

O Famoso Apêndice de Landau

H. Fleming

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

June 14, 2001

Abstract

The mathematical appendices of Landau, Lifshitz' *Quantum Mechanics* are famous for their elegance and power. Also, alas, by being concise and difficult. Here we try to make them more accessible by detailing and explaining them.

Os Apêndices Matemáticos do livro *Quantum Mechanics* de Landau e Lifshitz são famosos por sua elegância e pelos métodos poderosos que expõem. Infelizmente são também famosos por sua concisão e dificuldade. Neste artigo tentamos torná-los acessíveis oferecendo um tratamento mais detalhado.

Entre as muitas excelências do grande livro *Quantum Mechanics*, de L. D. Landau e E. M. Lifshitz[1], está o apêndice denominado *Mathematical Appendices*, onde, de uma forma unificada, são tratadas várias das funções especiais necessárias ao longo do texto. Essa unificação é tornada possível pelo uso do método de Laplace, uma genial técnica de resolução de certas equações diferenciais ordinárias inventada pelo grande matemático francês enquanto redigia seu *Théorie analytique des probabilités*.

O método faz uso intenso da integração no plano complexo, o que abre caminho para a utilização do método do ponto sela, para o estudo do comportamento assintótico das soluções. É esta combinação de técnicas que faz com que os métodos apresentados no apêndice citado se destaquem pela elegância e concisão, para não mencionar a potência.

O tratamento dado por Landau é talvez excessivamente breve, o que torna o material do apêndice acessível para poucos. Este artigo pretende, estendendo-se mais longamente sobre o tema, torná-lo acessível a um número maior de estudantes.

Minha principal fonte foi o grande tratado de Edouard Goursat[2], *Cours d'Analyse Mathématique*. Uma exposição mais detalhada e ambiciosa, escrita com a graça de sempre, encontra-se em Hille[3], abundante em notas históricas e aplicações elegantes. Para o método do ponto sela minha referência preferida é Courant, Hilbert[4]. Para saber mais sobre Laplace e seu tratado de probabilidades veja o notável *Dictionary of Scientific Biography*[5] ou, mais especificamente, a biografia de Laplace por Gillispie[6], um dos editores do dicionário citado.

1 A equação de Laplace

Laplace, após ter inventado a transformação que leva o seu nome¹, generalizou-a de várias formas. A que nos interessa aqui, uma generalização para o plano complexo, serve para resolver certas equações diferenciais ordinárias muito comuns nas aplicações. São equações da forma

$$(a_0 + b_0x)y + (a_1 + b_1x)\frac{dy}{dx} + \dots + (a_n + b_nx)\frac{d^n y}{dx^n} = 0 \quad (1)$$

que vamos também, de forma abreviada, denotar por

$$F(y) = 0$$

Vamos procurar soluções da forma

$$y = \int_C Z e^{zx} dz \quad (2)$$

onde Z é uma função de z a determinar, e o contorno C , independente de x , também deve ser determinado. Como veremos, a determinação do contorno é parte essencial na construção da solução, e aqui está talvez a principal inovação dessa “transformada de Laplace” complexa. Note-se que

$$\frac{d^k y}{dx^k} = \int_C Z z^k e^{zx} dz$$

Como

$$F(y) = \sum_{k=0}^n (a_k + b_k x) \frac{d^k y}{dx^k}$$

temos,

$$F(y) = \int_C Z \sum_{k=0}^n (a_k + b_k x) z^k e^{zx} dz$$

ou

$$F(y) = \int_C Z \left(\sum_{k=0}^n a_k z^k + b_k z^k x \right) e^{zx} dz$$

ou

$$F(y) = \int_C Z(Qx + P)e^{zx} dz \quad (3)$$

com

$$Q = \sum_{k=0}^n b_k z^k$$

e

$$P = \sum_{k=0}^n a_k z^k$$

¹ A famosa transformada de Laplace!

Podemos então escrever $F(y)$ como uma soma de duas integrais:

$$F(y) = \int_C PZ e^{zx} dz + \int_C ZQ x e^{zx} dz \quad (4)$$

A segunda dessas integrais pode ser escrita assim:

$$\int_C ZQ x e^{zx} dz = \int_C ZQ \frac{d}{dz} e^{zx} dz = \int_C \frac{d}{dz} (ZQ e^{zx}) dz - \int_C e^{zx} \frac{d}{dz} (ZQ) dz \quad (5)$$

Podemos agora escolher o contorno C de tal sorte que a primeira integral do segundo membro se anule. De fato, trata-se da integral de uma derivada; logo, o valor da integral 'e a diferença dos valores do integrando nos dois extremos. Escolhemos o contorno, então, ou como um contorno fechado, ou como um contorno aberto em cujos dois extremos a função

$$V(z) = ZQ e^{zx} \quad (6)$$

tenha o mesmo valor (No caso do contorno fechado isto acontece automaticamente). Com essa escolha de contorno,

$$\int_C ZQ x e^{zx} dz = - \int_C e^{zx} \frac{d}{dz} (ZQ) dz$$

Obtemos assim para a função $F(y)$ a expressão:

$$F(y) = \int_C dz \left(PZ - \frac{d}{dz} (ZQ) \right) e^{zx} \quad (7)$$

Queremos determinar Z de tal forma que $F(y) = 0$. Para tanto, o integrando da Eq.(7) deve se anular. Assim,

$$PZ = \frac{d}{dz} (ZQ) \quad \text{ou} \quad \frac{P}{Q} ZQ = \frac{d}{dz} (ZQ) \quad (8)$$

o que nos leva à equação diferencial

$$\frac{1}{ZQ} \frac{d}{dz} (ZQ) = \frac{P}{Q} \quad (9)$$

Equivalentemente,

$$d \log(ZQ) = \frac{P}{Q} dz$$

e $\log(ZQ) = \int \frac{P}{Q} dz$, ou ainda,

$$ZQ = e^{\int \frac{P}{Q} dz}$$

e, finalmente,

$$Z = \frac{1}{Q} e^{\int \frac{P}{Q} dz} \quad (10)$$

A solução procurada é então

$$y(x) = \int_C \frac{1}{Q} e^{\int \frac{P}{Q} dz} e^{zx} dz \quad (11)$$

ou, para maior clareza,

$$y(x) = \int_C \frac{1}{Q} e^{\int_a^z \frac{P(t)}{Q(t)} dt} e^{xz} dz \quad (12)$$

onde a é, por exemplo, um dos zeros de $P(t)$.

2 O Oscilador Harmônico

Considere a equação

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + 2ny = 0 \quad (13)$$

que aparece na solução do problema de determinar os estados estacionários do oscilador harmônico. Aqui n é um número qualquer, não necessariamente um inteiro, apesar da notação. Colocando-a na forma

$$(a_0 + b_0 x)y + (a_1 + b_1 x) \frac{dy}{dx} + (a_2 + b_2 x) \frac{d^2 y}{dx^2} = 0$$

vemos que

$$b_0 = 0 \quad a_0 = 2n$$

$$b_1 = -2 \quad a_1 = 0$$

$$b_2 = 0 \quad a_2 = 1$$

Temos, então,

$$P(z) = 2n + z^2$$

$$Q(z) = -2z$$

e

$$Z(z) = \frac{1}{-2z} e^{-\frac{1}{2} \int \frac{z^2 + 2n}{z} dz}$$

e, como

$$\int dz \frac{z^2 + 2n}{z} = \frac{z^2}{2} + 2n \log z ,$$

$$e^{\int \frac{P}{Q} dz} = e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{z^2}{2} + 2n \log z \right)} = \frac{e^{-\frac{z^2}{4}}}{z^n}$$

Logo,

$$Z(z) = -\frac{1}{2z} \frac{e^{-\frac{z^2}{4}}}{z^n} = -\frac{1}{2} \frac{e^{-\frac{z^2}{4}}}{z^{n+1}} \quad (14)$$

e

$$y(x) = - \int_C \frac{e^{-\frac{z^2}{4}}}{2z^{n+1}} e^{xz} dz \quad (15)$$

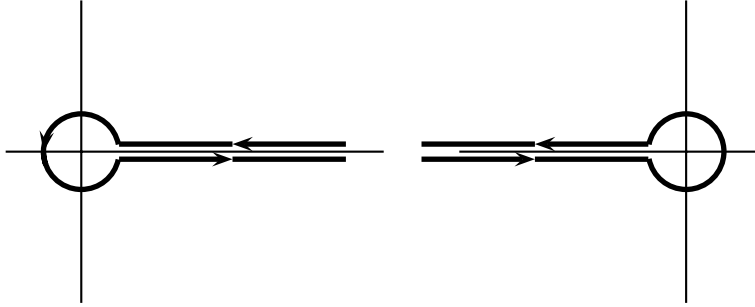
Como estamos calculando uma função de onda, constantes multiplicativas não têm importância. Por isso, simplificamos para

$$y(x) = \int \frac{dz}{z^{n+1}} e^{xz - \frac{z^2}{4}} \quad (16)$$

Passemos agora à determinação do caminho de integração. Como vimos, ele deve ser tal que a função ZQe^{zx} tenha o mesmo valor nos dois extremos. Essa função é, neste caso,

$$ZQe^{zx} = \frac{e^{zx - \frac{z^2}{4}}}{z^n} \quad (17)$$

Por argumentos físicos os casos de interesse são restritos a $n > -\frac{1}{2}$ (Veja nota²). Para esses valores os contornos C_1 e C_2 das figuras abaixo são adequados.



Seja $z = X + iY$. O termo dominante no integrando é $e^{-z^2} = e^{-(X^2 - Y^2)} e^{i2XY}$. Para Y pequeno em módulo, e^{-X^2} garante que a função V se anula nas extremidades de ambos os contornos.

Se n for um racional não inteiro, a origem $z = 0$ será um ponto de ramificação, e haverá cortes ao longo do eixo real. Se o corte for tomado ao longo do semi-eixo real negativo, o primeiro contorno não é permitido (a curva atravessa o corte). O segundo é aceitável. A integração é complicada, e não garante que $y(x)$ seja um polinômio, como é requerido. Quando n for inteiro, a situação é muito mais simples. Fazemos, neste caso, a mudança de variável

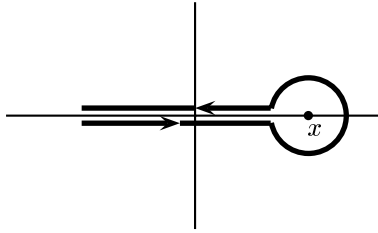
$$z = 2(x - u)$$

onde introduzimos a nova variável complexa u . Uma substituição simples mostra que

$$y(x) = -\frac{e^{x^2}}{2} \int_{C'} \frac{du}{(x-u)^{n+i}} e^{-u^2} \quad (18)$$

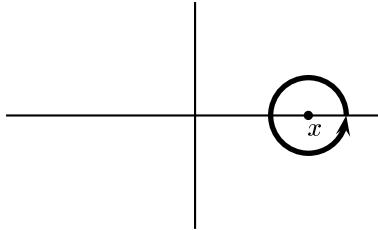
onde o novo contorno C' é descrito na figura abaixo.

² Isto quer dizer que as energias consideradas são positivas, como é o caso para um oscilador harmônico de energia potencial $\frac{1}{2}kx^2$



Que o contorno deve ser este, segue dos seguintes fatos: a transformação é linear; uma transformação linear transforma retas em retas e círculos em círculos³; a particular transformação acima inverte o sentido de percurso no contorno e leva pequenos valores da parte imaginária de z em pequenos valores da parte imaginária de u ; o ponto $z = 0$ corresponde ao ponto $u = x$ no novo contorno.

Para n inteiro e $x \neq u$ o integrando não tem singularidades. Por isso, o contorno pode ser deformado para



A integral é, então,

$$y(x) = e^{x^2} \oint e^{-u^2} \frac{du}{(u-x)^{n+1}} \quad (19)$$

Ora,

$$\frac{n!}{2\pi i} \oint \frac{e^{-u^2} du}{(u-x)^{n+1}} = \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

onde usamos a fórmula de Cauchy. Portanto,

$$y(x) = e^{x^2} \frac{2\pi i}{n!} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \equiv y_n(x) \quad (20)$$

Mas, uma maneira de definir os polinômios de Hermite é:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Logo,

$$y_n(x) = K H_n(x) \quad (21)$$

onde K é uma constante arbitrária, a ser determinada posteriormente pela normalização da função de onda.

³Bem, transforma círculos em elipses, mas, no caso, a transformação é isotrópica, e transforma círculos em círculos...

3 O Campo Uniforme

Nada supera em importância, na gênese da mecânica Newtoniana, o problema da queda livre, seja da maçã, seja da Lua, em seu movimento em redor da Terra. No entanto raramente se vê, num curso de mecânica quântica, esses problemas tratados, nem mesmo no caso simplificado de um campo gravitacional constante. Nesta seção vamos resolver o problema do movimento de um ponto material sob a ação de um campo uniforme: a queda da maçã, se a altura da queda não for muito grande. O método de Laplace para resolver a equação diferencial obtida será essencial.

Uma partícula de massa m (a “maçã”) se move sob a ação de um campo uniforme ao longo do eixo x , o que lhe dá uma energia potencial

$$U(x) = -Fx .$$

Logo, age sobre ela uma força na direção x , de módulo F . O movimento da partícula é também restrito (por escolha das condições iniciais) ao eixo x .

A equação de Schrödinger para os estados estacionários desse sistema é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - Fx\psi = E\psi \quad (22)$$

ou

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (Fx + E) \psi = 0 \quad (23)$$

É conveniente introduzir a variável adimensional

$$\xi = \left(x + \frac{E}{F} \right) \left(\frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (24)$$

Temos então

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(\frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{d^2\psi}{d\xi^2}$$

e, após algumas substituições simples,

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \xi\psi = 0 , \quad (25)$$

como nova equação de Schrödinger.

Trata-se de uma equação de Laplace. Na notação convencional, temos

$$(a_0 + b_0\xi)y(\xi) + (a_1 + b_1\xi)\frac{dy}{d\xi} + (a_2 + b_2\xi)\frac{d^2y}{d\xi^2} = 0 \quad (26)$$

à qual o método que vimos acima pode ser aplicado. Contudo, para aproveitar os estudos prévios sobre uma função que irá aparecer no problema (a função de Airy), vamos estudar não a equação acima, mas uma estreitamente ligada a ela,

$$\frac{d^2y}{d\xi^2} - \xi y(\xi) = 0 \quad (27)$$

que é muito conhecida na física-matemática. Se $\Phi(\xi)$ for solução desta equação, $\Phi(-\xi)$ será solução da Eq.(25). A Eq.(35) é escrita, à maneira de Laplace, assim:

$$(a_0 + b_0\xi)y(\xi) + (a_1 + b_1\xi)\frac{dy}{d\xi} + (a_2 + b_2\xi)\frac{d^2y}{d\xi^2} = 0 \quad (28)$$

com $a_0 = 0$, $b_0 = -1$, $a_1 = b_1 = 0$, $b_2 = 0$, $a_2 = 1$. Segue que

$$\begin{aligned} P(z) &= z^2 \\ Q(z) &= -1 \end{aligned}$$

e, como $\frac{P}{Q} = -z^2$,

$$\exp \int \frac{P}{Q} dz = \exp -\frac{z^3}{3} \quad (29)$$

e então

$$y(\xi) = \int_C \exp \left(\xi z - \frac{z^3}{3} \right) dz \quad (30)$$

Como vimos, o contorno de integração deve ser escolhido de maneira que a função

$$V(z) = ZQ = \exp \left(\xi z - \frac{z^3}{3} \right) \quad (31)$$

tenha valores idênticos nos dois extremos. Neste caso tomaremos um contorno que vai ao infinito, sendo os valores de $V(z)$ nos dois extremos iguais a zero. Seja $z = u + iv$. Então

$$\begin{aligned} \exp -\frac{z^3}{3} &= \exp -\frac{1}{3}(u + iv)^3 \\ &= \exp \left(-\frac{1}{3}\{u^3 + 3u^2(iv) + 3u(iv)^2 + (iv)^3\} \right) \\ &= \exp \left(-\frac{1}{3}u(u^2 - 3v^2) \right) \exp \left(-\frac{i}{3}(3u^2v + v^3) \right) \end{aligned}$$

O contorno deve ser tal que a exponencial leve o integrando a zero nos dois extremos. Para isso, devemos ter:

$$\begin{aligned} u &> 0 \\ &e \\ u^2 - 3v^2 &> 0 \\ &ou \\ u &< 0 \\ &e \\ u^2 - 3v^2 &< 0 \end{aligned}$$

Consideremos primeiro o caso $u > 0$. Devemos então ter

$$(u - \sqrt{3}v)(u + \sqrt{3}v) > 0$$

Esta é uma região do plano (u, v) delimitada pelas retas

$$v = \frac{1}{\sqrt{3}}u$$

e

$$v = -\frac{1}{\sqrt{3}}u$$

Na figura abaixo estão representadas essas duas retas. Sobre elas temos $u^2 - 3v^2 = 0$. Uma pequena reflexão com ajuda da figura convencerá o leitor de que a região entre as retas é aquela em que $u^2 - 3v^2 > 0$. A região **I** é aquela em que temos $u^2 - 3v^2 > 0$ e $u > 0$. A região simétrica à tracejada em relação ao eixo v , isto é, a região **II**, é aquela em que temos $u^2 - 3v^2 > 0$ e $u < 0$. Logo, a região em que $u^2 - 3v^2 < 0$ e $u < 0$ é a complementar dessa região **II** no semiplano que contém o eixo real negativo, e é constituída pelas regiões **III** e **IV**. Essas regiões estendem-se ao infinito, embora isto não seja (nem possa ser!) representado na figura. Em princípio o contorno de integração pode começar em qualquer das regiões tracejadas, e terminar em qualquer outra tracejada.

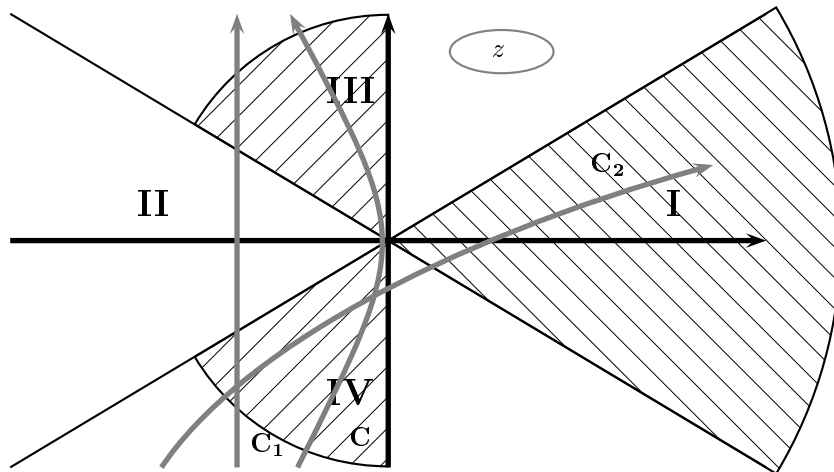


Fig.1
Regiões permitidas

Na figura estão indicados, em cinza, três contornos possíveis: C , C_1 e C_2 . Desses, C_2 é problemático, pois se estende na região em que a variável z atinge valores reais e positivos. Então o termo

$$e^{xz}$$

que aparece na expressão de $y(\xi)$, pode, para x grande e positivo, complicar a convergência da integral. Por isso tomamos os contornos que começam na

região **IV** e terminam na **III**. Em particular, o caminho C pode ser ao longo do eixo imaginário. Então, tomando $z = iv$,

$$y(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(ixv - \frac{(iv)^3}{3}\right) i dv = i \int_{-\infty}^{\infty} dv \exp\left(ixv + i\frac{v^3}{3}\right) \quad (32)$$

ou

$$y(\xi) = i \int_{-\infty}^0 dv \exp\left(ixv + i\frac{v^3}{3}\right) + i \int_0^{\infty} dv \exp\left(ixv + i\frac{v^3}{3}\right) \quad (33)$$

ou ainda

$$y(\xi) = -i \int_{\infty}^0 dv \exp\left(-ixv - i\frac{v^3}{3}\right) + i \int_0^{\infty} dv \exp\left(ixv + i\frac{v^3}{3}\right)$$

e, finalmente,

$$y(\xi) = i \int_0^{\infty} dv \cos\left(xv + \frac{v^3}{3}\right) \quad (34)$$

A função de Airy, bem conhecida na literatura matemática, é definida por

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dv \cos\left(\frac{v^3}{3} + xv\right). \quad (35)$$

Logo,

$$\psi(\xi) = K\Phi(-\xi) \quad (36)$$

3.1 Comportamento Assintótico

As funções descritas pelas Eqs.(35) e (36) estão expressas como uma representação integral, e, sendo assim, não se pode ter uma idéia imediata de seu comportamento. Nos casos em que $x \rightarrow \infty$ e $x \rightarrow -\infty$ obtêm-se comportamentos assintóticos mais reveladores. Vamos a eles.

Para x positivo e muito grande na função de Airy (correspondendo a x negativo e de módulo muito grande para a função de onda) temos de achar um contorno de integração que permita utilizar o método do ponto sela. (Veja o Apêndice dedicado a este método).

É conveniente voltar à expressão exponencial

$$y(x) = \int_C \exp\left(x\left(t - \frac{t^3}{3x}\right)\right) dt \quad (37)$$

Pondo $f(t) = t - \frac{t^3}{3x}$ temos $\frac{df}{dt} = 1 - \frac{t^2}{x}$ e a condição $\frac{df}{dt} = 0$ implica em $t = \pm\sqrt{x}$, que são os possíveis pontos sela. Na região permitida, temos só o valor $t = -\sqrt{x}$. A seguir faremos a escolha de um caminho de integração que passe pelo ponto sela e seja de máximo aclave. Na realidade, é suficiente que o caminho seja de máximo aclave *nas vizinhanças do ponto sela*. Vamos então expandir $f(t)$ em série de Taylor em torno de $t = -\sqrt{x}$. Temos,

$$f(t) = f(-\sqrt{x}) + (t + \sqrt{x})\frac{df}{dt} + \frac{(t + \sqrt{x})^2}{2} \frac{d^2f}{dt^2} + \dots$$

as derivadas sendo calculadas no ponto $t = -\sqrt{x}$. Facilmente se obtém que

$$f(-\sqrt{x}) = -\frac{2}{3}\sqrt{x}$$

e que

$$\frac{d^2 f}{dt^2} \Big|_{t=-\sqrt{x}} = \frac{2}{\sqrt{x}}$$

Naturalmente a derivada primeira é zero nesse ponto, pois ele é ponto sela. Então,

$$f(t) = -\frac{2}{3}\sqrt{x} + (t + \sqrt{x})^2 \frac{1}{\sqrt{x}} \quad (38)$$

Para separar as partes real e imaginária de $f(t)$ escrevo

$$t = u + iv$$

o que dá

$$f(t) = -\frac{2}{3}\sqrt{x} + \frac{1}{\sqrt{x}}(u^2 - v^2 + x + 2\sqrt{x}u + i(2uv + 2\sqrt{x}v))$$

Então, nas vizinhanças de $t = -\sqrt{x}$, temos:

$$\begin{aligned} f(t) &= -\frac{2}{3}\sqrt{x} + \frac{1}{\sqrt{x}}(u^2 - v^2 + 2\sqrt{x}u) + \frac{i}{\sqrt{x}}(2uv + 2\sqrt{x}v) \\ f(t) &= -\frac{2}{3}\sqrt{x} + \frac{1}{\sqrt{x}}(u^2 - v^2 + 2\sqrt{x}u) + \frac{2i}{\sqrt{x}}v(u + \sqrt{x}) \end{aligned} \quad (39)$$

Considere a reta $u = -\sqrt{x}$. Ao longo dela, $Im f(t) = 0$. Logo, é uma curva de máximo active.

$$Re f(t) = \frac{1}{3}\sqrt{x} + \frac{1}{\sqrt{x}}(x + 2\sqrt{x}(-\sqrt{x})) - \frac{v^2}{2} \quad (40)$$

ou, simplificando,

$$Re f(t) = \frac{\sqrt{x}}{3} - \frac{v^2}{\sqrt{x}} \quad (41)$$

Então a linha de maior active é a paralela ao eixo imaginário passando por $-\sqrt{x}$. Pondo $t = -\sqrt{x} + iv$, temos

$$y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{x(-\sqrt{x}+iv)} e^{-\frac{1}{3}(-\sqrt{x}+iv)^3} i dv \quad (42)$$

$$y(x) = ie^{-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dve^{-\sqrt{x}v^2 - \frac{i}{3}v^3} \quad (43)$$

e podemos omitir a exponencial imaginária do integrando, pois a parte gaussiana, para grandes valores de x , restringe de tal forma o trecho do contorno

que conta para a integral, que $e^{\frac{i}{3}v^3}$ pode ser substituída por seu valor em $x = 0$. Então,

$$y(x) = ie^{-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dve^{-\sqrt{x}v^2} = ie^{-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{\pi}{\sqrt{x}}} = \sqrt{\pi}x^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}} \quad (44)$$

Levando em conta a definição da função de Airy, temos o comportamento assintótico

$$\Phi(x) = \frac{1}{2}x^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}} \quad (45)$$

Como a função de onda do sistema sob a ação do campo uniforme é

$$\psi\xi = \Phi(-\xi)$$

o comportamento assintótico que obtivemos é o esperado, uma vez que, para ξ negativo e de grande módulo, estamos na região classicamente inacessível, e a exponencial negativa é bem-vinda.

Consideremos agora o comportamento assintótico para grandes valores de ξ , o que corresponde, na função de Airy, a x negativo e de grande módulo. Neste caso $\frac{df}{dt} = 0$ dá

$$1 - \frac{t^2}{x} = 0$$

ou seja, $t^2 = x$, com x negativo. Então,

$$t = \pm i\sqrt{|x|} \quad (46)$$

Aqui os dois pontos sela devem ser considerados, já que estão, **ambos**, em regiões onde a integral converge. Vamos, primeiro, ao ponto $t = i\sqrt{|x|}$. Expandindo a função $f(t) = t - \frac{1}{3}\frac{t^3}{x}$ em torno do ponto sela, temos:

$$f(t) = f(i\sqrt{|x|}) + \frac{(t - i\sqrt{|x|})^2}{2} \left(-\frac{2i\sqrt{|x|}}{x} \right) \quad (47)$$

onde omitimos o termo contendo a derivada primeira, já que ela se anula no ponto sela. Após um cálculo simples, obtém-se:

$$f(t) = \frac{2}{3}i\sqrt{|x|} + \frac{1}{2} \left(t^2 - 2it\sqrt{|x|} - |x| \right) \left(-\frac{2i}{x}\sqrt{|x|} \right) \quad (48)$$

Usando $t = u + iv$,

$$f(t) = \frac{\sqrt{|x|}}{x} \left(2uv - 2u\sqrt{|x|} \right) + i \left(\frac{2}{3}\sqrt{|x|} - \frac{\sqrt{|x|}}{x} \left(u^2 - v^2 + 2v\sqrt{|x|} + x \right) \right) \quad (49)$$

Segue que

$$Re f(t) = \frac{\sqrt{|x|}}{x} 2u \left(v - \sqrt{|x|} \right) \quad (50)$$

e

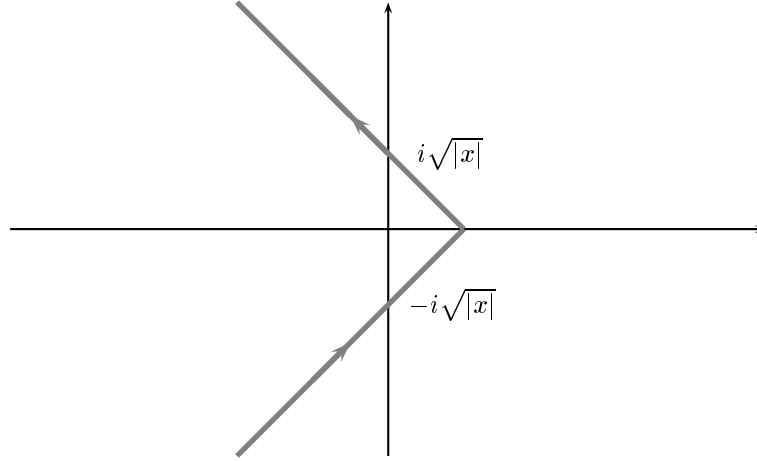
$$\operatorname{Im} f(t) = \frac{2}{3}\sqrt{|x|} - \frac{\sqrt{|x|}}{x} (u^2 - v^2 + 2v\sqrt{|x|} + x) \quad (51)$$

ou

$$\operatorname{Im} f(t) = -\frac{1}{3}\sqrt{|x|} - \frac{\sqrt{|x|}}{x} (u^2 - v^2) + 2v \quad (52)$$

Ao longo da reta $v = u + \sqrt{|x|}$ temos $\operatorname{Im} f(t) = \text{const.}$, logo, este é o primeiro trecho do caminho, aquele que passa pelo ponto sela $t = i\sqrt{|x|}$.

Considerações inteiramente análogas levam à conclusão que o segundo trecho do contorno é a reta $v = -u + \sqrt{|x|}$, ou, mais precisamente, o segmento que começa no eixo real, em $\sqrt{|x|}$ e vai a $v = -\infty$. Assim, o contorno de integração adequado para o comportamento assintótico para x negativo e de grande módulo é o que está representado na figura abaixo.



Contorno para o cálculo do comportamento assintótico para x negativo, de grande módulo.

A contribuição do trecho superior do contorno à integral é:

$$\int_{C_1} e^{x(t - \frac{t^3}{3x})} dt = \frac{\sqrt{2}}{2} \int_{\sqrt{|x|}}^{-\infty} du e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{x(-2\frac{\sqrt{|x|}}{x}u^2)} e^{-ix\frac{2}{3}\sqrt{|x|}} \quad (53)$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{2} e^{-i\frac{2}{3}x\sqrt{|x|} - i\frac{\pi}{4}} \int_{\sqrt{|x|}}^{-\infty} du e^{-2\sqrt{|x|}u^2} \quad (54)$$

$$= -\frac{\sqrt{|x|}}{2} e^{-i(\frac{2}{3}x\sqrt{|x|} + \frac{\pi}{4})} \sqrt{\frac{\pi}{\sqrt{|x|}}} \quad (55)$$

$$= -\frac{\sqrt{2\pi}}{2|x|^{\frac{1}{4}}} e^{-i(\frac{2}{3}x\sqrt{|x|} + \frac{\pi}{4})} \quad (56)$$

Alguma álgebra elementar leva este resultado à forma:

$$\frac{i\sqrt{2\pi}}{2|\xi|^{\frac{1}{4}}} e^{i\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right)} \quad (57)$$

onde pusemos $x = -\xi$. A contribuição do outro trecho é perfeitamente análoga, dando como resultado

$$-\frac{i\sqrt{2\pi}}{2|\xi|^{\frac{1}{4}}} e^{-i\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right)} \quad (58)$$

Somando as duas, temos

$$\Psi(\xi) = \frac{A}{\xi^{\frac{1}{4}}} \sin\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (59)$$

Vamos nos deter agora um pouco na interpretação física do resultado, comparando a solução com a solução clássica para o mesmo problema. É preciso ressaltar que o que calculamos foram as funções de onda dos *estados estacionários* de um corpo sob a ação de uma força constante (queda livre, por exemplo). Classicamente nunca, ou raramente, estudamos estados estacionários, o que torna a comparação entre os resultados mais difícil. Para realizar estados estacionários em queda livre na mecânica clássica, temos que recorrer a um conjunto de muitas partículas. Um bom modelo de queda livre em estado estacionário na mecânica clássica é uma cachoeira sem turbulência, um lençol homogêneo de água em queda livre. Cada gota de água estará em movimento, mas o conjunto de todas as gotas forma uma figura que, no conjunto, parece imóvel. Vamos mostrar que a solução quântica que obtivemos possui algo em comum com a solução clássica. Isto é mais fácil de ver usando-se a expressão assintótica da Eq.(59).

De fato, usando a Eq.(59) temos que

$$|\Psi(\xi)|^2 = |A|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{\xi}} \quad (60)$$

O sistema clássico correspondente é uma partícula de massa m em queda livre (ou, antes, uma enorme quantidade delas). A conservação da energia dá

$$\frac{mv^2}{2} - mgx = E \quad (61)$$

de onde se tira

$$v = \frac{2}{m} \sqrt{E + mgx} \quad (62)$$

e, portanto,

$$\frac{1}{v} \sim \frac{1}{\sqrt{x}} \quad (63)$$

Para o sistema clássico, a probabilidade de se encontrar a partícula em torno de uma posição x é inversamente proporcional à velocidade dela naquela posição,

pois é diretamente proporcional ao tempo que a partícula em torno da posição. Quanticamente esta probabilidade é dada por $|\Psi(x)|^2$. Comparando a Eq.(60) com a Eq.(63), vemos que a dependência em $\frac{1}{x}$ comparece nas duas.

4 Apêndice:O Método do Ponto Sela

Seja

$$g(x) = \int_C e^{xf(z)} dz \quad (64)$$

onde C é um contorno aberto com a propriedade de que $Re(f(z))$ tenda a $-\infty$ em ambas as suas extremidades. A partir de agora escreveremos o número complexo $f(z)$ assim, decomposto em sua parte real e imaginária:

$$f(z) = f_R(z) + if_I(z) \quad (65)$$

Consideremos valores positivos e grandes de x . Como

$$e^{xf(z)} = e^{xf_R(z)} e^{ixf_I(z)}$$

e $|e^{ixf_I(z)}| = 1$, o módulo do integrando na Eq.(64) é dado por $e^{xf_R(z)}$. Esta função, para um dado x , varia de um valor máximo, atingido quando $f_R(z)$ é máximo, até zero, pelo menos nos extremos. Para $x > 0$ e muito grande, temos um “pico” muito elevado, de onde o valor da integral cai rapidamente para o “vale” (região de baixos valores). Além disso, podemos utilizar a possibilidade de deformar o contorno, para fazer com que ele fique “a maior parte do tempo” nos vales, subindo ao pico pelo caminho mais íngreme. Desta maneira, apenas uma pequena parte do contorno contribuirá efetivamente para a integral. O método do ponto sela é isto: achar o contorno mais íngreme, passando pelo pico. Note que são os valores muito grandes de x que acentuam essas propriedades extremas. Logo, o método se presta para calcular valores assintóticos.

A determinação do caminho mais íngreme passando pelo pico pode ser feita assim: considere as curvas de nível de $f_R(z)$, ou seja, as curvas ao longo das quais $f_R(z)$ é constante. O que procuramos são as curvas que cortem essas curvas de nível ortogonalmente: são estas as que “sobem mais rapidamente”. Ora, essas curvas são, como se sabe da teoria de funções analíticas de uma variável complexa, as curvas ao longo das quais $f_I(z)$ é constante. Logo, temos de achar a curva dessa família que passa pelo “pico”. No “pico” (que é o ponto sela) temos $\frac{d}{dz}f_R(z) = 0$. Vimos agora que, pelo caminho escolhido, $f_I(z)$ é constante, e, portanto, $\frac{d}{dz}f_I(z) = 0$. Logo, o ponto sela satisfaz a equação complexa

$$\frac{df(z)}{dz} = 0 \quad (66)$$

Seja z_0 o ponto em que essa equação é satisfeita (pode haver vários). Expandindo a função em torno desse ponto, temos

$$f(z) = f(z_0) + (z - z_0) \left(\frac{df}{dz} \right)_{z_0} + \frac{(z - z_0)^2}{2!} \left(\frac{d^2f}{dz^2} \right)_{z_0} \quad (67)$$

mais termos de ordem superior. A derivada primeira é nula, por definição de ponto sela. Logo, temos, para a parte real do integrando,

$$e^{xf(z)} = e^{xf(z_0)} e^{\frac{(z-z_0)^2}{2} \left(\frac{d^2 f}{dz^2}\right)_{z_0}} \quad (68)$$

com $\left(\frac{d^2 f}{dz^2}\right)_{z_0} > 0$, ao longo do contorno, por ser um máximo de $f_R(z)$. Logo,

$$\int_C e^{xf(z)} dz = e^{xf(z_0)} \int_C e^{-\left|\frac{d^2 f}{dz^2}\right|_{z_0} \frac{(z-z_0)^2}{2}} dz \quad (69)$$

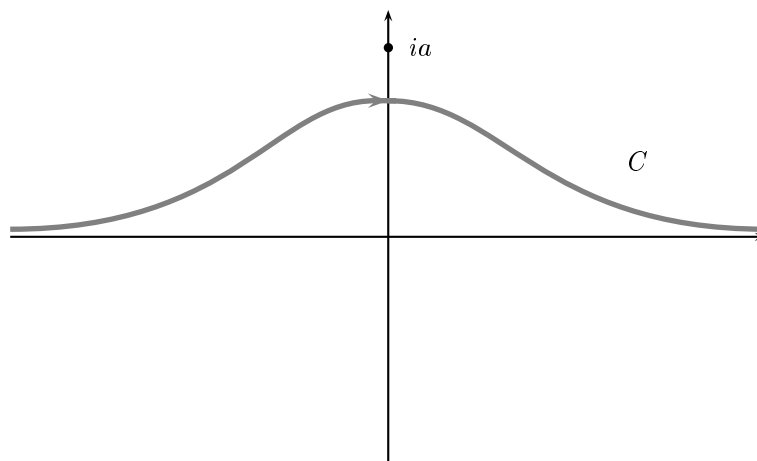
que, em geral, por ser a integral de uma gaussiana, pode ser calculada facilmente.

4.1 Exemplo simples

Considere a função

$$g(\alpha) = \int_C e^{-\alpha(z^2 + \frac{1}{z^2 + a^2})} dz \quad (70)$$

onde o contorno C , ilustrado na figura, começa e termina no eixo real, em $-\infty$ e ∞ , respectivamente.



A função é da forma

$$\int_C e^{\alpha f(z)} dz$$

com $f(z)$ dada por

$$f(z) = -z^2 - \frac{1}{z^2 + a^2} \quad (71)$$

Um cálculo simples mostra que

$$f_R(z) = -x^2 + y^2 - \frac{x^2 - y^2 + a^2}{(x^2 - y^2 + a^2)^2 + 4x^2y^2} \quad (72)$$

enquanto que

$$f_I(z) = -2xy \left(1 - \frac{1}{(x^2 - y^2 + a^2)^2 + 4x^2y^2} \right) \quad (73)$$

Como a integral converge, já que $f_R(z)$ tende a zero para x^2 tendendo a infinito com y limitado, as singularidades de $g(\alpha)$ são as singularidades do integrando. A função $f(z)$ tem polos em $z = \pm ia$. O contorno C está entre ia e o eixo real. Logo, podemos deformá-lo a vontade nessa região.

O ponto sela é determinado pela equação

$$\frac{df}{dz} = 0 \quad (74)$$

ou seja,

$$2z \left(1 - \frac{1}{(z^2 + a^2)^2} \right) = 0 \quad (75)$$

que tem a solução

$$z = 0 \quad (76)$$

A derivada segunda de $f(z)$ é

$$\frac{d^2f}{dz^2} = -2 + \frac{2}{(z^2 + a^2)^2} - \frac{8z^2}{(z^2 + a^2)^3} \quad (77)$$

e, no ponto sela, tem o valor

$$\left(\frac{d^2f}{dz^2} \right)_0 = -2 \left(1 - \frac{1}{a^4} \right) \quad (78)$$

A família de curvas $f_I(z) = cte.$ é muito complicada. No entanto, para a curva $y = 0$ com x qualquer, temos $f_I(z) = 0$, e, portanto, constante. Como esta curva passa por $z = 0$, ela é a curva de máximo aclave procurada. Ou seja, para o cálculo do valor assintótico de $g(\alpha)$ é conveniente deformar o contorno de maneira a fazê-lo coincidir com o eixo real. Portanto, temos

$$g(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha \left(x^2 + \frac{1}{x^2 + a^2} \right)} \quad (79)$$

Podemos agora expandir $f(z)$ em torno do ponto sela. Como a derivada primeira é nula no ponto sela, resulta que

$$f(z) = f(0) + \frac{z^2}{2} \left(\frac{d^2f}{dz^2} \right)_{z=0} \quad (80)$$

o que dá

$$f(z) = -\frac{1}{a^2} - z^2 \left(1 - \frac{1}{a^4} \right) \quad (81)$$

Temos então para $g(\alpha)$:

$$g(\alpha) \sim \int_C e^{-\frac{\alpha}{a^2}} e^{-\alpha(1-\frac{1}{a^4})x^2} dx \quad (82)$$

e agora a integral pode ser calculada facilmente. De fato,

$$g(\alpha) \sim e^{-\frac{\alpha}{a^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha(1-\frac{1}{a^4})x^2} \quad (83)$$

Usando o resultado conhecido (integral de Gauss)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}, \quad (84)$$

obtemos

$$g(\alpha) \sim e^{-\frac{\alpha}{a^2}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha(1-\frac{1}{a^4})}} \quad (85)$$

que é o resultado procurado, válido para grandes valores de α .

References

- [1] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, 3rd. Edition, Pergamon Press, Oxford, 1976.
- [2] E. Goursat, *Cours d'Analyse Mathématique*, 7eme. édition, Gauthier-Villars, Paris, 1949, Volume II, pg. 471.
- [3] E. Hille, *Ordinary Differential Equations in the Complex Domain*, Wiley, 1976.
- [4] R. Courant, D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics*, Interscience, New York, 1953.
- [5] C. C. Gillispie (ed.) *Dictionary of Scientific Biography* Scribner's, New York, 1970.
- [6] C. C. Gillispie, *Pierre-Simon Laplace*, Princeton University Press, Princeton, 1997.