Universidade Federal de Alagoas

Programa de Pós-Graduação em Matemática

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Uma Introdução aos Operadores de Schrödinger com Ênfase no Caso Unidimensional.

Priscila Santos Ramos

Maceió
Fevereiro de 2009

Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Matemática

Uma Introdução aos Operadores de Schrödinger com Ênfase no Caso Unidimensional

Priscila Santos Ramos

Maceió
2009

Priscila Santos Ramos

Uma Introdução aos Operadores de Schrödinger com Ênfase no Caso Unidimensional

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal de Alagoas como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Matemática.

Orientador: Prof Dr. Ediel Azevedo Guerra.

Maceió
2009

Catalogação na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico
Bibliotecária Responsável: Helena Cristina Pimentel do Vale

R175u Ramos, Priscila Santos.
Uma introdução aos operadores de Schrödinger com ênfase no caso unidimensional / Priscila Santos Ramos. – Maceió, 2009.
63 f..

Orientador: Ediel Azevedo Guerra.
Dissertação (mestrado em Matemática) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Matemática. Maceió, 2009.

Bibliografia: f. 62-63..

1. Operador auto-adjunto. 2. Schrödinger, operadores de. 3. Espectro. I. Título.

CDU: 517.984.4

Uma Introdução aos Operadores de Schrödinger com Ênfase no Caso Unidimensional

Dissertação de Mestrado na área de concentração de Análise submetida em 26 de fevereiro de 2009 à Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal de Alagoas, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de mestre em Matemática.

Banca Examinadora:

Ramón Mendoza

Prof. Dr. Ramón Orestes Mendoza Ahumada (UFPE).

Prof. Dr. Adán José Corcho Fernádez (UFAL).

Prof Dr. Ediel Azevedo Guerra(Orientador).

Aos meus pais e a vovoi (in memoriam)
pelos ensinamentos da vida e pelo amor.

Agradecimentos

- À Deus pela graça de mais uma vitória;
- Ao meu orientador Prof. Ediel pela dedicação, atenção e pela parceria (honrosa) deste trabalho;
- Aos professores Adán e Ramón pelas valiosas sugestões;
- Aos professores da pós-graduação pelos ensinamentos matemáticos;
- Aos meu irmãos Patricia e Robson pelo amor e confiança e as minhas tias Nancy e Rose, a minha prima Têka e a Fernando (meu cunhado) pelo apoio e carinho;
- Ao meu namorado Gleidson pela compreensão, cumplicidade, apoio e amor;
- Aos colegas: Arlyson, André, Marcius, Daniel, Leandro, Leonardo, Carlos Alberto, Borges, Erikson, Fábio, Everson, Darliton pela recepção e por todos os momentos compartilhados. Agradeço com carinho ao meu colega e amigo Alex pela amizade e compreensão;
- Aos amigos André Moura, Arleide, Hea, Raimundo (Red Júnior), Toinho, Loyana e Welton pela torcida e carinho;
- À José Eduardo pelas conversas matemáticas e disponibilidade e também a Michel pelo apoio e amizade;
- Aos funcionários da UFAL. Em particular, à Márcia e Silvinha pela prontidão nos seviços prestados e a D. Maria pelo carinho e pelas conversas;
- À CAPES/FAPEAL pelo apoio financeiro.

Resumo

O objetivo principal desta dissertação é fornecer uma introdução aos operadores de Schrödinger do tipo $H = -\Delta + V$, onde Δ denota o laplaciano do $\mathbb{R}^n$ e V denota o operador de multiplicação pela função V ambos definidos em um subespaço conveniente do $L^2(\mathbb{R}^n)$, no que diz respeito à determinação de sua auto-adjunticidade e do seu espectro.

Palavras-chave: Operador auto-adjunto, Operador de Schrödinger, Espectro.

Abstract

The main objective of this dissertation is to give an introduction to Schrödinger operators of the type $H = -\Delta + V$. In these operators, Δ denotes the Laplacian of $\mathbb{R}^n$ and V denotes the operator of multiplication by a function V, both defined in a suitable subspace of $L^2(\mathbb{R}^n)$ with respect to the determination of its selfadjointess and of its spectrum.

Key words: Selfadjoint operator, Schrödinger operator, spectrum.

Sumário

Introdução

As relações entre a Matemática e a Física, têm emergido fortemente nas últimas décadas, tornando cada vez mais clara a necessidade de um diálogo maior entre esses dois campos de conhecimentos. Uma abordagem que tem se mostrado bastante frutífera em física-matemática é aquela da teoria dos operadores. No estudo de muitos problemas da física-matemática, na perspectiva da teoria dos operadores, são fundamentais as questões da determinação da auto-adjunticidade e do espectro de um operador.

O objetivo principal desta dissertação é fornecer uma introdução aos operadores de Schrödinger do tipo $H = -\Delta + V$, onde Δ denota o laplaciano do $\mathbb{R}^n$ e V denota o operador de multiplicação pela função V ambos definidos em um subespaço conveniente do $L^2(\mathbb{R}^n)$, no que diz respeito à determinação de sua auto-adjunticidade e do seu espectro. Como bem se sabe, esses operadores emergiram da teoria ondulatória da matéria formulada pelo físico austríaco Erwin Schrödinger na terceira década do século XX.

Esta dissertação se justifica pelo menos por três motivos: em primeiro lugar, para o desenvolvimento da compreensão do Teorema Espectral de Operadores auto-adjuntos em espaços de dimensão infinita; em segundo lugar, para um maior entendimento dos aspectos matemáticos da Física Quântica, um conhecimento indispensável para o aprofundamento dos estudos em física-matemática; em terceiro lugar, pela aquisição de conhecimentos necessários para a compreensão das aplicações dos operadores de Schrödinger à mecânica quântica e à Geometria Diferencial Global [4]. Este trabalho dissertativo encontra-se estruturado do seguinte modo. No capítulo 1 encontram-se listados as definições e os resultados básicos acerca dos operadores lineares não-limitados em um espaço de Hilbert que são necessários nos capítulos subseqüentes.

Particularmente, definimos, caracterizamos e interrelacionamos operadores simétricos, auto-adjuntos e essencialmente auto-adjuntos.

No capítulo 2, nos fixamos no problema da determinação do espectro do hamiltoniano livre.

Fazemos isso mostrando inicialmente que o hamiltoniano livre em $L^2(\mathbb{R}^n)$ é unitariamente equivalente a um operador de multiplicação; precisaremos neste ponto de trabalhar com a transformada de Fourier definida em $L^2(\mathbb{R}^n)$. Em seguida, analisamos mais detidamente as propriedades dos operadores de multiplicação, dedicando especial atenção ao seu espectro.

No capítulo 3, demonstramos o Teorema de Kato-Rellich e o aplicamos para estudar a auto-adjunticidade dos operadores de Schrödinger do tipo $H = -\Delta + V$. No capítulo 4, finalizamos o nosso trabalho estudando os operadores de Schrödinger unidimensionais, tratando as questões da determinação de sua auto-adjunticidade e do seu espectro. A consideração desses operadores de Schrödinger em dimensão 1 permite uma abordagem mais simples dessas questões e ilustram algumas das dificuldades que precisam ser enfrentadas para alcançarmos a compreensão desses operadores.

Capítulo 1

Preliminares

Neste capítulo, estamos interessados em algumas definições e resultados básicos da teoria dos operadores não-limitados, necessários para relacionar operadores simétricos, auto-djuntos e essencialmente auto-adjuntos.

1.1 Operadores simétricos, auto-adjuntos e essencialmente auto-adjuntos

Definição 1.1. *Consideremos $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert. Um* ***operador em*** $\mathcal{H}$ *é uma aplicação linear $A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ cujo domínio $\mathcal{D}(A)$ é um subespaço vetorial de $\mathcal{H}$.*

É importante observar que nesta definição não supomos A limitado ou contínuo.

Definição 1.2. *Um operador linear $A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ é dito* ***densamente definido*** *quando $\mathcal{D}(A)$ é um subconjunto denso em $\mathcal{H}$, ou seja, quando o fecho $\overline{\mathcal{D}(A)}$ de $\mathcal{D}(A)$ é igual a $\mathcal{H}$, isto é, $\overline{\mathcal{D}(A)} = \mathcal{H}$.*

Definição 1.3. *Um operador $A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ é* ***simétrico*** *se*

$$\big\langle \varphi, A\psi \big\rangle = \big\langle A\varphi, \psi \big\rangle, \quad \forall\ \psi, \varphi \in \mathcal{D}(A).$$

Definição 1.4. *O* ***operador adjunto*** *A^* de um operador A em $\mathcal{H}$ densamente definido é dado* *por*

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(A^*) &= \left\{\psi \in \mathcal{H} | \exists\ \bar{\psi} \in \mathcal{H} : \langle A\varphi, \psi\rangle = \left\langle \varphi, \bar{\psi}\right\rangle, \forall \varphi \in \mathcal{D}(A)\right\}, \\ A^*\psi &= \bar{\psi}. \end{aligned}$$

Desse modo, vale a igualdade

$$\langle A\varphi, \psi\rangle = \langle \varphi, A^*\psi\rangle\,, \quad \forall\ \varphi \in \mathcal{D}(A),\ \forall\ \psi \in \mathcal{D}(A^*).$$

Como $\mathcal{D}(A)$ é denso em $\mathcal{H}$, então o elemento ψ^* é único e assim A^* está bem definido. Entretanto, $\mathcal{D}(A^*)$ pode não ser denso em geral. De fato, pode conter apenas o vetor nulo.

Exemplo 1.1. *Sejam $\mathcal{H} = L^2([0,1])$ e $\varphi \in \mathcal{H}\backslash\{0\}$ fixa. Considere A o operador definido por*

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(A) &= C([0,1]) \subset \mathcal{H}, \\ Af &= f(1)\varphi. \end{aligned}$$

Então, $\mathcal{D}(A^*) = \varphi$ e $A^*f = 0, \quad f \in \mathcal{D}(A^*)$.

Agora consideremos os operadores A e B, ambos em $\mathcal{H}$. A soma deles é o operador $A+B$ dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(A+B) &= \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B) \\ (A+B)\varphi &= A\varphi + B\varphi,\ \forall\ \varphi \in \mathcal{D}(A+B). \end{aligned}$$

O operador composto de A e B é o operador AB dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(AB) &= \{\varphi \in \mathcal{D}(B) | B\varphi \in \mathcal{D}(A)\} \\ (AB)\varphi &= A(B\varphi),\ \forall\ \varphi \in \mathcal{D}(AB). \end{aligned}$$

A proposição seguinte lista algumas propriedades do operador adjunto.

Proposição 1.1.

(*a*) $(\alpha A)^* = \bar{\alpha}A^*, \quad \forall\ \alpha \in \mathbb{C}$

(*b*) *Se $A \subset B$, então $B^* \subset A^*$;*

(*c*) $A^* + B^* \subseteq (A+B)^*$. *A igualdade ocorre apenas quando* $\mathcal{D}(A+B)$ *é denso em* $\mathcal{H}$.

(*d*) $\mathcal{N}(A^*) = Im(A)^{\perp}$

(*e*) $B^*A^* \subset (AB)^*$. *Se* $B : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ *é limitado, então vale a igualdade.*

(*f*) $(A+\alpha)^* = A^* + \bar{\alpha}$.

Demonstração. Ver [11] e [5].

$\square$

Vale notar que para operadores simétricos densamente definidos sempre temos a inclusão $A \subseteq A^*$ (ver [14]). E se além disso tivermos $A = A^*$ então A será chamado **auto-adjunto**.

De acordo com as definições que já foram apresentadas notamos que operadores auto-adjuntos são operadores simétricos, entretanto a recíproca não é verdadeira em geral, como será visto no exemplo a seguir.

Exemplo 1.2. *Seja* $\mathcal{H} = L^2([0,1])$ *relativo a medida de Lebesgue* λ, *com produto interno definido por*

$$\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} f\bar{g}\; d\lambda.$$

Considere os operadores T_1, T_2, T_3 *definidos em* $L^2([0,1])$, *cujos domínios são:*

- $D(T_1) = \{f \in AC[0,1] | f' \in L^2[0,1]\}$;
- $D(T_2) = D(T_1) \cap \{f | f(0) = f(1)\}$;
- $D(T_3) = D(T_1) \cap \{f | f(0) = f(1) = 0\}$.

Note que estes domínios são densos em $L^2([0,1])$. *Defina*

$$T_n f = i f'; \quad f \in D(T_n), \quad n = 1, 2, 3.$$

Queremos mostrar que

$$T_1^* = T_3, \quad T_2^* = T_2, \quad T_3^* = T_1. \tag{1.1}$$

Sendo $T_3 \subset T_2 \subset T_1$, segue que T_2 é uma extensão auto-adjunta do operador simétrico T_3 e que a extensão T_1 de T_2 não é simétrico.

De fato T_3 é simétrico, pois dadas $f, g \in D(T_3)$ temos

$$\langle T_3 f, g \rangle = \int_0^1 i f' \bar{g},$$

donde integrando por partes, obtemos

$$i f \bar{g}\big|_0^1 - \int_0^1 i f (\bar{g'}) = \int_0^1 f(\bar{ig'}) = \langle f, T_3 g \rangle .$$

desde que $f(1)\bar{g}(1) = f(0)\bar{g}(0) = 0$ e $\overline{ig'} = -i\bar{g'}$.

Mas, o operador T_3 não é auto-adjunto como será visto no decorrer do exemplo.

Para demonstrar (1.1) *observe que*

$$\langle T_n f, g \rangle = \int_0^1 i f' \bar{g} = i f \bar{g}\big|_0^1 - \int_0^1 f(i\bar{g'}) = \int_0^1 f(\overline{ig'}) = \langle f, T_m g \rangle$$

onde $f \in D(T_n), g \in D(T_m)$ e $m + k = 4$, desde que $f(1)\bar{g}(1) = f(0)\bar{g}(0) = 0$. Assim, $T_m \subset T_n^*$. Ou seja,

$$T_1 \subset T_3^*, \qquad T_2 \subset T_2^*, \qquad T_3 \subset T_1^*.$$

Agora basta mostrarmos as outras inclusões. Para isto, suponhamos $g \in D(T_n^*)$, $\phi = T_n^*\ g$ e façamos $\Phi(x) = \displaystyle\int_0^x \phi$.

Portanto, para $f \in D(T_n)$

$$\int_0^1 i f' \bar{g} = \langle T_n f, g \rangle = \langle f, T_n^* g \rangle = \langle f, \phi \rangle = f\bar{\Phi}\big|_0^1 - \int_0^1 \Phi f' = f(1)\Phi(1) - \int_0^1 \Phi f'. \tag{1.2}$$

Note que quando $n = 1$ ou $n = 2$, o domínio $D(T_n)$ contém constantes não nulas e por (1.2) *temos $\Phi(1) = 0$. Quando $n = 3$, temos $f(1) = 0$.*

Daí, para todos os casos, temos que

$$ig - \Phi \in Im(T_n)^{\perp}. \tag{1.3}$$

Se $n = 1$, então $Im(T_1) = L^2([0,1]), ig = \Phi$. Uma vez que $\Phi(1) = 0$, então $g \in D(T_3)$.

Portanto, $T_1^* \subset T_3$.

Se $n = 2$ *ou* $n = 3$, *temos que* $Im(T_n)$ *consiste de todas as funções* $u \in L^2([0,1])$ *tais que*

$$\int_0^1 u = 0.$$

Assim,

$$Im(T_2) = Im(T_3) = B^\perp,$$

onde B *é o subespaço unidimensional de* $L^2([0,1])$ *que contém as constantes. Desse modo,* $ig - \Phi$ *é constante, por* (1.3). *Portanto,* g *é absolutamente contínua e* $g' \in L^2([0,1])$, *isto é,* $g \in D(T_1)$. *Logo,* $T_3^* \subset T_1$.

Se $n = 2$, *então* $\Phi(1) = 0$, *assim* $g(0) = g(1)$ *e* $g \in D(T_2)$.
Portanto, $T_2^* \subset T_2$.

O lema seguinte estabelece um importante critério para que operadores simétricos sejam auto-adjuntos.

Lema 1.1. *Seja* A *simétrico tal que* $Im(A+z) = Im(A+z^*) = \mathcal{H}$ *para um* $z \in \mathbb{C}$. *Então* A *é auto-adjunto.*

Demonstração. *Como* A *é simétrico temos que* $A \subseteq A^*$, *então basta mostrar que* $A^* \subseteq A$. *Seja* $\psi \in \mathcal{D}(A^*)$ *e* $A^*\psi = \tilde{\psi}$. *Uma vez que* $Im(A+\bar{z}) = \mathcal{H}$, *então existe* $\vartheta \in \mathcal{D}(A)$ *tal que* $(A+\bar{z})\vartheta = \tilde{\psi} + \bar{z}\psi$.
Assim, $\forall \varphi \in \mathcal{D}(A)$ *temos*

$$\begin{aligned}
\big\langle \psi, (A+z)\varphi \big\rangle &= \big\langle (A+z)^*\psi, \varphi \big\rangle \\
&= \big\langle (A^*+\bar{z})\psi, \varphi \big\rangle \\
&= \big\langle A^*\psi + \bar{z}\psi, \varphi \big\rangle \\
&= \big\langle \tilde{\psi} + \bar{z}\psi, \varphi \big\rangle \\
&= \big\langle (A+\bar{z})\vartheta, \varphi \big\rangle \\
&= \big\langle A\vartheta + \bar{z}\vartheta, \varphi \big\rangle \\
&= \big\langle A\vartheta, \varphi \big\rangle + \big\langle \bar{z}\vartheta, \varphi \big\rangle \\
&= \big\langle \vartheta, A\varphi \big\rangle + \big\langle \vartheta, z\varphi \big\rangle \\
&= \big\langle \vartheta, (A+z)\varphi \big\rangle.
\end{aligned}$$

Portanto, $\psi = \vartheta \in \mathcal{D}(A)$ já que $Im(A + z) = \mathcal{H}$.

□

Definição 1.5. *O produto interno $\langle \psi, A\psi \rangle$ é chamado a **forma quadrática** associada ao operador A e denotamos por*

$$q_A(\psi) = \langle \psi, A\psi \rangle, \quad \forall\ \psi \in \mathcal{D}(A).$$

Assim, dizemos que um operador é **não negativo** se

$$q_A(\psi) = \langle \psi, A\psi \rangle \geq 0, \quad \forall\ \psi \in \mathcal{D}(A).$$

Definição 1.6. *Uma **extensão de um operador** $A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ é um operador $S : D(S) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ tal que $\mathcal{D}(A) \subseteq D(S)$ e $S|_{\mathcal{D}(A)} = A$.*

Notação: $A \subseteq S$.

Definição 1.7. *Um operador $A : \mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ é **essencialmente auto-adjunto** quando possui uma única extensão auto-adjunta. Seja $A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ um operador auto-adjunto. Um **core** (ou **cerne**) de A é um subespaço vetorial $W \subseteq \mathcal{D}(A)$ tal que $A|_W$ é essencialmente auto-adjunto.*

Uma generalização do lema anterior é o seguinte

Lema 1.2. *Um operador simétrico A é essencialmente auto-adjunto se e somente se para um $z \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$ vale uma das seguintes condições:*

- $\overline{Im(A + z)} = \overline{Im(A + z^*)} = \mathcal{H}$;
- $\mathcal{N}(A^* + z) = \mathcal{N}(A^* + z^*) = \{0\}$.

Se A é não negativo, podemos assumir $z \in (-\infty, 0)$.

Demonstração. Observe que as duas condições são equivalentes, pois $\mathcal{N}(A^*) = Im(A)^\perp$.
($\Rightarrow$) Agora suponhamos A fechado e $z = x + iy$. Então,
$\|(A - z)\psi\|^2 = \|(A - x)\psi - iy\psi\|^2 = \|(A - x)\psi\|^2 + \|iy\psi\|^2 + i\langle (A - z)\psi, y\psi\rangle - i\langle y\psi, (A - z)\psi\rangle$.

Como A é simétrico, temos

$$\|(A-z)\psi\|^2 = \|(A-x)\psi - iy\psi\|^2 = \|(A-x)\psi\|^2 + \|iy\psi\|^2 \geq y^2 \|\psi\|^2$$

e inferimos que $\mathcal{N}(A-z) = \{0\}$. De fato,

$$v \in Ker(A-z) \Rightarrow (A-z)v = 0 \Rightarrow \|(A-z)v\| = 0$$

e por outro lado,

$$0 = \|(A-z)v\| \geq \lambda \|v\| \Rightarrow \lambda \|v\| = 0 \Rightarrow v = 0.$$

Além disso, fazendo $\psi = (A-z)^{-1}\varphi$ obtemos

$$y^2 \left\|(A-z)^{-1}\varphi\right\|^2 \leq \|\varphi\|^2 \tag{1.4}$$

$$\Rightarrow \left\|(A-z)^{-1}\varphi\right\|^2 \leq \frac{1}{y^2} \|\varphi\|^2 \tag{1.5}$$

$$\Rightarrow \left\|(A-z)^{-1}\varphi\right\| \leq \frac{1}{y} \|\varphi\| \tag{1.6}$$

ou seja, $\|(A-z)^{-1}\| \leq |y|^{-1}$ o que mostra que $(A-z)^{-1}$ é limitado e fechado. Uma vez que $(A+z)$ é um operador definido densamente podemos supor $Im(A+z) = \mathcal{H}$. Trocando z por $\bar{z}$ temos $Im(A+\bar{z}) = \mathcal{H}$ e assim pelo lema 1.1 A é auto-adjunto.

($\Leftarrow$) Por hipótese $A = A^*$ e portanto, pelo cálculo feito anteriormente, temos $\mathcal{N}(A^*+z) = \{0\}\,, \quad z \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$.

Usa-se um argumento análogo para o caso não negativo com $z < 0$ (ver [14]).

□

Definição 1.8. *Uma bijeção $U : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ é dita **unitária** se*

$$\langle U\psi, U\psi\rangle = \langle \psi, U^*U\psi\rangle = \langle \psi, \psi\rangle\,.$$

Portanto, U é unitário se, e só se,

$$U^* = U^{-1}.$$

Definição 1.9. *Dois operadores lineares $A : \mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ e $A_1 : \mathcal{D}(A_1) \subseteq \mathcal{H}_1 \longrightarrow \mathcal{H}_1$ definidos em espaços de Hilbert $\mathcal{H}$ e $\mathcal{H}_1$, respectivamente, são **unitariamente equivalentes***

*quando existe um operador unitário $U : \mathcal{D}(A) \longrightarrow \mathcal{D}(A_1)$ chamado **operador entrelaçante**, tal que*

$$(A_1 U)\psi = (UA)\psi, \;\; \psi \in \mathcal{D}(A).$$

Definição 1.10. *Um operador simétrico A é dito ser **maximalmente simétrico** quando A não tem extensão simétrica própria, isto é, quando $A \subseteq S$, S simétrico implica $S = A$.*

Proposição 1.2. *Operadores auto-adjuntos são maximalmente simétricos.*

Demonstração. Suponhamos A um operador auto-adjunto em $\mathcal{H}$ e S um operador simétrico em $\mathcal{H}$ tal que $A \subseteq S$. Como S é simétrico, temos $S \subseteq S^*$ e como $A \subseteq S$, então $S^* \subseteq A^*$, pela proposição 1.1, letra (b).

Logo, como $A^* = A$, segue-se que $S = A$.

□

1.2 Operadores fechados

Definição 1.11. *O **gráfico** de um operador A em $\mathcal{H}$ é o subespaço vetorial $\tau(A)$ de $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ dado por*

$$\tau(A) = \{(\psi, A\psi) | \psi \in D(A)\}.$$

Definição 1.12. *Um **operador fechado** em $\mathcal{H}$ é um operador $A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ cujo gráfico é um subespaço fechado de $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$, ou seja, quando dada uma seqüência $\{f_n\} \subset \mathcal{D}(A)$, com $f_n \longrightarrow f$ em $\mathcal{H}$ e $Af_n \longrightarrow g$ em $\mathcal{H}$ tem-se $f \in \mathcal{D}(A)$ e $g = Af$.*

Teorema 1.1. *Se A é um operador densamente definido em $\mathcal{H}$, então*

$$\tau(A^*) = [U\tau(A)]^{\perp},$$

o complemento ortogonal de $U\tau(A)$ está em $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$. Onde U é um operador unitário que satisfaz $U^2 = -I$.

Demonstração. Ver [11].

□

Teorema 1.2. *Se A é um operador densamente definido em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, então A^* é um operador fechado. Em particular, operadores auto-adjuntos são fechados.*

Demonstração. Seja o subconjunto $M \subset \mathcal{H} \times \mathcal{H}$. Temos que,

$$M^{\perp} = \{g \in \mathcal{H} |\, \langle f, g \rangle = 0,\ \forall f \in M\}$$

é um espaço vetorial fechado, pois $M^{\perp} = \bigcap_{g \in M} \mathcal{N}\varphi_g$, onde φ_g é o funcional linear contínuo $\varphi_g(.) = \langle .\ , g \rangle$ definido em $\mathcal{H}$.

Logo, $\tau(A^*)$ é fechado em $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$, pelo teorema 1.1.

$\square$

Teorema 1.3. *Se A é um operador simétrico em $\mathcal{H}$ (não necessariamente densamente definido) as seguintes afirmações são verdadeiras:*

(a) $\|(A + iI)f\|^2 = \|f\|^2 + \|Af\|^2, \forall f \in \mathcal{D}(A)$;

(b) *A é um operador fechado se, e somente se, $Im(A + iI)$ é fechado;*

(c) *$(A + iI)$ é injetiva;*

(d) *Se $Im(A + iI) = \mathcal{H}$, então A é maximalmente simétrico;*

(e) *as afirmações precedentes são também verdadeiras quando i é trocado por $-i$.*

Demonstração. (a) Basta observar que

$$\begin{aligned} \|(A + iI)f\|^2 = \langle Af + if, Af + if \rangle &= \langle Af, Af \rangle + \langle Af, if \rangle + \langle if, Af \rangle + \langle if, if \rangle \\ &= \|Af\|^2 - i \langle Af, f \rangle + i \langle f, Af \rangle + \|f\|^2 \\ &= \|Af\|^2 + \|f\|^2, \end{aligned}$$

uma vez que A é simétrico.

(b) Se A é fechado, então $(A + iI)$ também é fechado. Pela letra (a), temos

$$(A + iI)f \leftrightarrow \{f, Af\}$$

é uma isometria injetiva correspondente entre a $Im(A+iI)$ e o $\tau(A)$. Assim, pela definição 1.12, concluímos nossa prova.

(c) Da letra (a) temos que $\|(A+iI)f\| \geq \|f\|$. Se $f \in Ker(A+iI) \Rightarrow (A+iI)f = 0 \Rightarrow \|(A+iI)f\| = 0$. Mas,

$$0 = \|(A+iI)f\| \geq \|f\| \Rightarrow \|f\| = 0 \Rightarrow f = 0.$$

Portanto, A é injetiva.

(d) Sendo $Im(A+iI) = \mathcal{H}$ e A_1 uma extensão própria de A, temos que (A_1+iI) é uma extensão própria de $(A+iI)$ que não pode ser injetiva. Portanto, pela letra (c), A_1 não é simétrico.

Se trocarmos i por $-i$ a demonstração é igualmente válida.

$\square$

Capítulo 2

Espectro do Hamiltoniano livre

Nosso objetivo neste capítulo é determinar o espectro do hamiltoniano livre (ou operador de Schrödinger livre), dado por $H_0 = -\Delta$. Para tanto estudaremos o operador de multiplicação e a transformada de Fourier, e a partir daí mostraremos que o laplaciano é unitariamente equivalente ao operador de multiplicação.

2.1 Algumas propriedades do operador de multiplicação

Sejam $(X, \mathcal{A}, \mu)$ um espaço de medida e $g : X \longrightarrow \mathbb{C}$ uma função mensurável.

Definição 2.1. *O operador M_g (operador de multiplicação por g) é dado por*

$$M_g : D(M_g) \subset L^2(X,\mu) \longrightarrow L^2(X,\mu), \ \textit{onde } D(M_g) = \left\{ f \in L^2(X,\mu) | gf \in L^2(X,\mu) \right\} \ \textit{e}$$

$$M_g f = gf, \quad \forall f \in D(M_g).$$

Antes de mais nada definimos a norma do espaço $L^2(X,\mu)$ por:

$$\|f\|_2 = \left(\int_X |f|^2 \, d\mu \right)^{\frac{1}{2}}.$$

E além disso, seja $f : (X, \mathcal{A}, \mu) \longrightarrow \mathbb{C}$ uma função mensurável. Existe uma coleção enumerável
$B_i = B(\lambda_i, \epsilon_i)$ de discos abertos que formam uma base da topologia usual de $\mathbb{C}$. Seja V a união

destes discos B_i para os quais $\mu(f^{-1}B_i) = 0$. Então, $\mu(V) = 0$ e V é o maior subconjunto aberto de $\mathbb{C}$ com essa propriedade.

Definição 2.2. *A* ***imagem essencial*** *de f é, por definição, o complemento de V em $\mathbb{C}$, ou seja, o conjunto*

$$Im\ ess(f) = \left\{\lambda \in \mathbb{C} | \mu(f^{-1}B(\lambda, \epsilon)) > 0, \quad \forall \epsilon > 0\right\},$$

onde

$$f^{-1}B(\lambda, \epsilon) = \{x \in X; |f(x) - \lambda| < \epsilon\}.$$

Dessa maneira, a imagem essencial de f é o menor subconjunto fechado de $\mathbb{C}$ que contém $f(x)$ para quase todo $x \in X$, isto é, $\forall\ x \in X$ exceto aqueles que estão em algum conjunto $\Omega \in \mathcal{A}$ para o qual $\mu(\Omega) = 0$.

(Neste caso, define-se $\|f\|_\infty$, o **supremo essencial de f** como sendo $sup\{|\lambda|\,; \lambda \in Im\ ess(f)\}$.)

Observação: Se f for uma função contínua, então $Im\ ess(f) = Im(f)$.

Exemplo 2.1. *Seja $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ tal que $f(x) = x^2$. Então a $Im\ ess(f) = [0, \infty)$.*

Proposição 2.1. *Sejam $g, h \in L^\infty(X, \mu)$. Então $M_g : L^2(X, \mu) \longrightarrow L^2(X, \mu)$ satisfaz:*

(a) $M_{\lambda g + \mu h} = \lambda M_g + \mu M_h$, *para* $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$;

(b) $M_{gh} = M_g \circ M_h$;

(c) $M_g^* = M_{\bar{g}}$;

(d) $\|M_g\| = \|g\|_\infty$, *onde* $\|g\|_\infty$ *é o supremo essencial de* g.

Demonstração. Sejam $\psi \in L^2(X, \mu)$ e $\omega \in X$.

Na prova do ítem (a) temos

$$\begin{aligned}
\left[M_{\lambda g + \mu h}\psi\right](\omega) &= (\lambda g + \mu h)(\omega)\psi(\omega) \\
&= [\lambda g(\omega) + \mu h(\omega)]\psi(\omega) \\
&= \lambda g(\omega)\psi(\omega) + \mu h(\omega)\psi(\omega) \\
&= \left[\lambda M_g\psi + \mu M_h\psi\right](\omega)
\end{aligned}$$

(b)

$$
\begin{aligned}
[M_{gh}\psi](\omega) &= (gh)(\omega)\psi(\omega) \\
&= g(\omega)h(\omega)\psi(\omega) \\
&= g(\omega)t(\omega), \quad onde \quad t(\omega) = h(\omega)\psi(\omega) \\
&= [M_g t](\omega) \\
&= [M_g \circ M_h](\psi)(\omega)
\end{aligned}
$$

(c)

$$
\begin{aligned}
\left\langle \phi, M_g^* \psi \right\rangle &= \langle M_g \phi, \psi \rangle \\
&= \int_X g(\omega)\phi(\omega)\bar{\psi}(\omega) d\mu(\omega) \\
&= \int_X \phi(\omega)[\overline{\bar{g}(\omega)\psi(\omega)}] d\mu(\omega) \\
&= \langle \phi, M_{\bar{g}} \psi \rangle
\end{aligned}
$$

Portanto, $M_g^* = M_{\bar{g}}$.

(d) Como $\psi \in L^2(X, \mu)$, então $\omega \mapsto g(\omega)\psi(\omega)$ é mensurável e assim

$$
\begin{aligned}
\|M_g \psi\|^2 = \int_X |g(\omega)\psi(\omega)|^2 d\mu &= \int_X |g(\omega)|^2 |\psi(\omega)|^2 d\mu \\
&\leq \int_X \sup ess\, |g|^2 |\psi(\omega)|^2 d\mu \\
&= \sup ess\, |g|^2 \int_X |\psi(\omega)|^2 d\mu < \infty \\
&= \sup ess\, |g|^2 \|\psi\|^2
\end{aligned}
$$

Logo, $\|M_g \psi\| \leq \sup ess\, |g| \, \|\psi\|$.

Para provarmos a outra desigualdade suponhamos $\alpha < \sup ess\, |g|$.
Sendo μ σ-finita e pela definição de $\sup ess$, existe $E \subseteq X$ de medida finita não nula tal que

$|g(\omega)| > \alpha, \quad \omega \in E$. Portanto,

$$\begin{aligned}
\|M_g\mathcal{X}_E\|^2 = \int_X |g\mathcal{X}_E|^2\, d\mu = \int_E |g\mathcal{X}_E|^2\, d\mu = \int_E |g|^2\, d\mu &\geq \int_E \alpha^2 d\mu \\
&= \alpha^2 \int_E d\mu \\
&= \alpha^2 \mu(E) \\
&= \alpha^2 \|\mathcal{X}_E\|^2,
\end{aligned}$$

pois $\|\mathcal{X}_E\|^2 = \int_E |\mathcal{X}_E|^2\, d\mu = \int_E d\mu = \mu(E)$.

Isso implica que

$$\frac{\|M_g\mathcal{X}_E\|^2}{\|\mathcal{X}_E\|^2} \geq \alpha^2.$$

Como $\|M_g\|^2 = \sup \frac{\|M_g\psi\|^2}{\|\psi\|^2} \geq \frac{\|M_g\mathcal{X}_E\|^2}{\|\mathcal{X}_E\|^2} \geq \alpha$, então

$$\|M_g\| \geq \sup ess\, |g|\, .$$

□

A seguir provaremos algumas proposições que caracterizam o operador de multiplicação.

Proposição 2.2. *M_g é um operador linear densamente definido e fechado.*

Demonstração. Não é difícil verificar que $D(M_g)$ é um espaço vetorial e que além disso é linear neste domínio. Então, primeiro povaremos que M_g é um operador linear densamente definido.

Seja $\psi \in L^2(X, \mu)$ e para cada $n \in \mathbb{N}$ definamos a função ψ_n tal que

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \psi(x), & \text{se} \quad |g(x)| \leq n \\ 0, & \text{se} \quad |g(x)| > n \end{cases}$$

Assim, para cada $n \in \mathbb{N}$, $\psi_n \in D(M_g)$. Além disto $\psi_n \to \psi$ na norma $L^2(X, \mu)$.

De fato, $|\psi_n| \leq |\psi|$ q.t.p. e daí temos $|g\psi_n| = |g|\, |\psi_n| \leq n\, |\psi|$. Desse modo,

$$\psi_n \in L^2(X, \mu) \text{ e } g\psi_n \in L^2(X, \mu).$$

Note que $\psi_n \to \psi$ q.t.p, pelo teorema da convergência dominada, logo

$$\psi_n \to \psi \text{ em } L^2(X, \mu).$$

Agora para mostrar que M_g é fechado, suponhamos

$$\psi_n \subset L^2(X, \mu) \text{ tal que } \psi_n \to \psi \text{ e } M_g\psi_n \to \phi \text{ ambas em } L^2(X, \mu).$$

Extraindo subsequências se necessário, podemos supor $\psi_n \to \psi$ q.t.p. e $g\psi_n \to \phi$ q.t.p.. Portanto, $g\psi_n \to g\psi$ q.t.p. e assim $g\psi = \phi$ q.t.p..

Logo, $\psi \in D(M_g)$ e $M_g\psi = \phi$.

□

Definição 2.3. *Seja $A : \mathcal{D}(A) \longrightarrow \mathcal{H}$ em um espaço de Hilbert complexo, onde $\mathcal{D}(A)$ é denso em H e A pode ser não limitado. O operador $\mathcal{C}(A)$ dado por*

$$\mathcal{C}(A) = (A - iI)(A + iT)^{-1}$$

*é a **transformada de Cayley de** A.*

Teorema 2.1. *A é auto-adjunto se, só se, $\mathcal{C}(A)$ é unitário.*

Demonstração. Ver [15].

□

Proposição 2.3. *M_g é um operador auto-adjunto.*

Demonstração. A transformada de Cayley de M_g é o operador M_z, onde $z : X \longrightarrow S^1$ é a função
$z(\omega) = [g(\omega) - i][g(\omega) + i]^{-1}$.

Sendo z uma função com valores em S^1, então M_g é unitário e portanto, pelo teorema 2.1 M_g é auto-adjunto.

□

Definição 2.4. *O **conjunto resolvente**, denotado por $\rho(A)$, de um operador linear $A : D(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ é o conjunto de todos os $\lambda \in \mathbb{C}$ para os quais $A - \lambda I$ é injetiva e existe um operador linear limitado*

$$S : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H} \ \ \textit{tal que a} \ \ Im(S) \subseteq D(A),$$

$$(A - \lambda I)Sg = g, \ \forall \ g \in \mathcal{H} \ \ \textit{e} \ \ S(A - \lambda I)f = f, \ \forall f \in D(A).$$

Definição 2.5. *Então dizemos que o **espectro** de A, denotado por $\sigma(A)$, é o complemento do conjunto resolvente em $\mathbb{C}$, isto é, $\sigma(A) = \mathbb{C} \backslash \rho(A)$.*

Proposição 2.4. *O espectro de M_g é a imagem essencial de g.*

Demonstração. Basta provarmos que o resolvente de M_g está contido no complementar da $Im\ ess(g)$.
Sabemos que o operador M_g é invertível, então

$$\begin{gathered}\lambda \in \rho(M_g) \Longleftrightarrow 0 \in \rho(M_g - \lambda I) = \rho(M_{g-\lambda}) \Longleftrightarrow \exists \ \delta > 0; |g(\omega) - \lambda| \geq \delta \text{ q.t.p.} \\ (\text{uma vez que } M^{-1}_{(g-\lambda)} = M_{(g-\lambda)^{-1}}, \ (g - \lambda) \neq 0) \Longleftrightarrow \exists \ \delta > 0 \text{ tal que} \\ \mu\{\omega : |g(\omega) - \lambda| < \delta\} = \mu[g^{-1}B(\lambda, \delta)] = 0 \Longleftrightarrow \lambda \notin Im\ ess(g).\end{gathered}$$

□

Proposição 2.5. *Sejam (X, μ) um espaço com medida e $g : X \longrightarrow \mathbb{R}$ uma função mensurável. Então,*

$$M_g \geq 0 \Longleftrightarrow g \geq 0 \ \ \textit{q.t.p.}.$$

Demonstração. $(\Leftarrow)$ Observe que

$$\langle M_g \psi_n, \psi_n \rangle = \int_X g(\omega) \ \psi_n(\omega) \ \bar{\psi}_n(\omega) \ d\mu(\omega) = \int_X g(\omega) \, |\psi_n(\omega)|^2 \, d\mu(\omega) \geq 0,$$

pois $g \geq 0$, por hipótese.

$(\Rightarrow)$Seja $E \subseteq X$ um conjunto mensurável de medida finita. Temos que

$$\psi_n = \mathcal{X}_{E \ \cap \ \{\omega : |g(x)| \leq n\}} \in D(M_g), \ \forall \ n > 0$$

e daí

$$0 \leq \langle M_g \psi_n, \psi_n \rangle = \int_X g(\omega) \, |\psi_n(\omega)|^2 \, d\mu(\omega) = \int_{E \ \cap \ \{\omega : |g(x)| \leq n\}} g(\omega) d\mu(\omega).$$

Como $E \subseteq X$ é mensurável de medida finita, então $E = \bigcup_{n=1}^{\infty} E_n$ desde que $E_n = E \cap \{\omega : |g(x)| \leq n\}$. Desse modo, para todo mensurável $E \subseteq X$ de medida finita,

$$\int_E g(\omega) d\mu(\omega) \geq 0.$$

$\square$

Corolário 2.1. *Seja $T : D(T) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ um operador linear unitariamente equivalente a um operador multiplicação M_g. Então, $\sigma(T) = \sigma(M_g) = Im\ ess(g)$.*

Demonstração. Sejam $U : D(U) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ unitário e $T = U^{-1} \circ M_g \circ U$. Agora basta notar que,

$$T - \lambda I = U^{-1} \circ M_g \circ U - \lambda I = U^{-1} \circ (M_g - \lambda I) \circ U.$$

$\square$

2.2 A transformada de Fourier no espaço de Schwartz

Definição 2.6. *Seja $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, ...\}$ o conjunto dos números naturais e $\mathbb{N}^n = \underbrace{\mathbb{N} \times \mathbb{N} \times ... \times \mathbb{N}}_{n}$. Se $\alpha \in \mathbb{N}^n$, logo $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n)$ e é chamado de* ***multi-índices****.*

Além disso, sejam $x \in \mathbb{R}^n$ e α multi-índices, segue que

$$\begin{aligned} |\alpha| &= \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \quad ; \qquad x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdot x_2^{\alpha_2} \cdot .... \cdot x_n^{\alpha_n} \\ \partial^\alpha &= \left(\frac{\partial}{\partial x_1}\right)^{\alpha_1} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x_2}\right)^{\alpha_2} \cdot ... \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x_n}\right)^{\alpha_n} \end{aligned}$$

Definição 2.7 (Espaço de Schwartz)**.** *Denotamos por $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, a coleção das aplicações $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{C}$ tais que $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ e*

$$\|f\|_{\alpha,\beta} = \sup_{x \in \mathbb{R}^n} \left| x^\alpha \partial^\beta f(x) \right| < \infty.$$

Teorema 2.2. *Seja $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$. Então, $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ se, e somente se,*

$$\lim_{|x|\to\infty} x^\alpha \partial^\beta f(x) = 0, \qquad \forall\ \alpha, \beta\ \in N^n$$

Demonstração. Ver [3].

□

Definição 2.8. *Dizemos que uma seqüência $\{f_k\}$ em $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ converge para $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, quando*

$$\lim_{k\to\infty} \|f_k - f\|_{\alpha,\beta} = 0 \qquad \forall\ \alpha, \beta\ \in N^n.$$

Proposição 2.6. *O espaço Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ é denso em $L^p(\mathbb{R}^n)$.*

Demonstração. Ver [3].

□

Definição 2.9. *Suponha $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. A* ***Transformada de Fourier*** *de f é a aplicação*

$$\mathcal{F} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$$

tal que

$$\mathcal{F}(f)(p) = \hat{f}(p) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ipx} f(x) d^n x,$$

onde $p.x = \displaystyle\sum_{i=1}^{n} p_i x_i.$

Teorema 2.3. *Se $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$, então $\hat{f} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$ e valem as fórmulas:*

$$(\partial_\alpha f)\,\hat{}\,(p) = (ip)^\alpha \hat{f}(p); \tag{2.1}$$

$$(x^\alpha f(x))\,\hat{}\,(p) = i^{|\alpha|} \partial_\alpha \hat{f}(p). \tag{2.2}$$

Demonstração. Para a prova de (2.1) dado $\hat{f} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ e $j = 1, ..., n$, por integração por partes, temos

$$\begin{aligned}(\partial_\alpha f)\hat{}(p) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^{n-1}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx}\partial_j f(x)\ dx_j\ d\tilde{x}\\ &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^{n-1}} e^{-i\tilde{p}\tilde{x}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx_j}\partial_j f(x)\ dx_j\ d\tilde{x}\\ &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^{n-1}} e^{-i\tilde{p}\tilde{x}}\left[f(x)e^{-ip_jx_j}|_{-\infty}^{\infty} + ip_j\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ip_jx_j}dx_j\right]d\tilde{x},\end{aligned}$$

onde $p \in \mathbb{R}^n$.

Temos que para cada $(x_1, ..., x_{j-1}, x_j, ..., x_n) \in \mathbb{R}^{n-1}$ a função $t \longrightarrow \tilde{f}(t)e^{\pm it\tau}$ está em $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, onde $\tilde{f}(t) = f(x_1, ..., x_{j-1}, t, x_{j+1}, ..., x_n)$ e assim

$$f(x)e^{-ip_jx_j}|_{-\infty}^{\infty} = \lim_{x_j\to\infty} f(x)e^{-ip_jx_j} = \lim_{x_j\to\infty}(\tilde{f}(x_j)e^{-ip_jx_j} - \tilde{f}(x_j)e^{ip_jx_j}) \longrightarrow 0.$$

Logo,

$$\begin{aligned}(\partial_\alpha f)\hat{}(p) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}ip_j\int_{\mathbb{R}^{n-1}} e^{-i\tilde{p}\tilde{x}}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ipx_j}dx_jd\tilde{x} && (2.3)\\ &= ip_j\hat{f}(p),\ p \in \mathbb{R}^n && (2.4)\end{aligned}$$

e por indução para α natural, obtemos $(\partial_\alpha f)\hat{}(p) = (ip)^\alpha\hat{f}(p)$.

Agora provaremos (2.2). Pela regra de Leibniz podemos derivar diretamente dentro do sinal de integração, obtendo

$$\begin{aligned}(x_jf(x))\hat{}(p) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n} x_je^{-ipx}f(x)d^nx && (2.5)\\ &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}\left(i\frac{\partial}{\partial p_j}e^{-ipx}\right)f(x)d^nx && (2.6)\\ &= i\frac{\partial}{\partial p_j}\left(\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n} e^{-ipx}f(x)d^nx\right) && (2.7)\\ &= i\frac{\partial}{\partial p_j}\hat{f}(p) && (2.8)\end{aligned}$$

e assim $(x_j^kf(x))\hat{}(p) = i^k\frac{\partial^k}{\partial p_j}\hat{f}(p),\ \forall k \in \mathbb{N}_0$.

Logo,

$$\begin{aligned}
\partial^\alpha \hat{f} &= (-i)^{\alpha_n} \partial_1^{\alpha_1}\partial_2^{\alpha_2}...\partial_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \widehat{(x_n^{\alpha_n} f)} && (2.9)\\
&= (-i)^{\alpha_{n-1}+\alpha_n} \partial_1^{\alpha_1}...\partial_{n-2}^{\alpha_{n-2}} (x_{n-1}^{\alpha_n} x_n^{\alpha_n} f)\hat{} && (2.10)\\
&= i^{|\alpha|}\widehat{(x^\alpha f)} && (2.11)
\end{aligned}$$

$\Rightarrow (x^\alpha f(x))\hat{}\,(p) = i^{|\alpha|}\partial_\alpha \hat{f}(p).$

□

Provaremos agora duas importantes propriedades.

Lema 2.1. *Seja* $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$*. Então*

$$\begin{aligned}
(f(x+a))\hat{}\,(p) &= e^{iap}\hat{f}(p), \quad a \in \mathbb{R}^n, && (2.12)\\
(f(\lambda x))\hat{}\,(p) &= \frac{1}{\lambda^n}\hat{f}(\frac{p}{\lambda}), \quad \lambda > 0 && (2.13)
\end{aligned}$$

Demonstração. Para provar (2.12) basta fazermos a substituição simples $v = x + a$; $d^n v = d^n x$, obtendo

$$\begin{aligned}
(f(x+a))\hat{}\,(p) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n} e^{-ipx} f(x+a) d^n x && (2.14)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n} e^{-ip(v-a)} f(v) d^n v && (2.15)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n} e^{ipa} e^{-ipv} f(v) d^n v && (2.16)\\
&= e^{ipa}\hat{f}(p), \quad a \in \mathbb{R}^n. && (2.17)
\end{aligned}$$

Já para provar (2.13) façamos a seguinte substituição $u = \lambda x$; $d^n u = \lambda^n d^n x$ e assim

$$\begin{aligned}
(f(\lambda x))\hat{}\,(p) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n} e^{-ipx} f(\lambda x) d^n x && (2.18)\\
&= \frac{1}{\lambda^n}\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n} e^{-iu\frac{p}{\lambda}} f(u) d^n u && (2.19)\\
&= \frac{1}{\lambda^n}\hat{f}(\frac{p}{\lambda}) && (2.20)
\end{aligned}$$

□

Lema 2.2. *Temos* $e^{-zx^2/2} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ *para* $Re(z) > 0$ *e*

$$\mathcal{F}(e^{-zx^2/2})(p) = \frac{1}{z^{n/2}} e^{-p^2/(2z)}.$$

Demonstração. Pela estrutura de produto da exponencial podemos reduzir o problema para $n = 1$.
Consideremos a função $\phi_z(x) = exp(-zx^2/2)$. Então,

$$\phi_z'(x) = -zx\phi_z(x) \text{ implica } \phi_z'(x) + zx\phi_z(x) = 0,$$

consequentemente $i(p\hat{\phi}_z(p) + z\hat{\phi}_z'(p)) = 0$.

Desse modo, calculando

$$\hat{\phi}_z(p) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ipx} \phi_z(x) d^n x$$

e da definição de ϕ_z, obtemos

$$\phi_{1/z}(p) = exp(-p^2/4),$$

donde vemos que $\hat{\phi}_z(p) = c\phi_{1/z}(p)$ e sabendo que $\displaystyle\int_{\mathbb{R}} exp(-x^2/2)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ (ver [14]) obtemos

$$c = \hat{\phi}_z(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} exp(-zx^2/2)dx = \frac{1}{\sqrt{z}}$$

para $z > 0$. Como a integral é holomorfa para $Re(z) > 0$, isto vale para todo z com $Re(z) > 0$ se escolhemos excluir o raíz ao longo do eixo real negativo.

□

Mostraremos agora um importante resultado.

Teorema 2.4. *A transformada de Fourier* $\mathcal{F} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ *é uma bijeção. Sua inversa é dada por*

$$\mathcal{F}^{-1}(g)(x) \equiv \check{g}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ipx} g(p) d^n p.$$

Além disso temos $\mathcal{F}^2(f)(x) = f(-x)$ *e também* $\mathcal{F}^4 = I$.

Demonstração. Por convergência dominada, usando os lemas (1.4) e (1.5) e pela linearidade de $\mathcal{F}$ temos

$$\begin{aligned}(\check{f}(p))\check{}\,(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n} e^{ipx}\check{f}(p)d^nx \\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}\phi_\epsilon(p)e^{ipx}\check{f}(p)d^nx.\end{aligned}$$

Usando Fubini e os lemas (1.4) e (1.5) temos

$$\begin{aligned}(\check{f}(p))\check{}\,(x) &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n} e^{-ipy}\phi_\epsilon(p)e^{ipx}f(y)d^nxd^ny \\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}(\phi_\epsilon(p)e^{ipx})\hat{}\,(y)f(y)d^ny \\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}e^{ipx}(\phi_\epsilon(p))\hat{}\,(y)f(y)d^ny \\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}(\phi_\epsilon(x+a))\hat{}\,(y-x)f(y)d^ny \\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}\frac{1}{\epsilon^{n/2}}exp(-(y-x)^2/2\epsilon)f(y)d^ny \\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}\frac{1}{\epsilon^{n/2}}\phi_{1/\epsilon}(y-x)f(y)d^ny.\end{aligned}$$

Fazendo $y = x+\sqrt{\epsilon}z, d^ny = \sqrt{\epsilon}\ d^nz$ obtemos

$$\begin{aligned}(\check{f}(p))\check{}\,(x) &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}\phi_1(z)f(x+\sqrt{\epsilon}z)d^nz \\ &= f(x)\end{aligned}$$

□

Observação: A transformada inversa tem o mesmo tipo de propriedade da transformada de Fourier. Note que,

$$\check{f}(x) = \hat{f}(-x),\quad \forall\ x\in\mathbb{R}.$$

Além disso,

$$\hat{f}\,\check{}(x) \ = f = \check{f}\,\hat{}(x) \tag{2.21}$$

Definição 2.10. *Dada $f\in L^2(\mathbb{R}^n)$ e $\{f_n\}$ qualquer seqüência em $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ tal que $f_n \longrightarrow f$ em*

$L^2(\mathbb{R}^n)$, segue que

$$\lim_{n\to\infty} \hat{f}_n = \hat{f} \quad e \quad \lim_{n\to\infty} \check{f}_n = \check{f}$$

onde o limite é visto no sentido de $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Teorema 2.5. *Sejam $f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Então $\hat{f} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, vale a fórmula de inversão*

$$f(x) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(p) e^{ipx} dp, \quad \forall x \ \in \mathbb{R}^n \tag{2.22}$$

e

$$\int_{\mathbb{R}^n} f\hat{g} = \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f} g. \tag{2.23}$$

Demonstração. Ver [3].

□

Teorema 2.6 (Igualdade de Plancherel em $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$)**.** *.Se $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, então*

$$\|f\|_{L^2} = \left\|\hat{f}\right\|_{L^2}.$$

Demonstração. Da igualdade (2.23) do teorema 2.5 para $\hat{g} = \bar{f}$, obtemos

$$\begin{aligned} \|f\|_{L^2} &= \int_{\mathbb{R}^n} f\hat{g} = \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f} g \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}\check{\bar{f}} = \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}\bar{\hat{f}} \\ &= \left\|\hat{f}\right\|_{L^2}. \end{aligned}$$

□

Assim, mostramos que $\mathcal{F} : (\mathcal{S}(\mathbb{R}^n), \|.\|_{L^2}) \longrightarrow (\mathcal{S}(\mathbb{R}^n), \|.\|_{L^2})$ é um isomorfismo de espaços vetoriais normados. Além disso, $\overline{\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)} = L^2(\mathbb{R}^n)$. Portanto, a tranformada de Fourier $\mathcal{F}$ pode ser estendida pelo teorema

Teorema 2.7. *A transformada de Fourier*

$$\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}^n) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$$

$$f \mapsto \hat{f} = \mathcal{F}f$$

definida como a única extensão da transformada em $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ a $L^2(\mathbb{R}^n)$ é um operador unitário, isto é, vale a igualdade $\|f\|_{L^2} = \left\|\hat{f}\right\|_{L^2}$.

Demonstração. Sejam $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ e $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ uma seqüência arbitrária em $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ convergindo a f em $L^2(\mathbb{R}^n)$. Pela continuidade em $L^2(\mathbb{R}^n)$ da transformada direta e inversa, obtemos

$$\left\|\hat{f}\right\|_{L^2} = \left\|\lim_{n\to\infty} \hat{f}_n\right\| = \lim_{n\to\infty} \left\|\hat{f}_n\right\|_{L^2} = \lim_{n\to\infty} \|f_n\|_{L^2} = \|f\|_{L^2},$$

além disso, temos

$$(\hat{f})\check{} = \lim_{n\to\infty} (\hat{f}_n)\check{} = \lim_{n\to\infty} f_n = f$$

e

$$(\check{f})\hat{} = \lim_{n\to\infty} (\check{f}_n)\hat{} = \lim_{n\to\infty} f_n = f,$$

onde o limite acima é interpretado no sentido de $L^2(\mathbb{R}^n)$.

□

2.3 O Laplaciano em $L^2(\mathbb{R}^n)$

Finalmente utilizaremos a transformada de Fourier para definir o Laplaciano de maneira maximal.

Consideramos duas cópias do $\mathbb{R}^n$, em uma delas estão definidas as funções originais munidas da variável "x"e a outra onde vive as transformadas munida da variável "p". Tal distinção é importante na mecânica quântica, onde x e p são interpretadas como posição e momento de uma partícula (no caso $n = 3$). Por conta disso, usaremos as notações $L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ e $L^2(\mathbb{R}^n, dp)$.

Observe que de (2.1), obtemos para $\alpha = 2$

$$-\Delta f = (|p|^2 \hat{f})\check{}, \quad \forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n).$$

Portanto, denotaremos por $H_0 = -\Delta$ o hamiltoniano livre (ou operador de Schrödinger livre) tal que

$$D(H_0) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx) \mid |p|^2 \hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^n, dp)\}$$

e

$$H_0 f = (M_0 \hat{f})\ \check{} = (\mathcal{F}^{-1} M_0\ \mathcal{F}) f, \quad f \in D(H_0), \tag{2.24}$$

onde M_0 é o operador maximal de multiplicação por $|p|^2$ em $L^2(\mathbb{R}^n, dp)$, isto é,

$$D(M_0) = \{g \in L^2(\mathbb{R}^n, dp) |\, |p|^2 g \in L^2(\mathbb{R}^n, dp)\}$$

$$(M_0 g)(p) = |p|^2 g(p), \quad g \in D(M_0), p - q.t.p..$$

Note que,

$$H_0 f = -\Delta f$$

é auto-adjunto e além disso, por (2.22), é unitariamente equivalente ao operador de multiplicação, isto é,

$$-\Delta = \mathcal{F}^{-1} M_g\ \mathcal{F},$$

onde $g : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ com $g(x) = |x|^2$.

Conseqüentemente, pelo corolário (2.1), temos

$$\sigma(H_0) = \sigma(-\Delta) = [0, +\infty).$$

Lema 2.3. *O conjunto* $C_c^\infty = \{f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N) | supp(f)$ *é compacto*$\}$ *é um core para* H_0*.*

Demonstração. Ver [14].

□

Teorema 2.8. *Funções em* $D(H_0)$ *são continuamente diferenciáveis.*

Demonstração. Ver [12].

□

Capítulo 3

Teorema de Kato-Rellich e Aplicações

Neste capítulo, a fim de estudarmos a auto-adjunticidade para o operador de Schrödinger do tipo $H = -\Delta + V$, demostraremos o teorema de Kato-Rellich, o qual nos dirá sob quais condições teremos a auto-adjunticidade desejada.

Teorema 3.1. *Seja $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ em H_0. Então,*

(a) *Se $n \leq 3$, φ é uma função limitada contínua e para qualquer $a > 0$, existe um b, independente de φ, tal que*

$$\|\varphi\|_\infty \leq a \|H_0\varphi\| + b \|\varphi\| \tag{3.1}$$

(b) *Se $n \geq 4$ e $2 \leq q < 2n/(n-4)$, então $\varphi \in L^q(\mathbb{R}^n)$ e para qualquer $a > 0$, existe um b (dependendo apenas de q, n e a) tal que*

$$\|\varphi\|_q \leq a \|H_0\varphi\| + b \|\varphi\| \tag{3.2}$$

Demonstração. Ver [10].

□

Teorema 3.2. *Sejam E um espaço de Banach e $T \in \mathcal{B}(E)$ tal que $\|T\| < 1$. Então, $(I - T)$ é inversível e seu inverso é dado pela série de Neumann*

$$(I - T)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} T^n,$$

onde a convergência vale na norma de $\mathcal{B}(E)$. Além disso,

$$\left\|(I-T)^{-1}\right\| \leq (1-\|T\|)^{-1}.$$

Demonstração. Ver [15].

□

Definição 3.1. *Seja A um operador auto-adjunto em $\mathcal{H}$. Um operador $B : \mathcal{D}(A) \longrightarrow \mathcal{H}$ é A-limitado se e só se existem constantes positivas a e b tais que*

$$\|B\eta\|^2 \leq a\,\|A\eta\|^2 + b\,\|\eta\|^2\,, \quad \eta \in \mathcal{D}(A). \tag{3.3}$$

Se B é A-limitado, definimos o **limite relativo** de B com respeito a A, denotado por $N_A(B) \in [0,\infty[$ como sendo

$$N_A(B) = \inf\{a \in [0,\infty[: \exists\, b \in [0,\infty[\text{ tal que (3.3) é válido para } \eta \in D(A)\}.$$

Se o limite relativo é zero, ou seja $N_A(B) = 0$, então B é dito infinitesimalmente pequeno com respeito a A.

Sabemos que o operador de Schrödinger é do tipo $H = H_0 + V$, onde V é a função potencial. A seguir damos um critério para saber quando uma função potencial V satisfaz a desigualdade (3.3) com $a < 1$.

Teorema 3.3. *As seguintes afirmações são equivalentes:*

(a) $D(H_0) \subset D(V)$.

(b) $\|V\psi\|^2 \leq C(\|H_0\psi\|^2 + \|\psi\|^2), \quad \psi \in D(H_0)$.

(c) $C_0 = sup_x \displaystyle\int_x^{x+1} |V(y)|^2\, dy < \infty$.

(d) *Para cada $\epsilon > 0$ existe uma constante K tal que*

$$\|V\psi\|^2 \leq \epsilon\,\|H_0\psi\|^2 + K\,\|\psi\|^2\,, \psi \in D(H_0). \tag{3.4}$$

(*e*) *A desigualdade* (3.4) *pode ser trocada por*

$$\|V\psi\| \leq \epsilon \|H_0\psi\| + K \|\psi\|, \psi \in D(H_0).$$

Demonstração. Ver [12].

$\square$

Teorema 3.4 (O Teorema de Kato-Rellich)**.** *Suponhamos que A seja um operador auto-adjunto em $\mathcal{H}$ e $B : \mathcal{D}(A) \longrightarrow \mathcal{H}$ um operador simétrico A-limitado com $N_A(B) < 1$. Então*

(*a*) *$A + B : \mathcal{D}(A) \longrightarrow \mathcal{H}$ é um operador auto-adjunto.*

(*b*) *$A + B$ é essencialmente auto-adjunto em $W \subseteq \mathcal{D}(A)$ se e só se A é essencialmente auto-adjunto em W.*

Demonstração. (*a*) De fato $A+B$ é simétrico, pois como A é auto-adjunto e B é simétrico, para $\varphi, \eta \in \mathcal{D}(A)$ temos

$$\langle (A+B)\varphi, \eta\rangle = \langle A\varphi + B\varphi, \eta\rangle = \langle A\varphi, \eta\rangle + \langle B\varphi, \eta\rangle = \langle \varphi, A\eta\rangle + \langle \varphi, B\eta\rangle = \langle \varphi, (A+B)\eta\rangle .$$

Assim, basta provarmos que $\exists\ c > 0$ tal que $Im(A + B \pm ic) = \mathcal{H}$ e usarmos o lema (1.1).

Note que a existência das inversas $(A \pm ic)^{-1} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{D}(A)$ é assegurada pela auto-adjunção de A. Como B é A-limitado, então existem $a < 1$ e $b \in \mathbb{R}$ tais que

$$\|B\eta\|^2 \leq a \|A\eta\|^2 + b \|\eta\|^2 = a(\|A\eta\|^2 + ba^{-1} \|\eta\|^2) = a \|(A \pm ic)\eta\|^2 , \quad \forall \eta \in \mathcal{D}(A),$$

onde $c = (ba^{-1})^{\frac{1}{2}}$.
Façamos $\eta = (A \pm ic)^{-1}\varphi$ e assim

$$\left\|B(A \pm ic)^{-1}\varphi\right\|^2 \leq a \|\varphi\|^2 , \quad \varphi \in \mathcal{H}.$$

Portanto, $B(A \pm ic)^{-1} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ é um operador limitado de norma menor que um. Assim, pelo teorema 3.2, segue que

$$I + B(A \pm ic)^{-1} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$$

é um operador invertível.

Como podemos escrever

$$A + B \pm ic = [B(A \pm ic)^{-1} + I](A \pm ic) \tag{3.5}$$

concluimos que $A + B \pm ic : \mathcal{D}(A) \longrightarrow \mathcal{H}$ é bijetivo.

(b) A é essencialmente auto-adjunto em $W \subseteq A \Leftrightarrow [A \pm ic](W)$ é denso em $\mathcal{H}$. Por $[B(A \pm ic)^{-1} + I]$ ser bicontínuo e por (3.5) temos que $[A + B \pm ic](W)$ é denso em $\mathcal{H}$, isto é, $B + A$ é essencialmente auto-adjunto em W. Do mesmo modo se $[A + B \pm ic]$ é essencialmente auto-adjunto em $W \subseteq \mathcal{D}(A)$ e pela bicontinuidade de (3.5), então A é essencialmente auto-adjunto em W.

□

Precisaremos definir uma classe de funções, como segue.

Definição 3.2. *Seja $\langle M, \mu \rangle$ um espaço de medida. Denotamos por $L^r(M, d\mu) + L^s(M, d\mu)$ o conjunto de funções mensuráveis f em M tal que*

$$L^r(M, d\mu) + L^s(M, d\mu) = \{f \in M | f = f_1 + f_2, \text{ onde } f_1 \in L^r(M, d\mu) \text{ e } f_2 \in L^s(M, d\mu)\}.$$

A seguir fazemos uma aplicação do teorema de Kato-Rellich e denotamos por V o operador multiplicação por v.

Teorema 3.5. *Seja $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ real. Então $-\Delta + V$ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ e auto-adjunto em $D(-\Delta)$.*

Demonstração. Como V é real, por hipótese, então o operador de multiplicação por V é auto-adjunto em

$$D(V) = \{\varphi | \varphi \in L^2(\mathbb{R}^3),\ V\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)\}.$$

Consideremos $V = V_1 + V_2$, onde $V_1 \in L^2(\mathbb{R}^3)$ e $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Então,

$$V(\varphi) = [V_1 + V_2](\varphi) = V_1(\varphi) + V_2(\varphi) \text{ implica } \|V(\varphi)\|_2 \leq \|V_1(\varphi)\|_2 + \|V_2(\varphi)\|_2 .$$

Mas,

$$\begin{aligned} \|V_1(\varphi)\|_2 &= \left(\int_{\mathbb{R}^3} |V_1(\varphi)|^2 \, d\mu\right)^{1/2} && (3.6) \\ &= \left(\int_{\mathbb{R}^3} |V_1|^2 \, |\varphi|^2 \, d\mu\right)^{1/2}. && (3.7) \end{aligned}$$

Como $|\varphi| \leq \|\varphi\|_\infty$, então

$$\begin{aligned} \|V_1(\varphi)\|_2 &\leq \left(\|\varphi\|_\infty^2 \int_{\mathbb{R}^3} |V_1|^2 \, d\mu\right)^{1/2} && (3.8) \\ &= \|\varphi\|_\infty \, \|V_1\|_2 \, . && (3.9) \end{aligned}$$

Como $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$, então $|V_2| \leq \|V_2\|_\infty$, $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ e de modo análogo ao cálculo anterior obtemos

$$\|V_2(\varphi)\|_2 \leq \|V_2\|_\infty \, \|\varphi\|_2 \tag{3.10}$$

Portanto, de (3.8) e (3.10) segue que

$$\|V(\varphi)\|_2 \leq \|V_1\|_2 \, \|\varphi\|_\infty + \|V_2\|_\infty \, \|\varphi\|_2 \tag{3.11}$$

e assim $C_0^\infty(\mathbb{R}^3) \subset D(V)$.

Pelo teorema 3.1 dado qualquer $a > 0$, existe $b > 0$ tal que

$$\|\varphi\|_\infty \leq a \, \|-\Delta\varphi\|_2 + b \, \|\varphi\|_2 \, , \; \varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3). \tag{3.12}$$

De (3.11) e (3.12) temos

$$\begin{aligned} \|V(\varphi)\|_2 &\leq \|V_1\|_2 \, (a \, \|-\Delta\varphi\|_2 + b \, \|\varphi\|_2) + \|V_2\|_\infty \, \|\varphi\|_2 && (3.13) \\ &= a \, \|V_1\|_2 \, \|-\Delta\varphi\|_2 + (b + \|V_2\|_\infty) \, \|\varphi\|_2 && (3.14) \end{aligned}$$

para todo $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$.

Assim, V é $-\Delta$-limitado com limite arbitrariamente pequeno em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Visto que $-\Delta$ é fechado e auto-adjunto ele é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, logo $-\Delta + V$ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, pelo teorema de Kato-Rellich. Além disso, como V é simétrico segue do teorema de Kato-Rellich que $-\Delta + V$ é auto-adjunto em $D(-\Delta)$.

$\square$

Exemplo 3.1. *Seja* $V(r) = -e^2/r$, *onde* $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. *Então,* $-\Delta - e^2/r$ *é essencialmente auto-adjunto em* $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$.

Teorema 3.6 (Teorema de Kato)**.** *Seja* $\{V_k\}_{k=1}^m$ *uma coleção de funções reais mensuráveis cada uma em* $L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$. *Seja* $V_k(y_k)$ *o operador multiplicação em* $L^2(\mathbb{R}^3)$ *obtido escolhendo* y_k *como sendo três coordenadas de* $\mathbb{R}^3$. *Então* $-\Delta + \sum_{k=1}^{m} V_k(y_k)$*é essencialmente auto-adjunto em* $C_0^\infty(\mathbb{R}^{3n})$, *onde* Δ *denota o Laplaciano em* $\mathbb{R}^{3n}$.

Demonstração. Pimeiro façamos para k. Como as normas $\|.\|_2$, $\|.\|_\infty$ e $-\Delta$ são invariantes por rotações, então podemos supor que x_1, x_2, x_3 são varáveis em V_k por uma rotação de variáveis. O Laplaciano com relação a essas variáveis denotamos por Δ_1. Por (3.12), (3.3) e pelo teorema 2.6, obtemos para toda $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{3n})$ que

$$
\begin{aligned}
\|V_k\varphi\|^2_{L^2(\mathbb{R}^{3n})} &\leq a^2 \int_{\mathbb{R}^3} |-\Delta_1\varphi(x_1, ..., x_{3n})|^2 \, dx_1, ..., dx_{3n} + b^2 \int_{\mathbb{R}^3} |\varphi(x_1, ..., x_{3n})|^2 \, dx_1, ..., dx_{3n} \\
&= a^2 \int_{\mathbb{R}^3} \left| \sum_{j=1}^{3} p_j^2 \varphi(p_1, ..., p_{3n}) \right|^2 dp_1, ..., dp_{3n} + b^2 \|\varphi\|^2 \\
&\leq a^2 \int_{\mathbb{R}^3} \left| \sum_{j=1}^{n} p_j^2 \varphi(p_1, ..., p_{3n}) \right|^2 dp_1, ..., dp_{3n} + b^2 \|\varphi\|^2 \\
&= a^2 \|-\Delta\varphi\|^2 + b^2 \|\varphi\|^2 .
\end{aligned}
$$

Daí, podemos concluir que

$$
\left\| \sum_{j=1}^{m} V_k(y_k)\varphi \right\|^2 \leq \sum_{j=1}^{m} \|V_k(y_k)\varphi\|^2 = m(a^2 \|-\Delta\varphi\|^2 + b^2 \|\varphi\|^2),
$$

para todo $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{3n})$.

Como a pode ser escolhido tão pequeno quanto desejamos, então $\sum_{j=1}^{m} V_k(y_k)$ é infinitessimalmente pequeno com relação a $-\Delta$, ou seja, $\sum_{j=1}^{m} V_k(y_k)$ é $-\Delta$-limitado. Logo, pelo teorema de Kato-Rellich, $-\Delta + \sum_{k=1}^{m} V_k(y_k)$ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^{3n})$.

□

Exemplo 3.2. ($Hamiltoniano$ *atômico*) *Sejam* $x_1, ..., x_n \in \mathbb{R}^3$ *coordenadas ortogonais de* $\mathbb{R}^{3n}$. *Então,*

$$-\sum_{i=1}^{n} \Delta_i - \sum_{i=1}^{n} \frac{ne^2}{|x_i|} + \sum_{i<j}^{n} \frac{e^2}{|x_i - x_j|}$$

é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^{3n})$.

□

Capítulo 4

Propriedades Espectrais de Operadores de Schrödinger Unidimencionais

Neste capítulo, estudamos as questões de adjunticidade e do espectro dos operadores de Schrödinger unidimensionais do tipo $H = -\frac{1}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V$.

Iniciamos o capítulo enuciando alguns postulados da mecânica quântica unidimensional. A escolha de dimensão 1 visa a evitar algumas dificuldades técnicas na abordagem do problema, possibilitando, assim, que nos detenhamos em alguns pontos que julgamos mais essenciais do problema. O enfoque axiomático, por seu turmo, permite que cheguemos mais rapidamente ao tratamento das questões em que estamos interessados, evitando que nos detenhamos nas motivações físicas dos conceitos da teoria quântica.

Neste capítulo, definimos também o espectro de um operador e caracterizamos o espectro dos operadores auto-adjuntos no teorema 4.2.

Finalizamos determinando o espectro dos operadores de Schrödinger $H = -\frac{1}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V$ em alguns casos. A nossa referência básica neste capítulo é Schechter [14].

4.1 O movimento unidimensional

<u>Postulado I:</u> Para cada partícula movendo-se ao longo de uma reta existe uma função complexa $\psi(x,t)$ da posição x e do instante t tal que a probalidade de que a partícula se

encontre no intervalo $I \subseteq \mathbb{R}$ no instante t é dado por

$$\int_I |\psi(x,t)|^2 \, dx. \tag{4.1}$$

Note que esse postulado não nos diz como determinar a posição de uma partícula, mas apenas como determinar a probabilidade de encontrá-la em um dado intervalo I da reta. Esse enfoque probabilístico é uma característica distintiva da teoria quântica com relação a física clássica.

A função ψ dada no postulado 1 é denominada **função de estado** (ou **função de onda**) da partícula. Observe que $\psi(x,t) \in \mathbb{C}$.

Uma vez que temos a certeza de que uma partícula deve estar em algum lugar ao longo da reta $\mathbb{R}$, podemos afirmar que

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi(x,t)|^2 \, dx = 1,$$

para cada instante t.

Em termos da teoria da medida, a expressão (4.1) pode ser reescrita na forma

$$\|\psi(.,t)\|^2_{L^2(I)} \, .$$

Desse modo,

$$\|\psi(.,t)\|^2_{L^2(\mathbb{R})} = 1.$$

Para enunciar o próximo postulado, precisamos da noção de **valor esperado** (ou **valor médio**) de uma grandeza w. Se w é uma grandeza que pode assumir qualquer valor de um intervalo $[a,b]$, então podemos associar a cada subintervalo I_k de $[a,b]$ a probabilidade P_{I_k} de que o valor de w esteja em I_k. O **valor esperado** $\bar{w}$ de w é dado por

$$\bar{w} = \lim_{N \longrightarrow \infty} \left(\sum_{k=1}^{N} w_k P_{I_k} \right),$$

onde w_k é um ponto arbitrário de $I_k, 1 \leq k \leq N$.

Logo,

$$\bar{w} = \int_{[a,b]} w \, |\psi(x,t)|^2 \, dx. \tag{4.2}$$

Em termos da teoria da medida, a expressão (4.2) pode ser reescrita na forma

$$\bar{w} = \langle w\psi(.,t), \psi(.,t)\rangle_{L^2([a,b])}\,.$$

Quando x é a posição de uma partícula, então o valor médio de x é dado por

$$\bar{x} = \langle M_x\psi, \psi\rangle_{L^2(I)}\,,$$

onde $M_x\psi = x\psi$ é o operador de multiplicação por x.

Em física clássica, o momento P de uma partícula é definido como

$$P = m\frac{dx}{dt} = massa \times velocidade.$$

Em física quântica define-se o momento P de uma partícula como sendo o operador

$$P\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x},$$

onde $\hbar$ é a constante de Planck.

<u>Postulado II:</u> A probabilidade de que o momento de uma partícula pertença ao intervalo I é dada por

$$\bar{P} = \langle P\psi, \psi\rangle_{L^2(I)} = \int_I (P\psi)\bar{\psi}dx.$$

Para enunciar o próximo postulado, precisamos do conceito de observável. Um **observável** é qualquer grandeza que pode ser medida em física. Temos visto até aqui dois exemplos de observáveis: a posição x e o momento P. Em cada um desses casos temos visto que se a denota um observável, então existe um operador A tal que

$$\bar{a} = \langle A\psi, \psi\rangle_{L^2(I)}\,.$$

O operador correspondente ao observável posição x é o operador de multiplicação

$$\begin{aligned} M_x : D(M_x) \subset L^2(I) &\longrightarrow L^2(I), \\ M_x(\psi) &= x\psi. \end{aligned}$$

O operador correspondente ao observável momento P é o operador

$$P\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}.$$

Em subespaços convenientemente escolhidos de $L^2(I)$ esses operadores são auto-adjuntos. Isso motiva o postulado seguinte.

Postulado III: A todo observável corresponde um operador A com domínio denso $\mathcal{D}(A)$ em $L^2(I)$ de modo que

$$\bar{a} = \langle A\psi, \psi\rangle_{L^2(I)}.$$

Se B é um operador hermitiano tal que $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{D}(B)$ e $\bar{a} = \langle A\psi, \psi\rangle_{L^2(I)}$ para todo $\psi \in \mathcal{D}(A)$, então $B = A$.

Postulado IV: Se f é uma função mensurável a Borel e a é um observável, então $f(a)$ também é um observável. Se A é o operador que corresponde ao observável a, então A^2 é o operador que corresponde ao observável a^2.

Sabemos que a função estado $\psi(x,t)$ depende do tempo, bem como da posição, embora até aqui estudamos apenas para um tempo fixado. Além disso o potencial pode ser uma função $V(x,t)$ em função do tempo, bem como da posição. Note que isso provocaria o operador Hamiltoniano a depender do tempo.

Afim de discutir a dependência do tempo em ψ enuciaremos o próximo postulado.

Postulado V: Se $H(t)$ é o operador Hamiltoniano (energia total) e $\psi(t) = \psi(x,t)$ é o estado de uma partícula no momento t, então $\psi(t)$ é uma solução de

$$i\hbar\psi'(t) = H\psi(t).$$

No que se segue, fazemos algumas observações acerca do hamiltoniano (ou operador de Schrödinger) em dimensão 1.

Como se sabe, em física clássica a enégia cinética T de uma partícula é dada por

$$T = \frac{P^2}{2m},$$

onde P é o momento e m é a massa da partícula. Então o valor médio de T é dado por

$$\bar{T} = \frac{1}{2m}\left\langle P^2\psi, \psi\right\rangle.$$

Por outro lado, a enegia potencial é dada pela função real de posição $V(x)$. A enegia total é dada por

$$E = \frac{P^2}{2m} + V.$$

Se V é uma função tal que

$$\left\langle M_{|V|}\psi(.,t), \psi(.,t)\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |V(x)|\, |\psi(x,t)|^2\, dx < \infty,$$

então o valor esperado de V pode ser obtido como

$$\bar{V} = \int_{-\infty}^{\infty} V(x)\, |\psi(x,t)|^2\, dx.$$

Desse modo, chegamos à seguinte expressão para o valor médio de enegia:

$$\bar{E} = \langle H\psi, \psi\rangle\,,$$

onde $H = -\frac{1}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V$.

4.2 Cálculo funcional boreliano

Começaremos esta seção enunciando o teorema espectral na sua forma multiplicativa.

Teorema 4.1. *Teorema Espectral (forma multiplicativa). Um operador linear $A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ é auto-ajunto se, e somente se, A é unitariamente equivalente a um operador de multiplicação M_g, atuando em um espaço $L^2(X,\mu)$, para algum espaço de medida (X,μ) separável e σ-finito e alguma função mensurável $g : X \longrightarrow \mathbb{R}$.*

Demonstração. Ver [9].

□

Definição 4.1. *Seja $A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ um operador auto-ajunto. Suponha que A é unitariamente equivalente a M_g. O* ***Cálculo funcional boreliano*** *para A é a aplicação*

$$\pi : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathcal{L}(L^2(X,\mu))$$

que cada função mensurável à Borel $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ associa o operador linear limitado $\pi(f) = f(A) = M_{f \circ g}$.

Sejam $E \subseteq \mathbb{R}$ um conjunto mensurável à Borel e $\mathcal{X}_E(x)$ a função característica do conjunto E. Então, $\mathcal{X}_E(A) = M_{\mathcal{X}_E \circ g} = \pi(\mathcal{X}_E)$.

Observação:

$$\pi : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathcal{L}(L^2(X, \mu))$$

é uma representação da álgebra $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ em $L^2(X, \mu)$, tal que

(a) π é um homomorfismo de anéis tal que $\pi(1_{\mathcal{B}(\mathbb{R})}) = I_{L^2(X,\mu)}$;

(b) $\pi(\bar{f}) = \pi(f)^*, \quad \forall f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$.

Definição 4.2. *Seja $A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ um operador auto-ajunto. As* ***medidas espectrais de A*** *como as medidas borelianas em $\mathbb{R}$ são dadas por*

$$\upsilon_h(E) = \langle \mathcal{X}_E(A)h, h \rangle_{L^2(X,\mu)}, \quad h \in \mathcal{H}, \ E \subseteq \mathbb{R}.$$

Observações:

(a) Se A é unitariamente equivalente a M_g, então

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}} \mathcal{X}_E \, d\upsilon_h = \upsilon_h(E) &= \langle \mathcal{X}_E(A)h, h \rangle_{L^2(X,\mu)} \\
&= \langle M_{\mathcal{X}_E \circ g} h, h \rangle_{L^2(X,\mu)} \\
&= \langle (\mathcal{X}_E \circ g)h, h \rangle_{L^2(X,\mu)} \\
&= \int_X (\mathcal{X}_E \circ g) h \, \bar{h} \, d\mu \\
&= \int_X (\mathcal{X}_E \circ g) \, |h|^2 \, d\mu.
\end{aligned}$$

(b) Se s é uma função simples (isto é, a imagem de s é finita, $s(I) = \{x_i\}_{i=1}^n$, e se cada imagem inversa $s^{-1}(x_i), \ 1 \le i \le n$, é um conjunto de Borel), então pela linearidade da integral, segue-se que

$$\int_{\mathbb{R}} s \, d\upsilon_h = \int_X (s \circ g) \, |h|^2 \, d\mu. \tag{4.3}$$

(c) Pelo teorema da convergência monótona, (4.3) vale para toda função boreliana $f : \mathbb{R} \longrightarrow [0, +\infty]$, ou seja,

$$\int_{\mathbb{R}} f \ d\upsilon_h = \int_X (f \circ g) \, |h|^2 \ d\upsilon_h.$$

Logo,

$$f \in L^2(\mathbb{R}, \upsilon_h) \Longleftrightarrow h \in D(M_{f \circ g}).$$

Com efeito,

$$\int_{\mathbb{R}} |f|^2 \ d\upsilon_h = \int_X |f \circ g|^2 \, |h|^2 \ d\upsilon_h.$$

Teorema 4.2. *Seja $A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ auto-adjunto. Então, $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$ e para cada $\lambda \in \mathbb{R}$ as seguintes condições são equivalentes:*

(a) *$\lambda \in \sigma(A)$;*

(b) *Para todo intervalo aberto I da reta que contém λ tem-se $\mathcal{X}_I(A) \neq 0$;*

(c) *Existe uma seqüência $\{\psi_n\} \subset \mathcal{D}(A)$ tal que $\|\psi_n\| = 1$ e*

$$\|(\lambda I - A)\psi_n\| \longrightarrow 0 \ \textit{quando} \ n \longrightarrow +\infty.$$

Demonstração. Podemos admitir, pelo teorema espectral, que $A = M_g$ agindo em $L^2(X, d\mu)$. Então, pelas proposições 2.4 e 2.5,

$$\sigma(A) = \sigma(M_g) = Im \ ess(g) \subseteq \mathbb{R}.$$

(a) $\Longrightarrow$ (b): Por hipótese $\lambda \in \sigma(A)$. Suponhamos por absurdo que existe um intervalo $I \subseteq \mathbb{R}$ que contém λ para o qual $\mathcal{X}_I(A) = 0$.

Agora defina $\varphi : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ do seguinte modo:

$$\varphi(x) = \begin{cases} (\lambda - x)^{-1}, & \text{se} \quad x \notin I \\ 0, & \text{se} \quad x \in I \end{cases}$$

Note que φ é contínua por partes e limitada em $\mathbb{R}$. Asssim, $\varphi(A)$ é um operador limitado. Consideremos a equação

$$\varphi(x)(\lambda - x) = 1 - \mathcal{X}_I(x),$$

da qual obtemos

$$\varphi(A)(\lambda I - A) = 1 - \mathcal{X}_I(A) = 1 \text{ sobre } \mathcal{D}(A)$$

e

$$(\lambda I - A)\varphi(A) = 1 - \mathcal{X}_I(A) = 1 \text{ sobre } \mathcal{H}.$$

Logo, $\lambda \in \rho(A)$. O que contradiz a hipótese de que $\lambda \in \sigma(A)$.

$(b) \Longrightarrow (c)$: Seja $\{I_n\}$ uma seqüência de intervalos abertos, onde $I_n = (\lambda - \frac{1}{n}, \lambda + \frac{1}{n})$.

Se $\mathcal{X}_{I_n}(A) \neq 0$, então

$$\exists\ \psi_n \in Im\ M_{\mathcal{X}_{I_n} \circ g} \text{ tal que } \|\psi_n\| = 1 \text{ para cada } n.$$

Com efeito, se $\mathcal{X}_{I_n}(A) \neq 0$, então $Im\ [M_{\mathcal{X}_{I_n} \circ g}](f_n) = (\mathcal{X}_{I_n} \circ g).f_n \neq 0$, para algum $f_n \in D(M_{\mathcal{X}_{I_n} \circ g})$.

Defina

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{\mathcal{X}_{I_n}(g(x)).f(x)}{\|\mathcal{X}_{I_n}(g(x)).f(x)\|}, & \text{se} \quad x \in \tilde{X} \\ 0, & \text{se} \quad x \in X \backslash \tilde{X}, \end{cases}$$

onde $\tilde{X} = \{x \in X | \mathcal{X}_{I_n}(g(x)).f(x) \neq 0\}$.

Devemos mostrar que $\psi \in D(M_g)$. Se $\psi_n(x) \neq 0$, então $g(x) \in I_n$. Assim,

$$|g\psi_n| = |g|\,|\psi_n| \leq \left|\lambda + \frac{1}{n}\right|.1 = \left|\lambda + \frac{1}{n}\right| \quad q.t.p..$$

Desse modo,

$$\int_X |g\psi_n|^2\,d\mu \leq (\lambda + \frac{1}{n})^2 \int_X |\psi_n|^2\,d\mu < \infty,$$

pois $\psi_n \in L^2(X, d\mu)$.

Portanto, $\psi \in D(M_g)$. Agora resta provar que $\|(\lambda I - M_g)\psi_n\| \longrightarrow 0$ quando $n \longrightarrow +\infty$. De fato,

$$
\begin{aligned}
|(\lambda I - M_g)\psi_n|^2 = |\lambda\psi_n - M_g\psi_n|^2 = |\lambda\psi_n - g\psi_n|^2 &= |(\lambda - g)\psi_n|^2 \\
&= |\lambda - g|^2 \, |\psi_n|^2 .
\end{aligned}
$$

Mas,

$$|g - \lambda| \leq -|\lambda| + |g| = -\lambda + \lambda + \frac{1}{n} = \frac{1}{n}.$$

Daí, obtemos

$$\|(\lambda I - M_g)\psi_n\|^2 = \int_X |g - \lambda|^2 \, |\psi_n|^2 \, d\mu \leq \frac{1}{n^2} \int_X |\psi_n|^2 \, d\mu \longrightarrow 0,$$

quando $n \longrightarrow +\infty$.

$(c) \Longrightarrow (a)$: Por absurdo, suponhamos que $\lambda \notin \sigma(A)$. Por hipótese, $\exists \, \{\psi_n\} \subset \mathcal{D}(A)$ tal que $\|\psi_n\| = 1$ e $\|(\lambda I - A)\psi_n\| \longrightarrow 0$ quando $n \longrightarrow +\infty$.

Se $\lambda \notin \sigma(A)$, então a função resolvente $R(\lambda) = (\lambda I - A)^{-1}$ de A é um operador limitado. Assim, $\|\psi_n\| = \|R(\lambda)(\lambda I - A)\psi_n\|$.

Da hipótese, obtemos a seguinte contradição:

$$1 = \lim_{n \longrightarrow \infty} \|\psi_n\| = \lim_{n \longrightarrow \infty} \|R(\lambda)(\lambda I - A)\psi_n\| = 0.$$

Portanto, $\lambda \in \sigma(A)$.

$\square$

Teorema 4.3. *Se I é um intervalo aberto de $\mathbb{R}$ e $\mathcal{X}_I(A) = 0$, então $I \subset \rho(A)$.*

Demonstração. Suponhamos $\lambda_0 \in I$. Defina

$$g(\lambda) = \begin{cases} (\lambda_0 - \lambda)^{-1}, & \text{se} \quad \lambda \notin I \\ 0, & \text{se} \quad \lambda \in I. \end{cases}$$

Note que $g(\lambda)$ é contínua por partes e limitada. Portanto, $g(A)$ é um operador limitado q.t.p.. Basta mostrar que $\lambda_0 \in \rho(A)$.

Para ver isso, consideremos a equação

$$g(\lambda)(\lambda_0 - \lambda) = 1 - \mathcal{X}_I(\lambda).$$

Disso e do fato que $\mathcal{X}_I(A) = 0$ por hipótese, temos

$$g(A)(\lambda_0 I - A) = 1 - \mathcal{X}_I(A) = 1 \text{ sobre } \mathcal{D}(A)$$

e

$$(\lambda_0 I - A)g(A) = 1 - \mathcal{X}_I(A) = 1 \text{ sobre } \mathcal{H}.$$

Logo, $\lambda_0 \in \rho(A)$.

□

Corolário 4.1. *$\rho(A)$ é um conjunto aberto.*

Demonstração. Suponhamos que $z \in \rho(A)$. Temos duas possibilidades:

i) se $z \notin \mathbb{R}$, então $\exists\ \epsilon > 0$ tal que z é centro de uma bola $B(z, \epsilon)$ que contém pontos não reais. Assim, pelo teorema (4.2) letra (a), $B(z, \epsilon) \subset \rho(A)$;

ii) se $z \in \mathbb{R}$, pelos teorema (4.2) letras (a) e (b) e teorema (4.3), z é centro de um intervalo aberto I tal que $I \subset \rho(A)$. O comprimento deste intervalo I é o diâmetro de um disco totalmente contido em $\rho(A)$.

□

Corolário 4.2. *$\sigma(A)$ é um conjunto fechado.*

Demonstração. É óbvio, visto que $\sigma(A) = \mathbb{C} \backslash \rho(A)$.

□

Definição 4.3. *Seja $I \subseteq \mathbb{R}$ um intervalo. Sejam $P(a \in I)$ (e $P(a \notin I)$) as probabilidades de que o observável a se encontre (respec. não se encontre) no intervalo I. Seja A o operador simétrico correspondente ao observável a. Então*

$$P(a \in I) = \langle \mathcal{X}_I(A) f, f \rangle_{L^2(\mathbb{R}, d\mu)},$$

onde $\mathcal{X}_I(A)$ é a função característica do intervalo I.

Corolário 4.3. *Um observável pode assumir valores apenas no espectro do seu operador correspondente.*

Demonstração. Seja a um observável com operador correspondente A.

Se $\lambda_0 \in \rho(A)$, então, pelo teorema (4.2) letra (b), existe um intervalo aberto I contendo λ_0 tal que $\mathcal{X}_I(A) = 0$. Assim,

$$P(a \in I) = \langle \mathcal{X}_I(A)f, f\rangle = 0$$

para toda função estado f. Portanto, a não pode assumir valores em I.

□

4.3 O operador momento

Denotamos por P o operador momento tal que

$$D(P) = \left\{ f \in L^2 | k\hat{f}(k) \in L^2 \right\},$$

$$Pf = \hbar (k\hat{f}(k))\check{},$$

onde $\hbar$ é a constante de Planck.

Observe que podemos escrever $P = -i\hbar\frac{d}{dx}$. Além disso, note que P é unitariamente equivalente a um operador de multiplicação, assim, pelo teorema espectral, o operador P é auto-adjunto.

Teorema 4.4. *O operador momento não admite autovalor em $C^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R}, dx)$.*

Demonstração. Suponha que existe $f \neq 0$ em $C^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R}, dx)$. Então,

$$Pf = \lambda f \Longrightarrow \lambda f + i\hbar f' = 0.$$

A solução geral dessa equação diferencial é dada por $f(x) = ce^{i\lambda x/\hbar}$, onde c é uma constante.

Se $f \in L^2(\mathbb{R}, dx)$, então $c = 0$. Portanto, $f = 0$ em $L^2(\mathbb{R}, dx)$, o que é contradição.

Logo, não existe autovetor f de P em $C^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R}, dx)$.

□

Teorema 4.5. *Seja P o operador momento. Então, $\sigma(P) = \mathbb{R}$.*

Demonstração. Seja $f(x) = ce^{-x^2}$, onde c é uma constante escolhida de modo que $\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2\, dx = 1$.

Defina

$$f_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} f\left(\frac{x}{n}\right) e^{i\lambda x/\hbar},$$

onde $\lambda \in \mathbb{R}$. Então,

$$\|f_n\|^2 = \frac{1}{n}\int_{\mathbb{R}} \left| f\left(\frac{x}{n}\right)\right|^2 dx = 1.$$

Além disso, $\|(P - \lambda I)f_n\| \longrightarrow 0$, quando $n \longrightarrow \infty$. De fato,

$$f_n'(x) = n^{-3/2} f'(\frac{x}{n}) f_0 + i\lambda f_n(x)/\hbar,$$

onde $f_0 = e^{i\lambda x/\hbar}$. Assim,

$$Pf_n = \lambda f_n - i\hbar n^{-3/2} f'\left(\frac{x}{n}\right) f_0.$$

Portanto, $\|(P - \lambda I)f_n\| \longrightarrow 0$, quando $n \longrightarrow \infty$.

Pelo teorema (4.2), concluímos que $\mathbb{R} \subseteq \sigma(A)$. Como P é auto-adjunto, então $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$.

Logo, $\sigma(P) = \mathbb{R}$.

□

Observe que $P = \hbar(\mathcal{F}^{-1} M_g \mathcal{F})$, onde $g : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$, $g(k) = k$. Logo, $\sigma(P) = Im\ ess(g) = \mathbb{R}$.

4.4 O operador energia

Seja $H_0 = \frac{1}{2m} P^2$ o operador energia, onde $P = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Considere o operador de Schrödinger unidimensional

$$H = H_0 + V,$$

onde V é o operador multiplicação $M_v(f) = vf$.

Para examinar o operador H, vamos estudar os operadores H_0 e V separadamente.

Um passo importante na definição de um operador é a escolha do seu domínio. Observe que,

$$D(H) = D(H_0) \cap D(V).$$

Para o operador H_0 um domínio que parece natural é $D(P^2)$.

Teorema 4.6. *O quadrado de um operador auto-adjunto é auto-adjunto.*

Demonstração. Ver [12].

$\square$

Corolário 4.4. *H_0 é um operador auto-adjunto.*

Teorema 4.7. *Seja $H_0 = \frac{1}{2m}P^2$, onde $P = -i\hbar\frac{d}{dx}$ é o operador momento. Então,*

$$\sigma(H_0) \subseteq [0, +\infty).$$

Demonstração. Como H_0 é auto-adjunto, temos que $\sigma(H_0) \subseteq \mathbb{R}$. Para cada $\lambda \in \mathbb{R}$, podemos escrever

$$H_0 - \lambda = \frac{1}{2m}(P + \sqrt{2m\lambda}I)(P - \sqrt{2m\lambda}I).$$

Agora, se $\lambda < 0$, então $\pm\sqrt{2m\lambda}$ é não-real. Donde se conclui que $\pm\sqrt{2m\lambda}$ estão no conjunto resolvente de P, $\rho(P)$.

Isso mostra que $\lambda \in \rho(H_0)$ quando $\lambda < 0$. Portanto, segue-se que $\sigma(H_0) \subseteq [0, +\infty)$.

$\square$

Teorema 4.8. *O espectro de H_0 consiste dos números reais não-negativos. Ou seja,*

$$\sigma(H_0) = [0, +\infty).$$

Demonstração. Seja $f(x) = ce^{-x^2}$, onde a constante c é escolhida de modo que

$$\int_{\mathbb{R}} f(x)^2 dx = 1.$$

Defina

$$f_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} f\left(\frac{x}{n}\right) f_0(x),$$

onde $f_0 = e^{i\lambda x/\hbar}$.

Então,

$$\|f_n(x)\|^2 = \int_{\mathbb{R}} f\left(\frac{x}{n}\right)^2 dx = 1.$$

Além disso,

$$f_n' = i\gamma f_n + f'\left(\frac{x}{n}\right) e^{i\gamma x} n^{-3/2}, \text{ onde } \gamma = \frac{\lambda}{\hbar}$$

e

$$f_n'' = -\gamma^2 f_n + 2i\gamma n^{-3/2} f'\left(\frac{x}{n}\right) e^{i\gamma x} + n^{-5/2} f''\left(\frac{x}{n}\right) e^{i\gamma x}.$$

Assim,

$$\begin{aligned}\left\|f_n'' + \gamma^2 f_n\right\| &\leq 2\gamma n^{-3/2} \left\|f'\left(\frac{x}{n}\right)\right\| + n^{-5/2} \left\|f''\left(\frac{x}{n}\right)\right\| \\ &= 2\gamma n^{-1/2} \left\|f'\left(\frac{x}{n}\right)\right\| + n^{-3/2} \left\|f''\left(\frac{x}{n}\right)\right\|.\end{aligned}$$

Isto mostra que, $\|(H_0 - \lambda I)f_n\| \longrightarrow 0$ quando $n \longrightarrow \infty$, visto que $(H_0 - \lambda I)f_n = f_n'' + \gamma^2 f_n$.

Daí, obtemos que $(0, +\infty) \subset \sigma(H_0)$. Como o espectro de um operador é um conjunto fechado, concluímos que $[0, +\infty) \subseteq \sigma(H_0)$.

Disso e do teorema 4.7, concluímos que $\sigma(H_0) = [0, +\infty)$.

□

Note que $H_0 = \hbar(\mathcal{F}^{-1} M_g \mathcal{F})$, onde $g : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}, \quad g(k) = k^2$. Logo, $\sigma(P) = Im\ ess(g) = [0, +\infty)$.

Proposição 4.1. *H_0 não admite autovalores em $C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R}, dx)$.*

Demonstração. Consideremos, inicialmente, a equação

$$H_0 f = \lambda f, \quad \lambda > 0$$

que dá os autovalores positivos de H_0.

Então,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} f'' - \lambda f = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} f'' + \lambda f = 0 \Rightarrow f'' + \frac{\lambda 2m}{\hbar^2} f = 0,$$

onde $\gamma^2 = \frac{\lambda 2m}{\hbar^2}$. A solução geral desta equação é dada por

$$f(x) = c_+ e^{i\gamma x} + c_- e^{-i\gamma x},$$

onde c_+, c_- são constantes.

A condição necessária para que $f(x) \in L^2(\mathbb{R}, dx)$ é que as constantes c_+, c_- sejam nulas. Então, H_0 não admite autovalores positivos.

$\square$

Consideremos, agora, o problema de determinação do espectro do operador de Schrödinger unidimensional $H = H_0 + V$, onde estamos supondo que $D(H) = D(H_0) \cap D(V)$.

Teorema 4.9. *Seja $b \in \mathbb{R}$. Se $V(x) \geq b$ para todo $x \in \mathbb{R}$, então todo $\lambda < b$ está no resolvente de H, ou seja, $(-\infty, b) \subseteq \rho(H)$.*

Demonstração. Para $f \in D(H)$, temos

$$\begin{aligned}
\langle (H - \lambda I)f, f\rangle &= \langle H_0 f, f\rangle + \langle (V - \lambda I)f, f\rangle \\
&= \frac{1}{2m}\left\langle P^2 f, f\right\rangle + \langle (V - \lambda I)f, f\rangle \\
&= \frac{1}{2m}\langle Pf, Pf\rangle + \langle (V - \lambda I)f, f\rangle \\
&= \frac{1}{2m}\|Pf\|^2 + \langle (V - \lambda I)f, f\rangle .
\end{aligned}$$

Como $\lambda < b$, então

$$\langle (H - \lambda I)f, f\rangle \geq (b - \lambda)\|f\|^2 \tag{4.4}$$

Se $\lambda \in \sigma(H)$, então existe uma sequência $\{f_n\} \subset D(H)$ com $\|f_n\| = 1$ tal que $\|(H - \lambda I)f_n\| \longrightarrow 0$, quando $n \longrightarrow +\infty$.

Assim, de (4.4) obtemos uma contradição. Portanto, $\lambda \notin \sigma(H)$.

Logo, se $\lambda < b$, então $\lambda \in \rho(H)$.

$\square$

Teorema 4.10. *Com a notação acima, se $V(x) = b$ para todo x em um intervalo não-limitado $I \subseteq \mathbb{R}$, então todos os $\lambda \geq b$ estão no espectro de H, ou seja, $[b, +\infty) \subseteq \sigma(H)$.*

Demonstração. Seja $\varphi(x) \not\equiv 0$ uma função de classse C^2 em $\mathbb{R}$ que se anula para x grande e fora de I. Multiplicando φ por uma constante adequada, podemos supor que $\|\varphi\|_{L^2(I)} = 1$.

Faça

$$f_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} f\left(\frac{x}{n}\right) e^{i\gamma x},$$

onde $\gamma^2 = \frac{2m(\lambda-b)}{\hbar^2}$. Note que as funções f_n se anulam para x grande e fora de I. Um cálculo simples mostra que $\|f_n\| = 1$ e que

$$f_n'' + \gamma^2 f_n = 2i\gamma n^{-3/2} f'\left(\frac{x}{n}\right) e^{i\gamma x} + n^{-5/2} f''\left(\frac{x}{n}\right) e^{i\gamma x}.$$

Visto que,

$$(H - \lambda I)f_n = \frac{\hbar^2}{2m}(f_n'' + \gamma^2 f_n)$$

obtemos a desigualdade

$$\|(H - \lambda I)f_n\| \leq \frac{\hbar^2\gamma}{mn}\|f'\| + \frac{\hbar^2}{2mn^2}\|f''\|.$$

Observe que $\|(H - \lambda I)f_n\| \longrightarrow 0$ quando $n \longrightarrow \infty$.

Portanto, pelo teorema (4.2), $\lambda \in \sigma(H)$ quando $\lambda \geq b$.

□

Como aplicação destes teoremas vejamos os exemplos seguintes:

Exemplo 4.1. *Seja*

$$V(x) = \begin{cases} b_1, & se \quad x < a \\ b_2, & se \quad x > a \end{cases}$$

Observe que pelo teorema 4.9

$$(-\infty, min(b_1, b_2)) \subset \rho(H). \tag{4.5}$$

E além disso, pelo teorema 4.10, $[min(b_1, b_2), \infty) \subset \sigma(H)$. Aplicando o complementar em (4.5), obtemos

$$\sigma(H) = [min(b_1, b_2), \infty).$$

Exemplo 4.2. *Considere*

$$V(x) = \begin{cases} b_1, & se \quad x < 0 \\ b_2, & se \quad 0 < x < a \\ b_3, & se \quad a < x \end{cases}$$

Seja $b_0 = min(b_1, b_3)$ tal que $b_2 \geq b_0$. Assim, pelo teorema 4.9,

$$(-\infty, b_0) \subset \rho(H). \tag{4.6}$$

E pelo teorema 4.10, $[b_0, \infty) \subset \sigma(H)$. Pelo complementar em (4.6), concluímos que

$$\sigma(H) = [b_0, \infty).$$

Os teoremas 4.9 e 4.10 atendem ao intervalo $J = [b_2, b_0)$? A resposta é não.

Basta notar que o teorema 4.9 estabelece $(-\infty, b_2) \subset \rho(H)$, enquanto que $[b_0, \infty) \subset \sigma(H)$, pelo teorema 4.10.

Então, queremos saber se existem pontos no intervalo $J = [b_2, b_0)$ os quais estão em $\sigma(H)$. Isto será estudado na seção que segue.

4.4.1 Procurando uma solução

Primeiramente vamos observar os autovalores. Suponhamos $\lambda \in J = [b_2, b_0)$ e seja

$$(H - \lambda)\psi = 0 \tag{4.7}$$

a equação diferencial em um intervalo I.

De (4.7) decorre que

$$H\psi - \lambda\psi = 0 \Rightarrow H_0\psi + V\psi - \lambda\psi = 0 \Rightarrow -\frac{\hbar}{2m}\psi'' + b_j\psi - \lambda\psi, \quad j = 1, 2, 3$$

onde V é o operador multiplicação por b_j.

Portanto, uma solução para (4.7) satisfaz

$$\hbar^2\psi'' + 2m(\lambda - b_j)\psi = 0 \ \text{ em } \ I_j, \quad j = 1, 2, 3, \tag{4.8}$$

ou seja,

$$\psi'' + \frac{2m(\lambda - b_j)}{\hbar^2}\psi = 0,$$

onde $I_1 = (\infty, 0), I_2 = (0, a)$ e $I_3 = (a, \infty)$.

Considere $\gamma_j^2 = 2m\,|\lambda - b_j|\,/\hbar^2, \quad j = 1, 2, 3$. Daí,

$$\gamma_2^2 - \gamma_j^2 = 2m(b_j - b_2)\hbar^2 \equiv c_j^2, \quad j = 1, 2, 3 \tag{4.9}$$

e

$$\begin{aligned} \psi'' - \gamma_j^2 \psi &= 0 \text{ em } I_j, \quad j = 1, 3, &(4.10)\\ \psi'' + \gamma_2^2 \psi &= 0 \text{ em } I_2. &(4.11)\end{aligned}$$

Através de métodos adequados da teoria das equações diferenciais obtemos a solução mais geral de (4.10) e (4.11) em $L^2(\mathbb{R}, dx)$, que é dada por

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\gamma_1 x}, & \text{em } I_1 \\ A_2 sen(\gamma_2 x + \alpha), & \text{em } I_2 \\ A_3 e^{-\gamma_3 x}, & \text{em } I_3 \end{cases} \tag{4.12}$$

Podemos assumir $A_2 = 1$, visto que podemos multiplicar ψ por uma constante arbitrária ela continuará satisfazendo (4.10) e (4.11). Observe que V satisfaz a letra (c) do teorema 3.3. Portanto, $D(H) = D(H_0)$. Desse modo, qualquer autofunção de H deve ser continuamente diferenciável pelo teorema (2.8).

Portanto, sendo (4.12) uma autofunção de H, devemos escolher a constantes A_1, A_3 e α de modo que ψ seja continuamente diferenciável.

Precisamos por continuidade que

$$A_1 = sen\alpha, \qquad A_3 e^{-a\gamma_3} = sen(\gamma_2 a + \alpha) \tag{4.13}$$

Como

$$\psi'(x) = \begin{cases} \gamma_1 A_1 e^{\gamma_1 x}, & \text{em } I_1 \\ \gamma_2 cos(\gamma_2 x + \alpha), & \text{em } I_2 \\ -\gamma_3 A_3 e^{-\gamma_3 x}, & \text{em } I_3 \end{cases}$$

então é necessário que

$$\gamma_1 A_1 = \gamma_2 \cos\, \alpha, \quad \gamma_3 A_3 e^{-a\gamma_3 x} = -\gamma_2 \cos(\gamma_2 a + \alpha) \tag{4.14}$$

para a contínua diferenciabilidade. Então devemos ter

$$\gamma_1 = \gamma_2 \cot\, \alpha, \quad \gamma_3 = -\gamma_2 \cot(\gamma_2 a + \alpha). \tag{4.15}$$

Note que devemos ter, em particular, $\cot\alpha > 0$ e $\cot(\gamma_2 a + \alpha) < 0$.

Por (4.15), obtemos

$$\operatorname{sen}\alpha = \pm\gamma_2/c_1, \quad \operatorname{sen}(\gamma_2 a + \alpha) = \pm\gamma_2/c_3.$$

Daí,

$$\alpha = \operatorname{sen}^{-1}(\gamma_2/c_1) + n_1\pi \tag{4.16}$$

$$\text{e} \quad \gamma_2 a + \alpha = -\operatorname{sen}^{-1}(\gamma_2/c_3) + n_2\pi, \tag{4.17}$$

onde n_1, n_2 são inteiros e $\operatorname{sen}^{-1} t$ denota o valor principal.

Por (4.16) e (4.17), temos

$$\gamma_2 a = n\pi - \operatorname{sen}^{-1}(\gamma_2/c_1) - \operatorname{sen}^{-1}(\gamma_2/c_3), \tag{4.18}$$

onde $n = n_2 - n_1$.

Portanto, (4.8) possui uma solução não trivial, a qual é continuamente diferenciável, para tanto é necessário que γ_2 satisfaça (4.18) para qualquer inteiro n, onde os c_j são dados por (4.9). Se temos uma solução de (4.18) podemos encontrar uma solução continuamente diferenciável não nula (4.12) de (4.8), basta procedermos do mesmo modo.

4.4.2 Achando os autovalores

Analisando soluções para (4.18) podemos observar que se γ_1, γ_2 e γ_3 são nulas, então de (4.13), (4.14), (4.15) e do fato que $\psi \in L^2$ temos que $\psi \equiv 0$. Portanto, estamos procurando soluções positivas e assim o inteiro n deve ser positivo. De (4.9) segue que

$$\gamma_2^2 \leq c_0^2 = min(c_1^2, c_3^2) = 2m(b_0 - b_2)/\hbar^2,$$

uma vez que $0 \leq \lambda - b_2 \leq b_0 - b_2$.

Assim, estamos procurando soluções que satisfazem

$$0 < \gamma_2 < c_0 \tag{4.19}$$

A desigualdade acima é restrita porque se $\gamma_2 = c_0$ implica ou $\gamma_1 = 0$ ou $\gamma_3 = 0$.

Sejam as curvas

$$\begin{aligned} y_1 &= a\gamma, \\ y_2 &= n\pi - \operatorname{sen}^{-1}(\gamma/c_1) - \operatorname{sen}^{-1}(\gamma/c_3). \end{aligned}$$

Obtemos a solução de (4.18) quando estas curvas se interseptam. Agora y_2 é uma função decrescente de γ, e satisfaz

$$(n-1)\pi \leq y_2 \leq n\pi.$$

Note que y_1 interseptará y_2 para algum γ no intervalo (4.19) se, somente se,

$$n\pi - \operatorname{sen}^{-1}(c_0/c_1) - \operatorname{sen}^{-1}(c_0/c_3) < ac_0 \tag{4.20}$$

Seja $c_4 = max(c_1, c_3)$. Uma vez que ou $c_0 = c_1$ e $c_4 = c_3$ ou $c_0 = c_3$ e $c_4 = c_1$, de (4.20), segue

$$n\pi < ac_0 + \frac{1}{2}\pi + \operatorname{sen}^{-1}(c_0/c_4).$$

De (4.9), obtemos

$$n\pi\hbar < a\sqrt{2m(b_0 - b_2)} + \frac{1}{2}\pi\hbar + \hbar \operatorname{sen}^{-1}\sqrt{\frac{b_0 - b_2}{b_4 - b_2}},$$

onde $b_4 = max(b_1, b_3)$. Disto, temos:

Proposição 4.2. *Seja N o inteiro suficientemente grande satisfazendo*

$$N < \frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2m(b_0 - b_2)} + \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\ sen^{-1}\sqrt{\frac{b_0 - b_2}{b_4 - b_2}}.$$

Então, existem precisamente N valores de λ no intervalo $[b_2, b_0)$ para o qual (4.8) tem uma solução continuamente diferenciável em $L^2([0,1])$ que não é identicamente nula .

Corolário 4.5. *O número N de tal soluções satisfaz:*

$$N - 1 < \frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2m(b_0 - b_2)} < N + \frac{1}{2}.$$

Corolário 4.6. *Se* $b_1 = b_3$*, então* N *é o inteiro suficientemente grande satisfazendo*

$$N < \frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2m(b_0 - b_2)} + 1.$$

Em particular, N *é pelo menos um e satisfaz*

$$N - 1 < \frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2m(b_0 - b_2)} < N.$$

Referências Bibliográficas

[1] Bartle, R. G.; *The Elements of Integration and Lebesgue Measure*, A Wiley-Interscience Publication. John Wiley Sons, Inc.; New York, 1995.

[2] Bachman, G. e Narici, L.; *Functional Analysis*, Dover Publications, New York, 2000.

[3] Cardoso, David C. S.; *O Problema de Cauchy para o Sistema de Gross-Pitaevskii*, Dissertação de Mestrado, Instituto de Matemática da Universidade Federal de Alagoas, Maceió-AL, 2005.

[4] Cycon, H. L, Froese, R.G., Kirsch, W., Simon, R.; *Schröedinger Operators with applications to Quantum Mechanics and Global Geometry.*, Series: Theoretical and Mathematics Physics. 1st ed. 1987. Corr. And extended 2nd printing, 2008, XII.

[5] Iório Jr, R. J. ; *Tópicos na Teoria da Equação de Schrödinger*, 16º Colóquio Brasileiro de Matemática, Instituto de Matemática Pura e Aplicada, CNPq.

[6] Guerra, Ediel A.; *Modelo Sigma Não-Linear e Função de Partição*, Tese de Doutorado, Departamento de Matemática da Universidade Federal de Pernambuco, Recife-PE, 2000.

[7] Iório Jr, R. J. e Iório, V.; *Equações Diferenciais Parciais: Uma Introdução*, Instituto de Matemática Pura e Aplicada, CNPq, 1988.

[8] Kreyszig, E.; *Introductory Functional Analysis with Applications*, A Wiley-Interscience Publication. John Wiley Sons, Inc.; New York, 1989.

[9] Reed, M. e Simon, B.; *Methods of Modern Mathematical Physics. I. Functional Analysis*, Academic Press, New York-London, 1972.

[10] Reed, M. e Simon, B.; *Methods of Modern Mathematical Physics. II. Functional Analysis*, Academic Press, New York-London, 1972.

[11] Rudin, W.; *Real and Complex Analysis* , Mcgraw-hill Science, 1986.

[12] Schechter, M.; *Operator Methods in Quantum Mechanics*, North Holland; New York, 1981.

[13] Taylor, A. E. e Lay, D. C.; *Introduction to Functional Analysis*, New York : Wiley, c1980.

[14] Teschl, G.; *Mathematical Methods in Quantum Mechanics with Applications to Schrödinger Operatores*, American Mathematical Society, 2008.

[15] Thayer, F. J.; *Operadores Auto-adjuntos e Equações Diferenciais Parciais*, Rio de Janeiro: LTC, 1987.