



Funções especiais

MECÂNICA QUÂNTICA II

ALUNA: ANA ELISA D. BARIONI

PROFESSOR: MARCO AURÉLIO P. LIMA

Relação de ortogonalidade

Queremos provar que
$$\int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) P_{\ell}(\cos \theta) = \frac{2}{2\ell + 1} \delta_{\ell\ell'}$$

Comecemos relembrando a definição do polinômio de Legendre

$$\frac{d}{dx} \left[(1 - x^2) \frac{dP_n(x)}{dx} \right] + n(n + 1)P_n(x) = 0$$

Multiplicamos essa equação por $P_m(x)$ e subtraímos desta a equação satisfeita por $P_m(x)$ multiplicada por $P_n(x)$ e obtemos

$$P_m(x) \frac{d}{dx} [(1 - x^2)P_n'(x)] - P_n(x) \frac{d}{dx} [(1 - x^2)P_m'(x)] = [m(m + 1) - n(n + 1)]P_m(x)P_n(x)$$

Relação de ortogonalidade

Integramos os dois lados a fim de obtermos

$$[(1 - x^2)P_m(x)P_n'(x) - (1 - x^2)P_n(x)P_m'(x)]|_{-1}^1 = [m(m + 1) - n(n + 1)] \int_{-1}^1 P_m(x)P_n(x) dx$$

Como $P_n(x)$ e $P_m'(x)$ são limitados em ± 1 , o termo do lado esquerdo se anula nos extremos e então, se $n \neq m$, temos que

$$\int_{-1}^1 P_m(x)P_n(x) dx = 0$$

Agora precisamos calcular essa integral quando $n = m$. Para isso, precisamos da função geratriz

$$g(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n$$

Relação de ortogonalidade

Integramos $[g(x, t)]^2$

$$\int_{-1}^1 [g(x, t)]^2 dx = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} t^{m+n} \int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \sum_{n=0}^{\infty} t^{2n} \int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx$$

Por outro lado, usando a primeira definição da função geratriz, obtemos

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 [g(x, t)]^2 dx &= \int_{-1}^1 \frac{1}{1 - 2xt + t^2} dx = -\frac{1}{2t} \ln|1 - 2xt + t^2| \Big|_{-1}^1 \\ &= \frac{1}{t} \ln \frac{1+t}{1-t} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{2n}}{2n+1} \end{aligned}$$

Daí, obtemos enfim que

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{2}{2n+1}$$

Relação de ortogonalidade

Por fim, obtemos que $\int_{-1}^1 P_m(x)P_n(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn}$

Agora, para obter a expressão do slide, basta fazer $x = \cos\theta$

$$\int_{-1}^1 P_m(\cos\theta)P_n(\cos\theta)d(\cos\theta) = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn}$$

Funções de Hankel

Definimos as funções de Hankel de primeira e segunda espécie como a seguinte combinação das funções de Bessel de primeira e segunda espécie

$$h^{(1)} = j_\ell + i\eta_\ell$$

$$h^{(2)} = j_\ell - i\eta_\ell$$

Queremos provar a seguinte expressão do slide 5 da aula 15

$$A_l = \frac{1}{2} e^{i2\delta_l} h^{(1)} + \frac{1}{2} h^{(2)} = e^{i\delta_l} (\cos \delta_l j_\ell(kr) - \sin \delta_l \eta_\ell(kr))$$

Funções de Hankel

$$\begin{aligned} A_l &= \frac{1}{2} e^{i2\delta_l} h^{(1)} + \frac{1}{2} h^{(2)} \\ &= \frac{1}{2} e^{i2\delta_l} (j_l + i \eta_l) + \frac{1}{2} (j_l - i \eta_l) \\ &= \frac{1}{2} e^{i\delta_l} [e^{i\delta_l} (j_l + i \eta_l) + e^{-i\delta_l} (j_l - i \eta_l)] \\ &= e^{i\delta_l} \left[\frac{1}{2} (e^{i\delta_l} + e^{-i\delta_l}) j_l + i \frac{1}{2} (e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l}) \eta_l \right] \\ &= e^{i\delta_l} (j_l \cos \delta_l - \eta_l \sin \delta_l) \end{aligned}$$

Limites assintóticos da função de Bessel

A função de Bessel esférica é definida como a solução da equação diferencial

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{d}{dz} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \right] f_l = 0$$

As soluções dessa EDO são chamadas funções de Bessel esféricas de primeira e de segunda espécie e podem escritas na representação de série como

$$j_l(z) = \frac{z^l}{(2l+1)!!} \left[1 - \frac{\frac{1}{2}z^2}{1!(2l+3)} + \frac{(\frac{1}{2}z^2)^2}{2!(2l+3)(2l+5)} - \dots \right]$$
$$n_l(z) = -\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \left[1 - \frac{\frac{1}{2}z^2}{1!(1-2l)} + \frac{(\frac{1}{2}z^2)^2}{2!(1-2l)(3-2l)} - \dots \right]$$

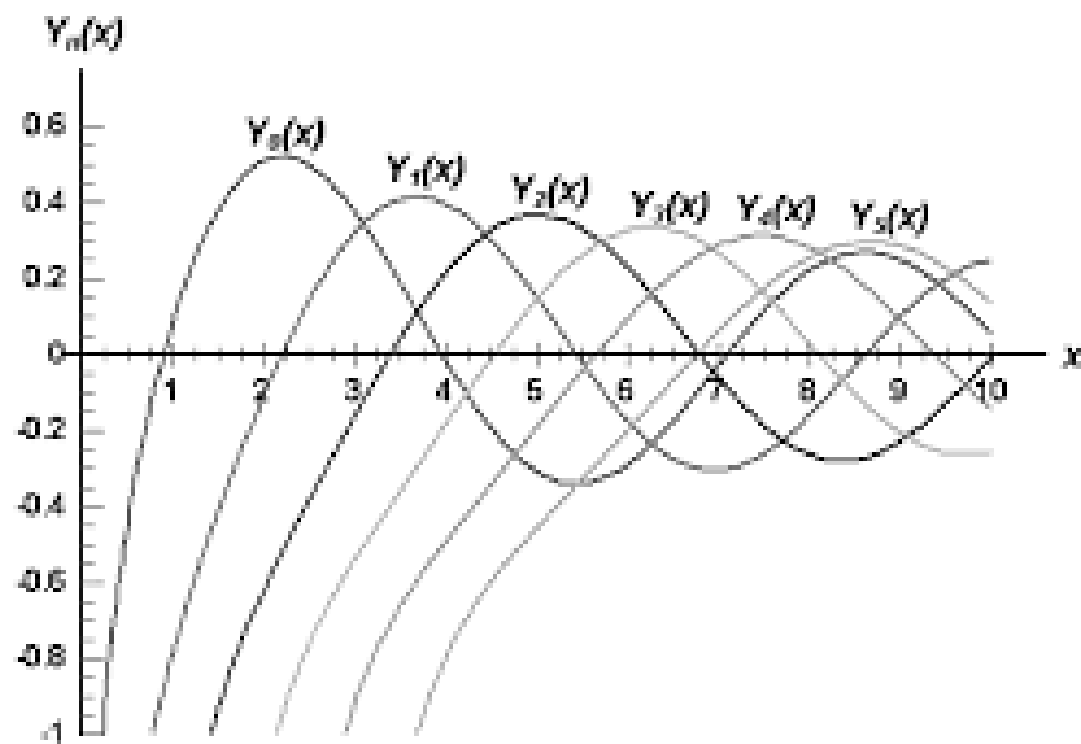
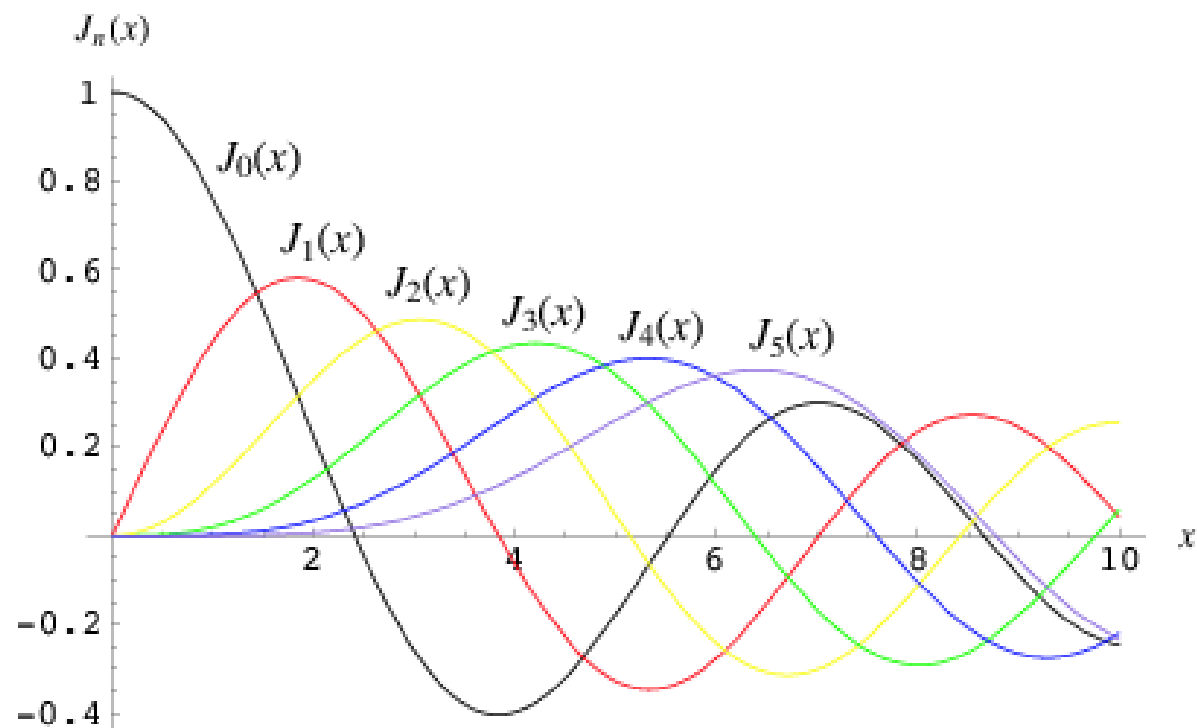
Limites assintóticos da função de Bessel

Logo, para $kr \ll 1$, temos

$$j_l(kr) \approx \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!}$$
$$\eta_l(kr) \approx -\frac{(2l-1)!!}{(kr)^{l+1}}$$

Por outro lado, se $kr \gg l(l+1)$, assintoticamente, temos

$$j_l(kr) \approx \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr}$$
$$\eta_l(kr) \approx -\frac{\cos(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr}$$



Funções Bessel

Referências

Métodos Matemáticos Volume 1 – Jayme Vaz

Apêndice C - C.J. Joachain - Quantum Collision