficiente c_n o coeficiente arbitrário. Geralmente é feita a seguinte escolha para c_n , visando a tornar todos os polinômios com valor 1 quando $x = 1$

$$\begin{aligned}
c_n &= \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n-2)(2n-1)(2n)}{2^n n! n!} \\
&= \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n-2)(2n-1) \cdot (2n)}{2^n 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (n-1) \cdot n \cdot n!} \quad (151) \\
&= \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n-2)(2n-1)(2n)}{(2 \cdot 1)(2 \cdot 2)(2 \cdot 3) \cdot \dots \cdot 2(n-1) \cdot 2n \cdot n!} = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n-1)}{n!}, \quad n \in \mathbb{N}
\end{aligned}$$

$$n = 0 \Rightarrow c_0 = \frac{(2 \cdot 0)!}{2^0 (0!)^2} = \frac{1}{1 \cdot 1^2} = 1 \quad (152)$$

Substituindo a escolha de c_n em (151) na equação (149), determina-se os coeficientes

$$\begin{aligned} c_{n-2} &= -\frac{n(n-1)}{2(2n-1)} c_n = -\frac{n(n-1)}{2(2n-1)} \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} \\ &= -\frac{n(n-1)[2n(2n-1)(2n-2)!]}{2(2n-1)2^n [n(n-1)(n-2)!][n(n-1)!]} \\ &= -\frac{(2n-2)!}{2^n (n-2)!(n-1)!} \end{aligned} \quad (153)$$

$$\begin{aligned} c_{n-4} &= -\frac{(n-2)(n-3)}{4(2n-3)} c_{n-2} = -\frac{(n-2)(n-3)}{4(2n-3)} \left[-\frac{(2n-2)!}{2^n (n-2)!(n-1)!} \right] \\ &= \frac{(n-2)(n-3)[(2n-2)(2n-3)(2n-4)!]}{4(2n-3)2^n [(n-2)(n-3)(n-4)!][(n-1)(n-2)!]} \\ &= \frac{(n-2)(n-3)[2(n-1)(2n-3)(2n-4)!]}{4(2n-3)2^n [(n-2)(n-3)(n-4)!][(n-1)(n-2)!]} \\ &= \frac{(2n-4)!}{2 \cdot 2^n (n-4)!(n-2)!} \end{aligned} \quad (154)$$

$$\begin{aligned} c_{n-6} &= -\frac{(n-4)(n-5)}{6(2n-5)} c_{n-4} = -\frac{(n-4)(n-5)}{6(2n-5)} \left[\frac{(2n-4)!}{2 \cdot 2^n (n-4)!(n-2)!} \right] \\ &= -\frac{(n-4)(n-5)[(2n-4)(2n-5)(2n-6)!]}{6(2n-5)2 \cdot 2^n [(n-4)(n-5)(n-6)!][(n-2)(n-3)!]} \\ &= -\frac{(n-4)(n-5)[2(n-2)(2n-5)(2n-6)!]}{6(2n-5)2 \cdot 2^n [(n-4)(n-5)(n-6)!][(n-2)(n-3)!]} \\ &= -\frac{(2n-6)!}{3 \cdot 2 \cdot 2^n (n-6)!(n-3)!} = -\frac{(2n-6)!}{3!2^n (n-6)!(n-3)!} \end{aligned} \quad (155)$$

$$c_{n-2m} = (-1)^m \frac{(2n-2m)!}{2^n m!(n-2m)!(n-m)!}, \quad m \in \mathbb{N}, \quad m \leq \frac{n}{2}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (156)$$

Daí, tem-se a seguinte solução para a equação diferencial de Legendre

$$\boxed{P_n(x) = \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^m \frac{(2n-2m)!}{2^n m!(n-2m)!(n-m)!} x^{n-2m}, \quad n \in \mathbb{N},} \quad (157)$$

$$\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor = j \Leftrightarrow j \leq \frac{n}{2} < j+1, \quad j \in \mathbb{Z}$$

a equação (157) é chamada *polinômio de Legendre de grau n*.

O polinômio de Legendre também pode ser escrito da seguinte forma

$$P_n(x) = \frac{n}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (158)$$

denominada de *fórmula de Rodrigues*. Tal fórmula pode ser demonstrada aplicando-se o desenvolvimento binomial de $(x^2 - 1)$ e diferenciando termo a termo para finalmente comparar com (157).

Há também a fórmula de recorrência dada por

$$P_n(x) = \frac{(2n-1)xP_{n-1}(x) - (n-1)P_{n-2}(x)}{n} \quad (159)$$

6.1.2. Polinômio de Legendre Associado

O polinômio de Legendre associado surge como solução da equação diferencial

$$(1-x^2) \frac{d^2 y(x)}{dx^2} - 2x \frac{dy(x)}{dx} + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] y(x) = 0, \quad n \in \mathbb{N}, m \in \mathbb{N} \quad (160)$$

sendo então (129) um caso especial de (160), quando $m = 0$.

A equação (160) possui como solução

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^n n!} \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}} (x^2 - 1)^n, \quad n \in \mathbb{N}, m \in \mathbb{N} \quad (161)$$

denominada *polinômio de Legendre associado*, que pode ser representado pelas fórmulas de recorrência

$$P_n^m(x) = \frac{(2n-1)xP_{n-1}^m(x) - (n+m-1)P_{n-2}^m(x)}{n-m} \quad (162)$$

$$P_n^m(x) = \frac{2(m-1)x}{\sqrt{1-x^2}} P_n^{m-1}(x) - (n-m+2)(n+m-1)P_n^{m-2}(x) \quad (163)$$

6.1.3. Polinômio de Laguerre Associado

A equação diferencial de Laguerre é dada por

$$x \frac{d^2 y(x)}{dx^2} + (1-x) \frac{dy(x)}{dx} + \lambda y(x) = 0 \quad (164)$$

e trata-se de um caso especial da equação diferencial de Laguerre associada, dada por

$$x \frac{d^2 y(x)}{dx^2} + (\nu + 1 - x) \frac{dy(x)}{dx} + \lambda y(x) = 0 \quad (165)$$

Utilizando a expansão em séries de potências, tem-se

$$x \sum_{n=2}^{+\infty} n(n-1) a_n x^{n-2} + (\nu + 1 - x) \sum_{n=1}^{+\infty} n a_n x^{n-1} + \lambda \sum_{n=0}^{+\infty} a_n x^n = 0 \quad (166)$$

$$\sum_{n=2}^{+\infty} n(n-1) a_n x^{n-1} + (\nu + 1) \sum_{n=1}^{+\infty} n a_n x^{n-1} - \sum_{n=1}^{+\infty} n a_n x^n + \lambda \sum_{n=0}^{+\infty} a_n x^n = 0 \quad (167)$$

$$\sum_{n=1}^{+\infty} (n+1) n a_{n+1} x^n + (\nu + 1) \sum_{n=0}^{+\infty} (n+1) a_{n+1} x^n - \sum_{n=1}^{+\infty} n a_n x^n + \lambda \sum_{n=0}^{+\infty} a_n x^n = 0 \quad (168)$$

$$[(\nu + 1) a_1 + \lambda a_0] + \sum_{n=1}^{+\infty} \{[(n+1)n + (\nu + 1)(n+1)] a_{n+1} + (\lambda - n) a_n\} x^n = 0 \quad (169)$$

Calculando os coeficientes, tem-se

$$a_1 = -\frac{\lambda}{\nu + 1} a_0 \quad (170)$$

$$a_{n+1} = \frac{n - \lambda}{(n+1)(n + \nu + 1)} a_n, \quad n > 1 \quad (171)$$

Observe que a fórmula (171) para $n = 0$ resulta em (170), ou seja, é válida para todo n inteiro não-negativo (isto é, inteiros positivos e nulos também). Escrevendo os coeficientes em função de a_0 , tem-se

$$a_2 = -\frac{\lambda - 1}{2(\nu + 2)} a_1 = \frac{\lambda - 1}{2(\nu + 2)} \frac{\lambda}{\nu + 1} a_0 \quad (172)$$

$$a_3 = -\frac{\lambda-2}{3(\nu+3)}a_2 = -\frac{\lambda-2}{3(\nu+3)}\frac{\lambda-1}{2(\nu+2)}\frac{\lambda}{\nu+1}a_0 \quad (173)$$

$$a_4 = -\frac{\lambda-3}{4(\nu+4)}a_3 = \frac{\lambda-3}{4(\nu+4)}\frac{\lambda-2}{3(\nu+3)}\frac{\lambda-1}{2(\nu+2)}\frac{\lambda}{\nu+1}a_0 \quad (174)$$

$$a_n = (-1)^n \cdot \frac{\lambda \cdot (\lambda-1) \cdot \dots \cdot (\lambda-n+1)}{[n \cdot (n-1) \cdot \dots \cdot 1] \cdot [(\nu+1) \cdot (\nu+2) \cdot \dots \cdot (\nu+n)]} a_0 \quad (175)$$

Substituindo os coeficiente, chega-se a

$$y(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \cdot \frac{\lambda \cdot (\lambda-1) \cdot \dots \cdot (\lambda-n+1)}{n! [(\nu+1) \cdot (\nu+2) \cdot \dots \cdot (\nu+n)]} a_0 x^n \quad (176)$$

Para um λ inteiro e positivo, a série se reduz a um polinômio, conhecido como *polinômio de Laguerre associado*, e no caso de ν ser nulo, tem-se o *polinômio de Laguerre*.

A fórmula de Rodrigues para o polinômio de Laguerre é

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}) \quad (177)$$

e para o polinômio de Laguerre associado é

$$L_n^k(x) = \frac{e^x x^{-k}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+k}) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{n+k}(x) \quad (178)$$

7. EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS

As equações diferenciais parciais são equações que possuem as funções em questão dependendo de duas ou mais variáveis independentes. As equações das ondas, as do calor, a de Laplace são exemplos de equações diferenciais parciais. A ordem da derivada mais elevada é chamada a ordem da equação.

7.1. Corda Vibrante. Equação de Onda Unidimensional

As equações que regem pequenas vibrações transversais de uma corda elástica, que é esticada e tem suas extremidades presas, são exemplos de equações diferenciais parciais. O problema consiste em achar a equação de movimento de uma corda, que inicialmente se encontra esticada de uma dada maneira, e quando liberada entra em vibração. Primeiramente deve-se levar em algumas considerações para simplificar o problema:

1. A densidade da corda é constante durante todo o tempo e ela é perfeitamente elástica, não oferecendo nenhuma resistência à flexão.
2. A tração causada é tão grande que a força gravitacional pode ser desprezada
3. O movimento da corda se restringe a um movimento transversal, em um plano vertical, e a deflexão e o coeficiente angular em qualquer ponto da corda são pequenos em valor absoluto.

Para se obter a equação diferencial considera-se inicialmente uma pequena porção da corda, analisando as forças que atuam sobre ela. As trações são tangentes à curva da corda em cada ponto devido a falta de resistência à flexão. Considerando o trecho de P a Q , verifica-se duas trações em seus extremos. Suas componentes horizontais devem ser iguais pois não há movimento na horizontal, assim a resultante na horizontal é nula, assim, tem-se

$$T_1 \cos \alpha = T_2 \cos \beta = T = \text{constante}$$

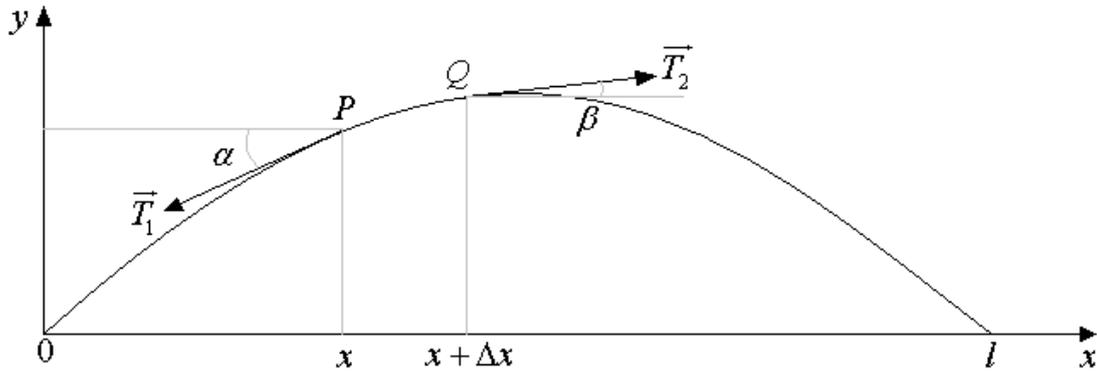


Figura 1 Corda vibrante

Devido ao fato de não haver movimento na horizontal, a resultante das forças será na vertical, ou seja, só haverá aceleração na vertical. Considerando a massa do trecho, que é igual ao produto da densidade ρ da corda pelo comprimento Δx do trecho e as componentes verticais das trações, tem-se

$$\rho \cdot \Delta x \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = T_2 \sin \beta - T_1 \sin \alpha \quad (179)$$

$$\frac{\rho \cdot \Delta x}{T} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{T_2 \sin \beta}{T_2 \cos \beta} - \frac{T_1 \sin \alpha}{T_1 \cos \alpha} = \operatorname{tg} \beta - \operatorname{tg} \alpha \quad (180)$$

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{\partial y(x,t)}{\partial x}, \quad \operatorname{tg} \beta = \frac{\partial y(x + \Delta x, t)}{\partial x} \therefore \quad (181)$$

$$\therefore \frac{\rho}{T} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{\partial y(x + \Delta x, t)}{\partial x} - \frac{\partial y(x, t)}{\partial x} \right]$$

Fazendo $\Delta x \rightarrow 0$, obtém-se a equação diferencial parcial homogênea linear

$$\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2}, \quad c^2 = \frac{T}{\rho} \quad (182)$$

7.2. Separação das Variáveis (Método do Produto)

O método do produto fornece como solução de (182) a seguinte função

$$y(x,t) = F(x)G(t) \quad (183)$$

onde F e G são funções de uma só das duas variáveis. Substituindo suas derivadas parciais chega-se à seguinte equação

$$\frac{1}{c^2 G} \frac{\partial^2 G}{\partial t^2} = \frac{1}{F} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = k = \text{constante} \quad (184)$$

Como se tem um membro com funções que dependem somente de uma variável e outro membro que depende somente da outra variável, tem-se que os dois membros não possam ser iguais a uma função de qualquer das duas variáveis, pois se assim fosse, uma das variáveis dependeria da outra, por isso devem ser iguais a uma constante. Dessa equação retira-se estas duas equações seguintes

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} - kF = 0, \quad \frac{\partial^2 G}{\partial t^2} - c^2 kG = 0 \quad (185)$$

sendo k arbitrário.

7.3. Solução para a Equação de Onda Unidimensional

Tem-se como equação que rege a vibração de uma corda elástica a equação de onda unidimensional

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \quad (186)$$

Observando que as extremidades da corda estão fixa, tem-se duas condições de contorno

$$u(0,t) \equiv 0, \quad u(l,t) \equiv 0 \quad (187)$$

Observando também que a corda pode ser deflexionada de várias maneiras e partir com qualquer velocidade inicial, tem-se duas condições iniciais

$$y(x,0) = f(x), \quad \frac{\partial y(x,0)}{\partial t} = g(x) \quad (188)$$

A partir dessas equações e do método do produto determina-se F e G de modo que a solução satisfaça as condições, assim

$$y(0,t) \equiv 0 \equiv F(0)G(t), \quad y(l,t) \equiv 0 \equiv F(l)G(t) \quad (189)$$

e assim chega-se à solução geral

$$F(x) = A \cos px + B \sin px, \quad k = -p^2 \quad (190)$$

onde k , que veio do método do produto, é negativo, evidenciado pela equação $k = -p^2$, de outra maneira chegar-se-ia a soluções desinteressantes. A partir das condições de contorno tem-se

$$\begin{aligned} F(0) = A = 0 &\Rightarrow F(x) = B \operatorname{sen} px \\ F(l) = B \operatorname{sen} pl = 0 &\Rightarrow pl = n\pi, \quad n \in \mathbb{Z} \end{aligned} \quad (191)$$

$$p = \frac{n\pi}{l} \quad \therefore k = -p^2 = -\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2$$

e assim obtém-se um número infinito de soluções, devido a periodicidade da função seno. Substituindo o valor de k encontrado em $\ddot{G} - c^2 k G = 0$ para determinar G , tem-se a solução geral

$$G_n(t) = B_n \cos \frac{cn\pi t}{l} + B_n^* \operatorname{sen} \frac{cn\pi t}{l} \quad (192)$$

encontrando

$$y_n(x, t) = \left(B_n \cos \frac{cn\pi t}{l} + B_n^* \operatorname{sen} \frac{cn\pi t}{l} \right) B \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} \quad (193)$$

que são *funções características* ou *próprias*, ou ainda *autofunções*, e os valores $cn\pi/l$ são *valores característicos* ou *próprios*, ou ainda *autovalores*. O conjunto dos autovalores constitui o *espectro*.

Verifica-se que cada y_n constitui um movimento harmônico de frequência $cn/2l$. Este movimento constitui o *modo normal* ou *tom normal* de ordem n . Obviamente qualquer dessas soluções simples não conseguirá atender às condições iniciais, mas como a soma de um número de solução constitui também uma solução, pode-se obter a solução que satisfaça às condições iniciais somando todas as soluções, obtendo assim

$$y(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} y_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(B_n \cos \frac{cn\pi t}{l} + B_n^* \operatorname{sen} \frac{cn\pi t}{l} \right) B \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} \quad (194)$$

e a partir primeira condição inicial, tem-se a série de Fourier

$$y(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \cdot B \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} = f(x) \quad (195)$$

de coeficiente

$$(B_n \cdot B) = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} dx \quad (196)$$

derivando y com relação a t , encontra-se a segunda condição inicial, que é a série de Fourier

$$\begin{aligned}\frac{\partial y(x,0)}{\partial x} &= \left[\sum_{n=1}^{\infty} \left(-B_n \frac{cn\pi}{l} \operatorname{sen} \frac{cn\pi t}{l} + B_n^* \frac{cn\pi}{l} \cos \frac{cn\pi t}{l} \right) B \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} \right]_{t=0} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} B_n^* \cdot B \frac{cn\pi}{l} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} = g(x)\end{aligned}\quad (197)$$

com coeficiente

$$B_n^* \cdot B \frac{cn\pi}{l} = \frac{2}{l} \int_0^l g(x) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} dx \Leftrightarrow B_n^* B = \frac{2}{cn\pi} \int_0^l g(x) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} dx \quad (198)$$

E assim defini-se a solução para a equação diferencial parcial que descreve o movimento de uma corda, com movimento puramente transversal num plano vertical

$$\begin{aligned}y(x,t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \left(B_n \cos \frac{cn\pi t}{l} + B_n^* \operatorname{sen} \frac{cn\pi t}{l} \right) B \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l}, \\ (B_n \cdot B) &= \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} dx, \quad (B_n^* \cdot B) = \frac{2}{cn\pi} \int_0^l g(x) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} dx\end{aligned}\quad (199)$$

7.4. Difusão Unidimensional do Calor

A difusão do calor em um material homogêneo é regida pela seguinte equação

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c^2 \nabla^2 u, \quad c^2 = \frac{K}{\sigma \rho} \quad (200)$$

que em coordenadas cartesianas retangulares é

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (201)$$

onde K é a condutividade térmica, σ o calor específico e ρ a massa específica do corpo. Considerando uma barra de somente uma dimensão, de comprimento l , onde seus extremos estão em $x=0$ e $x=l$ e sua temperatura inicial seja dada por $f(x)$ e que seja isolada lateralmente, tem-se a equação do calor unidimensional

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (202)$$

com condições de contorno

$$u(0,t) \equiv 0, \quad u(l,t) \equiv 0 \quad (203)$$

e condição inicial

$$u(x,0) = f(x) \quad (204)$$

A partir do método do produto, inicia-se pela equação

$$u(x,t) = F(x) \cdot G(t) \quad (205)$$

que substituindo na equação do calor, obtém-se

$$\frac{1}{c^2 G} \frac{\partial G}{\partial t} = \frac{1}{F} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = -p^2 = \text{constante} \quad (206)$$

onde a escolha da constante segue os mesmos motivos da escolha da constante na determinação da equação de onda unidimensional. Prosseguindo, chega-se às seguintes equações

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + p^2 F = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial t} + c^2 p^2 G = 0 \quad (207)$$

que possuem as seguintes soluções gerais

$$F_n(x) = B \text{sen} \frac{n\pi x}{l}, \quad G_n(t) = B_n e^{-(cn\pi/l)^2 t}, \quad n \in \mathbb{N}^* \quad (208)$$

Assim a solução da equação de calor será

$$u_n(x,t) = F_n(x)G_n(t) = B_n B \text{sen} \frac{n\pi x}{l} e^{-(cn\pi/l)^2 t}, \quad n \in \mathbb{N}^* \quad (209)$$

mas esta solução não satisfaz a condição inicial, dessa forma, soma-se todas as soluções para encontrar a solução que a satisfaz, que é

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n B \text{sen} \frac{n\pi x}{l} e^{-(cn\pi/l)^2 t} \quad (210)$$

onde surge a série de Fourier para a condição inicial

$$u(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n B \text{sen} \frac{n\pi x}{l} = f(x) \quad (211)$$

com coeficiente

$$B_n B = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \text{sen} \frac{n\pi x}{l} dx, \quad n \in \mathbb{N}^* \quad (212)$$

obtendo então a solução

$$\boxed{u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n B \text{sen} \frac{n\pi x}{l} e^{-(cn\pi/l)^2 t},} \quad (213)$$

$$B_n \cdot B = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \text{sen} \frac{n\pi x}{l} dx$$

7.5. Difusão do Calor em uma Barra Infinita

Considerando a solução para a equação do calor

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (214)$$

para uma barra unidimensional de comprimento que se estende infinitamente em ambos os sentidos, e que assim somente possuirá a condição inicial

$$u(x, 0) = f(x), \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (215)$$

sendo $f(x)$ a temperatura inicial.

Pelo método do produto, onde $u(x, t) = F(x)G(t)$ obtém-se

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + p^2 F = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial t} + c^2 p^2 G = 0 \quad (216)$$

com soluções

$$F(x) = A \cos px + B \operatorname{sen} px, \quad G(t) = e^{-c^2 p^2 t} \quad (217)$$

sendo A e B arbitrários pode-se considerá-los funções de p . Desta forma obtém-se

$$u(x, t; p) = F \cdot G = [A(p) \cos px + B(p) \operatorname{sen} px] e^{-c^2 p^2 t} \quad (218)$$

Empregando a integral de Fourier, por supostamente $f(x)$ não ser periódica, tem-se

$$u(x, t) = \int_0^\infty u(x, t; p) dp = \int_0^\infty [A(p) \cos px + B(p) \operatorname{sen} px] e^{-c^2 p^2 t} dp \quad (219)$$

que será uma solução se existir a integral e for possível derivar uma vez em relação a t e duas em relação a x . Então a condição inicial será dada por

$$u(x, 0) = \int_0^\infty [A(p) \cos px + B(p) \operatorname{sen} px] dp = f(x) \quad (220)$$

e a partir da integral de Fourier, tem-se que os coeficientes são

$$A(p) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty f(\xi) \cos p\xi d\xi, \quad B(p) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty f(\xi) \operatorname{sen} p\xi d\xi \quad (221)$$

Escrevendo a integral de Fourier resultante da seguinte forma

$$u(x,0) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \cos(px - p\xi) d\xi dp \quad (222)$$

e assim obtém-se

$$u(x,t) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \left[\int_0^{\infty} e^{-c^2 p^2 t} \cos(px - p\xi) dp \right] d\xi \quad (223)$$

Resolvendo a integral interior e substituindo sua solução chega-se a equação

$$\boxed{u(x,t) = \frac{1}{2c\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4c^2 t}} d\xi} \quad (224)$$

Se $f(x)$ for limitada para todo valor de x e integrável em todo intervalo finito, a equação acima satisfará à condição inicial e será solução da equação do calor.

8. OPERADORES

Um operador $A: f^{(n)}(I) \mapsto f(I)$ associa para toda função $f \in f^{(n)}(I)$ uma função $A(f) \in f(I)$, ou seja, é o mapeamento entre dois espaços de funções.

8.1. Espaço de Funções

Seja $f(I)$ um conjunto de todas funções contínuas definidas sobre um mesmo intervalo I . Sendo $f^{(n)}(I)$ o conjunto de todas as funções pertencentes a $f(I)$ com derivadas de ordem n contínuas sobre o intervalo I . Defini-se como espaço de funções como um *espaço vetorial* (definido mais adiante) onde os elementos são funções

8.2. Operadores Lineares

Um operador \hat{O} é dito ser linear se para todo par de funções f e g e uma constante α , vale as seguintes relações

$$\hat{O}(f + g) = \hat{O}f + \hat{O}g \quad (225)$$

$$\hat{O}(\alpha \cdot f) = \alpha \cdot \hat{O}f \quad (226)$$

9. COMUTADORES

Sendo \hat{A} e \hat{B} operadores. Então o comutador de \hat{A} e \hat{B} é definido por

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (227)$$

Segue-se algumas propriedades do comutador

$$[\hat{B}, \hat{A}] = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = -[\hat{A}\hat{B}] \quad (228)$$

Sendo x uma variável e $f(x)$ uma função dessa variável, tem-se

$$[f(x), x] = f(x) \cdot x - x \cdot f(x) = x \cdot f(x) - x \cdot f(x) = 0 \quad (229)$$

Sendo \hat{A} um operador, tem-se

$$[\hat{A}, \hat{A}] = \hat{A}\hat{A} - \hat{A}\hat{A} = 0 \quad (230)$$

Sendo \hat{A} , \hat{B} e \hat{C} operadores, tem-se

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = (\hat{A}\hat{B})\hat{C} - \hat{B}(\hat{C}\hat{A}) \\ &= (\hat{A}\hat{B})\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}(\hat{C}\hat{A}) \\ &= (\hat{A}\hat{B})\hat{C} - (\hat{B}\hat{A})\hat{C} + \hat{B}(\hat{A}\hat{C}) - \hat{B}(\hat{C}\hat{A}) \\ &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \end{aligned} \quad (231)$$

$$\begin{aligned} [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) - (\hat{C}\hat{A})\hat{B} \\ &= \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) - \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - (\hat{C}\hat{A})\hat{B} \\ &= \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) - \hat{A}(\hat{C}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C})\hat{B} - (\hat{C}\hat{A})\hat{B} \\ &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \end{aligned} \quad (232)$$

Sendo \hat{A} e \hat{B} operadores e a e b constantes, tem-se

$$\begin{aligned}
[a + \hat{A}, b + \hat{B}] &= (a + \hat{A})(b + \hat{B}) - (b + \hat{B})(a + \hat{A}) \\
&= ab + a\hat{B} + \hat{A}b + \hat{A}\hat{B} - ba - b\hat{A} - \hat{B}a - \hat{B}\hat{A} \\
&= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \\
&= [\hat{A}, \hat{B}]
\end{aligned} \tag{233}$$

Sendo \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} e \hat{D} operadores, tem-se

$$\begin{aligned}
[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C} + \hat{D}] &= (\hat{A} + \hat{B})(\hat{C} + \hat{D}) - (\hat{C} + \hat{D})(\hat{A} + \hat{B}) \\
&= \hat{A}\hat{C} + \hat{A}\hat{D} + \hat{B}\hat{C} + \hat{B}\hat{D} - \hat{C}\hat{A} - \hat{C}\hat{B} - \hat{D}\hat{A} - \hat{D}\hat{B} \\
&= \hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A} + \hat{A}\hat{D} - \hat{D}\hat{A} + \hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B} + \hat{B}\hat{D} - \hat{D}\hat{B} \\
&= [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{D}] + [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{D}]
\end{aligned} \tag{234}$$

10. ÁLGEBRA LINEAR

10.1. Espaço Vetorial

Um *espaço vetorial* consiste de um conjunto de *vetores* ($|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots$) – ou também chamados *ket* – e de um conjunto de *escalares* (a, b, c, \dots) os quais são sujeitos a duas operações (*adição vetorial* e *multiplicação escalar*).

Um *vetor* é representado por uma *n-tupla* ordenada de escalares pertencentes ao conjunto dos números complexos

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad \{a_1, a_2, \dots, a_n\} \subset \mathbb{C} \quad (235)$$

A *adição vetorial* de dois vetores resulta em outro vetor

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle \quad (236)$$

ou seja

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, |\beta\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \Rightarrow |\alpha\rangle + |\beta\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{pmatrix} \quad (237)$$

Lei comutativa da adição vetorial

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle \quad (238)$$

ou seja

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 + a_1 \\ b_2 + a_2 \\ \vdots \\ b_n + a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = |\beta\rangle + |\alpha\rangle \quad (239)$$

Lei associativa da adição vetorial

$$|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle \quad (240)$$

Existência de identidade aditiva ($|0\rangle$) onde

$$|\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle, \forall |\alpha\rangle, \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (241)$$

para qualquer vetor $|\alpha\rangle$.

Existência de negativo onde para qualquer vetor $|\alpha\rangle$ tem-se um vetor $|\alpha\rangle$ onde

$$|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = |0\rangle \quad (242)$$

ou seja

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \Rightarrow |-\alpha\rangle = -1 \cdot |\alpha\rangle = -1 \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_1 \\ -a_2 \\ \vdots \\ -a_n \end{pmatrix} \quad (243)$$

e, portanto, substituindo na equação imediatamente anterior, tem-se

$$|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -a_1 \\ -a_2 \\ \vdots \\ -a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 - a_1 \\ a_2 - a_2 \\ \vdots \\ a_n - a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (244)$$

A multiplicação escalar entre um escalar e um vetor resulta em outro vetor

$$a|\beta\rangle = |\gamma\rangle \quad (245)$$

ou seja

$$a \cdot |\beta\rangle = a \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \cdot b_1 \\ a \cdot b_2 \\ \vdots \\ a \cdot b_n \end{pmatrix} \quad (246)$$

Lei distributiva da multiplicação escalar, em relação à adição de vetores

$$a \cdot (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = a|\alpha\rangle + a|\beta\rangle \quad (247)$$

Lei distributiva da multiplicação escalar, em relação à adição de escalares

$$(a + b) \cdot |\alpha\rangle = a|\alpha\rangle + b|\alpha\rangle \quad (248)$$

Lei associativa da multiplicação escalar

$$a \cdot (b \cdot |\alpha\rangle) = (a \cdot b) \cdot |\alpha\rangle \quad (249)$$

Existência de identidade para a multiplicação escalar

$$1 \cdot |\alpha\rangle = |\alpha\rangle \quad (250)$$

Multiplicação de um vetor qualquer pelo escalar 0

$$0 \cdot |\alpha\rangle = |0\rangle \quad (251)$$

Uma *combinação linear* de vetores $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots$, é uma expressão da seguinte forma

$$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle + \dots \quad (252)$$

Um vetor $|\lambda\rangle$ é dito ser *linearmente independente* em relação ao conjunto $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots$ se não puder ser escrito como uma combinação linear deles, ou seja

$$|\lambda\rangle \neq c_1 \cdot |\alpha\rangle + c_2 \cdot |\beta\rangle + c_3 \cdot |\gamma\rangle + \dots, \quad \forall (c_1, c_2, c_3, \dots) \quad (253)$$

ou de outra forma

$$c_1 \cdot |\alpha\rangle + c_2 \cdot |\beta\rangle + c_3 \cdot |\gamma\rangle + \dots + c_n \cdot |\lambda\rangle = |0\rangle \Rightarrow c_1 = c_2 = c_3 = \dots = c_n = 0 \quad (254)$$

Um conjunto de vetores é chamado de *gerador do espaço* se todo vetor puder ser escrito como uma combinação linear deles. O conjunto de vetores linearmente independentes que geram um espaço são chamados *bases*. O número de bases usadas para se gerar um espaço é chamado a *dimensão* do espaço. Assim, qualquer vetor pode ser escrito da seguinte forma

$$|\alpha\rangle = a_1 \cdot |e_1\rangle + a_2 \cdot |e_2\rangle + \dots + a_n \cdot |e_n\rangle \quad (255)$$

onde $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle$ são as bases do espaço e n é a dimensão do espaço.

10.2. Espaço Dual

Complexo conjugado de um vetor $|\alpha\rangle$ é dado por

$$|\alpha\rangle^* = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} a_1^* \\ a_2^* \\ \vdots \\ a_n^* \end{pmatrix} \quad (256)$$

POSTULADO: Para todo ket $|\alpha\rangle$ existe um correspondente vetor no espaço dual, chamado *bra*, denotado por $\langle\alpha|$. que também é uma n-tupla ordenada de escalares que também pertencem ao conjunto dos números complexos. A correspondência é dada por

$$\langle\alpha| = |\alpha\rangle^\dagger = (|\alpha\rangle^*)^T = \begin{pmatrix} a_1^* \\ a_2^* \\ \vdots \\ a_n^* \end{pmatrix}^T = (a_1^* \quad a_2^* \quad \cdots \quad a_n^*) \quad (257)$$

ou seja, é a matriz transposta com seus valores sendo os complexos conjugados da matriz coluna $|\alpha\rangle$. O símbolo \dagger (dagger) significa que, o vetor dual $\langle\alpha| = |\alpha\rangle^\dagger$ é o hermitiano adjunto, ou simplesmente adjunto do vetor $|\alpha\rangle$, que é simplesmente a aplicação da operação de conjugação e a transposta na matriz.

Da mesma forma que o espaço vetorial, o espaço dual possui as mesmas propriedades.

A soma de dois vetores do espaço dual é dada por

$$\begin{aligned} \langle\alpha| + \langle\beta| &= (a_1^* \quad a_2^* \quad \cdots \quad a_n^*) + (b_1^* \quad b_2^* \quad \cdots \quad b_n^*) \\ &= (a_1^* + b_1^* \quad a_2^* + b_2^* \quad \cdots \quad a_n^* + b_n^*) \end{aligned} \quad (258)$$

ou, de outra forma

$$\begin{aligned} (|\alpha\rangle + |\beta\rangle)^\dagger &= \left[\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \right]^\dagger = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^* + b_1^* \\ a_2^* + b_2^* \\ \vdots \\ a_n^* + b_n^* \end{pmatrix} \\ &= (a_1^* + b_1^* \quad a_2^* + b_2^* \quad \cdots \quad a_n^* + b_n^*) = \langle\alpha| + \langle\beta| \end{aligned} \quad (259)$$

A multiplicação escalar entre um escalar e um vetor do espaço dual é dado por

$$\begin{aligned}
 c^* \cdot \langle \alpha | &= \langle \gamma | \\
 &= c^* \cdot (a_1^* \quad a_2^* \quad \cdots \quad a_n^*) \\
 &= (c^* \cdot a_1^* \quad c^* \cdot a_2^* \quad \cdots \quad c^* \cdot a_n^*), \quad c^* \in \mathbb{C}
 \end{aligned} \tag{260}$$

ou, de outra forma

$$\begin{aligned}
 (c \cdot |\alpha\rangle)^\dagger &= \left[c \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \right]^\dagger = \begin{pmatrix} c \cdot a_1 \\ c \cdot a_2 \\ \vdots \\ c \cdot a_n \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} c^* \cdot a_1^* \\ c^* \cdot a_2^* \\ \vdots \\ c^* \cdot a_n^* \end{pmatrix}^T \\
 &= (c^* \cdot a_1^* \quad c^* \cdot a_2^* \quad \cdots \quad c^* \cdot a_n^*) = c^* \cdot \langle \alpha |, \quad c \in \mathbb{C}
 \end{aligned} \tag{261}$$

10.3. Produto Interno

Considerando-se dois vetores $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, definidos por

$$|\beta\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}, \{b_1, b_2, \dots, b_n\} \in \mathbb{C}, \quad |\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \{a_1, a_2, \dots, a_n\} \in \mathbb{C} \tag{262}$$

tem-se que o *produto interno* deles é dado por

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha | \beta \rangle &= |\alpha\rangle^\dagger |\beta\rangle \\
 &= (a_1^* \quad a_2^* \quad \cdots \quad a_n^*) \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \\
 &= a_1^* \cdot b_1 + a_2^* \cdot b_2 + \dots + a_n^* \cdot b_n
 \end{aligned} \tag{263}$$

que nada mais é do que o produto matricial de uma matriz linha com uma matriz coluna.

O produto interno possui as seguintes propriedades

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \beta \rangle &= (a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_n^*) \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = (a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n)^* \cdot \begin{pmatrix} b_1^* \\ b_2^* \\ \vdots \\ b_n^* \end{pmatrix} \\
&= \left[(a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n) \cdot \begin{pmatrix} b_1^* \\ b_2^* \\ \vdots \\ b_n^* \end{pmatrix} \right]^* = (a_1 \cdot b_1^* + a_2 \cdot b_2^* + \dots + a_n \cdot b_n^*)^* \\
&= (b_1^* \cdot a_1 + b_2^* \cdot a_2 + \dots + b_n^* \cdot a_n)^* = \left[(b_1^* \ b_2^* \ \dots \ b_n^*) \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \right]^* \\
&= (|\beta\rangle^\dagger |\alpha\rangle)^* = \langle \beta | \alpha \rangle^*
\end{aligned} \tag{264}$$

Verifica-se assim que o produto interno $\langle \alpha | \beta \rangle$ é diferente de $\langle \beta | \alpha \rangle$, exceto no caso em que $\langle \alpha | \beta \rangle$ seja um número real.

O produto vetorial de qualquer vetor com ele mesmo é um número não negativo, ou seja

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \alpha \rangle &= (a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_n^*) \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \\
&= a_1^* \cdot a_1 + a_2^* \cdot a_2 + \dots + a_n^* \cdot a_n \\
&= |a_1|^2 + |a_2|^2 + \dots + |a_n|^2
\end{aligned} \tag{265}$$

assim, tem-se

$$|a_i|^2 \geq 0, \forall i \Rightarrow \langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0 \tag{266}$$

A *norma* de um vetor é dada por

$$\|\alpha\| = \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle} \tag{267}$$

e ela representa uma generalização da noção de “comprimento do vetor”.

A *desigualdade de Schwarz* declara que

$$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \quad (268)$$

A demonstração é dada a seguir:

Considere o seguinte vetor

$$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} |\beta\rangle \quad (269)$$

Lembrando que

$$\langle \gamma | \gamma \rangle \geq 0 \quad (270)$$

tem-se

$$\begin{aligned} \langle \gamma | \gamma \rangle &= \left(|\alpha\rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} |\beta\rangle \right)^\dagger \left(|\alpha\rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} |\beta\rangle \right) \\ &= \left(|\alpha\rangle^\dagger - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle^\dagger}{\langle \beta | \beta \rangle} |\beta\rangle^\dagger \right) \left(|\alpha\rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} |\beta\rangle \right) \\ &= \left(\langle \alpha | - \frac{\langle \alpha | \beta \rangle}{\langle \alpha | \alpha \rangle} \langle \beta | \right) \left(|\alpha\rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \alpha | \alpha \rangle} |\beta\rangle \right) \\ &= \langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \langle \alpha | \beta \rangle - \frac{\langle \alpha | \beta \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \langle \beta | \alpha \rangle + \frac{\langle \alpha | \beta \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \langle \beta | \beta \rangle \\ &= \langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle \langle \alpha | \beta \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} - \frac{\langle \alpha | \beta \rangle \langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} + \frac{\langle \alpha | \beta \rangle \langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \\ &= \langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{|\langle \beta | \alpha \rangle|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} - \frac{|\langle \alpha | \beta \rangle|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} + \frac{|\langle \alpha | \beta \rangle|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} = \langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{|\langle \beta | \alpha \rangle|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} \end{aligned} \quad (271)$$

então

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{|\langle \beta | \alpha \rangle|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} \\ \frac{|\langle \beta | \alpha \rangle|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} &\leq \langle \alpha | \alpha \rangle \\ |\langle \beta | \alpha \rangle|^2 &\leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \end{aligned} \quad (272)$$

10.4. Conjunto Ortonormal e o Procedimento Gram-Schmidt

Na Mecânica Quântica é desejável se ter um conjunto de bases ortonormais, ou seja

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{i,j} \quad (273)$$

onde

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (274)$$

É possível a partir de um conjunto de vetores $|u_i\rangle$ se extrair um conjunto de bases ortonormais $|e_i\rangle$. Levando em consideração a idéia de que o produto interno é uma generalização do produto de vetores em três dimensões, onde o produto retorna a projeção de um vetor em um segundo vetor, começando por definir

$$|v_i\rangle = |u_i\rangle \quad (275)$$

O segundo passo é definir $|v_i\rangle$ em cima de $|u_2\rangle$, tomando o cuidado de se retirar a projeção sobre o vetor $|v_1\rangle$ já definido

$$|v_2\rangle = |u_2\rangle - \frac{\langle v_1 | u_2 \rangle}{\langle v_1 | v_1 \rangle} |v_1\rangle \quad (276)$$

e assim, recursivamente

$$\begin{aligned} |v_3\rangle &= |u_3\rangle - \frac{\langle v_1 | u_3 \rangle}{\langle v_1 | v_1 \rangle} |v_1\rangle - \frac{\langle v_2 | u_3 \rangle}{\langle v_2 | v_2 \rangle} |v_2\rangle \\ |v_4\rangle &= |u_4\rangle - \frac{\langle v_1 | u_4 \rangle}{\langle v_1 | v_1 \rangle} |v_1\rangle - \frac{\langle v_2 | u_4 \rangle}{\langle v_2 | v_2 \rangle} |v_2\rangle - \frac{\langle v_3 | u_4 \rangle}{\langle v_3 | v_3 \rangle} |v_3\rangle \\ &\vdots \end{aligned} \quad (277)$$

Normalizando tem-se

$$\begin{aligned} |e_1\rangle &= \frac{|v_1\rangle}{\sqrt{\langle v_1 | v_1 \rangle}} \\ |e_2\rangle &= \frac{|v_2\rangle}{\sqrt{\langle v_2 | v_2 \rangle}} \\ &\vdots \end{aligned} \tag{278}$$

11. MECÂNICA QUÂNTICA

11.1. Postulados da Mecânica Quântica

A equação fundamental da mecânica quântica é a *equação de Schrödinger*⁵

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (279)$$

sendo esta equação para a uma partícula de massa m se movendo por um potencial U em três dimensões. A função Ψ é chamada função de onda, é em função do espaço e do tempo. Esta função não foi obtida por raciocínio dedutivo, ela é um postulado, assim como a equação da força dada por Newton e as equação de Maxwell. Diferentes potenciais dão diferentes funções de onda. Observando a equação, vê-se que a função de onda é uma função complexa. Uma vez encontrada a função de onda, pode-se calcular qualquer outra quantidade física.

POSTULADO 1. Para cada estado de um sistema físico há uma correspondente função de onda $\Psi(x, t)$.

Na mecânica clássica, cada estado de um sistema físico é especificado por duas variáveis, chamadas posição $x(t)$ e momento $p(t)$ que ambos são funções da variável tempo t . Na mecânica quântica, cada estado físico é especificado por apenas uma variável, chamada função de onda $\Psi(x, t)$ que é função de duas variáveis, posição x e tempo t .

⁵ Erwin Schrödinger (1887 – 1961), físico teórico austríaco que contribuiu para a teoria ondulatória da matéria e outros fundamentos da mecânica quântica. Em 1933 ganhou junto com o físico britânico Paul Adrien Maurice Dirac o prêmio Nobel de Física.

POSTULADO 2. O desenvolvimento temporal da função de onda é determinado pela equação de Schrödinger.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right] \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) \quad (280)$$

Em contraste com a mecânica clássica que o desenvolvimento temporal do momento é dado por $F = \dot{p}$ e o desenvolvimento da posição é dado por $F = m\ddot{x}$, ou na formulação lagrangiana que o desenvolvimento temporal das coordenadas generalizadas que é dada por equações diferenciais de segunda ordem, ou na formulação hamiltoniana que o desenvolvimento temporal das coordenadas generalizadas $q_i(t)$ e momento generalizado $p_i(t)$ são dados pelas equações diferenciais de primeira ordem de Hamilton $\dot{p}_i = -\partial H/\partial q_i$ e $\dot{q}_i = \partial H/\partial p_i$.

POSTULADO 3. (Hipótese de Born): A densidade de probabilidade é dado por $|\Psi|^2$.

Este postulado mostra uma relação entre a função de onda e a densidade de probabilidade. A probabilidade de se achar a partícula em questão entre a e b no tempo t é

$$P = \int_a^b |\Psi|^2 dx \quad (281)$$

Geralmente Ψ é normalizado assim a probabilidade total de se achar a partícula em qualquer lugar do universo é 1, ou seja, unidimensionalmente

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 1 \quad (282)$$

Como saber se os valores esperados serão valores reais sendo que os operadores são complexos e que a função de onda também é? Se ficar provado que o valor esperado de um operador for igual ao valor esperado de seu complexo conjugado, verifica-se que a parte imaginária é nula, restando somente a parte real. Por exemplo

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{p} \rangle &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \\
 \langle \hat{p} \rangle^* &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi d\Psi^* \\
 &= i\hbar \left(\left| \Psi \Psi^* \right|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* d\Psi \right) = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \langle \hat{p} \rangle
 \end{aligned} \tag{283}$$

ficando provado que o valor esperado é um número real.

POSTULADO 4. Para todo observável físico b existe um operador hermitiano \hat{B} correspondente, tal que $\hat{B}\phi_i = b_i\phi_i$.

Assim os observáveis são representados por operadores. Estes são operadores hermitianos especiais para assegurar que os observáveis sejam números reais. Note que se pode inventar um operador que não significa necessariamente um observável físico.

POSTULADO 5. Qualquer função de onda pode ser expandido em termos de ϕ_i , ou seja,

$$\psi = \sum_i c_i \phi_i.$$

Assim tem-se que a base da função de onda são as autofunções.

POSTULADO 6. Se o estado de um sistema é ψ , então a probabilidade que uma medida encontre o sistema no estado ϕ_i é $|c_i|^2$.

Se for feita uma medição então a probabilidade de se encontrar o sistema no estado $\psi_n(x)$ é $|c_n|^2$.

POSTULADO 7. Uma coerente superposição de ψ colapsa para uma autofunção ϕ_i sob medida.

O ato de medir força o estado geral ψ colapsar para um estado particular ψ_n . Este colapso tem que ocorrer porque de outra maneira uma segunda medição imediata poderia não fornecer o mesmo E_n .

11.2. A Equação de Schrödinger Independente do Tempo

Primeiramente utiliza-se do *método de separação de variáveis*, para encontrar a solução da equação de Schrödinger, que se trata de uma equação diferencial parcial. Esse método consiste em substituir a função em questão pelo produto de duas ou mais funções, cada uma das funções será dependente de uma variável, sendo as variáveis independentes entre si. Aplicando na função de onda tem-se

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot f(t) \quad (284)$$

Substituindo (284) em (279), tem-se

$$i\hbar\psi(x, y, z)\frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}f(t)\cdot\nabla^2\psi(x, y, z) + V\psi(x, y, z)\cdot f(t) \quad (285)$$

Considerando o potencial V como função somente da posição, e isolando em cada membro as funções dependentes do tempo com as dependentes da posição

$$i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \nabla^2 \psi + V \quad (286)$$

Como o primeiro membro de (286) está em função de t e o segundo está em função de (x, y, z) , tem-se que a igualdade só pode ser satisfeita se ambos os membros forem iguais a uma constante, pois as variáveis são independentes, não se pode ter em nenhum dos membros nenhuma variável, senão ou deixariam de serem independentes (caso em que se tem uma função dependente do tempo no 1º membro e uma dependente da posição no 2º membro) ou não seriam variáveis (caso em que se tem em um membro com uma função dependente de uma das coordenadas e o outro membro igual uma constante). Assim, de (286) tem-se

$$i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = E \quad (287)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \nabla^2 \psi + V = E \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi \quad (288)$$

A solução de (287) é

$$f(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (289)$$

A equação (288) é a equação de Schrödinger independente do tempo. Note que ela assemelhasse com a equação dependente do tempo, mas isso só é possível porque V é independente do tempo.

11.3. Normalização

A probabilidade de se encontrar a partícula em qualquer lugar será

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz = 1 \quad (290)$$

Entretanto, nem sempre se chega a uma função de onda que obedeça a relação descrita por (290), mas esse problema é contornado multiplicando a função de onda por uma constante complexa A , resultando em $A \cdot \Psi(x, y, z, t)$, que também será uma solução de (279) e satisfará (290). Esse processo é chamado de *normalização* da função de onda.

Em alguns casos chega-se a uma solução da equação de Schrödinger, em que a integral do primeiro membro de (290) é infinita, não havendo fator multiplicativo que o normalize, e em outros casos chega-se a solução trivial $\Psi \equiv 0$. Tais soluções não normalizáveis, não podem representar nenhuma partícula, portanto são rejeitadas. Dessa forma, pode-se dizer que as soluções fisicamente aceitáveis são as que possuem o quadrado-integrável, para isso tem-se que

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi = \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \Psi = \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \Psi = 0 \quad (291)$$

do contrário, a substituição dos limites no infinito, após a solução da integral, faria os valores crescerem indefinidamente. Esta condição também garante que a função de onda Ψ permaneça normalizável para qualquer instante t .

11.4. Operadores

Na mecânica quântica, quantidades físicas são geralmente representadas por operadores, diferentemente do que na mecânica clássica, onde as quantidades físicas são representadas por funções ordinárias.

Relembrando a definição de energia total

$$T + U = E \quad (292)$$

onde U é a energia potencial e T a energia cinética

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad (293)$$

onde p é o momento e m é a massa. Multiplicando a equação da energia total pela função de onda tem-se

$$(T + U)\Psi = E\Psi \quad (294)$$

então se for feito algumas substituições para se conseguir a equação de Schrödinger tem-se

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (295)$$

da energia cinética pode-se tirar o momento fazendo algumas substituições tem-se

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (296)$$

Será utilizado $\hat{}$ para especificar operadores, assim tem-se

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (297)$$

A energia potencial e a posição não são operadores, desta forma

$$\hat{U} = U(x), \quad \hat{x} = x \quad (298)$$

11.5. Valores Esperados

Para uma partícula no estado Ψ , o valor esperado de x é dado por

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x,t)|^2 dx \quad (299)$$

(considerando o problema unidimensional, para simplificação)

Isto significa que para partículas preparadas no mesmo estado Ψ , terão a média dos valores observados da quantidade física através da medição descritos por (299), mas uma vez realizado o processo de medição, medições subsequentes confirmarão o mesmo valor. Pode-se também interpretar como o valor médio das medições feitas sobre a mesma partícula preparada sistematicamente no mesmo estado Ψ após o processo.

Partindo para o cálculo do valor esperado do momento \hat{p} , tem-se inicialmente a seguinte relação

$$\langle \hat{p} \rangle = m \cdot \frac{d}{dt} \langle x \rangle \quad (300)$$

Substituindo o valor $\langle x \rangle$, determinado por (299)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right) dx \end{aligned} \quad (301)$$

Isolando a derivada parcial em relação a t da equação de Schrödinger unidimensional

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \Psi \quad (302)$$

cujo complexo conjugado é

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \Psi^* \quad (303)$$

então

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \underbrace{\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x}}_{=0} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[\left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right] \end{aligned} \quad (304)$$

Substituindo (304) em (301)

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \quad (305)$$

e usando integração por partes no primeiro termo, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx + \\ &+ \left[x \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right]_{-\infty}^{+\infty} \end{aligned} \quad (306)$$

Utilizando (291) em (306), tem-se

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \quad (307)$$

Usando da integração por partes

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi dx = \underbrace{[\Psi^* \Psi]_{-\infty}^{+\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \quad (308)$$

Substituindo (308) em (307)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi dx \\ &= -2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \end{aligned} \quad (309)$$

Substituindo o resultado encontrado em (309) na equação (305), chega-se a

$$\langle \hat{p} \rangle = \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \underbrace{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)}_{=\hat{p}} \Psi dx \quad (310)$$

O cálculo do valor esperado de qualquer outra quantidade física Q pode ser feita através dessas duas quantidades (posição x e momento \hat{p}). Assim pode-se escrever para qualquer quantidade Q

$$\langle Q(x, \hat{p}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{Q} \Psi dx \quad (311)$$

Estando \hat{Q} (operador que representa a quantidade física Q) inserido entre os Ψ .

11.6. Interpretação Estatística

As quantidades dinâmicas podem ser expressas em função das quantidades x e \hat{p} : $\hat{Q}(x, \hat{p}, t)$. Para cada quantidade associa-se um operador \hat{Q} . O valor esperado para esta quantidade é dado por

$$\langle \hat{Q} \rangle = \int \Psi^*(x,t) \cdot \hat{Q} \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, t \right) \cdot \Psi(x,t) dx \quad (312)$$

o qual pode-se reescrever da seguinte forma

$$\langle \hat{Q} \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle \quad (313)$$

Como o valor esperado deve ser um valor obtido na prática, isto implica que deve ser um número real, assim

$$\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle^* = \langle \hat{Q} \Psi | \Psi \rangle \quad (314)$$

No geral, idênticas medições feitas sobre idênticos estados preparados podem não produzir os mesmos resultados, a não ser em estados determinados para um observável que se deseja medir. Nos estados determinados para um observável Q , o desvio padrão do observável é zero, sendo assim bem determinado.

$$\begin{aligned} 0 &= \sigma_Q^2 \\ &= \langle (\hat{Q} - \langle Q \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle \Psi | (\hat{Q} - \langle Q \rangle)^2 \Psi \rangle \end{aligned} \quad (315)$$

como o operador \hat{Q} é Hermitiano ($\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$) e a média $\langle Q \rangle$ é um valor real ($\langle Q \rangle = \langle Q \rangle^*$), então

$$\begin{aligned} \langle \Psi | (\hat{Q} - \langle Q \rangle)^2 \Psi \rangle &= \langle \Psi | (\hat{Q} - \langle Q \rangle) \cdot (\hat{Q} - \langle Q \rangle) \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{Q} \cdot (\hat{Q} - \langle Q \rangle) \Psi \rangle - \langle \Psi | \langle Q \rangle \cdot (\hat{Q} - \langle Q \rangle) \Psi \rangle \\ &= \langle \hat{Q} \Psi | (\hat{Q} - \langle Q \rangle) \Psi \rangle - \langle \langle Q \rangle \Psi | (\hat{Q} - \langle Q \rangle) \Psi \rangle \\ &= \langle (\hat{Q} - \langle Q \rangle) \Psi | (\hat{Q} - \langle Q \rangle) \Psi \rangle \\ &= \| (\hat{Q} - \langle Q \rangle) | \Psi \rangle \|^2 \end{aligned} \quad (316)$$

Mas para que a norma de um vetor ($\| |\alpha\rangle \|^2 = \langle \alpha | \alpha \rangle$) seja igual a zero, é necessário que o vetor seja o vetor nulo ($|0\rangle$), assim

$$(\hat{Q} - \langle Q \rangle) | \Psi \rangle = |0\rangle \quad (317)$$

ou

$$\hat{Q}|\Psi\rangle = \langle Q|\Psi\rangle |\Psi\rangle \quad (318)$$

Assim conclui-se que para uma medição de um observável Q sobre uma partícula que está num estado $|\Psi\rangle$ o resultado será o valor λ se, e somente se, $|\Psi\rangle$ for um autovetor de Q , com autovalor λ .

A medição de um observável \hat{Q} de uma partícula no estado $|\Psi\rangle$ certamente dará um dos autovalores de \hat{Q} , e a probabilidade de se encontrar um particular autovalor λ é igual ao quadrado absoluto do componente λ de $|\Psi\rangle$, quando está expresso em bases ortonormais de autovetores.

11.6.1. O Princípio da Incerteza

Para qualquer observável A , tem-se seu desvio padrão dado por

$$\begin{aligned} \sigma_A^2 &= \langle \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 | \Psi \rangle \\ &= \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle \end{aligned} \quad (319)$$

e, semelhantemente, para um observável B , tem-se

$$\sigma_B^2 = \langle (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle \quad (320)$$

Substituindo na desigualdade de Schwarz

$$\begin{aligned} \sigma_A^2 \cdot \sigma_B^2 &= \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle \langle (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle \\ &\geq \left| \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (321)$$

Para qualquer número complexo $w = u + i \cdot v$, tem-se que

$$\begin{aligned} |w|^2 &= [\text{Re}(w)]^2 + [\text{Im}(w)]^2 = u^2 + v^2 \\ &\geq [\text{Im}(w)]^2 = v^2 \end{aligned} \quad (322)$$

e que

$$\frac{1}{2i}(w - w^*) = \frac{1}{2i}[(u + iv) - (u - iv)] = \frac{1}{2i}(2iv) = v \quad (323)$$

assim, substituindo na equação anterior

$$|w|^2 = u^2 + v^2 \geq v^2 = \left[\frac{1}{2i}(w - w^*) \right]^2 \quad (324)$$

substituindo w por $\langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle$ tem-se

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2i} \left(\langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle - \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle^* \right) = \\ & = \frac{1}{2i} \left(\langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle - \langle (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle \right) \end{aligned} \quad (325)$$

ou seja

$$\begin{aligned} & \left| \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle \right|^2 \geq \\ & \geq \left| \frac{1}{2i} \left(\langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle - \langle (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle \right) \right|^2 \end{aligned} \quad (326)$$

Tem-se que

$$\begin{aligned} & \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle = \langle \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle = \\ & = \langle \Psi | (\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle B \rangle - \langle A \rangle\hat{B} + \langle A \rangle\langle B \rangle) \Psi \rangle = \\ & = \langle \Psi | \hat{A}\hat{B}\Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{A}\langle B \rangle\Psi \rangle - \langle \Psi | \langle A \rangle\hat{B}\Psi \rangle + \langle \Psi | \langle A \rangle\langle B \rangle\Psi \rangle = \\ & = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle B \rangle\langle \Psi | \hat{A}\Psi \rangle - \langle A \rangle\langle \Psi | \hat{B}\Psi \rangle + \langle A \rangle\langle B \rangle = \\ & = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle B \rangle\langle A \rangle - \langle A \rangle\langle B \rangle + \langle A \rangle\langle B \rangle = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle A \rangle\langle B \rangle \end{aligned} \quad (327)$$

$$\begin{aligned} & \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle = \langle \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle = \\ & = \langle \Psi | (\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle B \rangle - \langle A \rangle\hat{B} + \langle A \rangle\langle B \rangle) \Psi \rangle = \\ & = \langle \Psi | \hat{A}\hat{B}\Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{A}\langle B \rangle\Psi \rangle - \langle \Psi | \langle A \rangle\hat{B}\Psi \rangle + \langle \Psi | \langle A \rangle\langle B \rangle\Psi \rangle = \\ & = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle B \rangle\langle \Psi | \hat{A}\Psi \rangle - \langle A \rangle\langle \Psi | \hat{B}\Psi \rangle + \langle A \rangle\langle B \rangle = \\ & = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle B \rangle\langle A \rangle - \langle A \rangle\langle B \rangle + \langle A \rangle\langle B \rangle = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle A \rangle\langle B \rangle \end{aligned} \quad (328)$$

e, semelhantemente

$$\begin{aligned}
& \langle (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle = \langle \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle = \\
& = \langle \Psi | (\hat{B}\hat{A} - \hat{B}\langle A \rangle - \langle B \rangle \hat{A} + \langle B \rangle \langle A \rangle) \Psi \rangle = \\
& = \langle \Psi | \hat{B}\hat{A} \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{B} \langle A \rangle \Psi \rangle - \langle \Psi | \langle B \rangle \hat{A} \Psi \rangle + \langle \Psi | \langle B \rangle \langle A \rangle \Psi \rangle = \\
& = \langle \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle A \rangle \langle \Psi | \hat{B} \Psi \rangle - \langle B \rangle \langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle = \\
& = \langle \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle = \langle \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle
\end{aligned} \tag{329}$$

como $\langle A \rangle$ e $\langle B \rangle$ são números reais, então $\langle A \rangle \langle B \rangle = \langle B \rangle \langle A \rangle$.

Substituindo

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2i} \left(\langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle - \langle (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle \right) = \\
& = \frac{1}{2i} \left[\left(\langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \right) - \left(\langle \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \right) \right] = \\
& = \frac{1}{2i} \left(\langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle - \langle \hat{B}\hat{A} \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \right) = \\
& = \frac{1}{2i} \left(\langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle \hat{B}\hat{A} \rangle \right)
\end{aligned} \tag{330}$$

Finalmente chega-se que

$$\sigma_A^2 \cdot \sigma_B^2 \geq \left| \frac{1}{2i} \left(\langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle \hat{B}\hat{A} \rangle \right) \right|^2 = \left| \frac{1}{2i} [\hat{A}, \hat{B}] \right|^2 \tag{331}$$

onde $[\hat{A}, \hat{B}]$ é o comutador dos operadores \hat{A} e \hat{B} .

11.7. O Oscilador Harmônico

O oscilador harmônico consiste em uma partícula de massa m executando um movimento unidimensional, estando sujeita a uma força elástica descrita pela *lei de Hooke*

$$F = m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -k \cdot x(t), \quad k > 0, \quad m > 0 \tag{332}$$

cuja solução é

$$x(t) = A \cdot \text{sen}(\omega t) + B \cdot \text{cos}(\omega t) \tag{333}$$

onde a frequência angular ω é

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (334)$$

A energia potencial é dada por

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (335)$$

Na literatura encontra-se duas abordagens para se resolver o oscilador harmônico. Uma utiliza-se das séries de potências para resolver a equação diferencial. A outra abordagem utiliza-se de uma engenhosa técnica algébrica, usando os operadores de criação e aniquilação.

11.7.1. Método Algébrico

Escrevendo a equação de Schrödinger para o oscilador

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x) \quad (336)$$

ou, de outra forma

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] \psi = E\psi \quad (337)$$

A idéia concentra-se em reescrever o termo dentro dos colchetes partindo da idéia da seguinte equação para números complexos

$$\begin{aligned} (u + iv) \cdot (u - iv) &= u^2 - iu \cdot v + iv \cdot u - i^2 v^2 \\ &= u^2 + v^2 + i(v \cdot u - u \cdot v) \end{aligned} \quad (338)$$

mas como u e v são números, tem-se que

$$u \cdot v = v \cdot u \quad (339)$$

assim chega-se a

$$(u + iv) \cdot (u - iv) = u^2 + v^2 \quad (340)$$

Porém deve-se lembrar que dentro dos colchetes há o operador d/dx , e operadores geralmente não comutam, como é este caso. Entretanto esse fato não é um impedimento para se poder utilizar a idéia, começando por definir os seguintes operadores

$$a_- = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right), \quad a_+ = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right) \quad (341)$$

Aplicando o produto $a_- \cdot a_+$ sobre uma função, tem-se

$$\begin{aligned} (a_- \cdot a_+) \cdot f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right) \cdot f(x) = \\ &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right) \cdot f(x) = \\ &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \cdot \left[\frac{\hbar}{i} \frac{df(x)}{dx} + im\omega x \cdot f(x) \right] = \\ &= \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} \right) + \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (im\omega x f) - im\omega x \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} - im\omega x \cdot im\omega x f \right] = \\ &= \frac{1}{2m} \left\{ \frac{\hbar^2}{i^2} \frac{d^2 f}{d^2 x} + \hbar m \omega \left[\frac{d(x)}{dx} \cdot f + x \cdot \frac{df}{dx} \right] - \hbar m \omega x \cdot \frac{df}{dx} + m^2 \omega^2 x^2 f \right\} = \\ &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar^2}{i^2} \frac{d^2 f}{d^2 x} + \hbar m \omega f + \hbar m \omega x \cdot \frac{df}{dx} - \hbar m \omega x \cdot \frac{df}{dx} + m^2 \omega^2 x^2 f \right) \end{aligned} \quad (342)$$

$$\begin{aligned} (a_- \cdot a_+) \cdot f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right) \cdot f(x) = \\ &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right) \cdot f(x) = \\ &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \cdot \left[\frac{\hbar}{i} \frac{df(x)}{dx} + im\omega x \cdot f(x) \right] = \\ &= \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} \right) + \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (im\omega x f) - im\omega x \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} - im\omega x \cdot im\omega x f \right] = \\ &= \frac{1}{2m} \left\{ \frac{\hbar^2}{i^2} \frac{d^2 f}{d^2 x} + \hbar m \omega \left[\frac{d(x)}{dx} \cdot f + x \cdot \frac{df}{dx} \right] - \hbar m \omega x \cdot \frac{df}{dx} + m^2 \omega^2 x^2 f \right\} = \\ &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar^2}{i^2} \frac{d^2 f}{d^2 x} + \hbar m \omega f + \hbar m \omega x \cdot \frac{df}{dx} - \hbar m \omega x \cdot \frac{df}{dx} + m^2 \omega^2 x^2 f \right) \end{aligned} \quad (343)$$

$$\begin{aligned}
(a_- \cdot a_+) \cdot f(x) &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar^2}{i^2} \frac{d^2 f}{dx^2} + \hbar m \omega f + m^2 \omega^2 x^2 f \right) \\
&= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar^2}{i^2} \frac{d^2}{dx^2} + \hbar m \omega + m^2 \omega^2 x^2 \right) \cdot f(x) \\
&= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \omega x)^2 + \hbar m \omega \right] \cdot f(x)
\end{aligned} \tag{344}$$

descartando a função de teste, usada para achar o produto $a_- \cdot a_+$, tem-se

$$\begin{aligned}
a_- \cdot a_+ &= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \omega x)^2 + \hbar m \omega \right] \\
&= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \omega x)^2 \right] + \frac{1}{2m} \hbar m \omega \\
&= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \omega x)^2 \right] + \frac{1}{2} \hbar \omega
\end{aligned} \tag{345}$$

Comparando a equação de Schrödinger para o oscilador

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \omega x)^2 \right] \psi = E \psi \tag{346}$$

com a equação do produto $a_- \cdot a_+$

$$a_- \cdot a_+ = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \omega x)^2 \right] + \frac{1}{2} \hbar \omega \tag{347}$$

verifica-se que só diferem por um fator $\frac{1}{2} \hbar \omega$. Reescrevendo a equação para o oscilador harmônico

$$\left(a_- \cdot a_+ - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \psi = E \psi \tag{348}$$

Alterando a ordem dos fatores a_+ e a_- , e aplicando numa função $f(x)$, tem-se

$$\begin{aligned}
(a_+ \cdot a_-)f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) f(x) = \\
&= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} - im\omega x f \right) = \\
&= \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} \right) + \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (-im\omega x f) + im\omega x \frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} + im\omega x (-im\omega x f) \right] = \quad (349) \\
&= \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar^2}{i^2} \frac{d^2 f}{dx^2} - \hbar m \omega x f - \hbar m \omega x \frac{df}{dx} + \hbar m \omega x \frac{df}{dx} + m^2 \omega^2 x^2 f \right] = \\
&= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 - \hbar m \omega \right] f
\end{aligned}$$

descartando a função de teste, usada para achar o produto $a_+ \cdot a_-$, tem-se

$$\begin{aligned}
a_+ \cdot a_- &= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 - \hbar m \omega \right] \\
&= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] - \frac{1}{2} \hbar \omega
\end{aligned} \quad (350)$$

e assim, também pode-se escrever da seguinte forma a equação e Schrödinger para o oscilador harmônico

$$\left(a_+ \cdot a_- + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \psi = E \psi \quad (351)$$

Aplicando o comutador sobre os operadores a_- e a_+ , tem-se

$$\begin{aligned}
[a_-, a_+] &= a_- \cdot a_+ - a_+ \cdot a_- = \\
&= \left\{ \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] + \frac{1}{2} \hbar \omega \right\} - \left\{ \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] - \frac{1}{2} \hbar \omega \right\} = \\
&= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] + \frac{1}{2} \hbar \omega - \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] + \frac{1}{2} \hbar \omega = \quad (352) \\
&= \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{1}{2} \hbar \omega = \hbar \omega
\end{aligned}$$

Agora, mostra-se que se ψ satisfaz a equação de Schrödinger com energia E , então pode-se afirmar que $a_+ \psi$ também a satisfaz, mas com energia $(E + \hbar \omega)$, ou seja

$$\begin{aligned}
\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)[a_+\psi(x)] &= a_+a_-a_+\psi + \frac{1}{2}\hbar\omega a_+\psi = \left(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}\hbar\omega a_+\right)\psi \\
&= a_+\left(a_-a_+ + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi = a_+\left(a_-a_+\psi + \frac{1}{2}\hbar\omega\psi\right) \\
&= a_+\left(a_-a_+\psi - \frac{1}{2}\hbar\omega\psi + \frac{2}{2}\hbar\omega\psi\right) \\
&= a_+\left[\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi + \hbar\omega\psi\right] = a_+(E\psi + \hbar\omega\psi) \\
&= a_+[E\psi(x)] + a_+[\hbar\omega\psi(x)] = Ea_+\psi + \hbar\omega a_+\psi \\
&= (E + \hbar\omega)[a_+\psi(x)]
\end{aligned} \tag{353}$$

Da mesma forma, se ψ satisfaz a equação de Schrödinger com energia E , então pode-se afirmar que $a_-\psi$ também a satisfaz, mas com energia $(E - \hbar\omega)$, ou seja

$$\begin{aligned}
\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)[a_-\psi(x)] &= a_-\left(a_+a_- - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi \\
&= a_-\left(a_+a_-\psi + \frac{1}{2}\hbar\omega\psi - \hbar\omega\psi\right) \\
&= a_-\left[\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi - \hbar\omega\psi\right] \\
&= a_-(E\psi - \hbar\omega\psi) = Ea_-\psi - \hbar\omega a_-\psi \\
&= (E - \hbar\omega)[a_-\psi(x)]
\end{aligned} \tag{354}$$

Aplicando novamente o método, pode-se afirma que $a_+a_+\psi$ também satisfaz a equação de Schrödinger, mas com energia $(E + 2\hbar\omega)$, ou seja

$$\begin{aligned}
& \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) [a_+ a_+ \psi(x)] = \left(a_+ a_- a_+ + \frac{1}{2} \hbar \omega a_+ \right) (a_+ \psi) = \\
& = a_+ \left(a_- a_+ + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) (a_+ \psi) = a_+ \left[a_- a_+ + \left(1 - \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \right] (a_+ \psi) = \\
& = a_+ \left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar \omega + \hbar \omega \right) (a_+ \psi) = a_+ \left[\left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) a_+ \psi + \hbar \omega a_+ \psi \right] = \\
& = a_+ \left[\left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) a_+ \psi + \hbar \omega a_+ \psi \right] = a_+ \left[\left(a_+ a_- a_+ + \frac{1}{2} \hbar \omega a_+ \right) \psi + \hbar \omega a_+ \psi \right] = \\
& = a_+ \left[a_+ \left(a_- a_+ + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \psi + \hbar \omega a_+ \psi \right] = a_+ \left\{ a_+ \left[\left(a_- a_+ + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \psi + \hbar \omega \psi \right] \right\} = \\
& = a_+ a_+ \left[\left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar \omega + \hbar \omega \right) \psi + \hbar \omega \psi \right] = \\
& = a_+ a_+ \left\{ \left[\left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \psi + \hbar \omega \psi \right] + \hbar \omega \psi \right\} = \\
& = a_+ a_+ \left[(E \psi + \hbar \omega \psi) + \hbar \omega \psi \right] = a_+ a_+ \left[E \psi + 2 \hbar \omega \psi \right] = \\
& = a_+ a_+ E \psi + a_+ a_+ 2 \hbar \omega \psi = (E + 2 \hbar \omega) [a_+ a_+ \psi(x)] \tag{355}
\end{aligned}$$

Da mesma forma, pode-se afirmar que $a_- a_- \psi$ também a satisfaz, mas com energia $(E - 2 \hbar \omega)$, ou seja

$$\begin{aligned}
& \left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) [a_- a_- \psi(x)] = \left(a_- a_+ a_- - \frac{1}{2} \hbar \omega a_- \right) (a_- \psi) = \\
& = a_- \left(a_+ a_- - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) (a_- \psi) = a_- \left[a_+ a_- + \left(-1 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \right] (a_- \psi) = \\
& = a_- \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \hbar \omega - \hbar \omega \right) (a_- \psi) = a_- \left[\left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) a_- \psi - \hbar \omega a_- \psi \right] = \\
& = a_- \left[\left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) a_- \psi - \hbar \omega a_- \psi \right] = \\
& = a_- \left[\left(a_- a_+ a_- - \frac{1}{2} \hbar \omega a_- \right) \psi - \hbar \omega a_- \psi \right] = \\
& = a_- \left[a_- \left(a_+ a_- - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \psi - \hbar \omega a_- \psi \right] = a_- \left\{ a_- \left[\left(a_+ a_- - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \psi - \hbar \omega \psi \right] \right\} = \\
& = a_- a_- \left[\left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \hbar \omega - \hbar \omega \right) \psi - \hbar \omega \psi \right] = \\
& = a_- a_- \left\{ \left[\left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \psi - \hbar \omega \psi \right] - \hbar \omega \psi \right\} = a_- a_- [(E\psi - \hbar \omega \psi) - \hbar \omega \psi] = \\
& = a_- a_- [E\psi - 2\hbar \omega \psi] = a_- a_- E\psi - a_- a_- 2\hbar \omega \psi = (E - 2\hbar \omega) [a_- a_- \psi(x)]
\end{aligned} \tag{356}$$

O operador a_+ chama-se *operador de criação*, pois ele cria um quantum de energia a cada vez que é aplicado. E o operador a_- chama-se *operador de aniquilação*, pois ele aniquila um quantum de energia a cada vez que é aplicado.

Aplicando o operador de aniquilação, recursivamente, chega-se a situação em que a energia começa a se tornar negativa a partir de um ponto, o que não pode existir, e neste momento o mecanismo falha. Assim tem-se um nível que é o mais baixo chamado por ψ_0 , onde

$$a_- \psi_0 = 0 \tag{357}$$

isto significa que

$$\frac{1}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi_0(x)}{dx} - im\omega x \psi_0(x) \right] = 0$$

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0 \Leftrightarrow \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} x dx \quad (358)$$

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\int \frac{m\omega}{\hbar} x dx \Leftrightarrow \ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + C$$

$$\psi_0(x) = A_0 \cdot e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

Determinando o valor da energia para esse estado tem-se

$$\left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \cdot \psi_0(x) = E_0 \cdot \psi_0(x)$$

$$a_+ \underbrace{a_- \psi_0(x)}_{=0} + \frac{1}{2} \hbar \omega \psi_0(x) = E_0 \cdot \psi_0(x) \quad (359)$$

$$\frac{1}{2} \hbar \omega \psi_0(x) = E_0 \cdot \psi_0(x)$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

Agora simplesmente aplica-se o operador de criação para se encontrar os estados excitados

$$\psi_n(x) = A_n \cdot (a_+)^n e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (360)$$

$$A_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{(-1)^n}{\sqrt{n! (\hbar\omega)^n}}$$

ou de outra forma

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad (361)$$

$$H_1(\xi) = 1, \quad H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n (e^{-\xi^2})}{d\xi^n}$$

onde $H_n(\xi)$ é o polinômio de Hermite.

11.8. O Átomo De Hidrogênio

A equação de Schrödinger é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (362)$$

onde H é o operador hamiltoniano, que pode ser obtido por meio da energia clássica

$$\frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V \quad (363)$$

estendendo para y e z o operador momento, tem-se

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad (364)$$

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (365)$$

assim a equação de Schrödinger toma a forma

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi \quad (366)$$

cuja solução, quando V não é dependente do tempo, é

$$\Psi = \sum c_n \psi_n(\vec{r}) \cdot e^{-iE_n t/\hbar} \quad (367)$$

Geralmente o potencial depende somente da distância da origem, desse modo é natural adotar as coordenadas esféricas, assim o laplaciano em coordenadas esféricas é

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \\ &= \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (368)$$

Separando as variáveis pelo método do produto, tem-se

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y(\theta, \phi) \quad (369)$$

substituindo na equação de Schrödinger, e já colocando o laplaciano em coordenadas esféricas, tem-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{Y}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{R}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] + VRY = \hat{E}RY \quad (370)$$

que multiplicando por $-2mr^2/(\hbar^2 RY)$ tem-se

$$\left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - \hat{E}] \right\} + \frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = 0 \quad (371)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - \hat{E}] &= -\frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] \\ &= l(l+1) \end{aligned} \quad (372)$$

onde a segunda equação possui o primeiro membro dependente de uma só variável e o segundo dependente da duas variáveis restantes. Como as variáveis são independentes entre si, a igualdade entre o primeiro e o segundo membro só pode resultar em uma constante, do contrário não seriam independentes, assim escolheu-se a constante $l(l+1)$ por questões práticas. Tratando da equação com as variáveis de ângulo, tem-se

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -l(l+1)Y \sin^2 \theta \quad (373)$$

separando as variáveis

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi) \quad (374)$$

tem-se

$$\left[\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + l(l+1) \sin^2 \theta \right] + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = 0 \quad (375)$$

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + l(l+1) \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = m^2 \quad (376)$$

onde o primeiro e o segundo membro da equação são dependentes de uma só variável, sendo assim só podem ser iguais a uma constante. Resolvendo a equação dependente somente de ϕ

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m^2\Phi = 0 \quad (377)$$

encontra-se a solução

$$\begin{aligned} \Phi(\phi) &= e^{im\phi} \\ \Phi(\phi + 2\pi) &= \Phi(\phi) \\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots &\Rightarrow e^{2\pi mi} = 1 \end{aligned} \quad (378)$$

e para a equação dependente somente de θ

$$\sin\theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + [l(l+1)\sin^2\theta - m^2]\Theta = 0 \quad (379)$$

encontra-se a solução

$$\Theta(\theta) = A \cdot P_l^m(\cos\theta) \quad (380)$$

onde P_l^m é a função associada de Legendre

$$P_l^m(w) = (1-w^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dw} \right)^{|m|} P_l(w) \quad (381)$$

e P_l o polinômio de Legendre

$$P_l(w) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dw} \right)^l (w^2 - 1)^l \quad (382)$$

O grau do polinômio de Legendre é dado por l , assim, se $|m| > l$, tem-se $P_l^m \equiv 0$ pois a ordem de derivação superará o grau do polinômio, zerando todos os termos.

Da condição de normalização tem-se

$$\int |\psi|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \int |R|^2 r^2 dr \int |Y|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = 1 \text{ e } \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$$
(383)

A normalização da função de onda angular é chamada harmônicos esféricos

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \varepsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} \cdot e^{im\phi} \cdot P_l^m(\cos \theta), \quad \varepsilon = \begin{cases} (-1)^m, & m \geq 0 \\ 1, & m \leq 0 \end{cases}$$
(384)

O átomo de hidrogênio consiste em um elétron, partícula de carga negativa, girando em torno de um próton, partícula de carga igual à do elétron, só que positiva, e de massa 1840 vezes maior que a do elétron. O potencial é dado a partir da lei de Coulomb, e em unidades do Sistema Internacional é

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r}$$
(385)

que substituindo na equação radial (dependente somente da variável r), e fazendo a substituição $u(r) = r \cdot R(r)$, tem-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = \hat{E}u$$
(386)

simplificando

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u, \quad \rho = \kappa r, \quad \rho_0 = \frac{me^2}{2\pi\varepsilon_0 \hbar^2 \kappa}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$
(387)

introduzindo a função

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho)$$
(388)

tem-se

$$\rho \frac{d^2v}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)]v = 0$$
(389)

com solução expressa em série de potências

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^j, \quad a_{j+1} = \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} a_j, \quad \rho_0 = 2n \quad (390)$$

e então temos as energias permitidas

$$E_n = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (391)$$

O polinômio $v(\rho)$ é uma função conhecida, que pode ser escrita como

$$v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) \quad (392)$$

onde

$$L_{q-p}^p(w) = (-1)^p \left(\frac{d}{dw} \right)^p L_q(w) \quad (393)$$

é o polinômio associado de Laguerre, e

$$L_q(w) = e^w \left(\frac{d}{dw} \right)^q (e^{-w} w^q) \quad (394)$$

é o polinômio de Laguerre.

A função de onda espacial para o átomo de hidrogênio é dada por

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) \quad (395)$$

onde

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) \quad (396)$$

A função de onda espacial, já normalizada toma a forma

$$\psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \cdot e^{-r/na} \cdot \left(\frac{2r}{na} \right)^l \cdot L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right) \cdot Y_l^m(\theta, \phi), \quad (397)$$

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

A partir da função de onda, pode-se ter os valores esperados das quantidades físicas, a densidade de probabilidade de se encontrar o elétron numa dada região. Uma representação bem intuitiva, é a que representa o elétron como uma nuvem, onde as regiões de maior concentração indicam onde se pode encontrar com maior probabilidade o elétron.

12. COMPUTAÇÃO GRÁFICA

A computação gráfica trata-se de um ramo da computação dedicada ao desenvolvimento de técnicas e de algoritmos para geração, tratamento, apresentação e armazenamento de imagens em computadores. Aplicações gráficas exigem um número extenso de cálculos, portanto a evolução dos computadores propiciou o avanço da computação gráfica.

Atualmente, os cálculos relacionados ao processamento gráfico ficam concentrados em sua maioria nas placas aceleradoras de gráfico, que são destinadas especificamente para este fim, possuindo poderosos processadores gráficos e grande quantidade de memória dedicada.

A computação gráfica encontra-se em vários ramos da ciência, como por exemplo na engenharia, nas simulações astronômicas, nas análises de aerodinâmica, entre tantos outros ramos.

Com o intuito de exemplificar alguns dos comandos utilizados da área da computação gráfica, será apresentado alguns comandos (os referentes ao desenho e à transformações nestes) e explicações sobre eles, sem aprofundar muito, pois não é o foco deste projeto, apesar de se utilizar desta área.

12.1. OpenGL (Open Graphics Library)

A OpenGL trata-se de uma biblioteca de rotinas gráficas, cuja especificação é gerenciado pelo consórcio independente ARB (Architecture Review Board), fundado em 1992 e constituído por empresas do ramo, das quais se encontram a 3Dlabs, Apple, nVIDIA e SUN.

A OpenGL inclui 250 funções, das quais 200 são da própria OpenGL e as 50 restantes são da biblioteca GLU (OpenGL Utility Library), pertencente à OpenGL. A OpenGL disponibiliza rotinas referentes à construção de objetos gráficos como linhas, pontos e polígonos, ficando a cargo da GLU a disponibilização de superfícies, curvas, matrizes para operações de projeção e orientação de visualização, entre outras funções.

A GLUT (OpenGL Utility Toolkit) foi criada por Mark Kilgard com o intuito de incluir elementos de interface gráfica com o usuário (GUI) que sejam independentes do

sistema operacional, como por exemplo o tratamento de eventos de teclado, de mouse, criação de menus pop-up, gerenciamento de janelas, entre outras funções.

12.1.1. Padrão na Nomenclatura

As funções das bibliotecas da OpenGL possuem nomes padronizados, de forma a facilitar o entendimento das mesmas, sendo assim divide-se seus nomes em quatro partes: a 1ª referente à biblioteca à qual pertence, a 2ª referente ao comando que representa, 3ª referente à quantidade de parâmetros passados e a 4ª referente ao tipo dos parâmetros. Essa padronização será vista à medida que for dados os exemplos.

12.1.2. Desenho de um Polígono

Para se desenhar um triângulo tem-se os seguintes elementos: a cor, a chamada do tipo de polígono (triângulo neste caso) e os vértices do polígono em questão (três vértices neste caso), o código é o seguinte:

```
glBegin (GL_TRIANGLES);
    glColor3f (vermelho, verde, azul);
    glVertex3f ( x1, y1, z1);
    glVertex3f ( x2, y2, z2);
    glVertex3f ( x3, y3, z3);
glEnd ();
```

onde *glBegin* determina que tipo de objeto a ser desenhado, *GL_TRIANGLES* especifica que o objeto triângulo será o desenhado. O comando *glColor3f* define a cor, que neste caso é dado pelo valor das variáveis *vermelho*, *verde* e *azul*, que estão dispostas exatamente nas posições referentes a estas cores, ou seja: 1º parâmetro referente à intensidade de vermelho, 2º parâmetro referente à intensidade do verde e o 3º parâmetro referente à intensidade de azul, todos com valores entre 0 e 1. Logo após a definição da cor vêm as definições de cada um dos três vértices, dados pelo comando *glVertex3f*, cujos parâmetros são dados pelo valor de cada uma das variáveis. Analizando o primeiro vértice definido, tem-se: como 1º parâmetro o valor da coordenada x (no sistema de referência do universo do desenho), dado por *x1*, como 2º parâmetro o valor da coordenada y (no sistema de referência do universo do desenho), dado por *y1* e por último, como 3º parâmetro o valor

da coordenada z (no sistema de referência do universo do desenho), dado por $z1$. E finalizando o desenho vem o comando `glEnd()`, fechando este conjunto de comandos.

Com relação à padronização dos nomes, começando por analisar o comando `glColor3f`, tem-se: `gl` referente à biblioteca à qual pertence, `Color` o comando a que se refere, ou seja, atribuição de cor, `3f` refere-se aos parâmetros usados, ou seja, 3 parâmetros do tipo `float`. Do mesmo modo para o comando `glVertex3f`: `gl` refere-se à biblioteca, `Vertex` refere-se ao comando para definir os vértices, `3f` refere-se aos 3 parâmetros do tipo `float`.

Além de `GL_TRIANGLES` que refere-se ao desenho de triângulos, pode-se usar: `GL_POINTS` para pontos, `GL_LINES` para linhas, `GL_POLYGON` para polígonos, entre outros, seguindo o mesmo raciocínio que o considerado no exemplo anterior.

12.1.3. Transformações Geométricas

As transformações geométricas são transformações operadas em cima dos valores de coordenadas dos objetos, resultando numa translação, rotação ou mudanças na escala. Algumas dessas operações, quando combinadas, levam a resultados diferentes, dependendo da ordem em que são aplicadas.

As transformações geométricas utilizam-se de matrizes, para realizar as operações sobre os objetos. Deste modo, inicialmente especifica-se com o comando `glMatrixMode` que serão realizados comandos de transformações geométricas, assim:

```
glMatrixMode( GL_MODELVIEW );
```

onde o parâmetro `GL_MODELVIEW` especifica que será trabalhado transformações geométricas (também serve para visualização da cena, pois transladar a câmera, equivale a transladar os objetos do cenário, do mesmo modo vale para a rotação e a escala). Logo após, deve-se inicializar a matriz com o seguinte comando:

```
glLoadIdentity ( );
```

tal comando inicializa a matriz com a matriz identidade. A partir disto pode-se iniciar os comandos das transformações seguidos dos comandos que desenharem os objetos em que serão operadas as mesmas. A combinação de vários comandos de transformação

geométrica é resultado da multiplicação de todas as matrizes dessas transformações, resultando numa única matriz que será multiplicada pelas coordenadas que constituem os objetos em que serão operados as transformações.

Analisando primeiramente a transformação de translação, tem-se o seguinte comando:

```
glTranslatef ( transx, transy, transz );
```

O comando *glTranslatef* refere-se à translação do objeto (àquele que vem após ele, podendo ser um ou mais objetos) com os seguintes parâmetros: o valor do 1º parâmetro (referente à coordenada *x*) dado pelo valor da variável *transx*, o valor do 2º parâmetro (referente à coordenada *y*) dado pelo valor da variável *transy* e o valor do 3º parâmetro (referente à coordenada *z*) dado pelo valor da variável *transz*. Com relação ao padrão de nomenclatura, *gl* refere-se à biblioteca, *Translate* refere-se ao comando de translação e *f* refere-se ao tipo do parâmetro ser do tipo *float*. Utilizar este comando resultaria numa mudança de lugar do objeto, levar de um ponto a outro.

Alisando a transformação de escala, tem-se o seguinte comando:

```
glScalef ( scalx, scaly, scalz );
```

O comando *glScalef* refere-se às mudanças das escalas referentes às três dimensões do objeto, com os seguintes parâmetros: o valor do 1º parâmetro (referente à coordenada *x*) dado pelo valor da variável *scalx*, o valor do 2º parâmetro (referente à coordenada *y*) dado pelo valor da variável *scaly* e o valor do 3º parâmetro (referente à coordenada *z*) dado pelo valor da variável *scalz*. Com relação ao padrão de nomenclatura, *gl* refere-se à biblioteca, *Scale* refere-se ao comando de mudança de escala e *f* refere-se ao tipo do parâmetro ser do tipo *float*. Utilizar este comando resultaria numa mudança de altura, largura e comprimento do objeto.

Finalmente, analisando a transformação de rotação, tem-se os seguintes comandos:

```
glRotatef ( angx, 1.0, 0.0, 0.0 );  
glRotatef ( angy, 0.0, 1.0, 0.0 );  
glRotatef ( angz, 0.0, 0.0, 1.0 );
```

cada um dos três comandos refere-se à rotação com relação ao eixo x , y e z , respectivamente. Analisando o primeiro comando, tem-se os seguintes parâmetros: o valor do 1º parâmetro (referente ao valor do ângulo em graus) dado pelo valor da variável *angx*, o valor do 2º parâmetro (referente à rotação em relação ao eixo x) dado pelo valor *1.0*, o valor do 3º parâmetro (referente à rotação em relação ao eixo y) dado pelo valor *0.0* e o valor do 4º parâmetro (referente à rotação em relação ao eixo z) dado pelo valor *0.0*. Com relação ao padrão de nomenclatura, *gl* refere-se à biblioteca, *Rotate* refere-se ao comando de mudança de escala e *f* refere-se ao tipo do parâmetro ser do tipo *float*. Utilizar este comando resultaria numa rotação do objeto em relação ao eixo x . Analogamente, o segundo refere-se à rotação do objeto em relação ao eixo y e o terceiro comando é uma rotação em relação ao eixo z .

Às vezes é desejável aplicar as transformações sobre objetos que compõem um objeto maior, e manter os vínculos entre os objetos, para que não haja um desmembramento do mesmo. Tomando como exemplo um trator, quando as rodas giram, todo o trator se move, as rodas mantêm seus centros ligados ao trator, e quando a “pá” do trator move-se para cima ou para baixo, os centros dos braços mecânicos mantêm suas posições relativas ao trator. Para se ter um efeito análogo, usa-se de estruturas hierárquicas. Utilizando-se do comando *glPushMatrix*

```
glPushMatrix();
```

empilha-se a matriz de transformação corrente (matriz que guarda todas as transformações já utilizadas) e para desempilhar utiliza-se o comando *glPopMatrix*

```
glPopMatrix();
```

dessa forma pode-se acumular ou desacumular transformações.

12.1.4. Visualização

Inicialmente, tem-se dois sistemas de referência a serem considerados: o do universo (usado na geração dos objetos) e o da tela (usado para especificar a área do monitor a ser usada).

A seguir delimita-se a região do monitor em que será visualizado o ambiente criado, que é a janela, usando do sistema de referência do monitor. A janela de é definida pelos comandos

```
glutInitWindowSize ( largura1, altura1 );  
glutInitWindowPosition ( x1, y1 );  
glutCreateWindow ("Nome da janela");
```

onde o comando *glutInitWindowPosition* posiciona a janela com relação ao monitor, o parâmetro *x1* (do tipo inteiro) refere-se à distância do canto esquerdo da janela ao canto esquerdo do monitor e o parâmetro *y1* (do tipo inteiro) refere-se à distância do canto superior da janela ao canto superior do monitor. O comando *glutInitWindowSize* define as dimensões da janela, o parâmetro *largura1* (do tipo inteiro) define a largura da janela e o parâmetro *altura1* (do tipo inteiro) define a sua altura. O comando responsável pela criação da janela de exibição é o *glutCreateWindow* que recebe como parâmetro o nome da janela.

Dentro da janela, pode-se delimitar a região que será usada, chamada de janela de exibição. A região (retângular) é delimitada usando o comando *glViewport*

```
glViewport (x2, y2, (GLsizei) largura2, (GLsizei) altura2);
```

onde o parâmetro *x2* (do tipo inteiro) refere-se à distância do canto esquerdo da janela de exibição ao canto esquerdo da janela, o parâmetro *y2* (do tipo inteiro) refere-se à distância do canto superior da janela de exibição ao canto superior da janela, o parâmetro *largura2* (do tipo inteiro) refere-se à largura da janela de exibição e o parâmetro *altura2* (do tipo inteiro) refere-se à altura da janela de exibição.

A delimitação da região do ambiente que será observada é denominada de janela de seleção. A janela de seleção faz uso do sistema de referência do universo. Para o caso de ambientes bidimensionais, usam-se os comandos

```
glMatrixMode ( GL_PROJECTION );  
glLoadIdentity ( );  
gluOrtho2D ( esquerda, direita, inferior, superior );
```

onde o comando *glMatrixMode* define qual matriz a se trabalhar, *GL_PROJECTION* seleciona a matriz de projeção, *glLoadIdentity* inicializa a matriz com a matriz identidade,

o comando *gluOrtho2D* define a região (retangular) do ambiente gráfico que será visualizado (usando de parâmetros do tipo precisão dupla - double), o parâmetro *esquerda* define a posição do canto esquerdo da janela de seleção (valor mínimo de x), o parâmetro *direita* define a posição do canto direito da janela de seleção (valor máximo de x), o parâmetro *inferior* define a posição do canto inferior da janela de seleção (valor mínimo de y) e o parâmetro *superior* define a posição do canto superior da janela de seleção (valor máximo de y).

No caso de se usar um ambiente tridimensional, a região a ser visualizada trata-se de um volume que é determinado dependendo do tipo de projeção escolhida. A projeção trata-se do mapeamento do ambiente tridimensional para um plano bidimensional, que representa a imagem formada no monitor. Existem dois tipos de projeções: a projeção paralela ortográfica (onde são mantidas as escalas, independente da posição em que se encontra o objeto em relação ao volume de visualização) e a projeção perspectiva (onde há variação da escala dependendo da distância em que se encontra o objeto no volume de visualização, criando a sensação de profundidade).

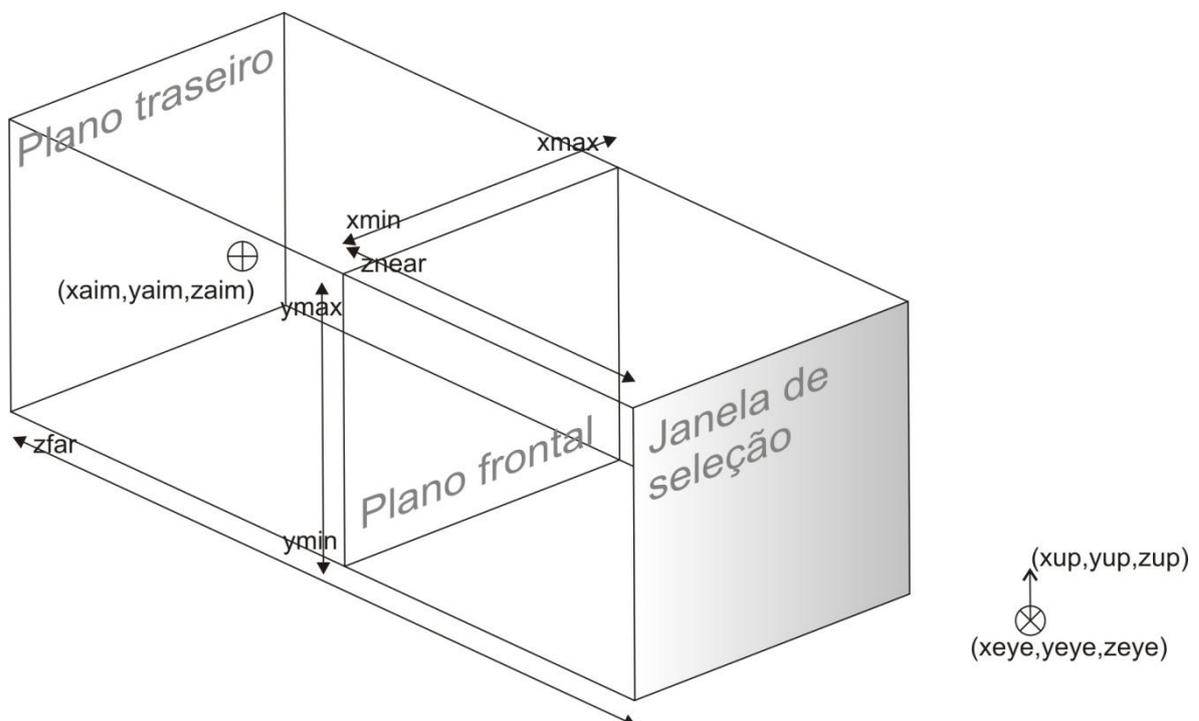


Figura 2 Projeção paralela ortográfica

Os comandos para a visualização em projeção paralela ortográfica são:

```

glMatrixMode ( GL_PROJECTION );
glLoadIdentity ( );
glOrtho ( xmin, xmax, ymin, ymax, znear, zfar );

```

o comando *glMatrixMode* define a matriz que será trabalhada, o parâmetro *GL_PROJECTION* seleciona a matriz de projeção, o comando *glLoadIdentity* inicializa a matriz com a matriz identidade e o comando *glOrtho* refere-se à projeção paralela ortográfica, seus parâmetros são do tipo de precisão dupla (double) e estão demonstrados na fig. 2. Todos os objetos (ou as partes deles) contidos no espaço definido entre os planos frontal e traseiro serão os visualizados, os demais não aparecem na visualização.

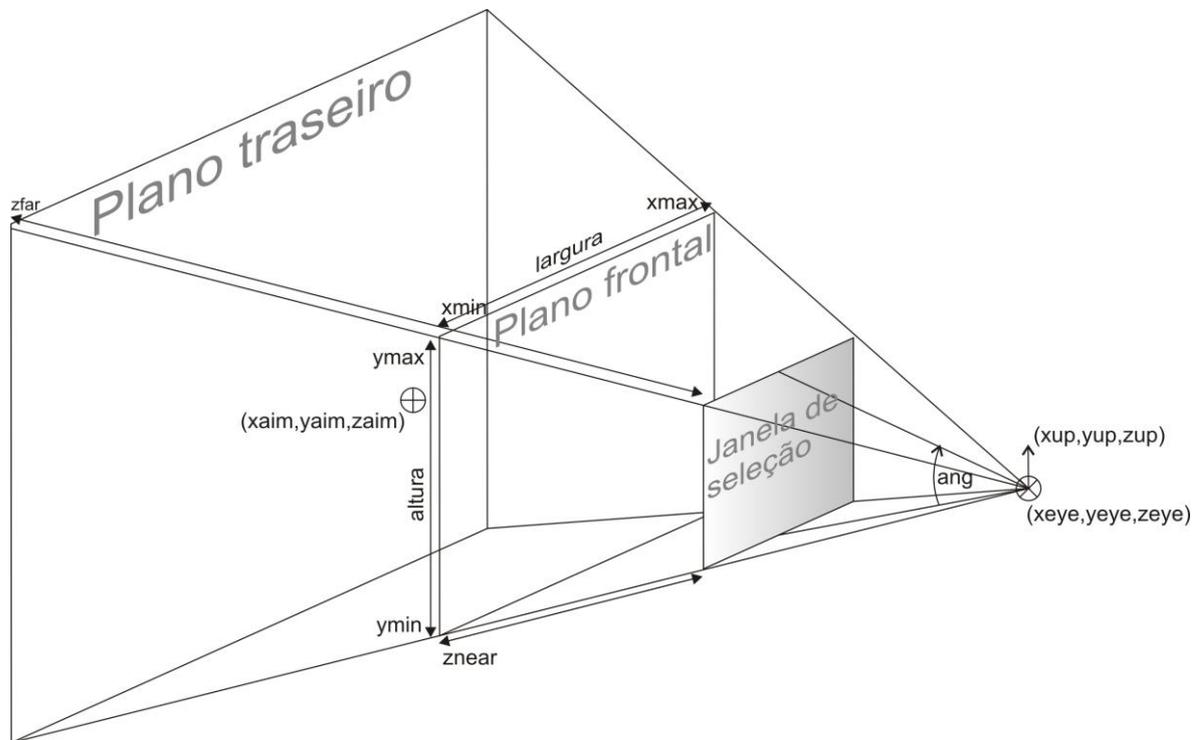


Figura 3 Projeção perspectiva

Os comandos para a visualização em projeção perspectiva são:

```

glMatrixMode ( GL_PROJECTION );
glLoadIdentity ( );
gluPerspective( ang, razao, znear, zfar );

```

o comando *glMatrixMode* define a matriz que será trabalhada, o parâmetro *GL_PROJECTION* seleciona a matriz de projeção, o comando *glLoadIdentity* inicializa a matriz com a matriz identidade e o comando *gluPerspective* refere-se à projeção

perspectiva, seus parâmetros são do tipo de precisão dupla (double) e estão demonstrados na fig. 3, com exceção do parâmetro *razão*, que é a razão de quantas vezes a largura é maior que a altura. Da mesma forma que na projeção paralela ortográfica, todos os objetos (ou as partes deles) contidos no espaço definido entre os planos frontal e traseiro serão os visualizados, os demais não aparecem na visualização.

Para a projeção perspectiva pode-se usar também estes comandos:

```
glMatrixMode ( GL_PROJECTION );  
glLoadIdentity ( );  
glFrustum ( xmin, xmax, ymin, ymax, znear, zfar );
```

onde o comando *glFrustum* também representa a projeção perspectiva, mas com parâmetros diferentes (todos estão demonstrados na fig. 3).

Definido o volume de visualização, basta definir agora os atributos da câmera, dados pelos comandos:

```
glMatrixMode (GL_MODELVIEW);  
glLoadIdentity();  
gluLookAt ( xeye, yeye, zeye, xaim, yaim, zaim, xup, yup, zup );
```

o comando *glMatrixMode* define a matriz que será trabalhada, o parâmetro *GL_MODELVIEW* seleciona a matriz do modelo, o comando *glLoadIdentity* inicializa a matriz com a matriz identidade e o comando *gluLookAt* refere-se à câmera, seus parâmetros são do tipo de precisão dupla (double) e estão demonstrados na fig. 2 e na fig. 3, são eles: *xeye*, *yeye* e *zeye* definem a posição da câmera no sistema de referência do universo, *xup*, *yup* e *zup* definem a orientação da câmera (se está na horizontal, na vertical, para cima, para direita, etc.) e os três últimos, *xaim*, *yaim* e *zaim* definem onde a câmera está mirando.

13. METODOLOGIA

13.1. Materiais

O computador em que o programa foi implementado constitui de um processador Intel Pentium D 945 de 3,4GHz, com 2x2MB de memória cache L2, placa mãe Asus P5VDC-X, 1,5GB de memória RAM Kingston 533MHz DDR2, placa de vídeo nVIDIA GeForce 6200 TurboCache (MSI NX6200TC-E) com velocidade de GPU de 350MHz e velocidade da memória dedicada de 300MHz, com 64MB de memória dedicada e 495MB de memória compartilhada.

O programa foi implementado usando a linguagem de programação C++ utilizando-se do compilador do Microsoft Visual Studio 2008 e biblioteca gráfica GLUT (OpenGL Utility Toolkit) no ambiente Microsoft Windows XP.

13.2. Desenvolvimento

O projeto exposto teve sua implementação iniciada em novembro de 2007, começando-se pela implementação das funções elementares por meio da expansão em séries de potências (funções seno, tangente, exponencial, etc.). Essas funções auxiliam na construção das equações que o projeto visa como resultado e na sua representação gráfica.

As funções usadas são aproximações de funções elementares por polinômios. Como visto anteriormente, tais funções são representadas por séries de potências contendo infinitos termos. Por motivos de praticidade (pois é impossível um cálculo com infinitos termos), considera-se somente uma parte inicial da série, somente os primeiros termos, causando um erro de truncamento, devido a essa aproximação. O erro de truncamentos é o erro causado quando a partir de um certo termo, começa-se a desprezar os demais, tornando a série que antes continha um número infinito de termos em uma série contendo um número finito de termos. Quanto maior o número de termos considerados no cálculo, maior será sua precisão, em contrapartida, mais tempo se levará para o cálculo. Quanto menor for o número de termos considerados, menor é a precisão e menos tempo se gasta.

Nem sempre é uma tarefa fácil delimitar o erro, mas em séries alternadas (que possui termos positivos e negativos intercalados) pode-se considerar o erro através do

termo descartado que é posterior ao último termo considerado. Por isso, no caso das séries de potências foi considerado para definir até que termo seria considerado, o seguinte critério: encontrando o termo $(n+1)$ com valor absoluto menor que o erro, considera-se os n termos anteriores a ele. Procurou-se superestimar o erro para evitar que discrepâncias aparecessem.

No decorrer da implementação das funções elementares, observou-se que para valores negativos grandes, a função exponencial passava a ser negativa, o que não deveria ocorrer, devido ao fato de que expansão em série de Taylor garantiria sempre um valor positivo desta função, ao menos teoricamente, mas devido a representação dos números no computador ser em binário, algumas frações que em decimal não são dízimas periódicas, em binário acabam se tornando. Além disso, há um tamanho de memória limitado para se representar os números, ultrapassando esse tamanho ocorre o truncamento. Esses erros podem ser acumulados a cada parcela da qual constitui o cálculo da função exponencial, e em um dado momento torna-o negativo. Para contornar tal problema, quando o expoente era negativo, de acordo com a propriedade de potenciação, fazia-se a seguinte substituição

$$a^{-b} = \frac{1}{a^b} \quad (398)$$

Outro problema encontrado foi que a dedução da fórmula do polinômio de Legendre inicia-se com o termo de maior potência e a partir dele vai decaindo para o termo de menor potência. Para reduzir o número de cálculos, utilizando-se do primeiro termo (o de maior potência), poderia calcular os demais termos, e para decair a potência, basta dividir (utilizando-se das propriedades de divisão de potências de mesma base)

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^m \frac{(2n-2m)!}{2^n m!(n-2m)!(n-m)!} x^{n-2m} \\ &= x^n \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^m \frac{(2n-2m)!}{2^n m!(n-2m)!(n-m)!} \cdot \frac{1}{x^{2m}} \end{aligned} \quad (399)$$

Mas ocorre o problema que quando a o valor da variável x for nulo, a divisão não é possível. Assim para contornar esse problema, recorreu-se à fórmula de recorrência para este polinômio, e também para outros, mantendo assim o reaproveitamento dos cálculos, aumentando a velocidade do algoritmo.

Algumas fórmulas possuíam frações com numerador e denominador compostos de fatoriais, que cresciam muito rápido, a princípio, uma solução pensada era a de transformar

as frações em multiplicações de frações contendo cada uma um fator do fatorial, por exemplo

$$\frac{n!}{m!} = \frac{n}{m} \cdot \frac{n-1}{m-1} \cdot \frac{n-2}{m-2} \cdot \dots \quad (400)$$

mas foi descartada essa hipótese, pois poderia inserir muitos erros de truncamento das operações de divisão.

As fórmulas escritas em séries de potências possuem como critério para parar o somatório quando o termo sendo calculado for menor que o erro especificado. No geral as fórmulas convergem rápido, tornando seu processo de cálculo eficaz.

A implementação gráfica decorreu de forma tranqüila, tendo como dificuldade somente as escolhas dos valores que as variáveis assumiriam. No uso da computação gráfica, os valores passados para as rotinas de desenho estão representados em coordenadas cartesianas, assim fez-se necessário algumas vezes de conversões do sistema polar para o cartesiano.

14. RESULTADOS

Neste projeto apresentou-se que uma partícula é totalmente definida a partir de sua função de onda, e que qualquer quantidade física relacionada à partícula, pode ser obtida a partir de sua função de onda. Viu-se que as quantidades físicas são geralmente representadas por operadores hermitianos.

Também apresentou-se que o quadrado do módulo da função de onda de uma partícula, significa a distribuição de probabilidade da mesma. A seguir mostra-se alguns gráficos relacionados à função de onda para o oscilador harmônico simples.

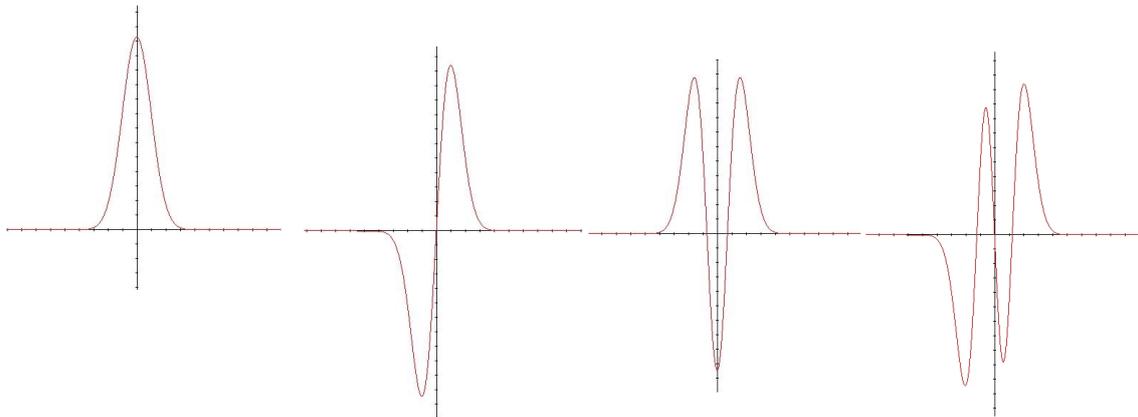


Figura 4 Função de onda dos primeiros quatro estados estacionários do oscilador harmônico simples

O quadrado das funções de onda retorna a densidade de probabilidade do oscilador harmônico simples

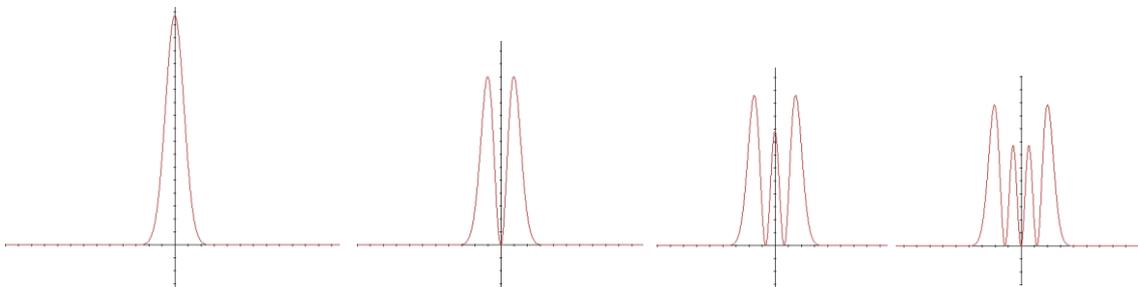


Figura 5 Distribuição de probabilidade dos primeiros quatro estados estacionários do oscilador harmônico simples

A seguir apresenta-se gráficos referentes à densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. O núcleo do átomo possui uma massa de cerca de 2000

vezes a massa do elétron, assim pode-se considerá-lo imóvel. É feita uma comparação com gráficos disponibilizados pelo site do Maple (www.maplesoft.com), há somente uma pequena diferença, referente ao fato dos gráfico conseguido a partir do algoritmo estar rotacionado em 90° com relação ao outro gráfico.

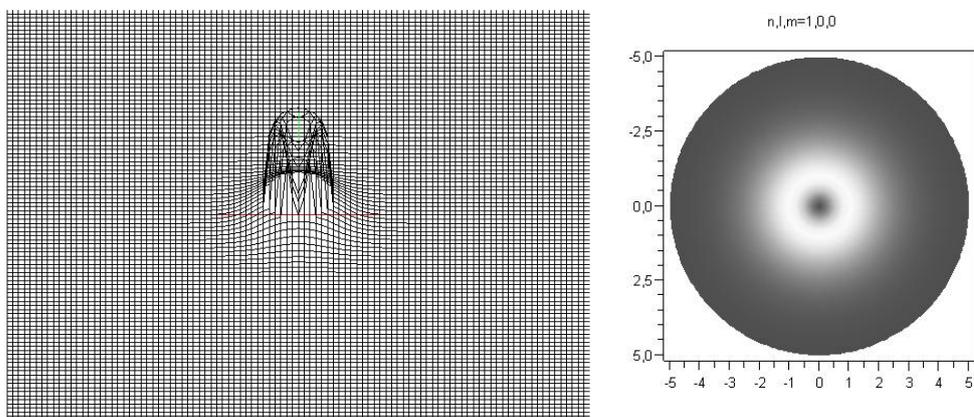


Figura 6 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$

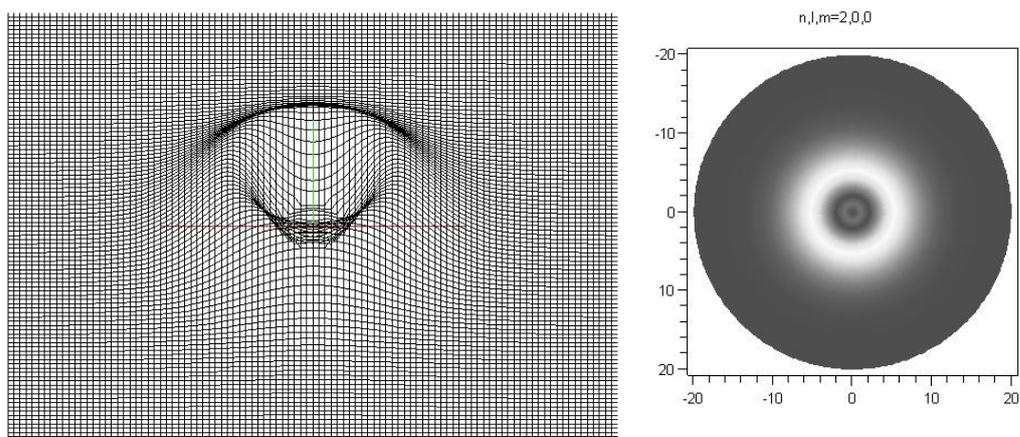


Figura 7 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 2$, $l = 0$, $m = 0$

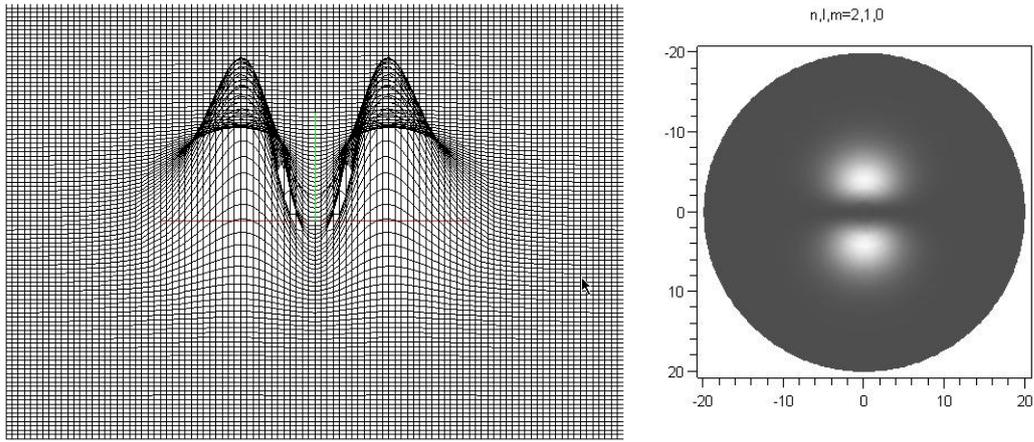


Figura 8 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 2, l = 1, m = 0$

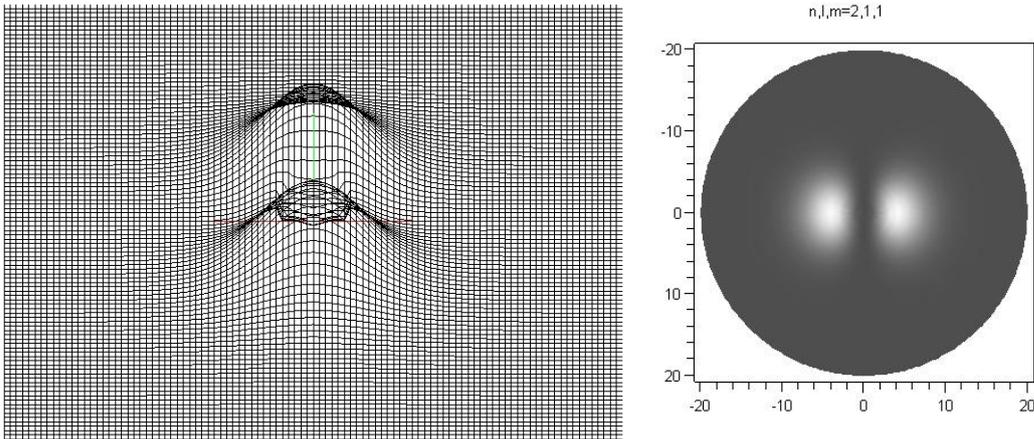


Figura 9 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 2, l = 1, m = 1$

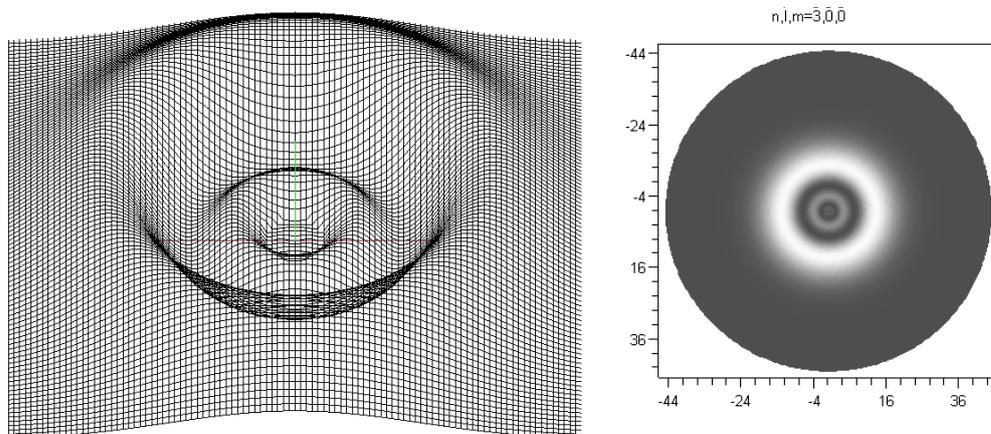


Figura 10 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 3, l = 0, m = 0$

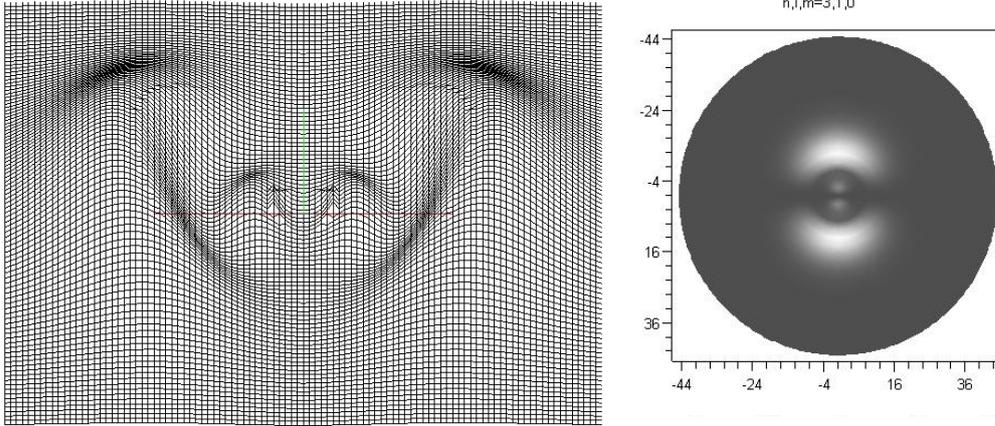


Figura 11 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 3$, $l = 1$, $m = 0$

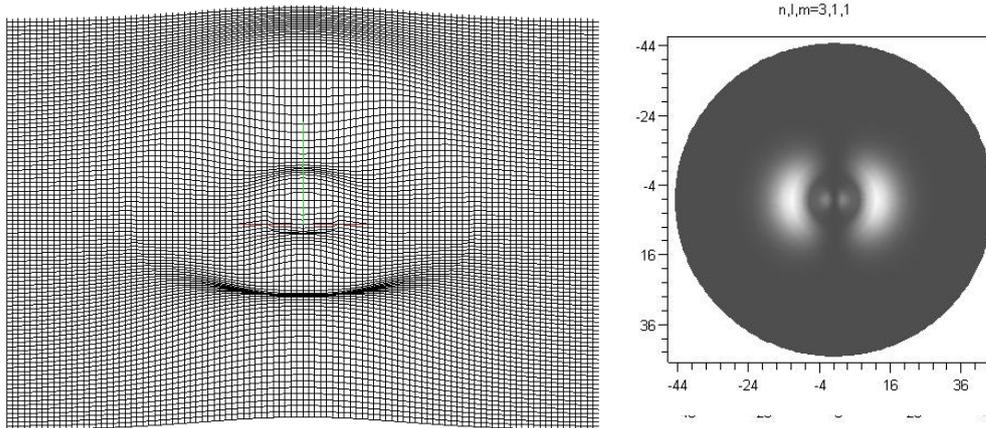


Figura 12 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 3$, $l = 1$, $m = 1$

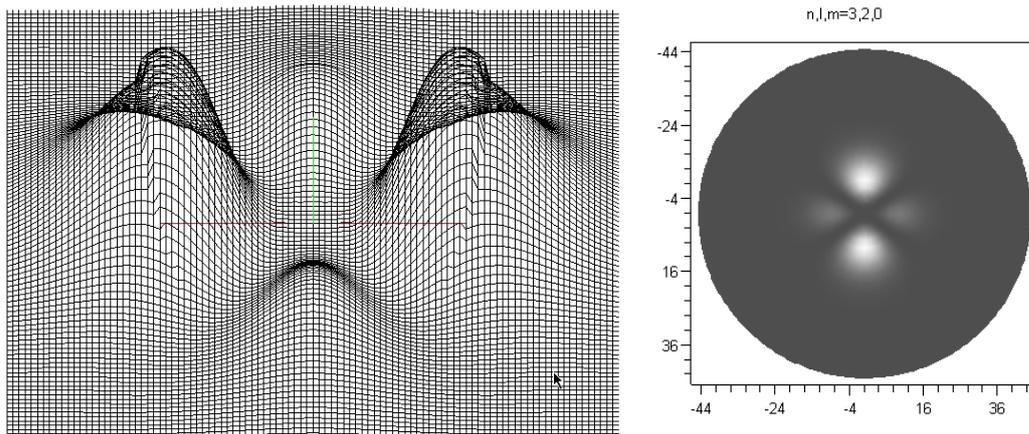


Figura 13 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 3, l = 2, m = 0$

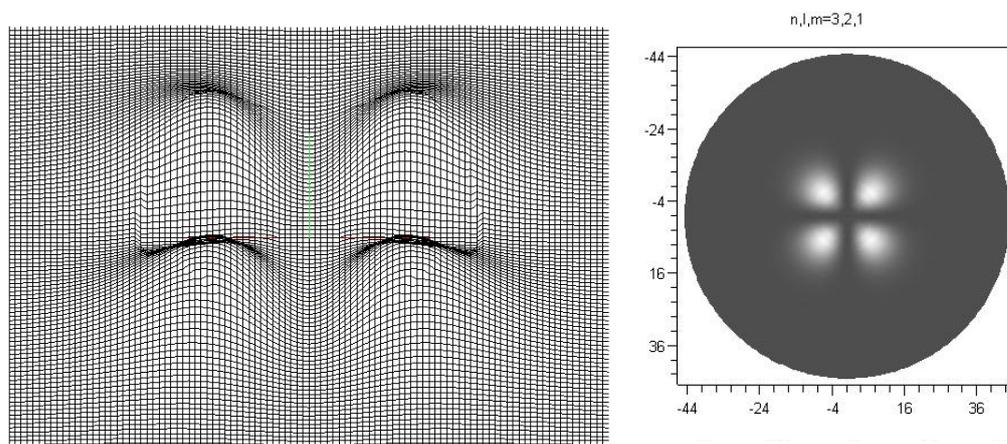


Figura 14 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 3, l = 2, m = 1$

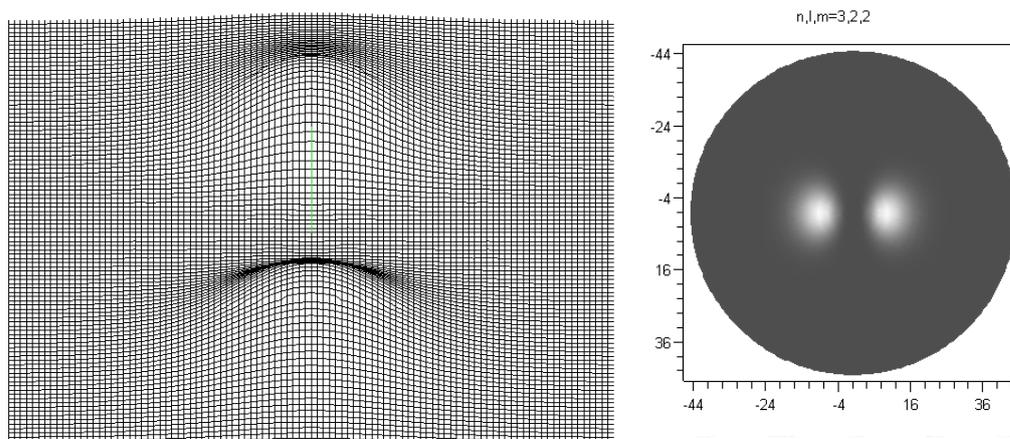


Figura 15 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 3, l = 2, m = 2$

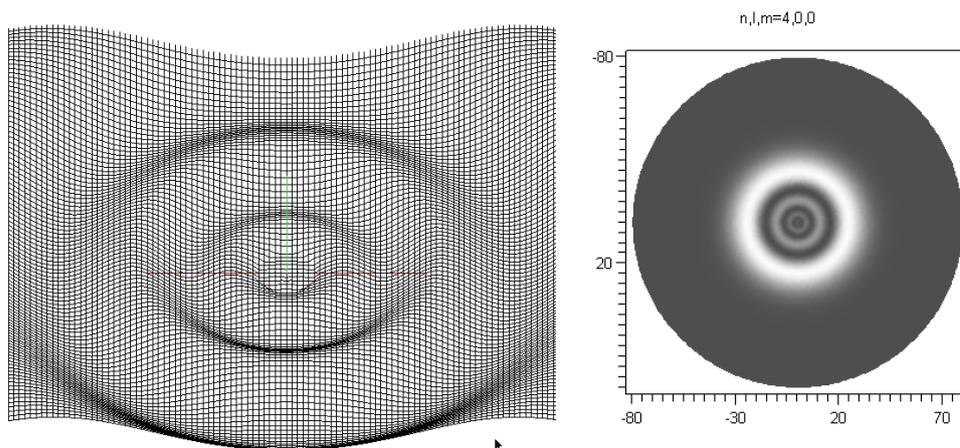


Figura 16 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple).
 Números quânticos: $n = 4$, $l = 0$, $m = 0$

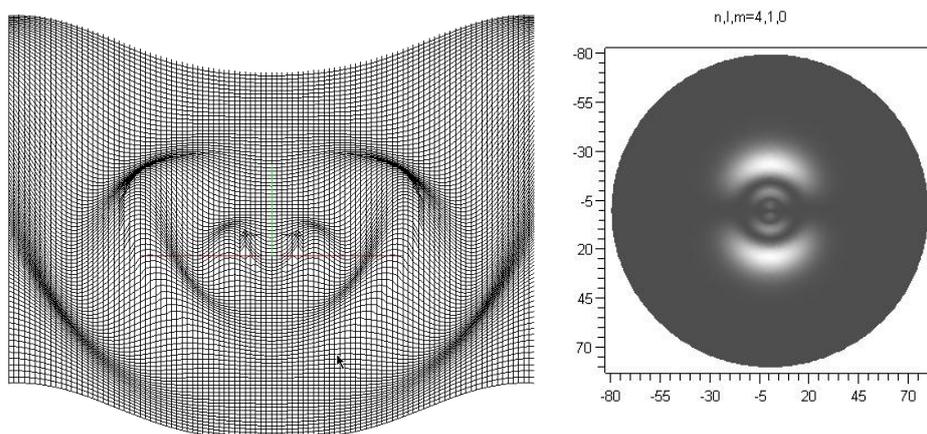


Figura 17 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple).
 Números quânticos: $n = 4$, $l = 1$, $m = 0$

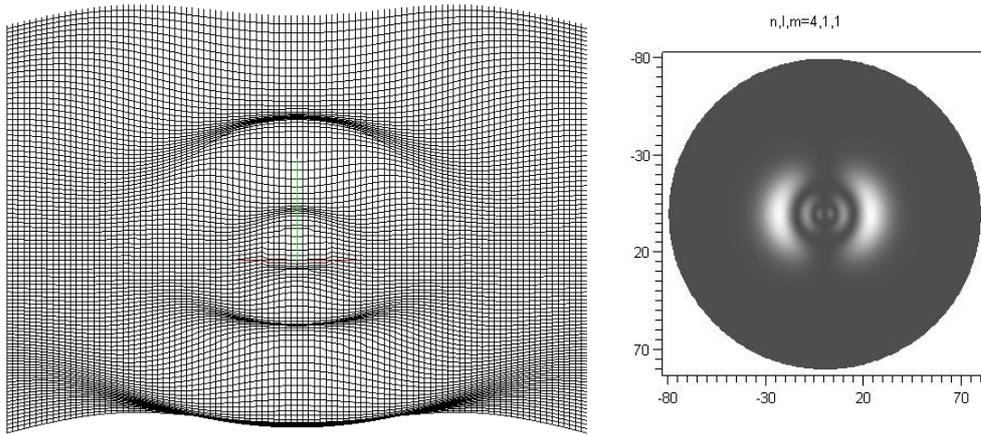


Figura 18 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 4$, $l = 1$, $m = 1$

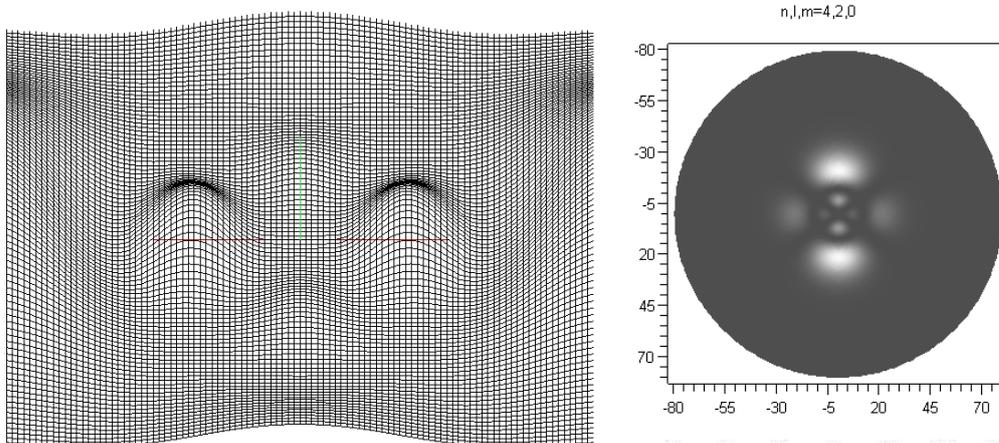


Figura 19 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 4$, $l = 2$, $m = 0$

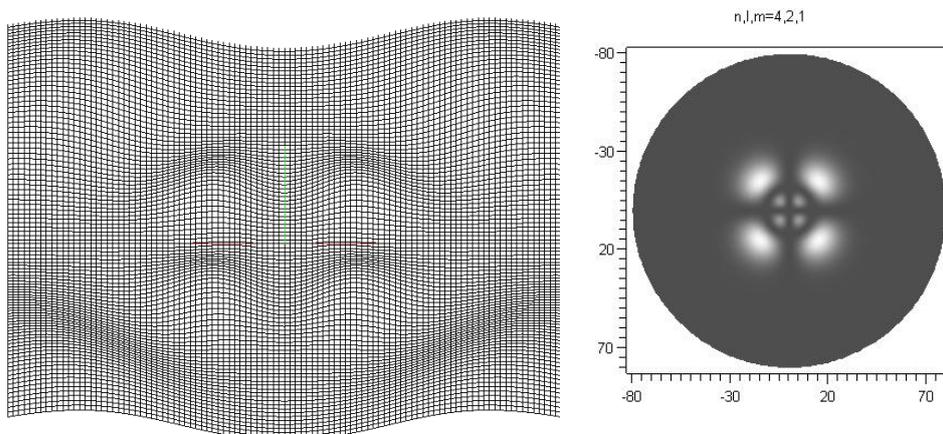


Figura 20 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 4$, $l = 2$, $m = 1$

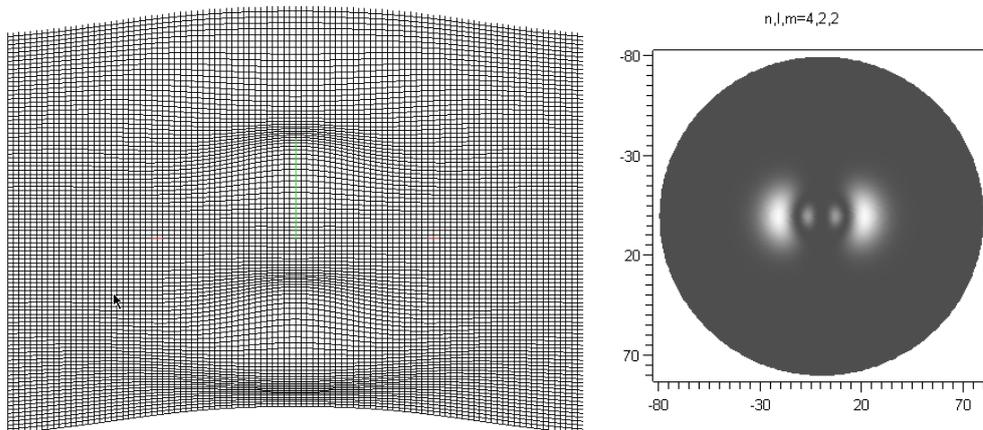


Figura 21 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 4$, $l = 2$, $m = 2$

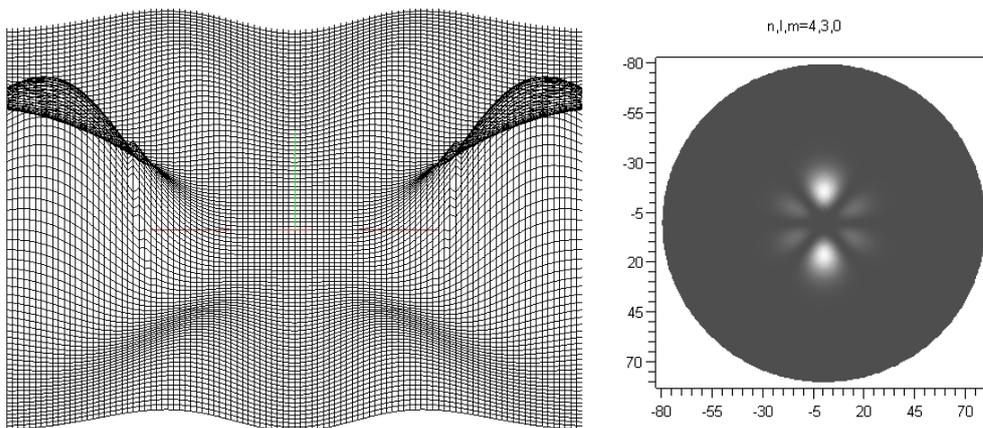


Figura 22 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 4$, $l = 3$, $m = 0$

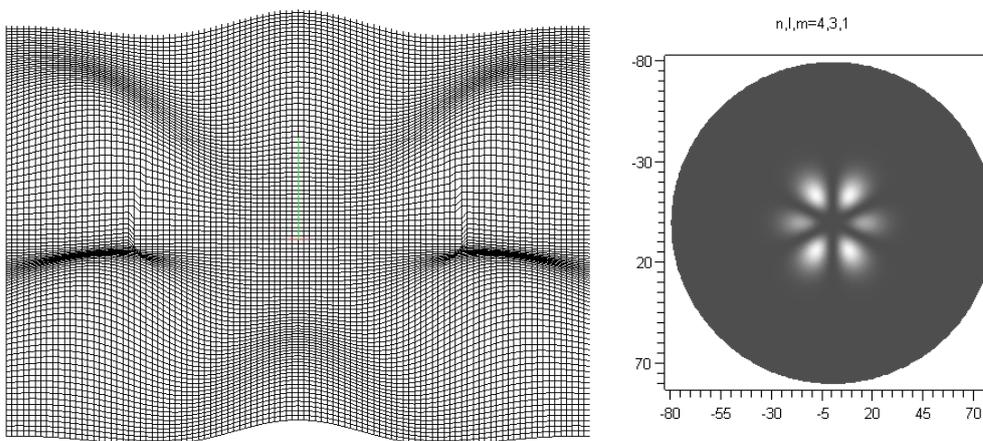


Figura 23 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 4$, $l = 3$, $m = 1$

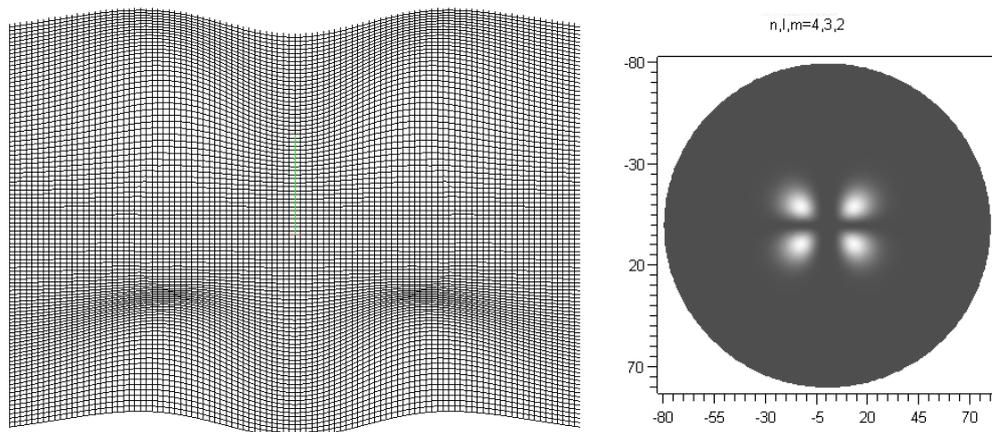


Figura 24 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 4$, $l = 3$, $m = 2$

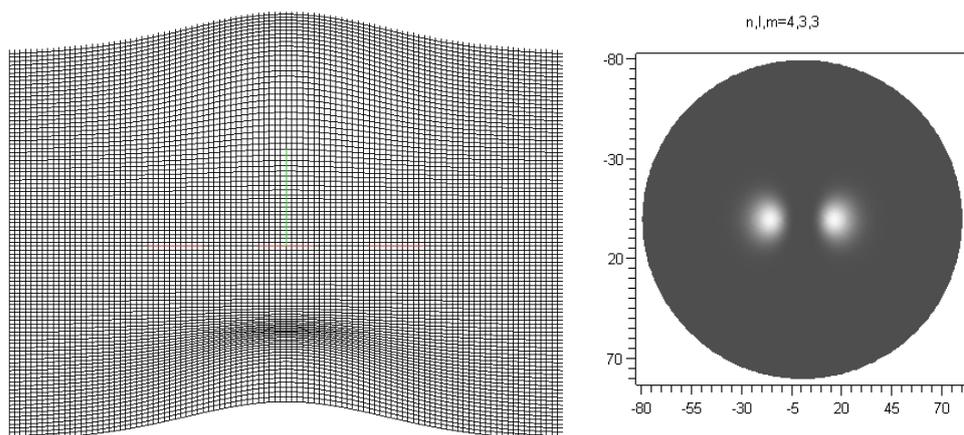


Figura 25 Densidade de probabilidade para o elétron do átomo de hidrogênio. Distribuição ao longo do plano xy (gráfico da esquerda obtido pelo algoritmo, gráfico da direita obtido através do software Maple). Números quânticos: $n = 4$, $l = 3$, $m = 3$

Esses gráficos representam a chance de se encontrar o elétron no átomo de hidrogênio. É possível notar que é nula a probabilidade de se encontrar o elétron no centro do átomo, ou seja, no núcleo. Nota-se que os gráficos que possuem os números quânticos $l = 0$ e $m = 0$ possuem semelhanças, tratam-se de círculos concêntricos. Percebe-se também que todos os gráficos possuem simetrias.

15. CONCLUSÃO

Durante o trabalho viu-se que para se caracterizar uma partícula, basta saber a sua função de onda. A partir da função de onda pode-se retirar toda a informação referente à partícula. Viu-se que as quantidades físicas são representadas por operadores. Viu-se que certos pares de quantidades físicas não podem ser mensurados com igual precisão, querendo obter precisão em uma, perde-se na outra. Também se viu a discretização da energia, mostrando que a partícula não pode ter qualquer quantidade de energia, a não ser aquelas permitidas. Percebeu-se que os sistemas quânticos em que a partícula está presa, tem a característica de discretizar a energia.

Estudou-se a natureza ondulatória da matéria, que é descrita através de uma equação diferencial parcial, a equação de Schrödinger. Aprendeu-se a extrair um significado dessa equação, através do quadrado do seu módulo, que fornece a distribuição de probabilidade da partícula. A partir dos gráficos, observaram-se simetrias, e um comportamento diferenciado do acostumado da mecânica clássica.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

COHEN, Marcelo. MANSSOUR, Isabel Harb. **OpenGL Uma Abordagem Prática e Objetiva**. Editora Novatec. 2006.

GRIFFITHS, David J. **Introducion to Quantum Mechanics** . Upper Saddle River, New Jersey, Estados Unidos. Prentice Hall. 1994.

KREYSZIG, Erwin. **Matemática Superior**. Vol. 1. Rio de Janeiro, Brasil. Livros Técnicos e Científicos Editora. 1974.

KREYSZIG, Erwin. **Matemática Superior**. Vol. 3. Rio de Janeiro, Brasil. Livros Técnicos e Científicos Editora. 1974.

LEITHOLD, Louis. **O Cálculo com Geometria Analítica**. Vol. 2. Brasil. Editora Harper & Row do Brasil Ltda.

LIMA, Elon Lages. **Elementos de Tpolgia Geral**. Editora da Universidade de São Paulo. 1970.

McMAHON, David. **Quantum Mechanics Demystified**. New York, Estados Unidos. McGraw-Hill.

NORBURY, John W. **Quantum Mechanics**. Physics Department, University of Wisconsin - Milwaukee. 2000.

WEISSTEIN, Eric W. **CRC Concise Encyclopedia of Mathematics, Second Edition**. Illinois, Estados Unidos. CRC Press LCC.