UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica

FELIPE FELIX SOUTO

Problema de Sturm-Liouville em Multi-Intevalos e o Espalhamento Quântico em Superfícies Não Regulares

Campinas

2019

Felipe Felix Souto

Problema de Sturm-Liouville em Multi-Intevalos e o Espalhamento Quântico em Superfícies Não Regulares

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientador: João Paulo Pitelli Manoel

Coorientador: Ricardo Antonio Mosna

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação defendida pelo aluno Felipe Felix Souto e orientada pelo Prof. Dr. João Paulo Pitelli Manoel.

Campinas

2019

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): CAPES
ORCID: https://orcid.org/0000-0003-4462-3720

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Ana Regina Machado - CRB 8/5467

So89p

Souto, Felipe Felix, 1995-
Problema de Sturm-Liouville em multi-intervalos e o espalhamento quântico em superfícies não regulares / Felipe Felix Souto. – Campinas, SP : [s.n.], 2019.

Orientador: João Paulo Pitelli Manoel.
Coorientador: Ricardo Antonio Mosna.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Sturm-Liouville, Equação de. 2. Métodos de elementos de contorno. 3. Espalhamento (Física). 4. Mecânica quântica. I. Pitelli, João Paulo Manoel, 1982-. II. Mosna, Ricardo Antonio, 1984-. III. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. IV. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Multi-interval Sturm-Liouville problem and quantum scattering in non-regular surfaces
Palavras-chave em inglês:
Sturm-Liouville equation
Boundary element methods
Scattering (Physics)
Quantum mechanics
Área de concentração: Matemática Aplicada
Titulação: Mestre em Matemática Aplicada
Banca examinadora:
Ricardo Antonio Mosna [Coorientador]
Samuel Rocha de Oliveira
Rodrigo Fresneda
Data de defesa: 08-02-2019
Programa de Pós-Graduação: Matemática Aplicada

Dissertação de Mestrado defendida em 08 de fevereiro de 2019 e aprovada pela banca examinadora composta pelos Profs. Drs.

Prof(a). Dr(a). RICARDO ANTONIO MOSNA

Prof(a). Dr(a). SAMUEL ROCHA DE OLIVEIRA

Prof(a). Dr(a). RODRIGO FRESNEDA

A Ata da Defesa, assinada pelos membros da Comissão Examinadora, consta no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria de Pós-Graduação do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

Este trabalho é dedicado à todos que um dia lerem este trabalho,
espero que seja de alguma ajuda.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001 (processo: 1684974). Além disso, agradeço aos meus pais, Audrey e Paulo, por me fornecerem todo o suporte necessário durante meus anos de estudo, me dando muito amor e carinho; à Profa. Dra. Suzinei Aparecida Siqueira Marconato por ter me introduzido à iniciação científica e por todos os conselhos; à Profa. Dra. Marta Cilene Gadotti que quando foi minha orientadora de iniciação científica se tornou uma companheira e me mostrou que o estudo pode sempre se tornar divertido e surpreendente; ao meu amigo Alex por ter me ajudado em todos os momentos difíceis durante a graduação e o mestrado , pois por pior que fosse a situação sempre conseguia me fazer sorrir, se tornando uma pessoa muito importante; aos meus amigos da graduação Bianca, Brendol, Fábio, Maria, Patrícia e Quédima pelo companheirismo; aos amigos que fiz no mestrado Cristian, Demacio, Joyce, Laryssa, Maiane, Melissa, Paula e Rodolfo que em tão pouco tempo já se tornaram tão importantes; ao meu coorientador Prof. Dr. Ricardo Antonio Mosna pela ajuda e suporte durante o trabalho; e claro, ao meu orientador Prof. Dr. João Paulo Pitelli Manoel que me aturou e me ajudou, além de toda supervisão durante esse período de dois anos. Também não posso esquecer de todos meus amigos de Santos que ainda mantenho contato mesmo depois de todo esse tempo e me trazem muita alegria nos poucos encontros que temos; à minha família por sempre acreditar em mim; e à todos os professores que de alguma forma, por menor que seja, me ajudaram a crescer não apenas academicamente, mas pessoalmente. Por fim, gostaria de agradecer todas as pessoas que já passaram pela minha vida e que me ajudaram de alguma forma, seja com uma ação, palavra ou conversa. À todas essas pessoas, sou eternamente grato.

Resumo

A Teoria de Sturm-Liouville tem grande importância no estudo de equações diferenciais de segunda ordem. Um estudo recente derivado deste tema é a Teoria de Sturm-Liouville Multi-Intervalos, que busca resolver problemas de equações diferenciais em vários intervalos. O objetivo deste trabalho é introduzir uma aplicação desta teoria para mostrar uma nova maneira de estudar o espalhamento quântico em superfícies não-regulares, buscando mostrar sua relevância e abrir novas possibilidades para este estudo.

Palavras-chave: Sturm-Liouville. condições de contorno. espalhamento. mecânica quântica.

Abstract

The Sturm-Liouville Theory is of great importance in the study of second order differential equations. A recent study derived from this topic is the Multi-Interval Sturm-Liouville Theory, which seeks to solve problems of differential equations at various intervals. The objective of this work is to introduce an application of this theory to show a new way of studying quantum scattering on non-regular surfaces, seeking to show its relevance and open new possibilities for this study.

Keywords: Sturm-Liouville. boundary conditions. scattering. quantum mechanics.

Lista de ilustrações

Sumário

1 Introdução

A propagação de partículas livres em uma superfície regular pode ser interpretada de duas maneiras distintas seguindo o formalismo da mecânica quântica. A primeira, obtida através de uma forte intuição física, consiste na resolução da equação de Schrödinger em $\mathbb{R}^3$ sujeita a um forte potencial atrativo muito próximo à superfície em questão, que surge devido ao "achatamento da onda" e das forças necessárias para contê-la no espaço de estudo. Neste caso, segundo (COSTA, 1981), surge um potencial geométrico que depende das curvaturas média e Gaussiana da superfície. Desta forma a equação de Schrödinger se torna:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{LB}\Psi + V_g\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad \text{com} \;\; V_g = -\frac{\hbar^2}{2m}(M^2 - K), \tag{1.1}$$

onde Δ_{LB} é o operador de Laplace-Beltrami definido na superfície, V_g representa o potencial geométrico, M é a curvatura média da superfície, K a curvatura Gaussiana, $\hbar$ é a constante de Planck e m é a massa reduzida.

A segunda consiste na resolução da equação de Schrödinger adaptada à superfície:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{LB}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \tag{1.2}$$

Neste caso, potenciais surgirão naturalmente devido à utilização do operador de Laplace-Beltrami, mas não há a contribuição de nenhum potencial geométrico (é como se a onda não enxergasse uma terceira dimensão). O formalismo correto ainda é motivo de discussão, pois o potencial geométrico é difícil de ser detectado, já que não é da ordem de $\hbar$, mas sim da ordem de $\hbar^2$.

Quando introduzimos algum tipo de descontinuidade através de vincos que conectam duas superfícies, como o cone colado no plano (ver Figura 1), o primeiro formalismo perde o sentido. Neste caso, o potencial geométrico se torna intratável matematicamente. Surgem potenciais não distribucionais e, consequentemente, estados ligados de energia infinita. Entretanto, no segundo formalismo podemos regularizar as descontinuidades do vinco, encontrando assim potenciais distribucionais. Estes nos levam à introdução de condições de contorno nos vincos (condições de colagem da função de onda).

Motivados pela discussão acima, procuramos, neste trabalho, encontrar observáveis físicos, como a seção de choque de espalhamento em superfícies não regulares seguindo o segundo formalismo de (ADHIKARI, 1986; LAPIDUS, 1982). Notamos que podemos olhar os vincos não apenas de uma maneira regularizada, como discutido acima,

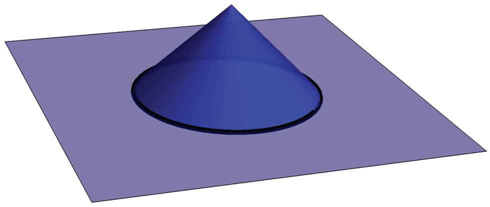

Figura 1 – O cone colado no plano. O vinco é representado pelo círculo conectando o cone ao plano.

mas também como colagem descontínuas de superfícies. Neste último caso, condições de contorno arbitrárias nos vincos se tornam possíveis e, como queremos uma evolução unitária, devemos impor condições que tornam o problema auto-adjunto. Devido à simetria de rotação, devemos colar os intervalos radiais - no cone colado no plano devemos colar o intervalo radial $(0, r_0)$, onde r_0 representa o raio do cone (vinco), com o intervalo (r_0, ∞), representando o restante do plano. Para tanto, utilizaremos a teoria de Sturm-Liouville multi-intervalos desenvolvida em (WU, 2009). Ao analisarmos ambos os métodos - regularização da superfície não regular e problema de Sturm-Liouville multi-intervalos - a ideia é compará-los e determinar se há alguma relação entre eles. Por exemplo, se existe uma condição de contorno mais física que todas as outras.

Por fim, determinada a solução, a intenção é estudar o espalhamento nessas superfícies, seguindo conceitos desenvolvidos em (ADHIKARI, 1986). Com o comportamento assintótico e a solução dada pelos métodos anteriores, será possível determinar as constantes que determinam o espalhamento e que são necessários para o cálculo da seção de choque total. Com a seção de choque total em mãos, analisaremos se os resultados obtidos fazem sentido fisicamente.

O espalhamento quântico no cone foi estudado em (BARROSO; PITELLI, 2017). Entretanto, por se tratar de um espaço assintoticamente distinto do plano euclidiano, uma redefinição de ondas planas se torna necessária, algo de certa forma artificial. Neste trabalho, entretanto, estudamos ondas em um espaço assintoticamente Euclidiano, de forma que a influência do cone no espalhamento pode ser vista de maneira mais natural.

De uma maneira geral, nosso objetivo principal é tratar de uma aplicação da recente teoria de Sturm-Liouville multi-intervalos para analisar o vinco. Nosso foco não se dará no ápice do cone, uma vez que esse problema já foi estudado em (KAY; M.STUDER, 1991). Além disso, buscaremos determinar uma condição de contorno que melhor representa o problema, mas sem ter a certeza de que tal método é decisivo, entendemos que existam outras maneiras de se tratar esse problema e nossa proposta é apenas uma delas.

Com esta introdução, buscamos justificar a importância do trabalho. Agora daremos a estrutura que o trabalho terá para que seja possível seu real entendimento. No Capítulo 2, introduziremos um estudo feito em (COSTA, 1981) sobre a equação de Schrödinger num fio regularizado e depois aplicar a teoria de Sturm-Liouville multi-intervalos neste mesmo modelo. No Capítulo 3, será detalhada a teoria de Sturm-Liouville, primeiro para um intervalo, seguindo as referências (ADKINS, 2014; HöNIG, 1970; ZETTL, 2005) para que seja possível um melhor desenvolvimento da multi-intervalos, seguindo as referências (WU, 2009; ZETTL, 2005). Além disso, no Capítulo 4, descreveremos o fenômeno do espalhamento quântico em duas dimensões baseado nas referências (ADHIKARI, 1986; LAPIDUS, 1982). Com esses capítulos, teremos o referencial teórico necessário para trabalhar no problema proposto.

No Capítulo 5, modelaremos o problema de estudar o espalhamento quântico no cone para obter uma condição de contorno que acreditamos ser uma condição preferencial para tal problema. Com tal condição, buscaremos determinar se ela é auto-adjunta de acordo com a Teoria de Sturm-Liouville. Por fim, no Capítulo 6, explicitaremos observáveis físicos dessa condição, assim como de algumas outras de modo a compará-las e entender se há algum fator que torne tal condição preferencial.

2 Motivação Física

Para mostrar que é possível conseguir resultados diferentes dos apresentados em (COSTA, 1981), usaremos a teoria, que será aprofundada no Capítulo 3, de (ZETTL, 2005). A proposta de (COSTA, 1981) é usar o fio curvo:

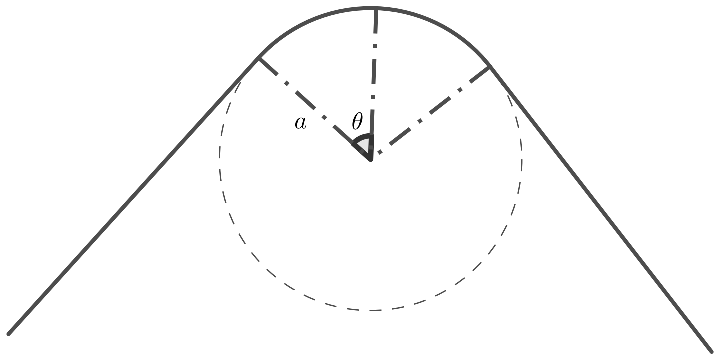

Figura 2 – Modelo para um fio curvo.

Com tal regularização (a é o raio da circunferência e θ o ângulo das retas tangentes), a equação de Schrödinger se torna:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial s^2}+V(s)\Psi=k^2\Psi, \tag{2.1}$$

onde o potencial, $V(s)$, novamente vem de sua curvatura no plano (assim como o da superfícies) e é dado por

$$V(s)=\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{8ma^2}, & |s|<a\,\theta\\ 0, & |s|\geqslant a\,\theta\end{cases}. \tag{2.2}$$

Para simplificar as contas, como $\hbar^2/m$ é uma constante, vamos considerá-la como 1 (ou, alternativamente, podemos incluí-la no valor de k). Dito isso, a solução tem forma:

$$\Psi(s)=\begin{cases}e^{iks}+R\,e^{-iks}, & s<-a\,\theta\\ C\,e^{\frac{\sqrt{(-1-4a^2k^2}}{2a}\,s}+D\,e^{-\sqrt{\frac{-1-4a^2k^2}{2a}}\,s}, & -a\,\theta\leqslant s\leqslant a\,\theta\\ T\,e^{iks}, & s>a\,\theta\end{cases}. \tag{2.3}$$

com $|R|^2+|T|^2=1$ (este condição vem da unitariedade do problema). Usando que Ψ é de classe C^1 (função continua com derivada contínua), obtemos que:

$$R = \frac{e^{-2iak\theta}\left(e^{2\theta\sqrt{-4a^2k^2-1}}-1\right)}{\left(-1-4ak\left(2ak+i\sqrt{-4a^2k^2-1}\right)\right)e^{2\theta\sqrt{-4a^2k^2-1}}+4ak\left(2ak-i\sqrt{-4a^2k^2-1}\right)+1}$$

e

$$T = \frac{4ak\sqrt{-4a^2k^2-1}\,e^{-2iak\theta}}{4ak\sqrt{-4a^2k^2-1}\cosh\left(\theta\sqrt{-4a^2k^2-1}\right)-i\left(8a^2k^2+1\right)\sinh\left(\theta\sqrt{-4a^2k^2-1}\right)},$$

o que implica que:

$$|R| \to 1, \quad \text{e} \quad |T| \to 0, \quad \text{quando} \quad a \to 0, \tag{2.4}$$

que nos diz que nada da onda "passa pelo fio". Segundo a conclusão de (COSTA, 1981): "O limite obtido não faz sentido. Nossa opinião é que apesar dos cálculos estarem impecáveis, são ruins num ponto de vista físico já que envolvem potenciais com forças tangentes não nulas em toda vizinhança da superfícies".

Nossa ideia é considerar a onda já restrita ao fio visto da seguinte forma (já estando no caso limite):

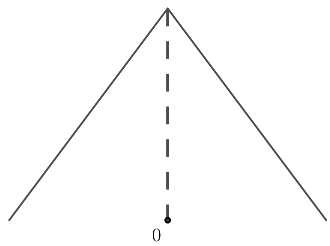

Figura 3 – Outro modelo para o fio.

Uma vez que regularizações nos levaram ao resultado anterior (que não é algo muito físico), uma alternativa é impor condições de contorno e utilizar a Sturm-Liouville em dois intervalos: $(-\infty, 0)$ e $(0, \infty)$. Neste caminho, não existe potencial gerado e a equação de Schrödinger se torna:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial s^2}\Psi = k^2\Psi, \tag{2.5}$$

e a solução:

$$\Psi(s) = \begin{cases} e^{iks} + R\,e^{-iks}, & s < 0 \\ T\,e^{iks}, & s > 0 \end{cases}. \tag{2.6}$$

Note que, em uma dimensão, não será possível fazer a modelagem que será proposta para as superfícies em dimensão maior para tentar determinar uma condição de contorno preferencial, pois um fio não tem curvatura sobre si mesmo, assim qualquer outra regularização nos levaria ao mesmo problema de reflexão total. Dito isso, devemos buscar condições a partir da teoria de Sturm-Liouville de dois intervalos, que para este caso diz que as condições de contorno auto-adjuntas possíveis são dadas por:

$$M\,Y(0^+) + N\,Y(0^-) = 0, \tag{2.7}$$

com $Y(s) = \begin{pmatrix} \Psi(s) \\ (-\hbar^2/2m)\,\Psi'(s) \end{pmatrix}$ e M e N são matrizes tais que:

$$(M\,|\,N) = \begin{pmatrix} 1 & c_{11} & 0 & \overline{c_{12}} \\ 0 & c_{12} & -1 & c_{22} \end{pmatrix}, \quad c_{ij} \in \mathbb{C} \tag{2.8}$$

tem posto completo. Usando as formas dadas por (2.8) em (2.7), teremos que:

$$R = \frac{1 + ikc_{11} - k^2 c_{12}\overline{c_{12}} - ikc_{22} + k^2 c_{11}c_{22}}{-1 - ikc_{11} - k^2 c_{12}\overline{c_{12}} - ikc_{22} + k^2 c_{11}c_{22}} \tag{2.9}$$

e

$$T = \frac{-2ikc_{22}}{1 + ikc_{11} + k^2 c_{12}c_{22} + ikc_{22} - k^2 c_{11}c_{22}}. \tag{2.10}$$

Por fim, supondo alguns valores para os c_{ij}'s e graficando $|R|^2$ e $|T|^2$ em função de k, obtemos os seguintes resultados:

- **Caso 1:** Este caso é o análogo ao anterior de regularizações. Note que a solução anterior, no caso limite $a \to 0$. Tal condição, pode ser vista na matriz de Sturm-Liouville usando $c_{ij} = 0$.

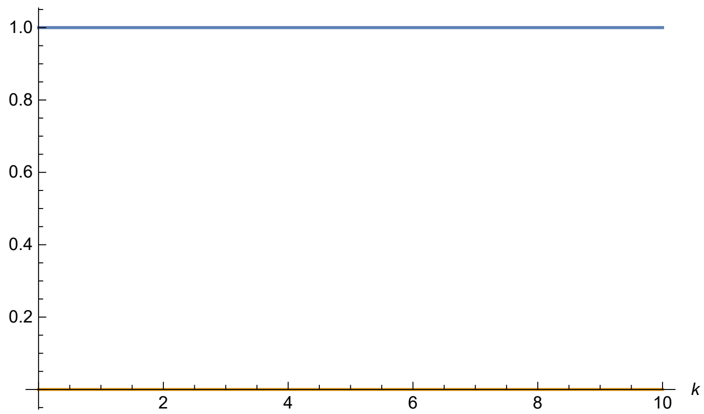

Figura 4 – Figura representando o caso 1 das condições de contorno.

A curva azul representa o índice de reflexão ($|R|^2$), enquanto a laranja representa o de transmissão ($|T|^2$). Note que, como esperado, esse caso recai no mesmo resultado do anterior.

- **Caso 2:** Para este segundo caso, supomos que a condição é de classe C^1.

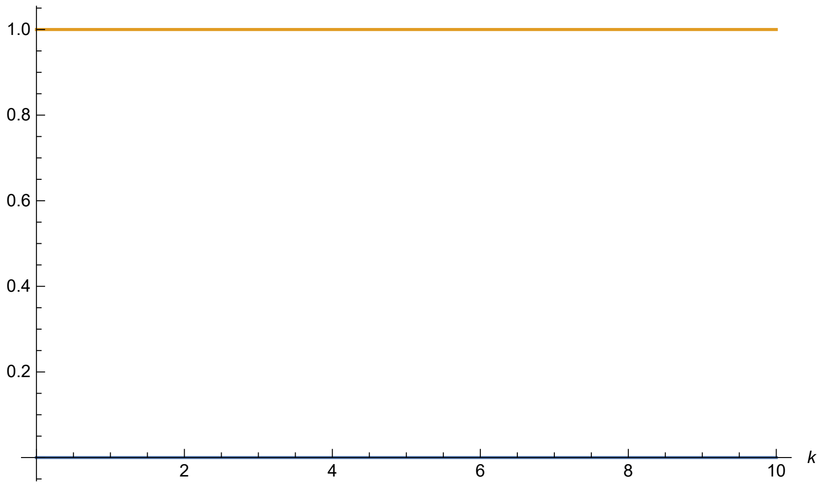

Figura 5 – Figura representando uma solução de classe C^1.

A curva azul representa o índice de reflexão ($|R|^2$), enquanto a laranja representa o de transmissão ($|T|^2$). Neste caso, temos transmissão total.

- **Caso 3**: $c_{11} = 3$, $c_{12} = -2$ e $c_{22} = 2$

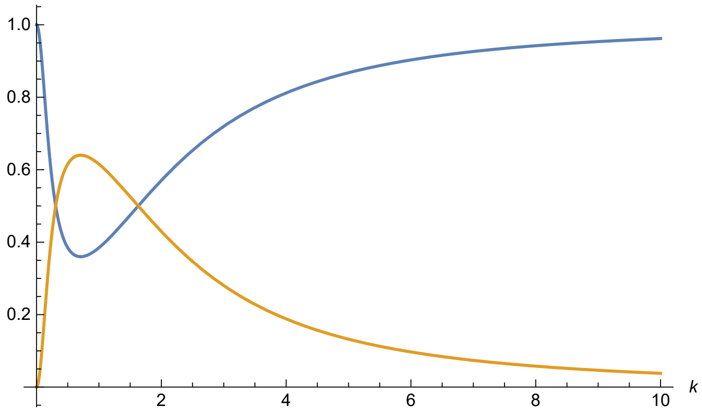

Figura 6 – Figura representando o caso 2 das condições de contorno.

A curva azul representa o índice de reflexão ($|R|^2$), enquanto a laranja representa o de transmissão ($|T|^2$).

- **Caso 4**: $c_{11} = 1$, $c_{12} = i$ e $c_{22} = 1$

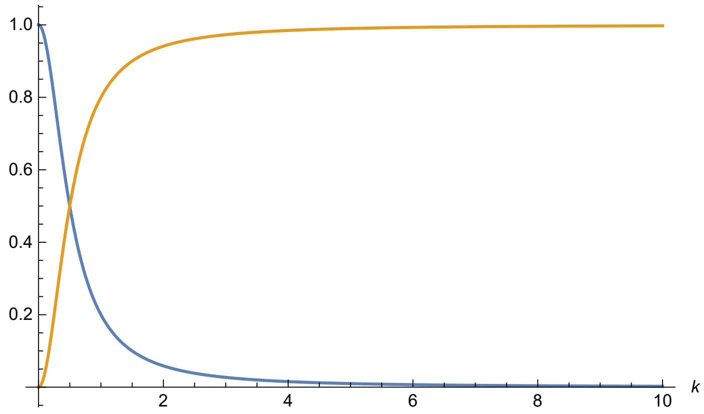

Figura 7 – Figura representando o caso 3 das condições de contorno.

A curva azul representa o índice de reflexão ($|R|^2$), enquanto a laranja representa o de transmissão ($|T|^2$).

Com apenas alguns casos, já é possível notar que a condição de contorno para um problema não parece ser tão arbitrária e buscar uma que represente bem um problema, deve se ter uma construção bem intrínseca com os dados do mesmo.

Observação 2.1. *O interessante de se usar a Teoria de Sturm-Liouville multi-intervalos é o fato das condições de contorno serem auto-adjuntas, o que garante um crescimento unitário (conservação de energia) no problema. Um exemplo para isso é considerar condições de contorno que não satisfaçam a teoria:* $c_{11} = 1$, $c_{12} = i$, $c_{21} = 1$ *e* $c_{22} = 1$.

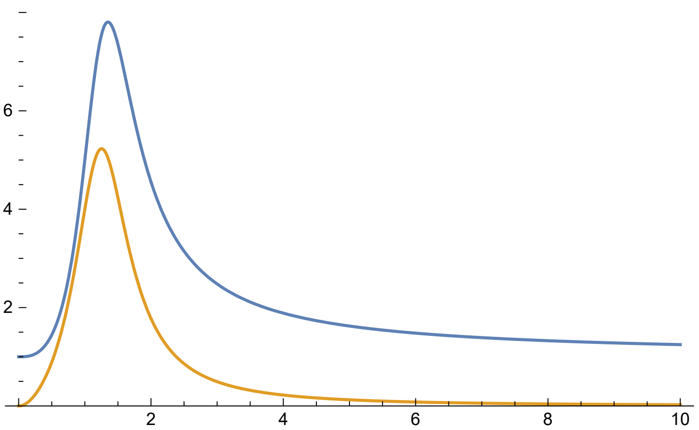

Figura 8 – Figura representando uma evolução não unitária.

Novamente, curva azul representa o índice de reflexão ($|R|^2$), enquanto a laranja representa o de transmissão ($|T|^2$).

Com o exposto nesta motivação, buscamos justificar o fato dos caminhos, citados na introdução, serem ainda discutidos. Isso se torna claro quando obtemos resultados diferentes em caminhos diferentes. A outra conclusão desta motivação é da importância da teoria de Sturm-Liouville e suas condições auto-adjuntas. É importante notar que a escolha da condição não parece ser tão arbitrária.

3 Sturm-Liouville

Nos século XIX, Jacques Charles Francois Sturm(1803 - 1855) e Joseph Liouville (1809 - 1882) estudaram o seguinte operador diferencial:

$$L[y(t)] = \frac{d}{dt}\left(p(t)\,\frac{dy}{dt}\right) + (q(t) - \lambda w(t))\,y(t), \tag{3.1}$$

que é comumente visto na forma de uma equação diferencial (não-)homogênea:

$$-\frac{d}{dt}\left(p(t)\,\frac{dy}{dt}\right) + (q(t) - \lambda w(t))\,y(t) = f(t). \tag{3.2}$$

Devido a tais estudos, essa equação é chamada de Equação Diferencial de Sturm-Liouville. Em resumo, o problema consiste em determinar os autovalores do operador L.

Antes de entrarmos em mais detalhes sobre o problema de multi-intervalos, vamos introduzir brevemente o problema em um intervalo.

3.1 Problema de Sturm-Liouville Clássico

Nas duas primeiras partes seguiremos a referência (HöNIG, 1970) para falar sobre solubilidade do problema de Sturm-Liouville. Muitos resultados técnicos, assim como algumas demonstrações, serão omitidos mas podem ser encontradas em (HöNIG, 1970). Depois de discutido o problema, passaremos a discutir a influência das condições de contorno no problema, isto é, quando tais condições tornam o problema auto-adjunto e para isto, seguiremos a referência (ZETTL, 2005). Tal discussão servirá como uma introdução ao problema multi-intervalos.

3.1.1 Teoria espectral para operadores hermitianos compactos

A teoria de Sturm-Liouville pode ser vista como uma consequência do Teorema Espectral para Operadores Hermitianos Compactos. Por esse motivo, iniciaremos introduzindo tais operadores (assim como algumas propriedades).

Definição 3.1. *Sejam X espaço métrico e $E \subset X$.*

*(i) Dizemos que um espaço métrico X é um **Espaço Completo** quando toda sequência de Cauchy em X é convergente em X;*

(ii) Se X for um espaço completo, E é dito relativamente compacto se $\overline{E}$ for compacto;

(iii) Seja F um espaço métrico. Uma aplicação linear $k : E \to F$ é compacta, ou completamente contínua, se satisfaz uma das condições:

(a) k leva a bola unitária B de E num conjunto relativamente compacto de F;

(b) k leva conjuntos limitados de E em conjuntos relativamente compactos de F;

(c) toda sequência limitada (x_n) de E contém uma subsequência (x_{r_n}) tal que $(k(x_{r_n}))$ converge em F.

Definição 3.2. *Seja T uma transformação linear sobre um espaço com produto interno X. Dizemos que T é hermitiano (simétrico no caso real) se para quaisquer $x, y \in X$ temos*

$$\langle T(x), y \rangle = \langle x, T(y) \rangle.$$

Observação 3.3. *Seja uma transformação linear T sobre um espaço com produto interno X. Se existe uma transformação linear $T^* : X \to X$ tal que*

$$\langle T(x), y \rangle = \langle x, T^*(y) \rangle.$$

Esta transformação é chamada de adjunto de T. Note que se $T = T^*$, T é hermitiano e motivados com essa nomenclatura, podemos chamá-lo, também, de auto-adjunto.

Definidos tais operadores e suas propriedades, podemos enunciar o Teorema Espectral para Operadores Hermitianos Compactos (para a demonstração, veja (HöNIG, 1970)). Tal teorema é uma caracterização desses operadores.

Teorema 3.4. ***(Teorema Espectral)*** *Seja X um espaço com produto interno (real ou complexo) e $T : X \to X$ um operador hermitiano compacto não nulo. Existe uma sequência $(\lambda_n)_{n\in I}$ de autovalores reais não nulos (finita ou infinita) e uma sequência $(e_n)_{n\in I}$ de autovetores correspondentes, que formam um conjunto ortonormal, tal que para cada $x \in X$*

$$T(x) = \sum_{n\in I} \lambda_n \, x_n \, e_n, \quad com \;\; x_n = \langle x, e_n \rangle. \tag{3.3}$$

Além disso, a sequência de autovalores é uma sequência decrescente em módulo que contém todos autovalores não nulos de T e caso seja infinita, $|\lambda_n| \to 0$.

Ainda, dado $\lambda = \lambda_n$, para algum $n \in I$, a dimensão do subespaço X_λ gerado pelos autovetores correspondentes ao autovalor λ é finita e igual ao número de vezes que λ aparece na sequência.

Um resultado que decorre do Teorema Espectral, e será de grande importância para o problema de Sturm-Liouville, é a Alternativa de Fredholm (para demonstração, veja (HöNIG, 1970)), que trata sobre autovalores de um operador:

Teorema 3.5. ***(Alternativa de Fredholm)*** *Sejam X um espaço com produto interno (real ou complexo), $T : X \to X$ um operador hermitiano compacto e $\lambda \in \mathbb{K}^*$ ($\mathbb{K} = \mathbb{R}$ ou $\mathbb{C}$). Vale a seguinte alternativa:*

(a) Se λ não é autovalor de T, a equação $\lambda\, x - T(x) = y$ tem solução para todo $y \in X$. Tal solução é única e dada por

$$x = \frac{1}{\lambda}\, y + \frac{1}{\lambda} \sum_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n \frac{y_n}{\lambda - \lambda_n}, \quad \text{onde } y_n = \langle y, e_n \rangle. \tag{3.4}$$

(b) Se λ é autovalor de T, a equação $\lambda\, z - T(z) = 0$ tem solução não trivial e o conjunto destas soluções forma um espaço vetorial de dimensão finita. Além disso, a equação $\lambda\, x - T(x) = y$ tem solução se, e somente se, y for ortogonal a toda solução z da equação $\lambda\, z - T(z) = 0$ e mais, todas soluções x são da forma

$$x = \frac{1}{\lambda}\, y + \frac{1}{\lambda} \sum_{\lambda_n \neq \lambda} \lambda_n \frac{y_n}{\lambda - \lambda_n}\, e_n + z, \quad \text{com } y_n = \langle y, e_n \rangle, \tag{3.5}$$

onde z é um autovetor associado a λ.

3.1.2 Teoria de Sturm-Liouville

Nesta seção, trataremos do problema de Sturm-Liouville em sua forma mais conhecida.

Considere o operador diferencial linear de segunda ordem:

$$L_\lambda[y] = -(p(t)y')' + [q(t) - \lambda w(t)]y \tag{3.6}$$

no intervalo $[a, b]$, onde $p \in C^1([a, b])$ com $p(t) > 0$ para $t \in [a, b]$, $w \in C([a, b])$ com $w(t) > 0$ para $t \in [a, b]$ e $q \in C([a, b], \mathbb{R})$.

Além disso, considere as condições de fronteira

$$\begin{cases} F_1[y] = \alpha_0 y(a) + \alpha_1 y'(a), \\ F_2[y] = \beta_0 y(b) + \beta_1 y'(b), \end{cases} \tag{3.7}$$

onde $\alpha_0, \alpha_1, \beta_0, \beta_1 \in \mathbb{R}$, $|\alpha_0| + |\alpha_1| \neq 0$ e $|\beta_0| + |\beta_1| \neq 0$.

O Problema de Sturm-Liouville consiste em determinar uma solução para o sistema

$$\begin{cases} L_\lambda[y](t) = f(t), \ \text{para } t \in [a, b], \\ F_1[y] = 0 \ \text{e } F_2[y] = 0. \end{cases} \tag{3.8}$$

O lema a seguir trata das condições de unicidade para problemas envolvendo operadores diferenciais. O resultado trata de um caso mais geral, enquanto que o problema de Sturm-Liouville se situa em $n = 2$.

Lema 3.6. *Dado um operador diferencial linear L de ordem n no intervalo $[a, b]$ e condições de fronteira $F_1, \dots, F_n$, são equivalentes:*

(a) *$F_1, \dots, F_n$ são linearmente independentes sobre $B = \{u \in C^{(n)}([a, b]) : L[u] = 0\}$, onde $C^{(n)}$ representa o espaço das funções contínuas com as primeiras n derivadas contínuas ;*

(b) *Se $y_1, \dots, y_n$ é um sistema fundamental de soluções de $L[y] = 0$, isto é, uma base de B, então $det|F_m[y_i]| \neq 0$;*

(c) *O problema*

$$\begin{cases} L[y] = f \\ F_m[y] = \gamma_m, \ m = 1, \dots, n \end{cases}, \tag{3.9}$$

onde $f \in C([a, b])$ e $\gamma_1, \dots, \gamma_n \in \mathbb{C}$ sempre tem solução, que é única;

(d) *O problema*

$$\begin{cases} L[y] = 0, \\ F_m[y] = 0 \ m = 1, \dots, n, \end{cases} \tag{3.10}$$

tem $y = 0$ como única solução.

Demonstração:

$(a \Leftrightarrow b)$ Observe que

$$det|F_m[y_i]| = 0$$

se, e somente se,

$$\sum_{m=1}^{n} \lambda_m F_m[y_i] = 0, \ \forall i = 1, \dots n$$

tem solução $(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \neq (0, \dots, 0)$, ou seja, se, e só se, existe uma combinação linear não nula

$$\sum_{m=1}^{n} \lambda_m \, F_m$$

que, por hipótese, é nula sobre B.

$(b \Leftrightarrow c)$ Seja y_0 uma solução particular de $L[y] = f$, então a solução geral é da forma

$$y = y_0 + \sum_{i=1}^{n} c_i \, y_i.$$

Assim, y satisfaz as condições de fronteira se, e somente se,

$$\gamma_m = F_m[y] = F_m[y_0] + \sum_{i=1}^{n} c_i\, F_m[y_i],\ \ m = 1, \ldots, n,$$

isto é, $(c_1, \ldots, c_n)$ é uma solução de

$$\sum_{i=1}^{n} c_i\, F_m[y_i] = \gamma_m - F_m[y_0],\ \ m = 1, \ldots n.$$

Entretanto, tal sistema tem solução apenas quando $det|F_m[y_i]| \neq 0$. Além disso, ela será única.

$(c \Rightarrow d)$ Imediato.

$(d \Leftrightarrow a)$ Usando o mesmo argumento da primeira equivalência, temos que $det|F_m[y_i]| = 0$ se, e somente se, existir uma combinação linear não nula

$$y = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i\, y_i$$

tal que $F_m[y] = 0$ para todo $m = 1, \ldots, n$. Tal afirmação é equivalente a pedir que (3.10) tenha solução não nula. ■

Um importante conceito para esta teoria são os autovalores do problema, que será definido a seguir:

Definição 3.7. *Dizemos que λ é um autovalor de (3.8), ou do Problema de Sturm-Liouville, se a equação homogênea*

$$L_\lambda[y] = 0 \tag{3.11}$$

tem uma solução não nula que satisfaz (3.7). Tal solução é chamada de autofunção correspondente ao autovalor λ.

Com o próximo teorema (que tem uma demonstração longa e técnica e por esse motivo será omitida, mas pode ser encontrada em (HöNIG, 1970)) será visto que substituindo $q(t)$ por $\hat{q}(t) = q(t) + \hat{c}\,w(t)$, onde $\hat{c} < 0$ e $\hat{c} < c_0$, teremos um operador $\hat{L_0}$ tal que $\lambda = 0$ não é autovalor. Dito isso, a partir de agora a hipótese global será: $\lambda = 0$ **não é autovalor de** L.

Teorema 3.8. *Seja λ um autovalor do problema de Sturm-Liouville, então existe $c_0 \in \mathbb{R}$ tal que $\lambda \geqslant c_0$.*

O teorema a seguir define uma importante função para a resolução do problema de Sturm-Liouville: a função de Green. Tal função será útil para definir a forma geral das soluções do problema.

Teorema 3.9. *Existe uma função contínua* $G : [a, b] \times [a, b] \to \mathbb{R}$ *tal que dada* $f \in C([a, b])$*, a função* $y \in C^2([a, b])$ *é solução de*

$$\begin{cases} L_0[y](t) = -(p(t)y'(t))' + q(t)y(t) = f(t), \ \text{para } t \in [a, b] \\ F_1[y] = \alpha_0 y(a) + \alpha_1 y'(a) = 0 \\ F_2[y] = \beta_0 y(b) + \beta_1 y'(b) = 0 \end{cases} \tag{3.12}$$

se, e somente se

$$y(t) = \int_a^b G(t, s)\, f(s)\, ds. \tag{3.13}$$

A função G é conhecida como função de Green.

Demonstração: Faremos tal demonstração em dois passos:

1) **Construção da função de Green:** Sejam y_1 e y_2 soluções reais não nulas de $L[y] = 0$ satisfazendo $F_i[y_i] = 0$, para $i = 1, 2$. Observe que y_1 e y_2 são, linearmente independentes, pois $\lambda = 0$ não é autovalor de L, ou seja, o problema homogêneo não tem solução nula.

   Dito isso, considere

$$G_s(t) = G(t, s) = \begin{cases} G^1(t, s) = c(s)\, y_1(t)\, y_2(s), \ a \leqslant t \leqslant s, \\ G^2(t, s) = c(s)\, y_2(t)\, y_1(s), \ s \leqslant t \leqslant b. \end{cases}$$

   Com tal definição, temos que

$$F_i[G_s(t)] = 0 \ \ e \ \ L[G_s^i(t)] = 0, \ \ i = 1, 2 \tag{3.14}$$

   e mais,

$$G^2(t, t) = G^1(t, t). \tag{3.15}$$

   Note que se G_s satisfaz

$$\frac{\partial G^2}{\partial t}(t, s)\Big|_{s=t-} = \frac{\partial G^1}{\partial t}(t, s)\Big|_{s=t+}, \tag{3.16}$$

   temos que G_s é uma solução do problema homogêneo. Como o problema homogêneo só tem a solução nula como solução, teríamos $G_s \equiv 0$. Como não queremos solução nula, segue que não se pode ter (3.16). Logo, devemos ter:

$$\frac{\partial G^2}{\partial t}(t, s)\Big|_{s=t-} - \frac{\partial G^1}{\partial t}(t, s)\Big|_{s=t+} = -\frac{1}{p(s)},$$

   o que implica em:

$$c(s)[y_2'\, y_1 - y_1'\, y_2](s) = -\frac{1}{p(s)} \Rightarrow c(s) = -\frac{1}{W[y_1, y_2](s)\, p(s)}$$

o que nos leva a

$$G(t,s) = \begin{cases} -\dfrac{y_1(t)\,y_2(s)}{W[y_1,y_2](s)\,p(s)}, & a \leqslant t \leqslant s, \\ -\dfrac{y_1(s)\,y_2(t)}{W[y_1,y_2](s)\,p(s)}, & s \leqslant t \leqslant b. \end{cases}$$

Por fim, usando que o Wronskiano tem forma

$$W(t) = W(a)\,\exp\left[-\int_a^t \frac{p'(s)}{p(s)}\,ds\right] \Rightarrow p(t)\,W(t) = p(a)\,W(a), \tag{3.17}$$

obtemos:

$$p(s)\,W[y_1,y_2](s) = p(a)\,W[y_1,y_2](a) = p(t)\,W[y_1,y_2](t),$$

isto é,

$$G(s,t) = G(t,s). \tag{3.18}$$

2) y **definida por** (3.13) **satisfaz** (3.12)**:** De fato, por (3.14), y satisfaz as condições de fronteira de (3.12). Além disso,

$$y(t) = \int_a^b G(t,s)\,f(s)\,ds = \int_a^t G^2(t,s)\,f(s)\,ds + \int_t^b G^1(t,s)\,f(s)\,ds.$$

Derivando a expressão acima, usando (3.15) obtemos:

$$\begin{aligned} y'(t) &= \int_a^t \frac{\partial G^2(t,s)}{\partial t}\,f(s)\,ds + G^2(t,t)\,f(t) + \int_t^b \frac{\partial G^1(t,s)}{\partial t}\,f(s)\,ds \\ -G^1(t,t)\,f(t) &= \int_a^t \frac{\partial G^1(t,s)}{\partial t}\,f(s)\,ds + \int_t^b \frac{\partial G^2(t,s)}{\partial t}\,f(s)\,ds. \end{aligned}$$

Fazendo a segunda derivada, temos:

$$\begin{aligned} y''(t) = &\int_a^t \frac{\partial^2 G^2(t,s)}{\partial t^2}\,f(s)\,ds + \frac{\partial\, G^2}{\partial\, t}(t,s)\Big|_{s=t+} + \\ &+ \int_t^b \frac{\partial^2 G^1(t,s)}{\partial t^2}\,f(s)\,ds + \frac{\partial\, G^1}{\partial\, t}(t,s)\Big|_{s=t-}. \end{aligned}$$

Por fim, multiplicando y, y' e y'' por q, $-p'$ e p respectivamente e obtemos:

$$\begin{aligned} L[y](t) &= \int_a^t L[G^2(t,s)]\,f(s)\,ds + \int_t^b L[G^1(t,s)]\,f(s)\,ds \\ -p(t)&\left[\frac{\partial\, G^2}{\partial\, t}(t,s)\Big|_{s=t-} - \frac{\partial\, G^1}{\partial\, t}(t,s)\Big|_{s=t+}\right] f(t) = f(t). \end{aligned}$$

Portanto, usando a unicidade (Lema 3.6), temos que a solução de (3.12) é da forma (3.13). ∎

O resultado a seguir caracteriza as soluções do problema da Sturm-Liouville.

Corolário 3.10. *A função y é uma solução do problema de Sturm-Liouville se, e somente se,*

$$y(t) - \lambda \int_a^b G(t,s)\, y(s)\, w(s)\, ds = g(t), \text{ onde } g(t) = \int_a^b G(t,s)\, f(s)\, ds.$$

Dada a importância do operador integral acima, vamos denotá-lo por:

$$\vartheta[y](t) = \int_a^b G(t,s)\, y(s)\, w(s)\, ds, \; t \in [a,b].$$

A seguir, temos algumas propriedades deste operador:

Corolário 3.11. *(a) λ é um autovalor do problema de Sturm-Liouville se, e somente se, $\dfrac{1}{\lambda}$ é autovalor de ϑ;*

(b) y é autofunção correspondente ao autovalor λ do problema de Sturm-Liouville se, e somente se, y é autofunção correspondente ao autovalor $\dfrac{1}{\lambda}$.

Corolário 3.12. *Todos os autovalores do problema de Sturm-Liouville são reais.*

Com estes resultados, podemos concluir que ϑ é um operador hermitiano compacto, ou seja, aplicar a Alternativa de Fredholm. Por fim, tudo que vimos até agora culmina em:

Teorema 3.13. *Considere o seguinte problema de Sturm-Liouville*

$$L_\lambda[y] = -(py')' + (q - \lambda w)y = f, \text{ em } [a,b];$$

$$\begin{cases} F_1[y] = \alpha_0 y(a) + \alpha_1 y'(a) = 0, \\ F_2[y] = \beta_0 y(b) + \beta_1 y'(b) = 0. \end{cases}$$

Então

a) Os valores $\lambda \in \mathbb{C}$ tais que exista uma solução $y \neq 0$ de $L_\lambda[y] = 0$ satisfazendo $F_1[y] = F_2[y] = 0$, isto é, os autovalores do problema formam uma sequência infinita crescente λ_n de números reais tais que

$$\lim_{n\to\infty} \lambda_n = \infty \text{ e } \sum_n \frac{1}{\lambda_n} < \infty.$$

b) Cada autovalor λ_n tem multiplicidade 1, isto é, o espaço vetorial das autofunções correspondentes tem dimensão 1; fixando uma autofunção real ϕ_n tal que

$$\int_a^b |\phi_n(t)|^2 w(t)\, dt = 1,$$

então qualquer outra autofunção correspondente a λ_n é múltipla de ϕ_n. Em outras palavras, todo autovalor do problema de Sturm-Liouville tem multiplicidade 1.

c) A sequência ϕ_n é uma base ortonormal do espaço com produto interno $C([a, b])$.

d) Para toda função $x \in C^2([a, b])$ tal que

$$F_1[x] = F_2[x] = 0,$$

temos

$$x(t) = \sum_n x_n \phi_n(t), \quad onde \quad x_n = \int_a^b x(t)\phi_n(t)w(t)\, dt,$$

sendo esta uma série uniformemente e absolutamente convergente em $[a, b]$.

e) Se $\lambda \neq \lambda_n$, $\forall n \in \mathbb{N}$, e $f \in C([a, b])$, o sistema $L_\lambda[y] = f$ e $F_1[y] = F_2[y] = 0$ tem uma e só uma solução y, que tem forma:

$$y(t) = \sum_n \frac{f_n}{\lambda - \lambda_n} \phi_n(t), onde \quad f_n = \int_a^b f(t)\phi_n(t)\, w(t)\, dt,$$

sendo esta uma série uniformemente e absolutamente convergente em $[a, b]$.

f) Se $\lambda = \lambda_m$, para algum $m \in \mathbb{N}$, e $f \in C([a, b])$, o sistema $L_\lambda[y] = f$ e $F_1[y] = F_2[y] = 0$ tem solução se, e somente se,

$$\langle f, phi_m \rangle = \int_a^b f(t)\phi_m(t)\, dt = 0$$

e neste caso, a solução é parecida com a do item (e), sendo a componente y_m de ϕ_m arbitrária.

Demonstração:

(b) Sejam y_1 e y_2 duas soluções linearmente independentes de $L_\lambda[y] = 0$, que satisfaçam $F_1[y] = F_2[y] = 0$, então

$$W[y_1, y_2](t) = y_1(t)\, y_2'(t) - y_2(t)\, y_1'(t) \neq 0, \ \forall t \in [a, b].$$

Por outro lado, temos por hipótese que :

$$F_1[y_1] = \alpha_0\, y_1(a) + \alpha_1\, y_1'(a) = 0 = F_1[y_2] = \alpha_0\, y_2(a) + \alpha_1\, y_2'(a),$$

o que implica que:

$$\frac{y_1'(a)}{y1(a)} = -\frac{\alpha_0}{\alpha_1} = \frac{y_2'(a)}{y_2(a)} \Rightarrow W[y_1, y_2](a) = 0.$$

O que é uma contradição, logo o autovalor tem multiplicidade 1.

(d) Do Teorema 3.9, temos:

$$x(t) = \int_a^b G(t,s)\, h(s)\, ds = \int_a^b G(t,s)\, \frac{h(s)}{w(s)} w(s)\, ds = \vartheta\left[\frac{h}{w}\right](t),$$

onde $h(s) = L[x](s)$.

Assim, pelo Teorema 3.5 segue que

$$x(t) = \sum_{n\in\mathbb{N}} \frac{1}{\lambda_n}\left(\frac{h}{w}\right)_n \phi_n(t) = \sum_{n\in\mathbb{N}} x_n\, \phi_n(t), \;\; onde\ x_n = \int_a^b x(t)\phi_n(t)w(t)\, dt \tag{3.19}$$

e assim,

$$\left(\frac{h}{w}\right)_n = \int_a^b \frac{h(t)}{w(t)}\phi_n(t)w(t)\, dt.$$

(c) Como o conjunto das funções a valores complexos infinitamente diferenciáveis em (a,b) e nulas fora de um intervalo fechado contido em (a,b), $D((a,b))$ é denso em $C([a,b])$ e todo $x \in D((a,b))$ satisfaz $F_1[x] = F_2[x] = 0$, segue que (d) vale para qualquer função de $D((a,b))$. Logo, $(\phi_n)_n$ forma uma base ortonormal de de $C([a,b])$ e portanto, existem infintas autofunções ϕ_n.

(a) Do Corolário 3.12, temos que todo autovalor do problema é real. Além disso, pelo Teorema 3.8, quase todos são positivos. Ainda, de (c) temos a infinitude da sequências (ϕ_n) e assim, pelo Teorema 3.4 e pelo Corolário 3.11 temos:

$$\frac{1}{\lambda_n} \to 0 \Rightarrow \lambda_n \to \infty.$$

Por fim, segue que

$$\sum_{n\in\mathbb{N}} \frac{1}{\lambda_n} < \infty.$$

(e) Do Corolário 3.10, a solução y do problema de Sturm-Liouville satisfaz:

$$y(t) = \int_a^b G(t,s)\left[\lambda y(s) + \frac{f(s)}{w(s)}\right] w(s)\, ds,$$

isto é,

$$\frac{1}{\lambda}\vartheta\left[\frac{f}{w}\right] = \frac{1}{\lambda}y - \vartheta[y].$$

Logo, usando o Teorema 3.5 obtemos:

$$y(t) = \vartheta\left[\frac{f}{w}\right](t) + \lambda\sum_{n\in\mathbb{N}} \frac{1}{\lambda_n}\frac{\frac{1}{\lambda}\vartheta[f/w]_n}{\frac{1}{\lambda}-\frac{1}{\lambda_n}}\phi_n(t),$$

sendo esta séria uniformemente e absolutamente convergente em $[a,b]$. Por fim, usando (3.19) concluímos que:

$$y(t) = \sum_{n\in\mathbb{N}} \frac{1}{\lambda_n}\vartheta\left[\frac{f}{w}\right]_n \phi_n(t) + \lambda\sum_{n\in\mathbb{N}} \frac{1}{\lambda_n}\frac{\frac{1}{\lambda}\vartheta[f/w]_n}{\frac{1}{\lambda}-\frac{1}{\lambda_n}}\phi_n(t) = \sum_{n\in\mathbb{N}} \frac{\langle f,\phi_n\rangle}{\lambda_n}\phi_n(t)$$
$$+ \sum_{n\in\mathbb{N}} \frac{\frac{\langle f,\phi_n\rangle}{\lambda_n}}{\lambda_n-\lambda}\phi_n(t) = \sum_{n\in\mathbb{N}} \frac{\langle f,\phi_n\rangle}{\lambda_n-\lambda}\phi(t).$$

(f) A demonstração é análoga a do item (e). ■

Este último teorema caracteriza totalmente o problema de Sturm-Liouville em sua forma mais clássica. Na próxima seção, veremos uma forma de simplificar a equação de Sturm-Liouville e depois trataremos da análise da condição de contorno do problema para analisar quando essas tornam o problema auto-adjunto, uma vez que este problema mais clássico tem uma forma bem determinada da condição de contorno e por isso temos toda essa caracterização.

3.1.3 Forma Normal de Liouville

Voltemos a pensar um pouco sobre a equação de Sturm-Liouville homogênea (vamos usar uma notação diferente, pois as derivadas podem ser em relação a diferentes variáveis):

$$-\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{dy}{dx}\right) + (q(x) - \lambda w(x))y(x) = 0. \tag{3.20}$$

Muitas vezes, pode ser interessante "retirar" a função p sem alterar os auto-valores. Por exemplo, como veremos a seguir, isso pode tornar o estudo de condições de contorno mais simples. Para tanto, existe um método chamado Forma Normal de Liouville.

De acordo com (OLIVEIRA, 2016), o método se baseia em se definir uma nova função, φ, e uma nova variável t tais que:

$$y = u\varphi \quad \text{e} \quad \frac{dt}{dx} = h, \tag{3.21}$$

onde u e h são funções a serem determinadas. Usando (3.21) em (3.20) resulta em

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} + \frac{1}{ph^2u}\left(ph^2\frac{du}{dt} + h\frac{d}{dt}(phu)\right)\frac{d\varphi}{dt} + \left(\frac{1}{phu}\frac{d}{dt}\left(wh\frac{du}{dt}\right) - \frac{q}{ph^2} + \frac{\lambda w}{ph^2}\right)\varphi = 0.$$

Desta maneira, temos que ter

$$ph^2\frac{du}{dt} + h\frac{d}{dt}(phu) = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\lambda w}{ph^2} = \lambda,$$

uma vez que desejamos "eliminar" p e manter os auto-valores. Com essas condições, é possível se obter:

$$h(x) = \sqrt{\frac{w(x)}{p(x)}} \quad \text{e} \quad u = \frac{1}{\sqrt[4]{p(x)w(x)}}.$$

Portanto, a variável t e a função $\varphi(t)$ são da forma

$$t = \int \sqrt{\frac{w(x)}{p(x)}}\, dx \quad \text{e} \quad \varphi(t) = \frac{1}{\sqrt[4]{p(x)w(x)}}\, y(x). \tag{3.22}$$

e a equação se torna

$$-\frac{d^2\varphi}{dt^2} + (V(t) - \lambda)\varphi = 0, \tag{3.23}$$

onde

$$V = \frac{q}{w} + \frac{1}{\sqrt[4]{p(x)w(x)}} \frac{d^2}{dt^2}(\sqrt[4]{p(x)w(x)}). \tag{3.24}$$

3.1.4 Condições de Contorno

Agora que já introduzimos o problema e Sturm-Liouville, vamos trabalhar em algo que é de grande importância e pode mudar substancialmente o problema (além de ser o grande foco pra a teoria em multi-intervalos): Condições de Contorno. Dependendo a condição de contorno, o operador pode deixar de ser auto-adjunto, então a ideia é buscar esse operador auto-adjunto que será a solução do nosso problema. Primeiramente, vamos definir as classificações dos pontos de fronteira do intervalo em que queremos resolver a equação. Depois, para cada tipo de classificação, citaremos teoremas que caracterizam o domínio dos operadores solução, de acordo com a classificação dos pontos de fronteira.

Inicialmente, definiremos espaços que serão importantes para a a resolução do problema:

Definição 3.14. *Seja $J \subset \mathbb{R}$ um intervalo.*

(i) Denotamos o espaço das funções Lebesgue integráveis em J por: $L(J, \mathbb{R})$;

(ii) O espaço das funções com valores complexos em J que são absolutamente contínuas em sub-intervalos compactos de J é denotado por: $AC_{loc}(J, \mathbb{C})$.

(iii) O espaço das matrizes quadradas de ordem dois com determinante unitário: $SL(2, \mathbb{R}) = \{K \in M_2(\mathbb{R}) : det(K) = 1\}$;

(iv) Dizemos que uma propriedade vale quase sempre em J (q.s.) ou em quase toda parte parte (q.t.p.) se os pontos de J para os quais tal propriedade não vale formam um conjunto de medida nula.

Dito isto, considere a equação de Sturm-Liouville:

$$-(py')' + qy = \lambda wy, \quad \text{em} \quad (a,b) \tag{3.25}$$

com $(1/p), q, w \in L_{1oc}((a,b),\mathbb{C})$ e $\lambda \in \mathbb{C}$.

As condições de contorno estão totalmente ligadas com os pontos de fronteira do intervalo (a,b). Então, vamos introduzir uma caracterização para esses pontos:

Definição 3.15. *O ponto de bordo a, em relação a (3.25) é:*

(i) ***regular (R):*** *se $1/p, q, w \in L((a,d),\mathbb{C})$, para algum $d \in (a,b)$ e*

$$y(d) = \lim_{t \to d} y(t) \ \text{ e } \ (py')(d) = \lim_{t \to d}(py')(t)$$

existem e são finitos para qualquer solução y da equação não homogênea;

(ii) ***círculo-limite (LC):*** *se toda solução de (3.25) está em $L^2((a,d),\mathbb{C})$, para algum $d \in (a,b)$;*

(iii) ***ponto-limite (LP):*** *se não é círculo-limite;*

(iv) ***singular (S):*** *Se não é regular.*

As mesmas definições podem ser são feitas para b, porém usando uma vizinhança à esquerda.

Observação 3.16. *Todo ponto regular é um ponto (LC), uma vez que todas as soluções tem limites finitos nos pontos regulares.*

Com a caracterização dos pontos de fronteira, vamos ver como tais classificações influenciam no domínio do operador solução. Para tanto, vamos, a partir de agora considerar a forma de operador de (3.25):

$$L(y) = -(py')' + qy, \tag{3.26}$$

sendo L definido q.s. para funções y tais que $y, py' \in AC_{1oc}((a,b))$.

Agora, vamos definir algumas características desse operador:

Definição 3.17. *Considere o operador L definido por (3.26).*

(i) O domínio de L é denotado por $D(L)$;

(ii) *O domínio máximo,* $D_{max} = D_{max}((a,b), L, w)$*, de* L *em* (a,b) *com função peso* $w \in L_{1oc}((a,b), \mathbb{R})$ *é definido por:*

$$D_{max} = \{y : (a,b) \to \mathbb{C} : y, (py') \in AC_{1oc}((a,b)) \\ e \;\; y, L(y), (1/w) \in L^2((a,b), w)\};$$

(iii) *O domínio pré-minimal,* $D_0 = D_0((a,b), L, w)$*, de* L *em* (a,b) *com função peso* w *é definido por:*

$$D_0 = \{y \in D_{max} : y \quad tem\ suporte\ compacto\ em\ (a,b)\};$$

(iv) *Os operadores máximo* (S_{max}) *e pré-minimal* (S'_{min}) *são definidos por:*

$$S_{max}(y) = (1/w)L(y), \;\; y \in D_{max} \;\; e \;\; S'_{min}(y) = (1/w)L(y), \;\; y \in D_0.$$

Além disso, o operador mínimo (S_{min}) *é o fecho do operador pré-minimal;*

(v) *Para funções* $y, z \in D(L)$*, definimos a forma sesquilinear de Lagrange por:*

$$[y, z] = yp\overline{z'} - \overline{z}py'. \tag{3.27}$$

Com essas definições em mãos, é possível enunciar o Teorema que caracteriza o domínio da extensão auto-adjunta a partir dos pontos de fronteira (que estão diretamente relacionados com o índice de deficiência). A demonstração desse Teorema será omitida, pois requer vários lemas técnicos, mas sua demonstração pode ser encontrada em (ZETTL, 2005).

Teorema 3.18. *Considere o problema* (3.25)*, então:*

(I) *Suponha que ambos os pontos são (LP). Neste caso, o operador* S_{min} *é sua própria extensão auto-adjunta e, portanto, não possui extensões auto-adjuntas próprias em* H*. Isto nos diz que as condições de contorno não tem importância para a auto-adjunticidade do problema;*

(II) *Suponha que um dos pontos é (LP) e o outro é (LC) ou (R). Neste caso, se* S *é uma extensão auto-adjunta de* S_{min}*, então existe uma função* $g \in D(S) \subset D_{max}$ *tal que:*

(i) g *não está em* D_{min}*;*

(ii) $[g, g](b) - [g, g](a) = 0$*;*

(iii) $D(S) = \{f \in D_{max} : [f, g](b) - [f, g](a) = 0\}$.

Por outro lado, se $g \in D_{max}$ *é uma função que satisfaz (i) e (ii), então o domínio definido em (iii) é auto-adjunto.*

(III) Suponha que nenhum dos pontos é (LP), isto é, são (LC) ou (R). Neste caso, se S é uma extensão auto-adjunta de S_{min}, então existem funções $g_1, g_2 \in D(S) \subset D_{max}$ tais que:

(i) nenhuma combinação não trivial de g_1 e g_2 está em D_{min};

(ii) $[g_i, g_j](b) - [g_i, g_j](a) = 0$, para $i, j = 1, 2$;

(iii) $D(S) = \{f \in D_{max} : [f, g_j](b) - [f, g_j](a) = 0,\ j = 1, 2\}$.

Por outro lado, se $g_1, g_2 \in D_{max}$ são funções satisfazendo (i) e (ii), então o domínio definido em (iii) é auto-adjunto.

Para terminar esta seção, vamos enunciar um teorema, cuja demonstração pode ser encontrada em (ZETTL, 2005), que caracteriza o domínio $D(S)$ para cada tipo de ponto e a partir de condições de contorno, já que no Teorema 3.18 temos uma caracterização mais geral.

Teorema 3.19. *Considere o problema (3.25), então, todas as extensões auto-adjuntas de S_{min} são caracterizadas da seguinte forma:*

(I) Suponha que cada ponto de fronteira é regular e sejam $A, B \in M_2(\mathbb{C})$ matrizes tais que posto$(A|B) = 2$ e

$$AEA^* = BEB^*, \quad E = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

O conjunto

$$D(S) = \left\{ y \in D_{max} : AY(a) + BY(b) = 0,\ Y = \begin{pmatrix} y \\ py' \end{pmatrix} \right\}$$

é um domínio auto-adjunto e todos os outros domínios auto-adjuntos são formados da mesma maneira. Além disso, a forma do domínio pode ser reescrita como:

$$D(S) = \{y \in D_{max} : Y(b) = e^{i\gamma} KY(a),\ K \in SL(2, \mathbb{R}) \ \text{ e } \ -\pi < \gamma \leqslant \pi\}.$$

(II) Suponha que a seja o ponto regular e b o ponto (LP), então $d = 1$. Se $A_1, A_2 \in \mathbb{R}$ são tais que $A_1 A_2 \neq 0$, então:

$$D(S) = \{y \in D_{max} : A_1 y(a) + A_2 (py')(a) = 0\}$$

é um domínio auto-adjunto e todos os outros domínios auto-adjuntos são formados da mesma maneira. Analogamente para quando b é o ponto regular.

(III) *Suponha que a seja o ponto (LC) e b o ponto (LP), então $d = 1$. Sejam $A_1, A_2 \in \mathbb{R}$ são tais que $A_1 A_2 \neq 0$, $c \in (a, b)$ e $\lambda \in \mathbb{R}$ fixo. Se existem funções u e v não triviais soluções de (3.25) em (a, c) tais que $[u, v](t) = 1$ para qualquer $t \in (a, c)$, então:*

$$D(S) = \{y \in D_{max} : A_1[y, u](a) + A_2[y, v](a) = 0\}$$

é um domínio auto-adjunto e todos os outros domínios auto-adjuntos são formados da mesma maneira. Analogamente para quando b é o ponto (LC).

(IV) *Suponha que a e b sejam pontos (LC). Sejam $u, v \in D_{max}$ tais que $[u, v](t) = 1$, para $t = a, b$,e $A, B \in M_2(\mathbb{C})$ matrizes tais que posto$(A|B) = 2$ e*

$$AEA^* = BEB^*, \quad E = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Então

$$D(S) = \left\{ y \in D_{max} : A \begin{pmatrix} [y, u](a) \\ [y, v](a) \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} [y, u](b) \\ [y, v](b) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}$$

é um domínio auto-adjunto e todos os outros domínios auto-adjuntos são formados da mesma maneira.

Os últimos teoremas caracterizarem a dependência das condições de contorno a partir da classificação dos pontos de bordo. Com isso, concluímos um resumo sobre a teoria mais "clássica" de Sturm-Liouville. Esta última parte terá forte importância e relação com a teoria de multi-intervalos, uma vez que o foco desta é garantir quando as condições de contorno formam um domínio auto-adjunto. O grande "salto" estará no fato de que, agora, os pontos de fronteira interagem entre si, mesmo sendo de intervalos distintos. Essa é a grande dificuldade do multi-intervalos.

3.2 Problema de Sturm-Liouville Multi-Intervalos

A ideia da Teoria de Sturm-Liouville Multi-Intervalos é trabalhar num sistemas de equações diferencias de Sturm-Liouville. De forma geral, o objetivo é usar a Teoria de Sturm-Liouville já conhecida em cada intervalo e tomar o cuidado para que as condições de contorno satisfaçam certas condições que tornem o problema auto-adjunto.

Vamos iniciar caracterizando um problema de Sturm-Liouville multi-intervalos, sem nos preocuparmos com as condições de contorno ainda.

Definição 3.20. *Seja $k \geqslant 2$ um inteiro. Um problema de Sturm-Liouville em k-intervalos consiste em k equações de Sturm-Liouville:*

$$-(p_j y')' + q_j y = \lambda w_j y, \ \text{ em } (a_j, b_j), \ \ j = 1, \ldots, k, \tag{3.28}$$

tais que para cada j, temos que $\lambda \in \mathbb{C}$ é o parâmetro espectral,

$$-\infty \leqslant a_j < b_j \leqslant \infty \tag{3.29}$$

e

$$(1/p_j), q_j, w_j \in L((a_j, b_j), \mathbb{R}) \ \text{ e } \ w_j > 0 \ q.s. \ \text{em} \ (a_j, b_j). \tag{3.30}$$

Observação 3.21. *(i) Note que por mais que as funções do problema variem de acordo com a equação, o auto-valor λ é fixo.*

(ii) Para cada uma das k equações, teremos um espaço de solução que depende da função peso w_j: $L^2_{w_j}((a_j, b_j), \mathbb{C})$.

Definido o problema, apresentamos um resultado que garante a solubilidade do problema (veja (WU, 2009)).

Proposição 3.22. *Sejam $k \geqslant 2$ um inteiro e $\boldsymbol{m} = (m_1, \ldots, m_k)$ uma k-upla de números positivos. Na soma direta*

$$H = H_1 \oplus \cdots \oplus H_k = L^2_{w_1}((a_1, b_1), \mathbb{C}) \oplus \cdots \oplus L^2_{w_k}((a_k, b_k), \mathbb{C}) \tag{3.31}$$

de espaços de Hilbert associados à (3.28), existe um operador diferencial linear l com domínio

$$D_{max} = \{(y_1, \ldots, y_k) \in H : y_j, (p_j y_j') \in AC_{1oc}((a_j, b_j), \mathbb{C}); \frac{-(p_j y_j') + q_j y_j}{w_j} \in H_j, j = 1, \ldots, k\}$$

definido por

$$l((y_1, \ldots, y_k)) = (m_1[-(p_1 y_1') + q_1 y_1]/w_1, \ldots, m_k[-(p_k y_k') + q_k y_k]/w_k) \tag{3.32}$$

Observação 3.23. *(i) A k-upla m da Proposição anterior serve para dar uma peso nas equações de Sturm-Liouville. Para o nosso estudos, sempre consideraremos $m_i = 1$, para $i = 1, \ldots, k$;*

(ii) O operador e o domínio definidos da Proposição 3.22 são bem especiais. O domínio D_{max} é chamado de domínio máximo associado as equações (3.28), enquanto que o operador l é chamado de operador máximo associado as equações (3.28) e à k-upla $\boldsymbol{m}$.

Em (EVERITT; ZETTL, 1986), foi mostrado que esses operadores auto-adjuntos são restrições do operador máximo no domínio determinado pelas condições de contorno

$$\sum_{j=1}^{k} A_j Y_j(a_j) + \sum_{j=1}^{k} B_j Y_j(b_j) = 0, \tag{3.33}$$

onde $Y_j(x) = \begin{pmatrix} y_j \\ f_j y_j' \end{pmatrix}$ e A_j e B_j são matrizes complexas $2k$ por 2, para $j = 1, \ldots, k$, tais que a matriz de coeficientes $(A_1|B_1|\ldots|A_k|B_k)$ satisfaz a condição de posto:

$$posto((A_1|B_1|\ldots|A_k|B_k)) = 2k \tag{3.34}$$

e a condição de auto-adjunticidade:

$$\sum_{j=1}^{k} A_j E A_j^* = \sum_{j=1}^{k} B_j E B_j^*, \tag{3.35}$$

com

$$E = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.36}$$

Observação 3.24. *Note que as condições de integrabilidade em D_{max} garantem que as funções y_j e $(p_j y_j')$ tem limites finitos nos pontos a_j e b_j, mesmo que esses sejam infinito. Isso nos mostra que (3.33) sempre faz sentido para funções no domínio máximo.*

Segundo (WU, 2009), para que fosse possível trabalhar com essa formulação era quase necessário uma forma explícita da matriz dos coeficientes. Neste mesmo artigo, os autores conseguem determinar tal forma, que é explicitada no seguinte teorema:

Teorema 3.25. *A menos de operações de linhas e operações de colunas auto-adjuntas, a matriz dos coeficientes das condições de contorno auto-adjuntas, no problemas de Sturm-Liouville em k intervalos com múltiplo $\boldsymbol{m} = (m_1, \ldots, m_k)$, tem forma*

$$\begin{pmatrix} 1 & c_{1,1} & 0 & \overline{c_{1,2}} & \ldots & \overline{c_{2k-1,1}} & 0 & c_{2k,1} \\ 0 & c_{2,1} & -1 & \overline{c_{2,2}} & \ldots & \overline{c_{2k-1,2}} & 0 & c_{2k,2} \\ . & . & . & . & \ldots & . & . & . \\ . & . & . & . & \ldots & . & . & . \\ . & . & . & . & \ldots & . & . & . \\ 0 & c_{2k-1,1} & 0 & c_{2k-1,2} & \ldots & c_{2k-1,2k-1} & 0 & \overline{c_{2k,2k-1}} \\ 0 & c_{2k,1} & 0 & c_{2k,2} & \ldots & c_{2k,2k-1} & -1 & c_{2k,2k} \end{pmatrix} D, \tag{3.37}$$

com $c_{i,i} \in \mathbb{R}$, $1 \leqslant i \leqslant 2k$, $c_{i,j} \in \mathbb{C}$, $1 \leqslant j < i \leqslant 2k$, arbitrários e

$$D = \begin{pmatrix} I_4/\sqrt{m_1} & \ldots & 0 \\ . & \ldots & . \\ . & \ldots & . \\ . & \ldots & . \\ 0 & \ldots & I_4/\sqrt{m_k} \end{pmatrix}, \tag{3.38}$$

em que a matriz I_4 é a matriz identidade de dimensão 4.

Note que tal resultado facilita muito quando desejamos fazer alguma aplicação, uma vez que temos uma forma geral bem definida e relativamente fácil de trabalhar.

3.2.1 Caso especial: 2 intervalos

Na referência (ZETTL, 2005), o caso de dois intervalos é detalhado de acordo com a classificação dos pontos de fronteira dos intervalos. Tal detalhamento é interessante, pois mostra que, de acordo com a classificação dos pontos, as matrizes de coeficientes podem tomar tamanhos diferentes, o que também altera a condição do posto. É de se esperar que o mesmo ocorra para os casos de intervalo maior. Nesta seção, apresentaremos o resultado que mostra esse fato interessante. Além disso, este caso serve para exemplificar um caso do multi-intervalos.

Na notação de (3.28), considere k=2. De acordo com (ZETTL, 2005), o jeito mais simples de se obter o operador auto-adjunto que representa o problema no espaço $H = H_1 \oplus H_2$, $H_j = L^2_{w_k}((a_j, b_j), \mathbb{R})$, é tomá-lo como soma direta dos operados em H_1 e H_2. Entretanto, tal fato não é tão simples já que temos interação entre os intervalos.

Observação 3.26. *Como buscamos um operador como soma direta, é natural que tenhamos:*

(i) $D_{max} = D_{1max} \oplus D_{2max}$ *e* $D_{min} = D_{1min} \oplus D_{2min}$*;*

(ii) $S_{max} = S_{1max} \oplus S_{2max}$ *e* $S_{min} = S_{1min} \oplus S_{2min}$*;*

(iii) $f \in H \Rightarrow f = \{f_1, f_2\}$ *com* $f_j \in H_j$, $j = 1, 2$*;*

(iv) Produto interno: $\langle f, g\rangle = \langle f_1, g_2\rangle_1 + \langle f_2, g_2\rangle_2$*;*

(v) Forma Sesquilinear de Lagrange:

$$[f, g] = [f_1, g_1]_1(b_1) - [f_1, g_1]_1(a_1) + [f_2, g_2]_2(b_2) - [f_2, g_2]_2(a_2);$$

(vi) Índice de deficiência do operador S_{min}*:* $d = d_1 + d_2$*.*

Definição 3.27. *Um conjunto de funções* $f_1, \ldots, f_t$ *de um domínio máximo é dito linearmente independente módulo domínio mínimo se nenhuma combinação linear não trivial pertence ao domínio mínimo.*

O lema a seguir não dá uma caracterização direta das extensões auto-adjuntas, mas é a base do Teorema 3.29.

Lema 3.28. *Considere o problema de Sturm-Liouville 2-intervalos ((3.28) com* $k = 2$*). Se* S *é tal que* $D_{min} \subset D(S) \subset D_{max}$ *é uma extensão auto-adjunta de* S_{min}*, então existem funções* $g_1, \ldots, g_d \in D(S)$ *tais que:*

(i) $g_1, \ldots, g_d$ *são L.I. módulo* D_{min}*;*

(ii) $[g_i, g_j] = 0, \forall i, j = 1, \ldots d$;

(iii) $D(S) = \{f \in D_{max} : [f, g_j] = 0, \forall j = 1, \ldots d\}$.

Por outro lado, se $g_1, \ldots, g_d \in D_{max}$ *são funções satisfazendo (i) e (ii), então* $D(S)$ *definido em (iii) é um domínio auto-adjunto.*

O Teorema a seguir, citado no início, detalha todos os casos possíveis para o problema de Sturm-Liouville de dois intervalos. Não iremos apresentar uma demonstração, mas ela pode ser encontrada em (ZETTL, 2005).

Teorema 3.29. *Considere o problema de Sturm-Liouville 2-intervalos (isto é, (3.28) com* $k = 2$*). Além disso, sejam* $u = \{u_1, u_2\}$ *e* $v = \{v_1, v_2\}$ *funções reais em* D_{max} *que são L.I. módulo* D_{min} *que satisfazem*

$$[u_j, v_j]_j(c) = 1, \;\; j = 1, 2$$

em cada ponto (LP). Então, todas as extensões auto-adjuntas de S_{min} *são caracterizadas da seguinte forma:*

(I) *Suponha que os quatro pontos são (LP). Neste caso,* $S_{min} = S_{max}$*, ou seja,* S_{min} *é auto-adjunto e não admite extensões próprias. Em particular nenhuma condição de contorno é necessária para determinar a extensão e vale:*

$$[f, g] = 0, \;\; \forall f, g \in D_{max}$$

(II) *Suponha que temos três pontos (LP) e um regular ou (LC), digamos* c*. Neste caso, a condição (iii) do Lema 3.28 se reduz a:*

$$c_{11}[y, u](c) + c_{12}[y, v](c) = 0, \;\; c_{11}, c_{12} \in \mathbb{R}.$$

Além disso, se c *for regular, então a equação acima se reduz a:*

$$c_{11}y(c) + c_{12}(py')(c) = 0, \;\; c_{11}, c_{12} \in \mathbb{R}$$

e a simetria se torna

$$c_{11}\overline{c_{12}} - \overline{c_{11}}c_{12} = 0. \tag{3.39}$$

Em resumo, todas extensões auto-adjuntas são determinadas pelas condições de contorno em c*.*

(III) *Suponha que dois pontos são (LP) e os outros dois regulares ou (LC), digamos* c *e* d*. Este caso é equivalente ao problema em de 1 intervalo com pontos de fronteira* c *e* d*. Assim, a condição (iii) do Lema 3.28 se reduz a:*

$$\begin{cases} c_{11}[y, u](c) + c_{12}[y, v](c) + d_{11}[y, u](d) + d_{12}[y, v](d) = 0 \\ c_{21}[y, u](c) + c_{22}[y, v](c) + d_{21}[y, u](d) + d_{22}[y, v](d) = 0 \end{cases}, \;\; c_{ij}, d_{i,j} \in \mathbb{C}.$$

Além disso, a condição (ii) se torna:

$$\begin{cases} c_{11}\overline{c_{22}} - \overline{c_{22}}c_{12} = d_{11}\overline{d_{22}} - \overline{d_{22}}d_{12} \\ c_{11}\overline{c_{12}} - \overline{c_{11}}c_{11} = d_{11}\overline{d_{12}} - \overline{d_{11}}d_{12} \\ c_{21}\overline{c_{22}} - \overline{c_{21}}c_{22} = d_{21}\overline{d_{22}} - \overline{d_{21}}d_{22} \end{cases},$$

que para o caso de matrizes reais é det$(C) = $ *det*(D), *onde* $C = (c_{ij})$ *e* $D = (d_{ij})$. *Enquanto que a condição (i) se torna:*

$$posto(C|D) = 2$$

Como esse caso remete ao caso de 1 intervalo, é possível representá-lo na forma:

$$Y(d) = e^{i\gamma}KY(c), \;\; Y = \begin{pmatrix} [y,u] \\ [y,v] \end{pmatrix},$$

com $-\pi < \gamma \leqslant \pi$ *e* $K \in SL(2,\mathbb{R})$. *Além disso, se um dos pontos for regular, digamos* c, *a matriz* Y *pode ser escrita como*

$$Y(c) = \begin{pmatrix} y(c) \\ (py')(c) \end{pmatrix}$$

(IV) Caso apenas um ponto for (LP), digamos b_2, *e os outros três regulares ou (LC), digamos* $a = a_1$, $c = a_2$ *e* $b = b_1$ *(os outros casos serão similares, porém poderá haver uma mudança de sinal devido a forma sesquilinear de Lagrange). Neste caso, a condição (iii) do Lema 3.28 se reduz a(será usada uma notação para simplificar:* $u^1 = u$ *e* $u^2 = v$*):*

$$\sum_{j=1}^{2} a_{ij}[y,u^j](a) + b_{ij}[y,u^j](b) + c_{ij}[y,u^j](c), \;\; i = 1,2,3.$$

Se considerarmos $A = (a_{ij})$, $B = (d_{ij})$ *e* $C = (c_{ij})$, *a condição (i) do Lema 3.28 se torna:*

$$posto(A|B|C) = 3,$$

enquanto que a (ii)é dada por:

$$(a_{j1}\overline{a_{i2}} - a_{j2}\overline{a_{i1}}) - (b_{j1}\overline{b_{i2}} - b_{j2}\overline{b_{i1}}) + (c_{j1}\overline{c_{i2}} - c_{j2}\overline{c_{i1}}) = 0, \;\; i,j = 1,2,3.$$

(V) Suponha que não tenhamos pontos (LP), isto é, são todos regulares ou (LC). Para simplificar a notação, considere $a = a_1$, $c = a_2$, $b = b_1$ *e* $d = b_2$ *e* $A = (a_{ij})$, $B = (d_{ij})$, $C = (c_{ij})$ *e* $D = (d_{ij})$. *Assim, as condições (i), (ii) e (iii) do Lema 3.28 se tornam, respectivamente:*

1. *A matriz* $(A|B|C|D)$ *tem posto completo;*

2. *As condições de contorno são (usando a notação simplificada:* $u^1 = u$ *e* $u^2 = v$*):*

$$\sum_{j=1}^{2} a_{ij}[y,u^j](a) + b_{ij}[y,u^j](b) + c_{ij}[y,u^j](c) + d_{ij}[y,u^j](d), \;\; i = 1,2,3,4.$$

3. *Dada a condição do posto, as condições para que as condições de contorno se tornem auto-adjuntas são:*

$$(a_{j1}\overline{a_{i2}} - a_{j2}\overline{a_{i1}}) - (b_{j1}\overline{b_{i2}} - b_{j2}\overline{b_{i1}}) + (c_{j1}\overline{c_{i2}} - c_{j2}\overline{c_{i1}}) - (d_{j1}\overline{d_{i2}} - d_{j2}\overline{b_{i1}}) = 0,$$

para $i,j = 1,2,3,4$ *,que podem ser escritas, compactamente, por:*

$$AEA^* - BEB^* + CEC^* - DED^*, E = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Observação 3.30. *Em um ponto regular* c*,* u *e* v *podem ser escolhidas com as condições iniciais:*

$$u(c) = 0, \;\; (pu')(c) = 1, \;\; v(c) = 1, \;\; (pv')(c) = 0,$$

o que nos dá

$$[y,u](c) = y(c) \;\; e \;\; [y,v](c) = (py')(c). \tag{3.40}$$

Note que o último caso do Teorema 3.29 nada mais é que o caso geral tratado no artigo (WU, 2009), que foi a base da nossa teoria em multi-intervalos. Além disso, observe que quando os pontos são (LP), as matrizes desses pontos não interferem nas condições de auto-adjunticidade das condições de contorno. Este resultado traz uma grande praticidade para aplicações, uma vez que podemos reduzir o tamanho da matriz dos coeficientes dependendo do nosso problema. Essa afirmação pode ser estendida para intervalos maiores e será de grande ajuda para as aplicações que faremos neste trabalho.

Com isso, terminamos esse resumo sobre a Teoria de Sturm-Liouville e temos tudo necessário para aplica-lá em nosso problema. Como já foi dito, para mais informações sobre esta teoria, recomendamos as referências usadas para escrever esta seção ((HöNIG, 1970; WU, 2009; ZETTL, 2005)).

4 Espalhamento Quântico

O espalhamento em duas dimensões é uma parte importante de muitos cursos de mecânica quântica e teve um grande interesse de estudo teórico nos anos 80, sendo sua grande aplicação o hélio sendo absorvido pelo grafite (mesmo esse estudo não sendo algo muito experimental). O interessante é que mesmo sistemas reais sendo tridimensionais, se o movimento de átomos e elétrons for restrito a uma camada atômica, podemos estudá-los em duas dimensões (que é nossa ideia para este problema, isto é, restringir a uma superfície).

Primeiramente, buscamos dar uma ideia bem geral do que é o espalhamento e depois detalhar o estudo do espalhamento quântico em duas dimensões. O estudo do espalhamento de partículas A por partículas B é representado na Figura 9.

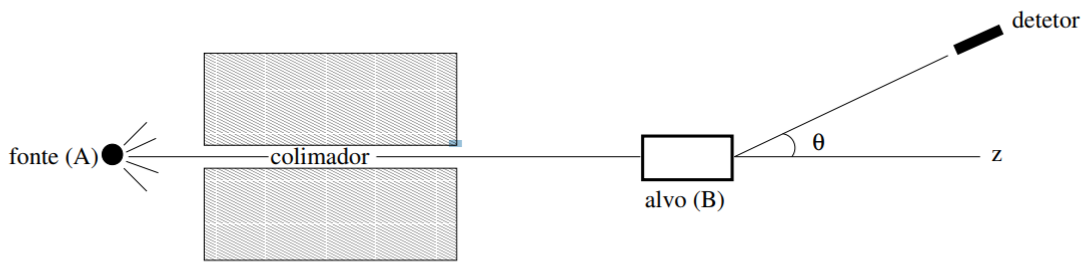

Figura 9 – Imagem retirada da referência (BETTEGA, 2012) representando o espalhamento.

Neste esquema, o feixe de partículas A é colimado e monoenergético (desconsiderando possíveis iterações) encontra um alvo com um grande números de partículas B, causando uma colisão entre essas partículas. A distância entre as partículas B é considerado sendo maior do que o comprimento de onda das partículas de A (de modo a desprezar efeitos de coerência entre as ondas espalhadas pelos centros espalhadores). Por fim, supomos que cada partícula B atua como centro espalhador independente para que possamos olhar o espalhamento de uma partícula A por uma partícula B.

Nosso objetivo é analisar essa iteração entre as partículas A e B através do detector. Para tanto, buscamos observáveis como a colisão e a seção de choque. Quanto a colisão, temos algumas possíveis:

1. **espalhamento elástico:** não há mudança na estrutura interna de A e B;
2. **espalhamento inelástico:** ocorre mudança na estrutura interna de A ou B;

3. **reação:** as partículas de A e B se decompõe em mais de duas partículas.

O que faltaria é como analisar esses tipo de colisão. A resposta para isso é a seção de choque total, que representa o quanto das partículas é espalhado (por exemplo se há perda). O espalhamento pode ser visto como uma onda plana mais a parte que é espalhada (sendo que esta parte contém modos de calcular a seção de choque total, que nos permite analisar que tipo de colisão ocorreu).

4.1 Espalhamento Quântico em duas dimensões

Considere a equação de Schrödinger em duas dimensões:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\,\Psi = i\hbar E\,\Psi, \tag{4.1}$$

onde m é a massa reduzida, V é o potencial local de curto-alcance e E é a energia relativa. Em coordenadas polares (r,θ), onde $x = r\cos(\theta)$ e $y = r\,\mathrm{sen}(\theta)$ são as coordenadas cartesianas correspondentes, equação (4.1) se torna

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\,\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial^2\theta} + k^2\,\Psi - U\,\Psi = 0, \tag{4.2}$$

com $k^2 = 2\,m\,E/\hbar^2$ e $U(r) = 2\,m\,V(r)/\hbar^2$.

De acordo com (ADHIKARI, 1986), uma região assintótica $\Psi(r,\theta)$ terá uma onda incidente plana ao longo do eixo x mais o espalhamento da onda de saída, o que matematicamente é representado por:

$$\Psi(r,\theta) \to e^{i\,k\,x} + \sqrt{\frac{i}{k}}\,f_k(\theta)\,\frac{e^{i\,k\,r}}{\sqrt{r}}, \quad r \to \infty, \tag{4.3}$$

onde f é a amplitude de espalhamento. Além disso, também é definido, em função de f, a seção de choque diferencial do espalhamento:

$$\lambda(\theta) = \left|\sqrt{\frac{i}{k}}\,f(\theta)\right|^2 = \frac{1}{k}\,|f(\theta)|^2, \tag{4.4}$$

que representa o número de partículas espalhadas entre θ e $(\theta + d\theta)$ por segundo por unidade do fluxo de incidência.

Note que para determinar a seção de choque é necessário determinar a forma de f, já que por (4.4) a seção de choque total será a integral da função λ. Desta maneira, seguindo os passos de (ADHIKARI, 1986), vamos determinar uma forma para f.

Para tanto, lembre que a solução geral de (4.2) tem forma

$$\Psi(r,\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} [A_n\, J_n(kr) + B_n\, N_n(kr)]\, \cos(n\theta), \tag{4.5}$$

onde J_n e N_n representam as funções de Bessel e Newmann respectivamente. Queremos que esta solução satisfaça (4.3) e para isso precisaremos de três expressões:

- a forma da onda incidente :

$$e^{ikx} = e^{ik\cos(\theta)} = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n\, i^n\, \cos(n\theta)\, J_n(kr), \tag{4.6}$$

  onde $\varepsilon_0 = 1$ e $\varepsilon_n = 2$ para $n = 1, 2, \ldots$

- as formas assintóticas das funções Bessel e Neumann:

$$\begin{cases} J_n(kr) \to \sqrt{\dfrac{2}{\pi kr}} \cos\left(kr - \dfrac{n\pi}{2} - \dfrac{\pi}{4}\right) \\ N_n(kr) \to \sqrt{\dfrac{2}{\pi kr}} \operatorname{sen}\left(kr - \dfrac{n\pi}{2} - \dfrac{\pi}{4}\right) \end{cases}, \quad \textit{quando} \;\; r \to \infty. \tag{4.7}$$

Substituindo (4.7) e (4.6) em (4.3), obtemos:

$$\Psi(r,\theta) \to e^{-ikr}\left[\sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}}\, \frac{\varepsilon_n}{2}\, \cos(n\theta)\, e^{i(n\pi + (\pi/4))}\right] + \\ e^{ikr}\left[\sum_{n=0}^{\infty} \left(\sqrt{\frac{2}{\pi kr}}\, \frac{\varepsilon_n}{2}\, \cos(n\theta)\, e^{-i(\pi/4)}\right) + \sqrt{\frac{i}{rk}}\, f(\theta)\right],$$

quando $r \to \infty$.

Além disso, expandindo f em uma série de Fourier:

$$f(\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n\, \cos(n\theta),$$

segue que:

$$\Psi(r,\theta) \to \frac{e^{-ikr}}{\sqrt{r}}\left[\sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}}\, \frac{\varepsilon_n}{2}\, e^{i(n\pi + (\pi/4))}\right] \cos(n\theta) + \\ \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}\left[\sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi k}}\, \frac{\varepsilon_n}{2}\, e^{-i(\pi/4)} + \sqrt{\frac{i}{k}}\, \alpha_n\right] \cos(n\theta), \tag{4.8}$$

quando $r \to \infty$.

Por outro lado, usando (4.6) e (4.7) em (4.5) temos:

$$\Psi(r,\theta) \to \frac{e^{-ikr}}{\sqrt{r}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi k}}\, \frac{A_n - iB_n}{2}\, e^{i((n\pi/2)+(\pi/4))} \right] \cos(n\theta) + \\ + \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi k}}\, \frac{A_n + iB_n}{2}\, e^{-i((n\pi/2)+(\pi/4))} \right] \cos(n\theta) \quad (4.9)$$

Agora, igualando os coeficientes de (4.8) e (4.9), obtemos:

$$\begin{cases} A_n - iB_n = \varepsilon_n i^n \\ A_n + iB_n = \varepsilon_n e^{i(n\pi/2)} + \sqrt{2i\pi}\, e^{i((ni/2)+(\pi/4))}\alpha_n \end{cases} . \quad (4.10)$$

Por fim, considerando δ_n um número tal que

$$\begin{cases} A_n = C_n \cos(\delta_n) \\ B_n = -C_n \mathrm{sen}(\delta_n) \end{cases} , \quad (4.11)$$

seguirá de (4.10) que

$$\begin{cases} C_n = \varepsilon_n i^n e^{i\delta_n} \\ \alpha_n = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \varepsilon_n e^{i\delta_n} \mathrm{sen}(\delta_n) \end{cases} . \quad (4.12)$$

Portanto, a forma de f é

$$f(\theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n e^{i\delta_n} \mathrm{sen}(\delta_n) \cos(n\theta),$$

o que implica que a seção de choque total será dada por

$$\lambda = \int_0^{2\pi} \lambda(\theta)\, d\theta = \frac{4}{k} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n\, \mathrm{sen}^2(\delta_n). \quad (4.13)$$

Observação 4.1. *A substituição (4.11) é feita para que, em sua forma assintótica, a solução não dependa de θ. Matematicamente falando, obteremos a seguinte forma:*

$$\Psi(r) \to \sum_{n=0}^{\infty} Cn(kr)^{-1/2} cos(n\theta)\, \cos\left(kr - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad \textit{quando } r \to \infty.$$

5 Regularizações e Sturm-Liouville

Neste Capítulo, iniciaremos a trabalhar propriamente com o problema proposto de estudar o espalhamento quântico em superfícies não regulares através da teoria de Sturm-Liouville. Primeiramente, usando regularizações (assim como algumas propriedades), buscaremos determinar uma condição de contorno que represente o problema de regularizar essas superfícies que não dependa da regularização usada. Depois, verificaremos se tal condição de contorno é, ou não, auto-adjunta de acordo com a teoria de Sturm-Liouville.

5.1 Regularização das Superfícies

Ao colarmos uma superfície, como o cone ou o cilindro, no plano ela deixa de ser regular (no caso do cone, ganha-se mais pontos não regulares), pois nos pontos de colagem se criam vincos. Sendo assim, se torna difícil trabalhar na superfície. Logo, usaremos uma regularização dela, isto é, uma outra superfície que não possua os pontos não regulares, mas que convirja para a superfície original. Faremos a regularização do cone, ou seja, definiremos a métrica correspondente e trabalharemos de modo a obter a equação na superfície. Neste ponto, é importante notar que não nos preocuparemos com o ápice do cone, uma vez que isso já foi tratado em (KAY; M.STUDER, 1991). Nosso objetivo é analisar o vinco criado na colagem da superfície com o plano (em outras palavras, nos preocupamos com vincos unidimensionais e não zero-dimensionais). O que faremos aqui é usar a solução regular já proposta para o ápice do cone.

5.1.1 Regularização do Cone em dois intervalos

Considere um cone de raio c e altura h. Além disso, sejam s o comprimento de arco do cilindro (isto é, para percorrer s, devemos analisar cada θ, da rotação) e $f(r) = z$ é uma regularização do cone (veja Figura 10).

Dito isso, usando as coordenadas da suavização, veja Figura 10, define-se a seguinte métrica

$$ds^2 = d\,r^2 + r^2\,d\theta^2 + d\,z^2 = (1 + f'(r)^2)\,dr^2 + r^2\,d\theta^2, \tag{5.1}$$

o que torna a matriz que representa a métrica:

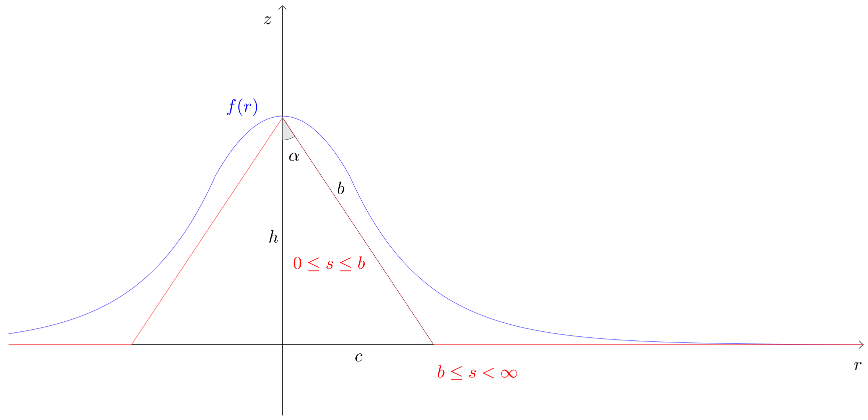

Figura 10 – Regularização do cone em dois intervalos

$$G=[g_{ab}]=\begin{pmatrix}1+f'(r)^2 & 0\\ 0 & r^2\end{pmatrix}\Rightarrow \hat{G}=[g^{ab}]=\begin{pmatrix}\dfrac{1}{1+f'(r)^2} & 0\\ 0 & \dfrac{1}{r^2}\end{pmatrix},\quad a,b=1,2=r,\theta.$$

Suponha que $g=det(G)$. De acordo com (GIL, 2008), o Laplaciano de uma função nesta nova métrica é:

$$\triangle\,\Psi=\frac{1}{\sqrt{g}}\,\partial_a\left(\sqrt{g}g^{ab}\,\partial_b\,\Psi\right),$$

ou, substituindo com os valores da matriz G:

$$\triangle\,\Psi=\frac{1}{r\sqrt{1+f'(r)^2}}\,\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{r}{\sqrt{1+f'(r)^2}}+\frac{\partial\,\Psi}{\partial r}\right]+\frac{1}{r^2}\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}. \tag{5.2}$$

Lembre que a equação diferencial a ser resolvida é

$$-\triangle\,\Psi=i\,k^2\,\frac{\partial\,\Psi}{\partial t},$$

que é uma equação separável, isto é, sua solução pode ser vista da seguinte maneira

$$\Psi=R(r)\,\Theta(\theta)\,T(t). \tag{5.3}$$

Para o nosso caso temos:

$$\Theta(\theta)=e^{i\,m\,\theta}\quad\text{e}\quad T(t)=e^{-i\,k^2\,t}.$$

Além disso, substituindo (5.3) em (5.2):

$$-\frac{1}{r\sqrt{1+f'(r)^2}}\,\frac{d}{dr}\left[\frac{r}{\sqrt{1+f'(r)^2}}\frac{dR}{dr}\right]+\frac{m^2}{r^2}\,R-k^2\,R=0. \tag{5.4}$$

Essa equação está na variável r, e desejamos estudá-la na variável s de comprimento de arco (definida inicialmente). Para fazer tal mudança, lembre que: para que seja possível analisar s, devemos ter um θ constante. Assim (5.1) se torna

$$ds^2=(1+f'(r)^2)\,dr^2,$$

isto é,

$$\frac{dr}{ds}=\frac{1}{\sqrt{1+f'(r)^2}} \quad \text{e} \quad \frac{ds}{dr}=\sqrt{1+f'(r)^2}. \tag{5.5}$$

Portanto, substituindo (5.5) em (5.4):

$$-\frac{d}{ds}\left[r(s)\,\frac{dR}{ds}(s)\right]+\frac{m^2}{r(s)}\,R(s)=k^2\,r(s)\,R(s), \tag{5.6}$$

que é uma equação de Sturm-Liouville.

Para tornar mais fácil a obtenção das condições de contorno e facilitar algumas implementações, usaremos aqui a Forma Normal de Liouville (para retirar o termos da primeira derivada). Usando (3.22) e (3.24) para o nosso caso, teremos:

$$\begin{cases}\sigma(s)=s\\ w(s)=\sqrt{r(s)}\,R(s)\\ V(s)=\dfrac{m^2}{r(s)^2}+\dfrac{r''(s)}{2\,r(s)}-\dfrac{r'(s)}{4\,r(s)^2}\end{cases}. \tag{5.7}$$

Fazendo as substituições(5.7) em (5.6), obtemos, finalmente, a equação

$$-w''(s)+\left[\frac{m^2}{r(s)^2}-\frac{r'(s)}{4\,r(s)^2}+\frac{r''(s)}{2\,r(s)}\right]\,w(s)=k^2\,w(s). \tag{5.8}$$

Note que, até aqui, nada foi feito especificamente para o cone. Tudo depende da função r, que depende da superfície. Com isto, temos um método para outras superfícies também.

Para o cone, em dois intervalos, a função r é definida da seguinte maneira (usando $b^2 = c^2 + h^2$)

$$r(s) = \begin{cases} \dfrac{c}{b}\, s, & 0 \leqslant s < b \\ s + (c - b), & s \geqslant b \end{cases}, \tag{5.9}$$

que é uma função contínua, porém quando $s = b$ sua derivada é descontínua (a derivada tem uma forma de Heaviside). Agora sua segunda derivada tem forma de delta de Dirac:

$$r'(s) = \frac{c}{b}\, H(b - s) + H(s - b) \Rightarrow r''(s) = \left(1 - \frac{c}{b}\right) \delta(s - b).$$

onde H representa a função de heaviside e δ a delta de Dirac. Essa análise das derivadas de r é necessária, pois agora teremos uma equação diferencial por partes.

Substituindo a forma de r e suas derivadas em (5.8) obtemos o seguinte sistema de equações diferenciais

$$\begin{cases} -w'' + \left[\dfrac{m^2\,(b/c)^2}{s^2} - \dfrac{1}{4\,s^2}\right] = k^2\, w, & 0 < s < b \\ -w'' + \left(\dfrac{m^2}{(s - (c - b))^2} - \dfrac{1}{4\,(s - (c - b))^2}\right) w = k^2\, w, & s > b \end{cases},$$

cuja solução geral, em cada fase $m \in \mathbb{N}$, é:

$$w(s) = \begin{cases} A_m \sqrt{s}\; J_{m/c}(k\, s), & 0 < s < b \\ B_m \sqrt{s + c - b}\, J_m(k\,(s + (c - b))) + C_m \sqrt{s + c - b}\, Y_m(k\,(s + (c - b))), & s > b \end{cases}.$$

Para que haja unicidade na solução, devemos ter condições de contorno, uma sobre a função e outra sobre a derivada, nos pontos de quebra da função. Para a função, desejamos a continuidade, então devemos ter:

$$\lim_{s \to b_-} w(s) = \lim_{s \to b_+} w(s).$$

Enquanto que para as derivadas, usaremos a equação diferencial e propriedades da delta de Dirac:

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{b-\varepsilon}^{b+\varepsilon} -w''(s)+\delta(s-b)\left(1-\frac{c}{b}\right)\,w(s)\,ds = \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{b-\varepsilon}^{b+\varepsilon} k^2\,w(s)\,ds \Rightarrow$$
$$\Rightarrow \lim_{s\to b_-} w'(s) - \lim_{s\to b_+} w'(s) = \left(1-\frac{c}{b}\right) w(b).$$

Resumidamente, as condições de contorno são:

$$\begin{cases} w(b_-) = w(b_+) \\ w'(b_+) - w'(b_-) = \left(1-\dfrac{c}{b}\right)\dfrac{w(b)}{2\,c} \end{cases} . \tag{5.10}$$

5.1.2 Regularização do Cone em três intervalos

Nesta parte, trataremos de uma outra maneira de analisar o cone. É importante notar que o nosso foco não será nesta maneira, mas sim na anterior. O interessante do que será mostrado a seguir é que não exite uma única maneira de usar Sturm-Liouville multi-intervalos, isto é, podemos ver a modelagem do problema do cone em 2 ou 3 intervalos e, no próximo capítulo, vamos testar se ambas modelagens levam ao mesmo resultado. Além disto servirá, também, como uma aplicação de três intervalos. Para ser consistente com o caso anterior, ao regularizarmos o ápice, desta vez, usaremos a solução regular no primeiro intervalo (que é o que representa o ápice).

Para o cone, em três intervalos, a ideia é a mesma do cone em dois intervalos. Considere um cone de raio c e altura h e $f(r) = z$ uma suavização do cone (veja Figura 11). Note que essa é uma regularização do cone apenas quando $a \to 0$.

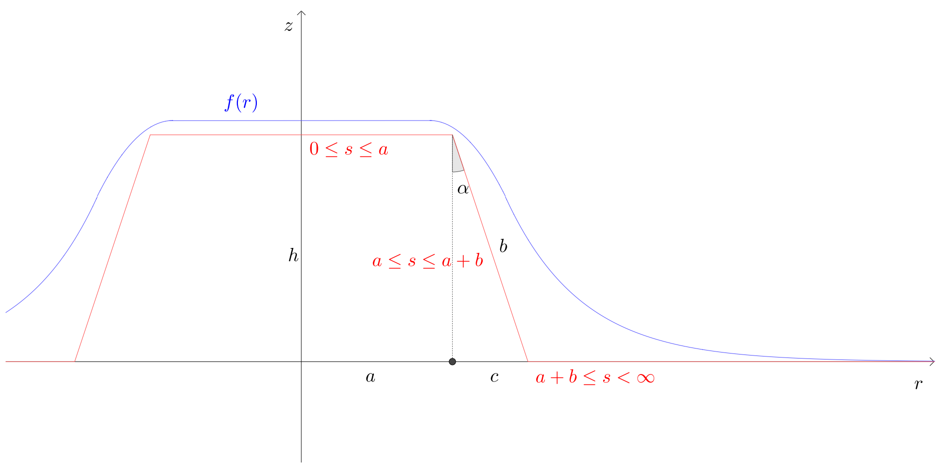

Figura 11 – Regularização do cone com três intervalos

Como já foi dito anteriormente, as contas iniciais feitas na seção anterior são bem gerais. Assim, podemos já considerar a equação (5.8). Logo, resta definir que é a função r no caso do cone. Ela é parecida com a anterior, porém temos três equações:

$$r(s) = \begin{cases} s, \ 0 \leqslant s < a \\ \dfrac{c}{b}\, s + a\left(1 - \dfrac{c}{b}\right), \ a \leqslant s < a+b \\ s + (c-b), s \geqslant a+b \end{cases}, \tag{5.11}$$

porém suas derivada e segunda derivada ainda são como o caso anterior:

$$r'(s) = \begin{cases} H(a-s) + \dfrac{c}{b} H(s-a), \ 0 \leqslant s < a+b \\ \dfrac{c}{b} H((a+b)-s) + H(s-(a+b)), \ s \geqslant a+b \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow r''(s) = \frac{c}{b} \begin{cases} \left(\dfrac{c}{b} - 1\right) \delta(s-a), \ 0 \leqslant s < a+b \\ \left(1 - \dfrac{c}{b}\right) \delta(s-(a+b)), \ s \geqslant a+b \end{cases}.$$

Com isso em mãos, substituindo as formas de r e suas derivadas, a equação (5.8) se torna

$$\begin{cases} -w'' + \left(\dfrac{m^2}{s^2} - \dfrac{1}{4\,s^2}\right) w = k^2\, w, \ 0 < s < a \\ -w'' + \left[\dfrac{m^2\,(b/c)^2}{s + (a\,b/c) - a} - \dfrac{1}{4\,(s + (a\,b/c) - a)^2}\right] = k^2\, w, \ a < s < a+b \\ -w'' + \left(\dfrac{m^2}{(s-(c-b))^2} - \dfrac{1}{4\,(s-(c-b))^2}\right) w = k^2\, w, \ s > a+b \end{cases},$$

cuja solução geral, em cada fase $m \in \mathbb{N}$, é:

$$w_m(s) = \begin{cases} A_m \sqrt{s}\, J_m(k\,s), \ 0 < s < a \\ B_m \sqrt{s + (a\,b/c) - a}\ J_{m/c}(k\,(s + (a\,b/c) - a)) + \\ + C_m \sqrt{s + (a\,b/c) - a}\ Y_{m/c}(k\,(s + (a\,b/c) - a)), \ a < s < a+h \\ D_m \sqrt{s-h}\, J_m(k\,(s-(c-b))) + E_m \sqrt{s-h}\, Y_m(k\,(s-(c-b))), \ s > a+h \end{cases}.$$

Assim como anteriormente, as condições nas derivadas são um pouco diferentes do que apenas impor continuidade. Como as contas são análogas, colocamos aqui uma forma resumida:

$$\begin{cases} w(a_-) = w(a_+) \\ w((a+b)_-) = w((a+b)_+) \\ w'(a_-) - w'(a_+) = \left(\frac{c}{b} - 1\right) \frac{w(a)}{2\,a} \\ w((a+b)_-) - w((a+b)_+) = \left(1 - \frac{c}{b}\right) \frac{w(a+b)}{2\,(a+c)} \end{cases} . \tag{5.12}$$

5.2 Comparação entre Sturm-Liouville e Regularizações

Um dos nossos objetivos é verificar se as condições de contorno (5.10) e (5.12) são auto-adjuntas de acordo com a Teoria de Sturm-Liouville multi-intervalos. Para tanto, vamos transformar as condições citadas em forma matricial e verificar se eles satisfazem as condições de posto e de auto-adjunticidade.

Trataremos primeiro do cone em dois intervalos para depois mostrar, como curiosidade, como ficaria para o cone em três intervalos.

5.2.1 Cone em dois intervalos

Primeiramente, vamos reescrever (5.10) como:

$$\begin{cases} w(b_-) = w(b_+) \\ w'(b_-) - w'(b_+) = \left(1 - \frac{c}{b}\right) \frac{w(b)}{2\,c} \end{cases} . \tag{5.13}$$

Transformando (5.13) na sua forma matricial e usando $\omega = \left(1 - \frac{c}{b}\right) \frac{1}{2\,c}$, teremos:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w(b_-) \\ w'(b_-) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -\omega & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w(b_+) \\ w'(b_+) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} . \tag{5.14}$$

Com isso, segue que

$$(A|B) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -\omega & -1 \end{pmatrix} \tag{5.15}$$

De acordo com (WU, 2009) temos que as condições de contorno são auto-adjuntas.

Essas duas conclusões nos levam aos questionamentos: Será que todas as condições de contorno auto-adjuntas tem alguma relação com essas obtidas? Se sim: Será que qualquer condição de contorno serve para representar este problema? Caso contrário: Será que essa condição "regular" representa melhor o fenômeno a ser estudado?

Esses questionamentos nos motivam a continuar explorando as possibilidades da teoria de Sturm-Liouville multi-intervalos e depois comparar com essas condições obtidas aqui.

5.2.2 Cone em três intervalos

Aqui, trataremos do cone em três intervalos só para mostrar que existem outras maneiras de analisar o problema, assim como ver uma aplicação da teoria de três intervalos. Note que podemos reescrever (5.12) da seguinte forma:

$$\begin{cases} w(p_-) - w(p_+) = 0 \\ w(q_-) - w(q_+) = 0 \\ w'(p_-) - w'(p_+) - \omega_1\, w(p) = 0 \\ w(q_-) = w(q_+) - \omega_2\, w(q) = 0 \end{cases}, \tag{5.16}$$

com $p = a$, $q = a + b$, $\omega_1 = \dfrac{(c/b) - 1}{2a}$ e $\omega_2 = \dfrac{1 - (c/b)}{2(a + c)}$.

A forma matricial de (5.16) é:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -\omega_1 & -1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w(p_-) \\ w'(p_-) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w(p_+) \\ w'(p_+) \end{pmatrix} + \\ + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ -1 & 0 \\ -\omega_2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w(q_-) \\ w'(q_-) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w(q_+) \\ w'(q_+) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{5.17}$$

Primeiramente note que:

$$(A|B|C|D) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\omega_1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\omega_2 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{5.18}$$

tem posto completo e, além disso

$$AEA^T - BEB^T + CEC^T - DED^T = 0_{4X4}, \ \text{com } E = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{5.19}$$

Em outras palavras, as condições que tornam essas condições de contorno auto-adjuntas segundo (WU, 2009) são cumpridas. Portanto, a regularização nos leva a uma condição de contorno auto-adjunta.

6 Condição de Contorno "Regular"

Neste capítulo vamos buscar comparativos para tentar indicar que condição de contorno "regular" (a que foi obtida através das regularizações) é a que melhor representa o problema de espalhamento. Para tanto, apresentaremos um experimento numérico que mostra que a solução encontrada através de uma solução numérica, resulta na condição de contorno regular e outro que compara resultados da função de espalhamento. Além disso, buscando analisar se há alguma relação entre outras condições de contorno auto-adjuntas (que podem ser obtidas na teoria de Sturm-Liouville) com a regular, compararemos o gráfico das curvas integrais que representam o espalhamento delas. Assim, buscamos responder as perguntas deixadas no final do Capítulo 5.

6.1 Experimentos com Soluções Numéricas

Nesta seção apresentaremos os resultados de alguns experimentos de resolução deste problema através de soluções numéricas (ou com uma parte analítica e outra numérica). O primeiro é baseado em comparar a condição de contorno obtida com uma obtida numericamente e compará-las. Já o segundo tem como objeto comparar o gráfico da função de espalhamento da condição de contorno regular com uma solução numérica do problema.

6.1.1 Determinando a condição de contorno

Note que a condição de contorno (5.10) é para equação na forma normal de Liouville e na variável s de comprimento de arco. Como queremos fazer um experimento numérico, através de regularizações, temos que analisar a equação (5.4), que está na variável r. A ideia, então, é fazer o "caminho inverso" para determinar o que a condição (5.10) equivale para equação diferencial (5.4).

Primeiramente, lembremos que, ao fazer a mudança para forma normal de Liouville, fizemos a seguinte substituição:

$$w(s) = \sqrt{r(s)}R(s). \tag{6.1}$$

Substituindo (6.1) em (5.10), segue que

$$w(b_+) = w(b_-) \Rightarrow \sqrt{r(b_+)}R(b_+) = \sqrt{r(b_-)}R(b_-) \Rightarrow R(b_+) = R(b_-),$$

isto é, R é contínua em b. Além disso,

$$w'(b_+) - w'(b_-) = \left(1 - \frac{c}{b}\right) \frac{w(b)}{2\,c} \Rightarrow$$
$$\left(1 - \frac{c}{b}\right) \frac{\sqrt{r(b)}w(b)}{2\,c} = \frac{r'(b_+)R(b_+)}{2\sqrt{r(b_+)}} + \sqrt{r(b_+)}R'(b_+) - \frac{r'(b_-)R(b_-)}{2\sqrt{r(b_-)}} - \sqrt{r(b_-)}R'(b_-)$$

e usando a forma de $r(s)$, dada em (5.9), temos:

$$\frac{(b-c)R(b)}{2b\sqrt{c}} = \left[\frac{b-c}{2b\sqrt{c}}\right] + R'(b_+) - R'(b_-) \Rightarrow R'(b_+) - R'(b_-) = 0,$$

o que nos dá que (5.10) é equivalente à:

$$\begin{cases} R(b_+) = R(b_-) \\ R'(b_+) = R'(b_-) \end{cases} . \tag{6.2}$$

Por fim, vamos determinar o que isso significa para $R(r)$, uma vez que (6.2) ainda está na variável s. Para tanto, observe que

$$R(r) = R(r(s)) = R(s) \Rightarrow \frac{dR}{ds} = \frac{dr}{ds}\frac{dR}{dr}.$$

Substituindo em (6.2) temos:

$$R(b_+) = R(b_-) \Rightarrow R(r(b_+)) = R(r(b_-)) \Rightarrow R(c_+) = R(c_-),$$

o que implica na continuidade de $R(r)$. Além disso, temos ainda

$$\frac{dR}{ds}(b_+) = \frac{dR}{ds}(b_-) \Rightarrow \frac{dr}{ds}(b_+)\frac{dR}{dr}(r(b_+)) = \frac{dr}{ds}(b_+)\frac{dR}{dr}(r(b_+))$$
$$\Rightarrow \frac{dR}{dr}(c_+) = \frac{c}{b}\frac{dR}{dr}(c_-),$$

que, resumidamente nos dá a seguinte condição

$$\begin{cases} R(c_+) = R(c_-) \\ R'(c_+) = \dfrac{c}{b}R'(c_-) \end{cases} . \tag{6.3}$$

Com a condição equivalente em mãos, nosso objetivo é criar uma família de regularizações que convergem para o cone. Com tal família, determinaremos se a solução

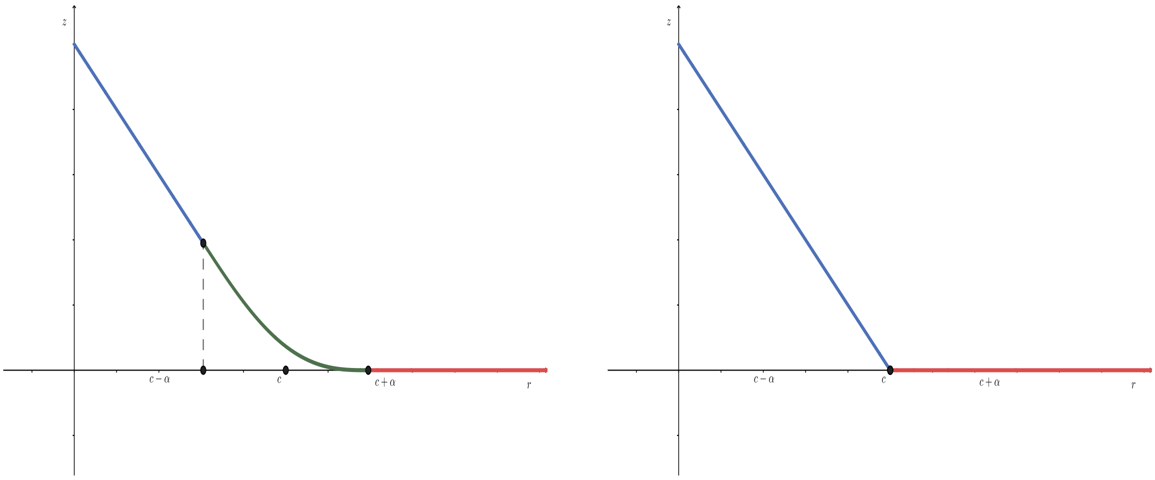

Figura 12 – Família de funções e sua função limite

obtida satisfaz (6.3). Dito isso, considere a família de regularizações da Figura 12.

A obtenção dessa família foi pensada da seguinte maneira: Criamos uma sequência de funções por partes, definidas por um parâmetro α: (lembrando que c representa o raio do cone e h sua altura)

$$g_\alpha(r) = \begin{cases} -\dfrac{h}{c}r + h, & 0 \leqslant r \leqslant c-\alpha \\ a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + a_3 r^3 + a_4 r^4 + a_5 r^5, & c-\alpha < r < c+\alpha \\ 0, & r \geqslant c+\alpha \end{cases}, \tag{6.4}$$

onde os coeficientes a_i, $i = 0, \ldots 5$, são determinados de modo que tal sequência seja de classe C^2 e têm forma:

$$a_0 = -\frac{h(c^4 - 6c^2\alpha^2 - 8c\alpha^3 - 3\alpha^4)}{16c\alpha^3} \qquad a_2 = -\frac{3h(c-\alpha)(c+\alpha)}{8c\alpha^3} \qquad a_4 = \frac{h}{16c\alpha^3}$$
$$a_1 = \frac{h(c^3 - 3c\alpha^2 - 2\alpha^3)}{4c\alpha^3} \qquad a_3 = \frac{h}{4\alpha^3} \qquad a_5 = 0.$$

Tal família é representada na Figura 12 na imagem esquerda. A imagem da direita representa a função para a qual essa família converge quando tomamos o limite: $\alpha \to 0$. Com tal família, fazendo $c = 1$, $h = 1$ e $k = 1$, resolvemos a equação (5.4) numericamente usando o Mathematica e obtemos: (veja Figura 13)

Note que tal gráfico indica uma convergência da razão para 1, o que confere com obtido pela condição de contorno (6.3). A importância deste resultado é que o jeito que obtivemos a condição de contorno (usando propriedades de regularização, mas sem

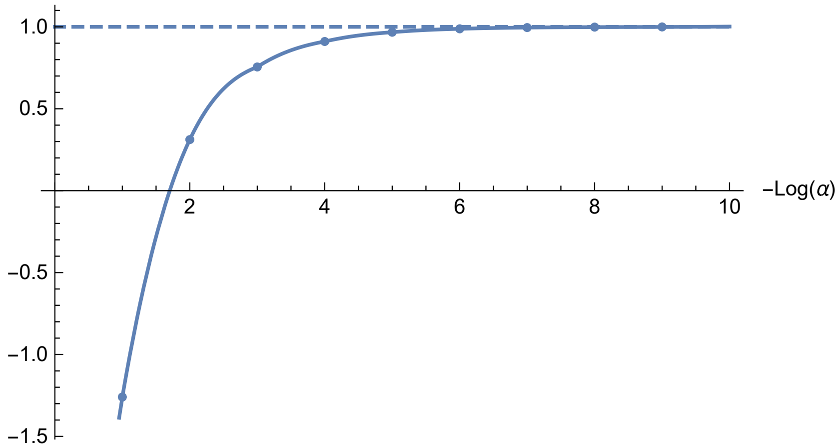

Figura 13 – Resultado do experimento para determinar a razão $\dfrac{R'(c^+)}{(c/b)R'(c^-)}$ para $c = 1$, $h = 1$ e $k = 1$.

usar uma regularização) resulta na mesma condição de contorno obtida se usarmos uma regularização de um polinômio por partes. Com os resultados obtidos, tivemos um indício de que a condição de contorno obtida pela regularização é melhor do que outras (que podem ser encontradas pela Teoria de Sturm-Liouville), uma vez que o numérico e o analítico nos levaram a mesma condição de contorno.

6.1.2 Determinando o gráfico da função de espalhamento

Outro teste numérico feito foi o de determinar o gráfico da função de espalhamento e compará-lo com o obtido usando a parte analítica. Discutiremos dois processos agora. O primeiro procedimento foi feito já utilizando o caso limite e a condição de contorno (6.3). Este caso é mais uma verificação, uma vez que é como conseguimos a condição de contorno, só que agora vamos colocar uma forma para regularização. Já o segundo foi feito usando uma das constantes obtidas no primeiro procedimento, que junto com as regularizações nos trariam o gráfico da função de espalhamento.

1. **Primeiro procedimento:** Começamos determinando a solução da equação

$$-\frac{1}{r\sqrt{1+g'(r)^2}}\frac{d}{dr}\left[\frac{r}{\sqrt{1+g'(r)^2}}+\frac{DR}{dr}\right]+\frac{m^2}{r^2}R-k^2\,R=0. \tag{6.5}$$

para o limite da regularização

$$g(r)=\begin{cases}-\dfrac{h}{c}r+h, & 0\leqslant r\leqslant c\\ 0, & r\geqslant c\end{cases},$$

que é

$$\psi_m(r) = \begin{cases} A_m J_{\frac{bm}{c}}(\dfrac{bkr}{c}), & 0 \leqslant r \leqslant c \\ \\ B_m J_m(rk) + C_m N_m(rk), & r \geqslant c \end{cases} . \tag{6.6}$$

Feito isso, aplicamos a condição de contorno (6.3) junto com a condição obtida pelo espalhamento

$$B_m - iC_m = \varepsilon_m i^m, \;\; \varepsilon_m = \begin{cases} 1, & m = 0 \\ 2, c.c. \end{cases} \tag{6.7}$$

para determinar A_m, B_m e C_m. Fazendo isso no Mathematica, determinamos a função de espalhamento e comparamos com o a função de espalhamento obtida com a condição de contorno regular. O que obtemos foi: ambos resultam no mesmo gráfico (veja Figura 14).

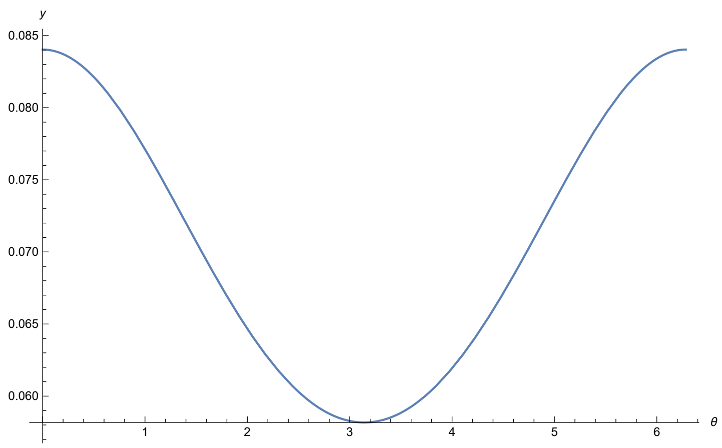

Figura 14 – Gráfico de $|f(\theta)|^2/k$ para $c = 1$, $k = 1$ e $h = 1$.

2. **Segundo procedimento:** Inspirados pelo primeiro procedimento, a ideia deste é usar a constante A_m obtida no primeiro procedimento (uma vez que essa constante já possui a condição de espalhamento para o caso limite) e resolver a equação (6.5) para a sequência de regularizações dada por (6.4). Para tanto, primeiro determinamos as constantes B_m e C_m com a solução numérica do problema e depois fazemos o quociente para que seja possível determinar $f(\theta)$. O problema é que para α pequeno não conseguimos determinar muitas constantes (para $\alpha = 0.1$, por exemplo, conseguimos no máximo 6 e isso se deve ao fato de nossa regularização ser um polinômio de grau 5), mas aparentemente o resultado é algo bem razoável.(veja Figura 15).

Neste caso, é possível notar que os gráficos não são idênticos, mas o numérico parece se aproximar do gráfico analítico.

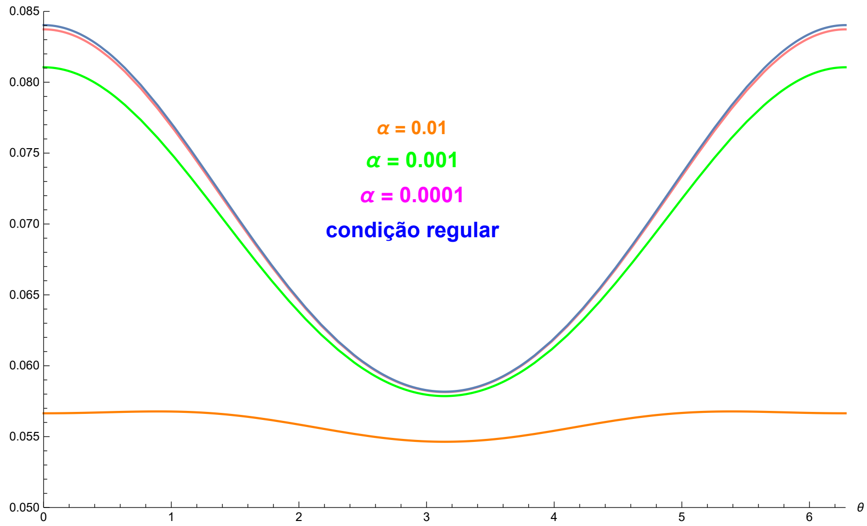

Figura 15 – Comparação dos gráficos de $|f(\theta)|^2/k$ para soluções a partir de regularizações e com a condição de contorno regular.

Com o exposto até então, é possível acreditar que a condição regular é a que melhor representa o problema. Nosso objetivo, agora, será de comparar essa condição com outras auto-adjuntas para determinar se essa escolha de condição pode ser arbitrária, isto é, buscamos comparar se qualquer condição auto-adjunta dará o mesmo resultado.

6.2 Seção de choque total

Primeiramente, relembre que seção de choque total é calculada da seguinte maneira:

$$\lambda = \int_0^{2\pi} \frac{1}{k} \, |f(\theta)|^2 \, d\theta = \frac{4}{k} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n \operatorname{sen}^2(\delta_n).$$

De acordo com (FITZPATRICK, 2013), ao se considerar uma energia muita grande, isto é $kc >> 1$, as frentes de onda que mais contribuem para seção de choque total vão até $n_{max} = kc$. Com isso, a seção de choque total se torna

$$\lambda = \frac{4}{k} \sum_{n=0}^{kc} \varepsilon_n \operatorname{sen}^2(\delta_n).$$

Além disso, como teremos vários valores de n nesse somatório, podemos fazer a seguinte aproximação média:

$$\operatorname{sen}^2(\delta_n) \approx \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, \ldots, kc.$$

Com isso, podemos concluir que

$$\lambda \approx \frac{2}{k} \sum_{n=0}^{kc} \varepsilon_n \approx 4c. \tag{6.8}$$

Em outras palavras, por mais que não consigamos plotar as curvas para k grande, é possível observar, a partir da seção de choque total, que à medida que o k aumenta, a seção de choque total tende ao valor $4c$, onde c é o raio do cone. É interessante notar que tal resultado independe da condição de contorno, isto é, para um espalhamento com k grande, todas as seções de choque total convergem para um mesmo valor, porém isso não implica que suas curvas integrais tenham o mesmo formato. Assim, uma outra forma de testar a condição de contorno regular é determinar se ela satisfaz esse limite.

Para analisar isso, novamente usamos o Mathematica para determinar as constantes de espalhamento, δ_n, e fizemos o proposto, isto é, para diferentes k's calculamos a seção de choque total, com um raio e uma altura fixada (veja Figura 16). Para criar tal gráfico, fizemos uma tabela, variando k e depois usamos o comando *ListLinePlot* do software.

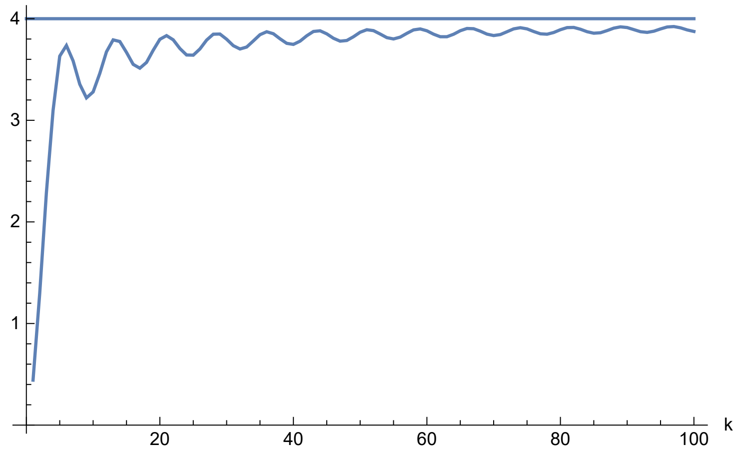

Figura 16 – Seção de choque total com $c = 1$, $h = 1$ e k variando entre 1 e 100

Note que a seção de choque total, com o aumento de k, tende ao limite desejado, o que mostra que a condição de contorno regular também satisfaz mais essa propriedade.

6.3 Cone de dois intervalos x Cone de três intervalos

No Capítulo 5, introduzimos a modelagem do cone em três intervalos como uma outra maneira de formular o problema. Vamos começar relembrando às formas do cone em dois e três intervalos (veja Figura 17).

Note que a formulação em três intervalos só recai em um cone quando $a \to 0$. Dito isso, nossa ideia foi determinar a consistência dessa aplicação, isto é, será que a seção de choque para o cone é a mesma sendo em dois ou três intervalos?

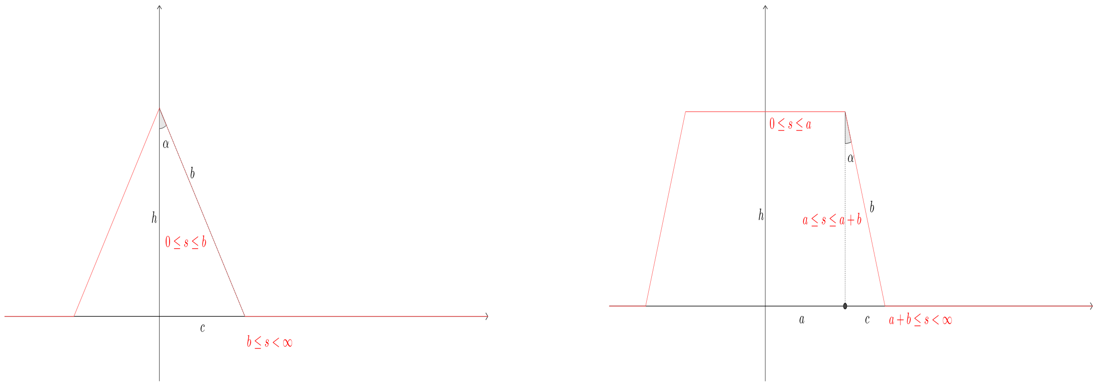

Figura 17 – Cone em dois intervalos (esquerda) e em três intervalos (direita).

Para determinar uma resposta, tomamos o que já tínhamos feito para dois intervalos e, com um procedimento análogo, fizemos o mesmo para três intervalos (com diferentes valores de a próximo de zero) para poder comparar ambos resultados. É importante observar que, assim como em dois intervalos, consideramos apenas a solução regular no ápice do cone, isto é, temos apenas a função Bessel, uma vez que não estamos preocupados em estudar tal problema. A comparação pode ser vista na Figura 18.

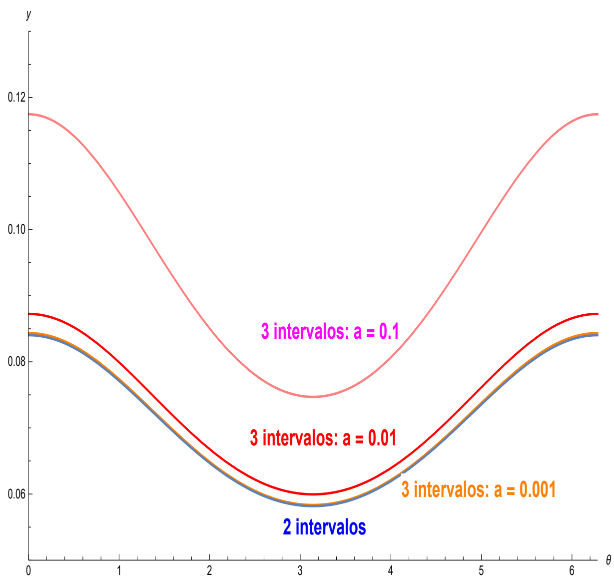

Figura 18 – Comparação da seção de choque total com $c = 1$, $h = 1$ e $k = 1$ dos cones em dois intervalos e três intervalos para diferentes valores de a.

Note que quanto mais próximo de zero for o valor de a, mais o gráfico de três intervalos converge para o gráfico obtido com a formulação de dois intervalos. Isto nos leva a crer na consistência das formulações, uma vez que mesmo com formulações diferentes, obtivemos o mesmo resultado para a seção de choque.

Até aqui, a comparação do resultado analítico com o numérico e a consistência na formulação, nos leva a acreditar que a condição regular é realmente uma boa solução para o problema. O que faremos a seguir é analisar o espalhamento desta e outras condições de contorno de Sturm-Liouville.

6.4 Curvas Integrais

Usando o software Mathematica, plotamos as curvas integrais que representam os vetores normais à onda para determinar qual o efeito do cone sobre a mesma. Além disso, também analisamos o gráfico da função que representa a seção de choque total para determinar se os resultados fazem algum sentido.

Para fazer o gráfico dessas curvas, primeiramente usamos condições de contorno para resolver o problema. Feito isso, construímos a solução como sendo um somatório das soluções obtidas para cada m e determinamos o número de termos a ser somado analisando quando tal função se estabiliza. Com isso, determinamos um intervalo e subdividimos esse intervalo (nos exemplos usamos $[-3,3] \times [-3,3]$ e os subdividimos com 0.01π). Depois de coletados esses dados, os interpolamos em suas partes real e imaginária para então passar o gradiente da solução de coordenadas polares para cartesianas. Por fim, resolvemos um sistema de equações diferenciais para determinar a curva que representa o gradiente e plotamos tal curva. Tudo isso foi feito no Mathematica.

Para os exemplos a seguir, usamos cones de raio 1, altura 2 e a energia da onda $k = 1$. Também tentamos analisar para energias maiores, porém o resultado ainda não está bom, pois as curvas integrais não se comportam muito bem, aparentemente por causa de requererem um refinamento maior de malha.

Primeiramente, analisaremos a solução:

$$w(s) = \begin{cases} A_m \sqrt{s}\ J_{m/c}(k\,s), \quad 0 < s < b \\ B_m \sqrt{s+c-b}\, J_m(k\,(s+(c-b)))+ \\ +C_m \sqrt{s+c-b}\, Y_m(k\,(s+(c-b))), \quad s > b \end{cases}$$

com a condição de contorno da regularização:

$$\begin{cases} w(b_-) = w(b_+) \\ w'(b_-) - w'(b_+) = \left(1 - \dfrac{c}{b}\right) \dfrac{w(b)}{2\,c} \end{cases} .$$

Feito isso, usaremos a Teoria de Sturm-Liouville multi-intervalos, nesse caso dois intervalos, para determinar outras condições de contorno. Lembrando que, por tal teoria, a condições de contorno são da forma

$$M\,Y(0^+) + N\,Y(0^-) = 0,$$

com $Y(s) = \begin{pmatrix} \Psi(s) \\ (-\hbar^2/2m)\,\Psi'(s) \end{pmatrix}$ e a matriz dos coeficientes tem forma:

$$(M \mid N) = \begin{pmatrix} 1 & c_{11} & 0 & \overline{c_{12}} \\ 0 & c_{12} & -1 & c_{22}, \end{pmatrix}$$

isto é, vamos supor alguns valores para c_{ij} para tentar analisar o que acontece com a onda.

Além disso, para determinar o comportamento da seção de choque, a função a ser analisada é $|f(\theta)|^2/k$, onde

$$f(\theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n e^{i\delta_n} \mathrm{sen}(\delta_n) \cos(n\theta).$$

1. O primeiro caso a ser analisado é o das condições de contorno que representam a regularização. Como pode ser observado na Figura 19, segundo o gráfico de f o espalhamento maior ocorre em 0 e 2π, o que é consistente com o que é visto no gráfico das curvas integrais. Além disso, observe que as curvas passam por dentro do cone, mesmo que o cone desvie sua trajetória.

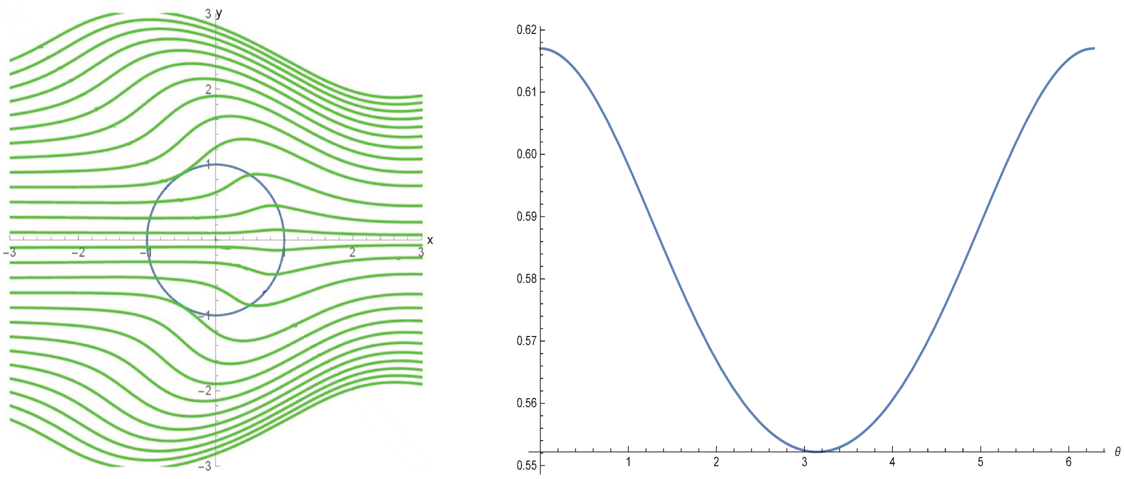

Figura 19 – Curvas Integrais e gráfico da função de espalhamento para a condição de contorno regular

2. Para este segundo caso, usamos as seguintes constantes: $c_{11} = 3$, $c_{12} = -2$ e $c_{22} = 2$. Note que, de acordo com a Figura 20, o gráfico de f indica que o espalhamento é intenso em quase toda região do cone, assim como é visto no gráfico das curvas integrais. Além disso, observe que o cone é quase um barreia repelindo a onda.

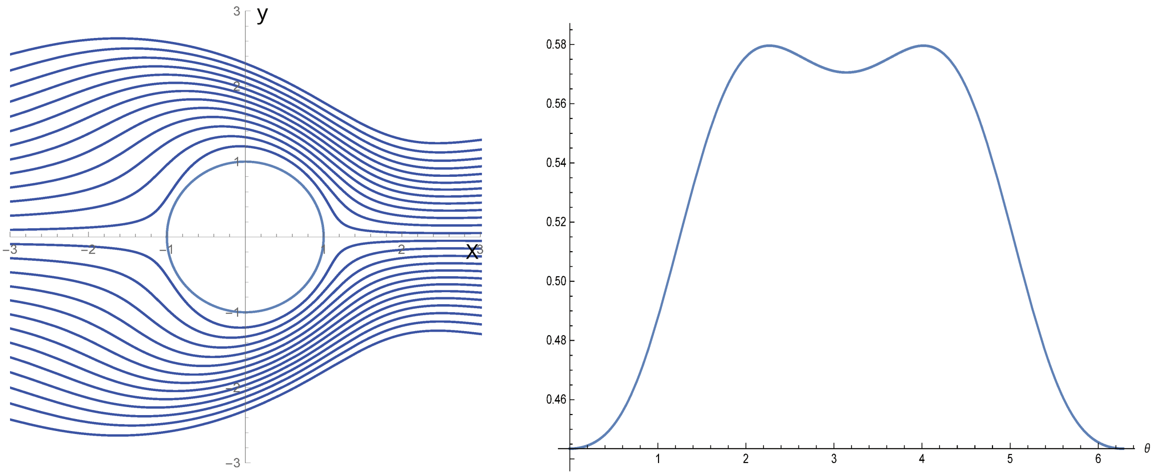

Figura 20 – Curvas Integrais e gráfico da função de espalhamento para a condição de contorno 1

3. Para este terceiro caso, usamos as seguintes constantes: $c_{11} = 1$, $c_{12} = i$ e $c_{22} = 1$. Pela Figura 21, o espalhamento é maior em π. O mais interessante deste caso é observar que o cone funciona como uma parede com as ondas que "encontram" com ele, enquanto que para as outras é, novamente, como uma barreira.

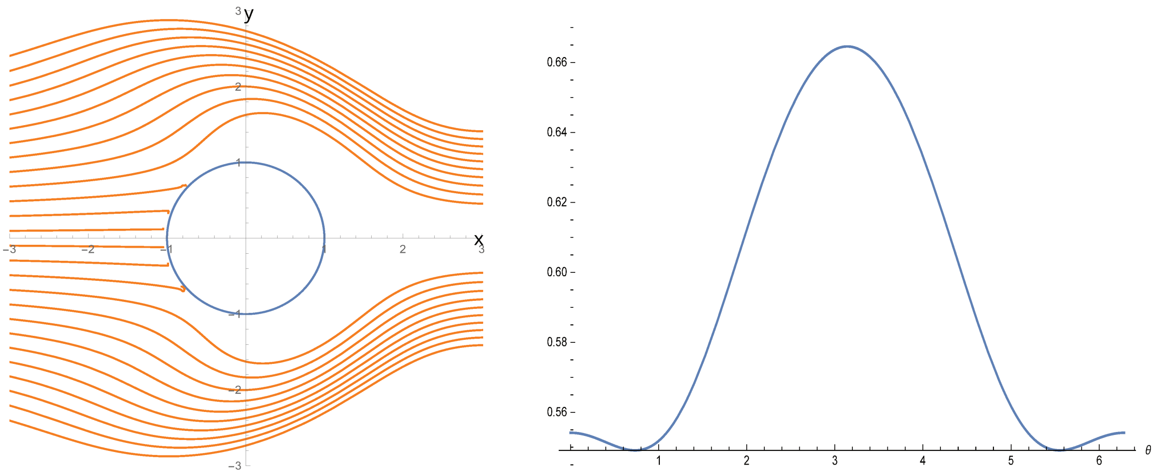

Figura 21 – Curvas Integrais e gráfico da função de espalhamento para a condição de contorno 2

Com estes dois casos, é possível notar que "chutar" uma condição de contorno qualquer nos dá algo aparentemente estranho, basta ver o comportamento das curvas integrais que parecem não interagir com o cone. Assim, fica claro que escolher uma condição de contorno que represente bem um problema não parece ser tão arbitrário.

4. Um outro caminho para comparar os resultados é usar condições de contorno que representam algo mais concreto. Por exemplo, supor que a função solução é de classe C^1, que seria a suposição mais comum. Esse caso especial será explorado aqui. Para tanto, primeiro temos que verificar qual matriz representa esse tipo de condição de contorno, depois verificar se tal condição satisfaz as condições de Sturm-Liouville e, no caso positivo, determinar as curvas integrais. Vamos a isso.

A condição de contorno para que a condição de contorno seja de classe C^1 é a seguinte:

$$\begin{cases} \psi(c_-) = \psi(c_+) \\ \psi'(c_-) = \psi'(c_+) \end{cases} , \tag{6.9}$$

que recai em:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(c_-) \\ \psi'(c_-) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(c_+) \\ \psi'(c_+) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{6.10}$$

Desta maneira as matrizes que devemos analisar são a identidade e a oposto da identidade. É fácil ver que tanto a condição de posto, quanto a condição de auto-adjunticidade são satisfeitas, logo a condição é de Sturm-Liouville. Assim, fazendo o mesmo procedimento, obtemos as curvas da Figura 22. Note que as curvas se comportam, novamente, de um jeito bem estranho, tentando evitar o cone e as que atravessam o cone logo voltam e se encontram com outras.

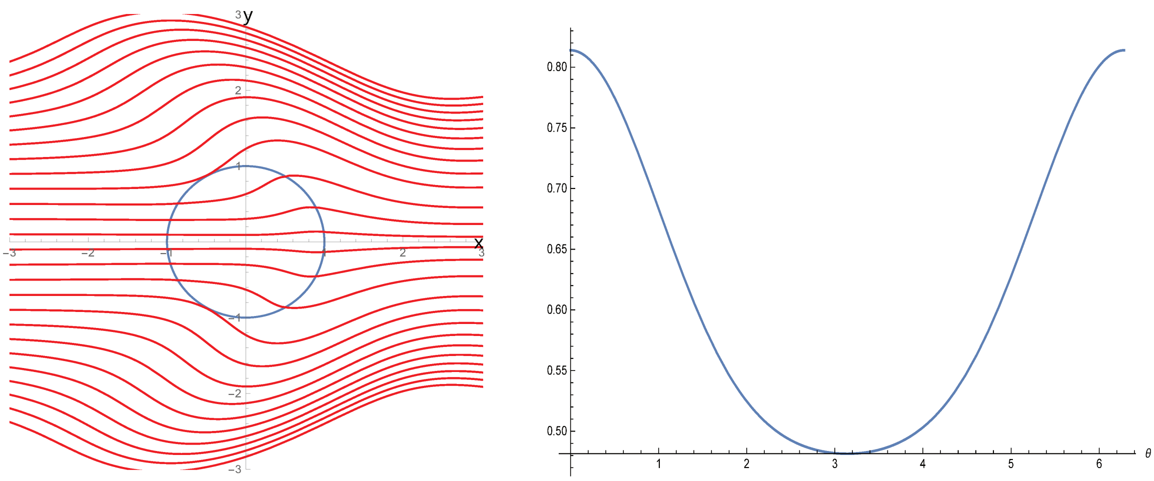

Figura 22 – Curvas integrais e gráfico da função de espalhamento para solução de classe C^1, $c = 1$, $h = 2$ e $k = 1$

Note que este gráfico é muito similar ao da condição de contorno regular. Isso se deve ao fato de que a relação entre as derivadas, na regular, é quase algo como igualar as derivadas laterais. Desta maneira, as curvas integrais são parecidas, mas não iguais como podemos ver no gráfico abaixo que contém um comparativo (veja Figura 23):

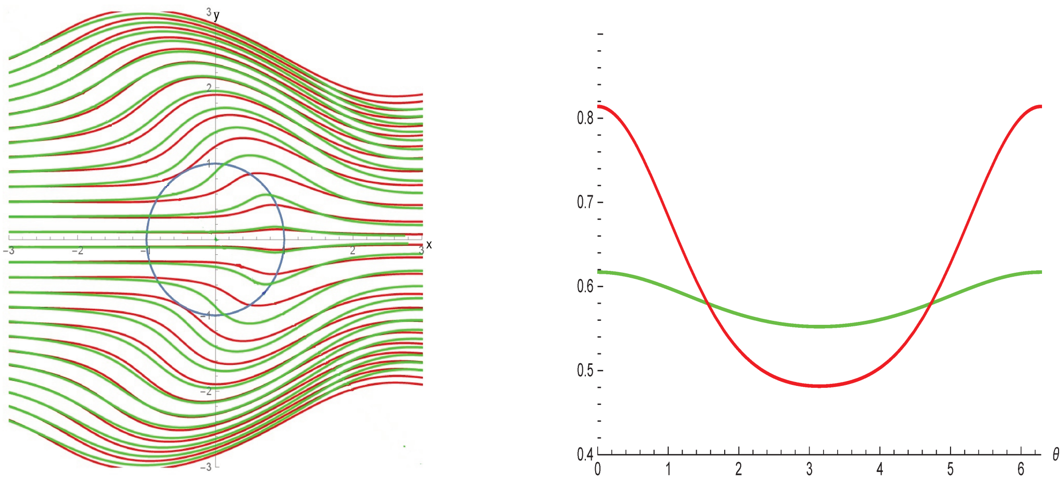

Figura 23 – Comparativo entre as curvas integrais da condição regular com a condição de classe C^1, para $c = 1$, $h = 2$ e $k = 1$.

A justificativa de falarmos que os comportamentos de condições de contorno, que não são a regular ou a de classe C^1, são estranhos é baseado em (MOSNA; BELLER; KAMIEN, 2012). Este trabalho trata do estudo do espalhamento de partículas clássicas no cone e mostra que as partículas satisfazem a Lei de Snell ao se encontrarem com o cone. Nosso caso é um pouco diferente, pois estamos com partículas quânticas com baixa energia (isto é, k é pequeno com relação à c), mas para energia grande, o limite seria um comportamento de partículas clássicas. Das condições mostradas, a única que mais se aproximaria seria a da condição regular.

Com estes resultados, é possível concluir que a escolha de uma condição de contorno para este problema não parece ser arbitrária, e determinar uma condição usando a matriz de Sturm-Liouville, não parece ser uma tarefa fácil. Além disso, em diferentes tipos de condições, obtemos resultados diferentes, o que nos informa que talvez essas condições não tenham muitas relações entre elas. Entretanto, a condição regular e a de classe C^1 apresentam um bom comportamento em seus resultados, mas ainda assim, são diferentes. De forma geral, elas são parecidas devido ao fato da condição de contorno regular, quando b está próximo de c, se assemelhar à uma condição de classe C^1. A diferença é que a condição regular contém os dados do problema (raio e altura do cone), enquanto outras não necessariamente. Assim, se supormos que o cone advém de um cone regularizado, a condição de contorno regular seria a que melhor representa o problema.

7 Considerações Finais

Este trabalho teve como objetivo apresentar uma nova forma de estudar o espalhamento quântico em superfícies não-regulares através da teoria de Sturm-Liouville Multi-Intervalos. O uso de tal teoria, além de garantir a unitariedade do problema, nos dá uma gama de possibilidades de soluções. É importante notar que, na teoria, todas as condições auto-adjuntas tem o mesmo valor, isto é, não existe uma condição preferencial. Para determinar uma que representasse melhor o estudo do espalhamento, foi necessário criar um critério. Neste trabalho, o critério proposto foi supor que o cone advinha de uma regularização, mas sem tais suposições não é possível determinar uma condição preferencial. Mesmo assim, com tal critério, foi possível apresentar testes que confirmam sua eficiência para o estudo espalhamento.

O interessante dessa abordagem é sua generalidade, uma vez que a construção feita para o cone, com algumas modificações, serve para outras superfícies "coladas" no plano (como um cilindro). Entretanto, acreditamos que a condição de contorno que representa bem um problema não possa ser escolhida aleatoriamente, ela deve ter fatores que a relacionam com a superfície em questão (como foi apresentado no capítulo anterior). Ainda, é interessante notar que tal método possui consistência quanto número de intervalos a serem tomados. Como foi visto o cone em três ou dois intervalos nos levaram às mesmas conclusões no estudo do espalhamento.

Sabemos que o estudo apresentado aqui é só o incipiente e que dele podem resultar novos estudos. Por exemplo, ainda não foi possível determinar se a condição de contorno regular é a condição que melhor representa esse problema, uma vez que ao impormos a condição mais regular possível (classe C^1), obtivemos resultados parecidos. Uma maneira de se determinar uma resposta melhor para isso, mas estava fora do objetivo deste trabalho, são experimentos laboratoriais sobre espalhamento para comparar os resultados deste trabalho com os obtidos nos experimentos. Uma outra aplicação para essa metodologia seria usá-la em outras superfícies como um cilindro ou uma esfera "colada" no plano. Acreditamos que com algumas modificações no apresentado até então, seja possível analisar tais problemas.

Por fim, esperamos ter mostrado uma aplicação satisfatória dessa Teoria de Sturm-Liouville Multi-Intervalos, assim como sua importância para alternativas de estudos já conhecidos.

Referências

ADHIKARI, S. K. Quantum scattering in two dimensions. *American Journal of Physiscs*, v. 54, p. 362, 1986. Citado 4 vezes nas páginas 11, 12, 13 e 43.

ADKINS, C. J. *Sturm-Liouville Theory*. Dissertação (Mestrado), 2014. Citado na página 13.

BARROSO, V. S.; PITELLI, J. P. M. Quantum scattering on a cone revisited. *Physics Review D*, v. 96, p. 025006, 2017. Citado na página 12.

BETTEGA, M. H. F. *Introdução à Teoria Quântica do Espalhamento: do Espalhamento por um Potencial ao Problema de Muitos Corpos*. 2012. Disponível em: < *https : //farside.ph.utexas.edu/teaching/qm/lectures/node82.html.* > Acessado em 07 de Agosto de 2018. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 42.

COSTA, R. da. Quantum mechanics of a constrained particle. *Physics Review A*, v. 23, n. 4, p. 1982 – 1987, 1981. Citado 4 vezes nas páginas 11, 13, 14 e 15.

EVERITT, W.; ZETTL, A. Sturm-liouville differential operators in direct sum spaces. *Rocky Mountain J. Matah*, v. 16, p. 497–516, 1986. Citado na página 36.

FITZPATRICK, R. *Scattering Theory*. 2013. Disponível em: < *https : //farside.ph.utexas.edu/teaching/qm/lectures/node82.html* >. Acessado em 07 de Novembro de 2018. Disponível em: <https://farside.ph.utexas.edu/teaching/qm/lectures/node82.html>. Citado na página 60.

GIL, F. L. P. *Elementos de Análise Tensorial*. [S.l.: s.n.], 2008. Citado na página 47.

HöNIG, C. S. *Análise Funcional e Aplicações*. [S.l.: s.n.], 1970. v. 1. Citado 5 vezes nas páginas 13, 20, 21, 24 e 41.

KAY, B. S.; M.STUDER, U. Boundary conditions for quantum mechanics on cones and fields aroundo cosmic strings. *Communications in Mathematical Physics*, v. 139, p. 103–139, 1991. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 46.

LAPIDUS, I. R. Quantum mechanical scattering in two dimensions. *American Journal of Physics*, v. 50, p. 45, 1982. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 13.

MOSNA, R. A.; BELLER, D. A.; KAMIEN, R. D. Breaking the rules for topological defects: Smectic order on conical subtrates. *Phys. Rev. E*, v. 86, 2012. Citado na página 67.

OLIVEIRA, J. V. J. . E. C. de. *Métodos matemáticos*. 1. ed. [S.l.]: Editora Unicamp, 2016. v. 1. 336 p. Citado na página 30.

WU, X. C. Z. W. H. On the boundary conditions in self-adjoint multi-interval sturm-liouville problems. *Linear Algebra and its Aplications*, v. 430, p. 2877 – 2889, 2009. Citado 7 vezes nas páginas 12, 13, 36, 37, 41, 53 e 54.

ZETTL, A. *Sturm-Liouville Theory*. [S.l.: s.n.], 2005. Citado 8 vezes nas páginas 13, 14, 20, 33, 34, 38, 39 e 41.