A teoria de Sturm & Liouville

Uma equação na forma

$$p(x)\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\left[\frac{d}{dx}p(x)\right]\frac{d}{dx}\psi(x)-q(x)\psi(x)+\lambda r(x)\psi(x) = 0, \tag{1}$$

onde $p(x)$, $q(x)$ e $r(x)$ são funções reais, é o que se chama uma equação de Sturm & Liouville. Veja que o segundo termo tem a derivada de $p(x)$, que também aparece no primeiro termo e é justamente esta uma das características principais de uma equação de Sturm & Liouville. Claro, outra das características principais é que esta é uma equação de autovalores, pois o termo $\lambda r(x)\psi(x)$ inclui o autovalor λ e aí $\psi(x)$ é uma autofunção com este autovalor. A equação de Schrödinger, da mecânica quântica, é uma equação de Sturm & Liouville.

Outra forma que podemos usar para escrever uma equação de Sturm & Liouville é obtida se notarmos que

$$\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\psi(x)\right] = p(x)\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\left[\frac{d}{dx}p(x)\right]\frac{d}{dx}\psi(x)$$

e, portanto, agora a Eq. (1) pode ser reescrita como

$$\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\psi(x)\right]-q(x)\psi(x)+\lambda r(x)\psi(x) = 0,$$

que é um pouco mais compacta.

O operador diferencial de Sturm & Liouville é hermitiano?

Vamos definir o operador diferencial de Sturm & Liouville, $\mathcal{L}$, assim:

$$\mathcal{L} \equiv -\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\right]+q(x),$$

de forma que, agora, a equação de Sturm & Liouville fica:

$$\mathcal{L}\psi(x) = \lambda r(x)\psi(x),$$

onde $r(x)\in\mathbb{R}$ e $r(x)\geqslant 0$ no intervalo dado e é só uma função peso que normalmente é tomada como sendo igual à unidade. Mas, para algumas situações que vamos encontrar, agora é necessário que nós a usemos e não mais a tomemos como unidade.

A questão agora é: o operador $\mathcal{L}$ é hermitiano? Para responder a esta pergunta, notemos que precisamos determinar se, de fato, vale a seguinte identidade:

$$\int_a^b dx\,\psi^*(x)\,\mathcal{L}\varphi(x) = \int_a^b dx\,\varphi(x)\left[\mathcal{L}\psi(x)\right]^*.$$

Notemos que algumas equações têm $r(x)\neq 1$. Vejamos então se isto é facilmente obtido pela definição de produto escalar:

$$\begin{aligned}\int_a^b dx\,\psi^*(x)\,\mathcal{L}\varphi(x) &= -\int_a^b dx\,\psi^*(x)\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]\\ &\quad+\int_a^b dx\,\psi^*(x)\,q(x)\,\varphi(x)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\int_a^b dx\,\frac{d}{dx}\left[\psi^*(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\varphi(x)\right] \\
&\quad +\int_a^b dx\,p(x)\left[\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]\frac{d}{dx}\psi^*(x) \\
&\quad +\left[\int_a^b dx\,\varphi^*(x)\,q(x)\,\psi(x)\right]^*,
\end{aligned}
$$

isto é,

$$
\begin{aligned}
\int_a^b dx\,r(x)\,\psi^*(x)\,\mathcal{L}\varphi(x) &= -\left[\psi^*(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]_a^b \\
&\quad +\int_a^b dx\,\left[\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]p(x)\,\frac{d}{dx}\psi^*(x) \\
&\quad +\left[\int_a^b dx\,\varphi^*(x)\,q(x)\,\psi(x)\right]^* \\
&= -\left[\psi^*(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]_a^b \\
&\quad +\int_a^b dx\,\frac{d}{dx}\left[\varphi(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right] \\
&\quad -\int_a^b dx\,\varphi(x)\,\frac{d}{dx}\left[p(x)\,\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right] \\
&\quad +\left[\int_a^b dx\,\varphi^*(x)\,q(x)\,\psi(x)\right]^*,
\end{aligned}
$$

ou seja,

$$
\begin{aligned}
\int_a^b dx\,\psi^*(x)\,\mathcal{L}\varphi(x) &= -\left[\psi^*(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]_a^b \\
&\quad +\left[\varphi(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right]_a^b \\
&\quad -\left[\int_a^b dx\,\varphi^*(x)\,\frac{d}{dx}\left[p(x)\,\frac{d}{dx}\psi(x)\right]\right]^* \\
&\quad +\left[\int_a^b dx\,\varphi^*(x)\,q(x)\,\psi(x)\right]^*,
\end{aligned}
$$

ou ainda,

$$
\begin{aligned}
\int_a^b dx\,\psi^*(x)\,\mathcal{L}\varphi(x) &= -\left[\psi^*(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]_a^b \\
&\quad +\left[\varphi(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right]_a^b
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&-\left\{\int_a^b dx\,\varphi^*(x)\,\frac{d}{dx}\left[p(x)\,\frac{d}{dx}\psi(x)\right]\right\}^* \\
&+\left[\int_a^b dx\,\varphi^*(x)\,q(x)\,\psi(x)\right]^* .
\end{aligned}
$$

Mas claramente vemos que, dada a definição de $\mathcal{L}$, esta equação nos dá

$$
\begin{aligned}
\int_a^b dx\,\psi^*(x)\,\mathcal{L}\varphi(x) &= \int_a^b dx\,\varphi(x)\,[\mathcal{L}\psi(x)]^* \\
&\quad-\left[\psi^*(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]_a^b \\
&\quad+\left[\varphi(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right]_a^b .
\end{aligned}
$$

Portanto, a condição para que $\mathcal{L}$ seja hermitiano é que

$$
\left[\psi^*(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]_a^b = \left[\varphi(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right]_a^b . \tag{2}
$$

Se esta condição for aplicada, isto é, se tivermos funções satisfazendo esta condição, então $\mathcal{L}$ será hermitiano. Veja que se $p(a) = p(b) = 0$, então, automaticamente $\mathcal{L}$ será hermitiano no intervalo $[a, b]$ para quaisquer funções bem comportadas definidas neste intervalo da reta real. O livro-texto do Riley et al adota a condição de que as autofunções de $\mathcal{L}$ satisfazem

$$
\left[\chi_m^*(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\chi_n(x)\right]_a^b = 0,
$$

para autofunções χ_m e χ_n quaisquer com autovalores λ_m e λ_n, respectivamente. Veja que se esta condição for satisfeita, então a nossa Eq. (2) será satisfeita automaticamente.

Vamos seguir o livro-texto do Boyce et al e, assim, nosso intervalo é escolhido como sendo $[0, 1]$ e não $[a, b]$. Além disso, as condições de contorno são especificadas de forma que

$$
\alpha_1\psi(0) + \alpha_2\psi'(0) = 0
$$

e

$$
\beta_1\psi(1) + \beta_2\psi'(1) = 0
$$

nos pontos extremos, com $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}$. Não há problema em fixar este intervalo, pois sempre podemos usar translação da origem para a e fazer uma mudança de escala do eixo x para que $b - a = 1$ na nova escala (com $a = 0$ depois da translação). Vamos mostrar, então, que a condição que encontramos acima,

$$
\left[\psi^*(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]_a^b = \left[\varphi(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right]_a^b . \tag{3}
$$

é automaticamente satisfeita com as condições de contorno do capítulo 11 do livro do Boyce et al:

$$
\begin{aligned}
\left[\psi^*(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]_0^1 &= \psi^*(1)\,p(1)\,\frac{d}{dx}\varphi(1) - \psi^*(0)\,p(0)\,\frac{d}{dx}\varphi(0) \\
&= -\psi^*(1)\,p(1)\,\frac{\beta_1}{\beta_2}\varphi(1) + \psi^*(0)\,p(0)\,\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\varphi(0)
\end{aligned}
$$

e

$$\begin{aligned}\left[\varphi(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right]_0^1 &= \varphi(1)\,p(1)\,\frac{d}{dx}\psi^*(1)-\varphi(0)\,p(0)\,\frac{d}{dx}\psi^*(0)\\ &= -\varphi(1)\,p(1)\,\frac{\beta_1}{\beta_2}\psi^*(1)+\varphi(0)\,p(0)\,\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\psi^*(0)\,,\end{aligned}$$

mostrando que ambos resultados são iguais. Caso, por exemplo, $\alpha_2=0$, segue que

$$\begin{aligned}\left[\psi^*(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\varphi(x)\right]_0^1 &= \psi^*(1)\,p(1)\,\frac{d}{dx}\varphi(1)\\ &= -\psi^*(1)\,p(1)\,\frac{\beta_1}{\beta_2}\varphi(1)\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\left[\varphi(x)\,p(x)\,\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right]_0^1 &= \varphi(1)\,p(1)\,\frac{d}{dx}\psi^*(1)\\ &= -\varphi(1)\,p(1)\,\frac{\beta_1}{\beta_2}\psi^*(1)\,,\end{aligned}$$

mostrando que ambos resultados são iguais. O mesmo ocorre quando $\beta_2=0$.

Exemplo ilustrando como colocar uma equação na forma de Sturm & Liouville

Qualquer equação diferencial da forma

$$p(x)\,\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+s(x)\,\frac{d}{dx}\psi(x)-q(x)\,\psi(x)+\lambda r(x)\,\psi(x) = 0,$$

onde $p(x)$, $s(x)$, $q(x)$ e $r(x)$ são funções reais, pode ser colocada na forma de Sturm & Liouville. Para ilustrar como fazer isso, vamos considerar como exemplo a equação de Laguerre:

$$xy''+(1-x)\,y'+\nu y = 0.$$

O truque aqui é multiplicar toda a equação por um fator integrante, $\mu(x)$, assim:

$$\mu(x)\,xy''+\mu(x)\,(1-x)\,y'+\nu\mu(x)\,y = 0.$$

O que queremos é que

$$p(x) = \mu(x)\,x$$

e

$$\frac{d}{dx}p(x) = \mu(x)\,(1-x)\,.$$

Ora, tomando a derivada da primeira destas duas equações e substituindo na segunda, vem:

$$\frac{d}{dx}\left[\mu(x)\,x\right] = \mu(x)\,(1-x)\,,$$

isto é,

$$x\frac{d}{dx}\mu(x)+\mu(x) = \mu(x)(1-x),$$

ou seja,

$$x\frac{d}{dx}\mu(x) = -x\mu(x),$$

ou ainda,

$$\frac{d}{dx}\mu(x) = -\mu(x)$$

e, portanto,

$$\mu(x) = \exp(-x)$$

é um possível fator integrante. Note que nós não vamos nos aborrecer de colocar uma constante de integração aqui, pois é completa e absolutamente desnecessária, já que, como multiplicamos a equação inteira, que é homogênia, por $\mu(x)$, qualquer constante multiplicativa (de integração) será cancelada.

A equação agora fica:

$$\exp(-x)\,xy''+\exp(-x)(1-x)\,y'+\nu\exp(-x)\,y = 0,$$

ou seja,

$$\exp(-x)\,xy''+y'\frac{d}{dx}[x\exp(-x)]+\nu\exp(-x)\,y = 0,$$

isto é,

$$\frac{d}{dx}[x\exp(-x)\,y']+\nu\exp(-x)\,y = 0,$$

ou ainda,

$$\frac{d}{dx}\left[x\exp(-x)\frac{d}{dx}y(x)\right]+\nu\exp(-x)\,y(x) = 0.$$

Com isso vemos que

$$p(x) = x\exp(-x),$$

$$q(x) = 0$$

e

$$r(x) = \exp(-x).$$

Note ainda que, para esta equação, o intervalo natural que podemos escolher para que o operador de Sturm & Liouville,

$$\mathcal{L} = -\frac{d}{dx}\left[x\exp(-x)\frac{d}{dx}\right],$$

seja hermitiano é $[0,+\infty)$, já que $p(0)=p(x\to+\infty)=0$ neste caso.