Polinômios de Hermite

Esses polinômios são a coisa mais fácil de encontrar. Pense assim: temos um oscilador harmônico, cuja energia potencial é dada por

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

onde m é a massa de um corpo,

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

é a frequência angular de oscilação do centro de massa desse corpo e k é a constante elástica da mola ou elástico ou mesmo algum tipo de campo de força que, próximo à origem, tem um mínimo de energia potencial e que, portanto, se comporta como um oscilador harmônico ali perto para pequenas oscilações (pequenas amplitudes de deslocamento a partir da origem). Aqui, x mede a distância ao longo do eixo x do centro de massa do corpo até a origem. Supomos que o movimento é unidimensional.

Se a massa é bem minúscula, podemos até imaginar um movimento quantizado e, portanto, desprezando correções relativísticas, vamos usar a equação de Schrödinger para descrever o movimento quântico. Nesse caso, a equação é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

onde $\hbar$ é a constante de Planck, h, dividida por 2π e estamos procurando por estados estacionários e, assim, E é o autovalor de energia e $\psi(x)$ é a autofunção com energia E. Vamos "mascarar" essa equação em um formato matemático padrão. Seja

$$y \equiv \psi(x)$$

e

$$\frac{d^2}{dx^2}y \equiv y'',$$

com, é claro,

$$\frac{d}{dx}y \equiv y'.$$

Assim, a equação de Schrödinger acima, já usando nossa expressão para o potencial, fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}y'' + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 y = Ey,$$

isto é,

$$y'' + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2\right] y = 0.$$

Se você ainda não sabe, a energia do n-ésimo estado excitado de um oscilador harmônico desse tipo é dada por

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

sendo que E_0 é a energia do estado fundamental (energia do ponto zero). Isso você aprende no curso de mecânica quântica, mas não custa nada já saber. Assim, sutistituindo essa energia na equação anterior, temos:

$$y'' + \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)(2n+1) - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2\right] y = 0.$$

Se mudarmos as unidades aqui de forma a termos

$$\frac{m\omega}{\hbar} = 1,$$

o que sempre podemos fazer e você pode até, se quiser, ver como isso pode ser feito, então a equação acima fica:

$$y'' + \left[(2n+1) - x^2\right] y = 0,$$

que é sem símbolos extras além dos que são relevantes matematicamente. Vamos resolvê-la. Para isso, vamos reescrevê-la assim:

$$\frac{d^2}{dx^2}y - x^2 y = -(2n+1)\, y. \tag{1}$$

Vamos supor, por um instante, que $n = 0$. Nesse caso,

$$\frac{d^2}{dx^2}y + y - x^2 y = 0. \tag{2}$$

Note que interessante a seguinte propriedade:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d}{dx} - x\right)\left(\frac{d}{dx} + x\right) y &= \left(\frac{d}{dx} - x\right)\left(\frac{d}{dx}y + xy\right) \\
&= \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}y + xy\right) - x\left(\frac{d}{dx}y + xy\right) \\
&= \frac{d^2}{dx^2}y + \frac{d}{dx}(xy) - x\frac{d}{dx}y - x^2 y \\
&= \frac{d^2}{dx^2}y + x\frac{d}{dx}y + y - x\frac{d}{dx}y - x^2 y \\
&= \frac{d^2}{dx^2}y + y - x^2 y.
\end{aligned}$$

Ora, por causa da nossa Eq. (2), vemos que, portanto,

$$\left(\frac{d}{dx} - x\right)\left(\frac{d}{dx} + x\right) y = 0. \tag{3}$$

Aqui, fazemos as duas coisas seguintes.

1. Resolvemos

   $$\left(\frac{d}{dx} + x\right) y_0 = 0$$

   e, automaticamente, a Eq. (3) estará satisfeita. A solução y_0 será proporcional à função de onda do estado fundamental.

2. Verificamos que

$$y_n \equiv \left(\frac{d}{dx} - x\right)^n y_0$$

é a solução da Eq. (1) para $n \neq 0$.

Vamos lá, então, ver se isso é verdade. Dada a equação

$$\left(\frac{d}{dx} + x\right) y_0 = 0,$$

vemos que sua solução é, simplesmente,

$$y_0 = C \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right),$$

já que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} y_0 &= \frac{d}{dx} C \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) \\ &= -xC \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) \\ &= -xy_0, \end{aligned}$$

onde C é uma constante (de normalização da função de onda). Para ver que

$$y_n \equiv \left(\frac{d}{dx} - x\right)^n y_0$$

é solução da Eq. (1), fazemos primeiro para $n = 1$, isto é,

$$\begin{aligned} y_1 &= \left(\frac{d}{dx} - x\right) y_0 \\ &= \frac{d}{dx} y_0 - xy_0 \\ &= -xy_0 - xy_0 \\ &= -2xy_0. \end{aligned} \tag{4}$$

Vejamos, então:

$$\begin{aligned} y_1' &= -2y_0 - 2xy_0' \\ &= -2y_0 + 2x^2 y_0 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} y_1'' &= -2y_0' + 4xy_0 + 2x^2 y_0' \\ &= 2xy_0 + 4xy_0 - 2x^3 y_0 \\ &= 6xy_0 - 2x^3 y_0 \\ &= -3y_1 + x^2 \left(-2xy_0\right) \\ &= -3y_1 + x^2 y_1, \end{aligned}$$

onde usamos várias vezes a Eq. (4). Logo,

$$y_1'' - x^2 y_1 = -3y_1,$$

que é a Eq. (1) para $n = 1$. O próximo passo, já que verificamos que

$$y_n \equiv \left(\frac{d}{dx} - x\right)^n y_0 \tag{5}$$

vale para $n = 1$, é supor que o resultado é válido para n e, por causa disso, o resultado vale também para $n+1$. Para tanto, notemos que

$$\begin{aligned}\left(\frac{d}{dx} - x\right)^{n+1} y_0 &= \left(\frac{d}{dx} - x\right)\left(\frac{d}{dx} - x\right)^n y_0 \\ &= \left(\frac{d}{dx} - x\right) y_n,\end{aligned}$$

por causa da hipótese, Eq. (5). Seja, portanto,

$$\begin{aligned}h &\equiv \left(\frac{d}{dx} - x\right) y_n \\ &= y_n' - xy_n. \end{aligned} \tag{6}$$

Assim,

$$h' = y_n'' - y_n - xy_n'.$$

Como, por hipótese, y_n satisfaz a Eq. (1), obtemos:

$$\begin{aligned}h' &= x^2 y_n - (2n+1)\, y_n - y_n - xy_n' \\ &= x^2 y_n - (2n+2)\, y_n - xy_n'\end{aligned}$$

e, derivando mais uma vez,

$$\begin{aligned}h'' &= 2xy_n + x^2 y_n' - (2n+2)\, y_n' - y_n' - xy_n'' \\ &= 2xy_n + x^2 y_n' - (2n+3)\, y_n' - xy_n'' \\ &= 2xy_n + x^2 y_n' - (2n+3)\, y_n' - x\left[x^2 y_n - (2n+1)\, y_n\right],\end{aligned}$$

onde novamente usamos a Eq. (1) para y_n. Então, rearranjando os termos, encontramos o seguinte:

$$\begin{aligned}h'' &= 2xy_n + x^2\left(y_n' - xy_n\right) - (2n+3)\, y_n' + (2n+1)\, xy_n \\ &= x^2\left(y_n' - xy_n\right) - (2n+3)\, y_n' + (2n+3)\, xy_n \\ &= x^2\left(y_n' - xy_n\right) - (2n+3)\left(y_n' - xy_n\right).\end{aligned}$$

Usando a Eq. (6) neste resultado, obtemos:

$$h'' = x^2 h - (2n+3)\, h,$$

isto é,

$$h'' - x^2 h = -\left[2\left(n+1\right)+1\right]h,$$

que é, justamente, a Eq. (1) para $n+1$ no lugar de n.

Com isso tudo, vemos que as autofunções do oscilador harmônico são todas proporcionais a

$$\begin{aligned} y_n &\equiv \left(\frac{d}{dx}-x\right)^n y_0 \\ &= C\left(\frac{d}{dx}-x\right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right). \end{aligned}$$

Veja que, para simplificar ainda mais essa fórmula, notemos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}\left[\exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)f\right] &= -\exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)xf + \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)\frac{d}{dx}f \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)\left(\frac{d}{dx}-x\right)f \end{aligned}$$

e, por indução finita,

$$\frac{d^n}{dx^n}\left[\exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)f\right] = \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)\left(\frac{d}{dx}-x\right)^n f.$$

Escolhendo

$$f = \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right),$$

vemos que o resultado acima se torna:

$$\frac{d^n}{dx^n}\left[\exp\left(-x^2\right)\right] = \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)\left(\frac{d}{dx}-x\right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right),$$

isto é,

$$\left(\frac{d}{dx}-x\right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) = \exp\left(\frac{1}{2}x^2\right)\frac{d^n}{dx^n}\exp\left(-x^2\right).$$

Com esta nova fórmula, podemos escrever

$$\begin{aligned} y_n &= C\exp\left(\frac{1}{2}x^2\right)\frac{d^n}{dx^n}\exp\left(-x^2\right) \\ &= C\left(-1\right)^n\exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)\left[\left(-1\right)^n\exp\left(x^2\right)\frac{d^n}{dx^n}\exp\left(-x^2\right)\right]. \end{aligned}$$

As funções

$$H_n\left(x\right) \equiv \left(-1\right)^n\exp\left(x^2\right)\frac{d^n}{dx^n}\exp\left(-x^2\right) \tag{7}$$

são polinômios, pois depois que tomarmos as n derivadas da gaussiana da direita, essa gaussiana ainda aparece multiplicando tudo e, quando a gaussiana da esquerda é multiplicada pela que remanesceu depois das n derivadas, uma cancela a outra e só sobram os chamados polinômios de Hermite dos físicos (pois há os outros polinômios de Hermite dos estatísticos; olhe na Wikipedia, que é ótima). Só para complementar a discussão acima, a constante C é escolhida, para normalizar adequadamente a função de onda y_n, como sendo dada por

$$C = \frac{(-1)^n}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}$$

e, nas unidades que estamos usando, isto é, onde

$$\frac{m\omega}{\hbar} = 1,$$

obtemos:

$$y_n = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) H_n(x) .$$

A fórmula da Eq. (7), definindo aqui os polinômios de Hermite, é uma das chamadas fórmulas de Rodrigues para polinômios (no caso, os de Hermite).