

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA

O Átomo de Hidrogênio em 1, 2 e 3 Dimensões

Alessandra Aparecida Verri

SÃO CARLOS

2007

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA

O Átomo de Hidrogênio em 1, 2 e 3 Dimensões

Alessandra Aparecida Verri

Orientador: Prof. Dr. César Rogério de Oliveira.

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal de São Carlos, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Mestre em Matemática.

SÃO CARLOS

2007

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

V554ah

Verri, Alessandra Aparecida.

O átomo de hidrogênio em 1, 2 e 3 dimensões /
Alessandra Aparecida Verri. -- São Carlos : UFSCar, 2007.
104 f.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São
Carlos, 2007.

1. Teoria espectral (Matemática). 2. Átomo de hidrogênio.
3. Operadores auto-adjuntos. 4. Coulomb, Potencial de. I.
Título.

CDD: 515.7222 (20^a)

Banca Examinadora:



Prof. Dr. César Rogério de Oliveira
DM - UFSCar



Prof. Dr. Marcus Vinícius de Araújo Lima
DM - UFSCar



Prof. Dr. Túlio Oliveira de Carvalho
DM - UEL

Aos meus pais, com todo amor e carinho.

Agradecimentos

A Deus pela constante companhia e por estar sempre iluminando meu caminho.

Aos meus pais, por todo amor e carinho, pela confiança, por serem os exemplos da minha vida.

Aos meus irmãos, Alexandre e Camila, pessoas que eu me orgulho e admiro muito.

Ao Professor César Rogério de Oliveira, pela orientação e dedicação a este trabalho.

Aos amigos do DM pela amizade e incentivo.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo

Neste trabalho vamos estudar o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio em 1, 2 e 3 dimensões. Especificamente, queremos defini-lo como um operador auto-adjunto no espaço de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$, $n = 1, 2, 3$. No entanto, o principal objetivo é estudar o átomo de hidrogênio 1-D. Em particular, para este modelo, abordaremos algumas questões relacionadas à singularidade do potencial de Coulomb $-1/|x|$.

Palavras-chave: átomo de hidrogênio, operador auto-adjunto, potencial de Coulomb.

Abstract

In this work we study the Hamiltonian of the hydrogen atom in 1, 2 and 3 dimensions. Specifically, it is defined as a self-adjoint operator in the Hilbert space $L^2(\mathbb{R}^n)$, $n = 1, 2, 3$. Nevertheless, the main goal is to study the hydrogen atom 1-D. Particularly, for this is model we address some problems related to the singularity of the Coulomb potential.

Keywords: hydrogen atom, self-adjoint operator, Coulomb potential.

Sumário

0	Introdução	9
1	Operadores Auto-adjuntos	14
1.1	Extensões Auto-Adjuntas	14
1.2	Formas de Fronteira	21
1.3	Triplas de Fronteira	24
1.4	Operadores Diferenciais de Segunda Ordem	27
1.5	Critérios de Limit Point e Limit Circle	34
2	O Átomo de Hidrogênio 3-D	39
2.1	A Decomposição em Coordenadas Esféricas	41
2.2	As Extensões Auto-Adjuntas	43
2.3	O Espectro Discreto	48
3	O Átomo de Hidrogênio 2-D	53
3.1	A Decomposição em Coordenadas Polares	54
3.2	As Extensões Auto-Adjuntas	55
3.3	O Espectro Discreto	58
4	O Átomo de Hidrogênio 1-D	59
4.1	As Extensões Auto-Adjuntas	68

4.2	O Espectro Discreto	72
4.3	Densidade de Corrente	77
4.4	Uma Aproximação	82
4.5	O Espectro Essencial	87
5	Potenciais Soluções da Equação de Laplace	88
5.1	O Potencial tridimensional $-\frac{1}{4\pi} \frac{Ze^2}{ x }$	89
5.2	O Potencial bidimensional $\frac{e^2}{2\pi} \ln x $	89
5.3	O Potencial unidimensional $\frac{e^2}{2} x $	90
5.4	Uma Comparação	92
A	g-Convergência	94
A.1	Resultados sobre g-Convergência	94

Capítulo 0

Introdução

O Hamiltoniano de um elétron, com carga $-e$, se movendo livremente no espaço n -dimensional é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta,$$

sendo Δ o Laplaciano em \mathbb{R}^n , \hbar a constante de Planck e m a massa do elétron. Consideremos uma partícula carregada positivamente Ze , sendo Z seu número atômico, localizada na origem do sistema de coordenadas. Se o elétron é atraído por essa partícula sob a influência do potencial atrativo de Coulomb $V(x) = -\frac{Ze^2}{|x|}$, o Hamiltoniano total é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{|x|}. \quad (1)$$

Ao longo de todo o trabalho, o termo potencial atrativo de Coulomb sempre se refere ao potencial $-1/|x|$, eventualmente, incluindo uma constante de multiplicação positiva.

O átomo de hidrogênio é o nome dado ao sistema composto por um elétron e um próton carregado positivamente ($Z = 1$ acima) localizado na origem do sistema de coordenadas. A força entre o elétron e o próton é determinada pelo potencial atrativo de Coulomb.

Neste trabalho vamos estudar o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio em 1, 2 e 3 dimensões, exatamente como representado por 1. O principal objetivo é

definir Δ como um operador auto-adjunto no espaço de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$ ($n = 1, 2, 3$). Esta característica é exigida por Axiomas de mecânica quântica. Sendo assim, começamos nossa análise definindo

$$(K\psi)(x) := -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi)(x), \quad \text{dom } K = \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n),$$

sendo $\mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n)$ o espaço de Sobolev ¹. Este operador é auto-adjunto. O fato é que $-(\Delta\psi)(x)$ é unitariamente equivalente ao operador multiplicação $(\mathcal{M}_{p^2}\psi)(p) = p^2\psi(p)$, ou seja,

$$-(\Delta\psi)(x) = (\mathcal{F}^{-1}p^2\hat{\psi})(x),$$

sendo $(\mathcal{F}\psi)(p) = \hat{\psi}(p)$ denotando a transformada de Fourier em $L^2(\mathbb{R}^n)$ ($n = 1, 2, 3$). A auto-adjunção de $-\Delta$ em $\mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n)$ segue do fato que \mathcal{M}_{p^2} é auto-adjunto em $\mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n)$. Em alguns momentos é conveniente considerar $\text{dom } K = C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Neste caso, $-\Delta$ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ desde que \mathcal{M}_{p^2} é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$.

Uma demonstração detalhada da discussão acima envolve resultados da teoria de distribuições e transformada de Fourier; não entraremos em detalhes neste trabalho. Como referência indicamos [2].

Agora fica natural pensar que o operador $K + V$ também é auto-adjunto em $\mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n)$. Mas precisamos ter cuidado. Desde que o potencial de Coulomb contém uma singularidade na origem, nem sempre é verdade que $V(x)\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}^n)$, $\forall \psi \in H^2(\mathbb{R}^n)$. Assim, precisamos excluir a origem do domínio de definição de $V(x)$. Definimos inicialmente

$$(H\psi)(x) := -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi)(x) - \frac{Ze^2}{|x|}\psi(x), \quad \text{dom } H = C_0^\infty(\mathbb{R}^n \setminus \{0\}).$$

Destacamos que no caso tridimensional o operador H está bem-definido em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Ao longo dos capítulos veremos porque isto ocorre somente com $n = 3$.

O Capítulo 1 é dedicado às definições e resultados da teoria de operadores que serão úteis ao longo de todo o trabalho.

¹Se $\psi^{[k]}$ denota a k -ésima derivada fraca da função ψ , o espaço de Sobolev $\mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n)$ consiste de todas as funções $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ de forma que $\psi^{[k]} \in L^2(\mathbb{R}^n)$, $k = 1, 2$.

No Capítulo 2 estudamos o caso tridimensional. Mostramos que o operador 1 é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ mas possui infinitas extensões auto-adjuntas quando considerado como um operador em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$.

A unicidade da extensão auto-adjunta em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ é devido ao Teorema de Kato-Rellich [2]. No entanto, devido à singularidade do potencial, surge a curiosidade de saber o que acontece com o operador retirando a origem de seu domínio. Em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ é conveniente a decomposição do operador 1 por coordenadas esféricas (r, θ, φ) . Por exemplo, o ponto $x = (x_1, x_2, x_3)$ em coordenadas esféricas fica $x_1 = r \sin \theta \cos \varphi$, $x_2 = r \sin \theta \sin \varphi$ e $x_3 = r \cos \theta$. Sem mais detalhes, por enquanto, nosso estudo se reduz aos operadores unidimensionais

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{r}, \quad l = 0, 1, 2, \dots,$$

com domínio $C_0^\infty(0, \infty) \subset L^2((0, \infty), r^2 dr)$. Fisicamente, l é chamado de momento angular e $\frac{l(l+1)}{r^2}$ de barreira centrífuga. Como veremos ao longo daquele capítulo, a ausência desta barreira, que corresponde ao valor $l = 0$, é justamente a causa da existência de infinitas extensões auto-adjuntas.

No Capítulo 3 estudamos o átomo de hidrogênio bidimensional. Destacamos que o Teorema de Kato-Rellich não se aplica neste caso. Mostramos que o operador 1 não pode ser definido em $C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$ sendo, então, definido em $C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\})$ onde possui infinitas extensões auto-adjuntas. Fazemos decomposição de 1 por coordenadas polares $x = (x_1, x_2) = (r \sin \theta, r \cos \theta)$. O estudo se reduz aos operadores unidimensionais

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l^2}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{r}, \quad l = 0, 1, 2, \dots,$$

com domínio $C_0^\infty(0, \infty) \subset L^2((0, \infty), r dr)$. Como no caso tridimensional, mostramos que o valor $l = 0$ é o responsável pelas infinitas extensões auto-adjuntas do operador 1 em $C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\})$.

Ao longo dos Capítulos 2 e 3 vamos mostrar em detalhes a decomposição do operador 1 por coordenadas esféricas e polares, respectivamente. Em ambos

os casos, será conveniente fazer uso da transformação unitária

$$U : L^2((0, \infty), r^{n-1}) \rightarrow L^2(0, \infty) \quad (U\varphi)(r) = r^{(n-1)/2}\varphi(r) \quad n = 3, 2,$$

a qual deixa $C_0^\infty(0, \infty)$ invariante. Assim, nosso estudo passa a se dirigir ao espaço de Hilbert usual $L^2(0, \infty)$.

O átomo de hidrogênio unidimensional é um interessante problema matemático e físico. Há mais de quatro décadas este modelo vem causando contradições [3, 7, 9, 12, 13, 14, 17, 26]. O motivo de tantos problemas: a singularidade do potencial de Coulomb é muito forte em 1-D. Como exemplo, consideremos a seguinte situação: um elétron viaja sobre o eixo x e ao se aproximar da origem existem duas possibilidades: ou ele é refletido ou é transmitido. Esta situação vem sendo estudada de várias formas. Alguns autores acreditam que o elétron é refletido, enquanto outros transmitido. Se o elétron é refletido (resp. transmitido) dizemos que a singularidade atua como uma barreira impermeável (resp. permeável).

No Capítulo 4 mostramos que o operador 1 possui infinitas extensões auto-adjuntas em $C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\})$. Devido à singularidade, o domínio de cada extensão é caracterizado por condições de contorno na origem. Podemos pensar na possibilidade de extensões em que a singularidade atua como uma barreira permeável e outras como uma barreira impermeável. Ao longo do capítulo, esperamos esclarecer todas essas questões.

Como vimos, pode ocorrer de infinitos operadores auto-adjuntos serem candidatos a representarem o mesmo Hamiltoniano. Em cada caso, sempre que possível, fixada uma extensão auto-adjunta vamos caracterizar o seu espectro discreto. Quanto ao espectro essencial apresentaremos alguns resultados, mas sem detalhes.

Os autofunções do Hamiltoniano 1 são chamados de estados estacionários. Caso exista, o estado estacionário correspondente ao menor autovalor possível é chamado de estado fundamental. Nosso interesse neste trabalho é estudar os valores de energia para os quais o átomo de hidrogênio “existe”. Mais precisamente, valo-

res de energia em que o elétron se mantém ligado ao núcleo, ou seja, no subespaço gerado pelos estados estacionários.

Lembremos que o espectro discreto de um operador auto-adjunto corresponde aos seus autovalores isolados de multiplicidade finita. Sendo E autovalor e ψ a autofunção correspondente vale a relação

$$(H\psi)(x) = E\psi(x).$$

Esta equação diz exatamente que o Hamiltoniano se mantém “constante” em $\psi(x)$, ou seja, o elétron se mantém ligado ao núcleo. Isto justifica parcialmente nosso interesse em relação ao espectro discreto.

Alguns autores acreditam que o potencial de Coulomb acima não é o potencial correspondente ao Hamiltoniano do átomo de hidrogênio, mas sim, os potenciais obtidos como solução fundamental da equação de Laplace

$$\Delta V = 0.$$

Mais precisamente, segundo tal proposta, os potenciais a representarem o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio seriam: (i) $-\frac{1}{4\pi} \frac{Ze^2}{|x|}$ no caso tridimensional; (ii) $\frac{e^2}{2\pi} \ln |x|$ no caso bidimensional; (iii) $\frac{e^2}{2}|x|$ no caso unidimensional.

No Capítulo 5 vamos apresentar alguns resultados sobre este assunto; com poucos detalhes. O objetivo é apenas uma breve comparação com os resultados obtidos com o potencial de Coulomb.

O principal objetivo deste trabalho é discutir o átomo de hidrogênio unidimensional e, por este motivo, seremos breves em algumas questões relacionadas aos casos tridimensional e bidimensional. Não entraremos em detalhes na discussão física do assunto átomo de hidrogênio. Abordaremos as questões principalmente do ponto de vista matemático.

Capítulo 1

Operadores Auto-adjuntos

A primeira seção deste capítulo é inteiramente dedicada à definições e resultados da teoria de operadores hermitianos. Não apresentaremos demonstrações. Todas as afirmações podem ser encontradas em [18, 20, 24]. Nas próximas seções definimos formas de fronteira e triplas de fronteira que são ferramentas úteis para a caracterização de extensões auto-adjuntas [18]. Incluímos uma seção especialmente para operadores diferenciais da forma $\psi'' + V(x)\psi$ com $V(x) \in L^2_{loc}(a, b)$ ($-\infty \leq a < b \leq \infty$) [16]. Finalmente, na última seção, enunciamos e demonstramos o Teorema de Weyl que nos diz sob quais condições um operador de determinada classe é essencialmente auto-adjunto [18, 20].

1.1 Extensões Auto-Adjuntas

Nesta seção vamos apresentar definições e resultados que citaremos ao longo de todo o trabalho. \mathcal{H} sempre representa um espaço de Hilbert e a notação $A \sqsubseteq B$ indica que o conjunto A é um subconjunto denso em B .

Definição 1.1 O operador $T : \text{dom} T \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é **simétrico** se

$$\langle T\xi, \eta \rangle = \langle \xi, T\eta \rangle, \quad \forall \xi, \eta \in \text{dom} T.$$

T é **hermitiano** se é simétrico e $\text{dom} T$ é um subconjunto denso em \mathcal{H} .

Seja $T : \text{dom} T \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Definimos $\text{dom} T^*$ como o espaço vetorial dos elementos $\eta \in \mathcal{H}$ de forma que o funcional linear

$$\xi \mapsto \langle \eta, T\xi \rangle, \quad \xi \in \text{dom} T,$$

pode ser representado por $\zeta \in \mathcal{H}$, ou seja,

$$\langle \eta, T\xi \rangle = \langle \zeta, \xi \rangle, \quad \forall \xi \in \text{dom} T.$$

Definição 1.2 O **adjunto** de T é o operador T^* com domínio $\text{dom} T^*$ definido acima e, para $\eta \in \text{dom} T^*$, $T^*\eta := \zeta$.

Observemos que é essencial que $\text{dom} T \subseteq \mathcal{H}$ para que T^* esteja bem definido.

Definição 1.3 Dizemos que $T : \text{dom} T \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é **auto-adjunto** se $T = T^*$.

Definição 1.4 O **gráfico** de um operador $T : \text{dom} T \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é o subespaço vetorial $G(T) := \{(\xi, T\xi) : \xi \in \text{dom} T\}$ de $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$.

A partir de agora, um operador T é sempre da forma $T : \text{dom} T \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$.

Dizemos que T é **fechável** se o conjunto $\overline{G(T)}$ (o fecho do gráfico de T) é um gráfico. Se T é fechável, \overline{T} denota o único operador cujo gráfico é $\overline{G(T)}$. \overline{T} também é chamado de **fecho** de T . No caso em que T é hermitiano, T é sempre fechável e

$$\text{dom} \overline{T} = \{\xi \in H; \exists (\xi_n) \subset \text{dom} T, \xi_n \rightarrow \xi \text{ existe } \eta \in H \text{ com } T\xi_n \rightarrow \eta\}.$$

Seguem abaixo algumas propriedades:

- T é hermitiano se, e somente se, $T \subset T^*$;
- T^* é fechado;
- se T é hermitiano, então T é fechável e seu fecho \overline{T} é hermitiano;
- se T é fechável, então $T^{**} = \overline{T}$ e $(\overline{T})^* = T^*$; T^* é uma extensão de toda extensão auto-adjunta de T .

Se T é hermitiano, dizemos que T é **essencialmente auto-adjunto** se seu fecho \overline{T} é auto-adjunto.

- T é essencialmente auto-adjunto se, e somente se, T possui uma única extensão auto-adjunta;
- T é essencialmente auto-adjunto se, e somente se, T^* é hermitiano e neste caso $\overline{T} = T^{**} = T^*$.

O **núcleo** do operador T é definido como sendo o subespaço vetorial $N(T) := \{\xi \in \text{dom} T : T\xi = 0\}$ de \mathcal{H} .

Os subespaços fechados $K_{\pm}(T) := N(T^* \pm iI)$ são chamados **subespaços de deficiência** e os números inteiros

$$n_+(T) := \dim N(T^* + iI) = \dim(\text{img}(T - iI))^{\perp},$$

$$n_-(T) := \dim N(T^* - iI) = \dim(\text{img}(T + iI))^{\perp}$$

são seus **índices de deficiência**.

Teorema 1.5 *Se T é hermitiano, então*

- (i) T é fechado se, e somente se, $\text{img}(T + iI)$ é um conjunto fechado (ou $\text{img}(T - iI)$ é um conjunto fechado);
- (ii) T é auto-adjunto se, e somente se, $\text{img}(T + iI) = \text{img}(T - iI) = \mathcal{H}$.

Demonstração: [18]. ■

O item (ii) deste teorema nos indica que $\text{img}(T \pm iI)^\perp$ medem quão longe um operador hermitiano está de ser auto-adjunto.

Os conjuntos $\rho(T)$ e $\sigma(T)$ indicam, respectivamente, o conjunto resolvente e espectro de T .

Teorema 1.6 *Se T é auto-adjunto, são equivalentes:*

- (i) $z \in \rho(T)$;
- (ii) $\text{img}(T - zI) = \mathcal{H}$;
- (iii) $\exists c > 0$ de forma que $\|(T - zI)\xi\| \geq c\|\xi\|$, $\forall \xi \in \text{dom } T$.

Demonstração: [18]. ■

Seja $B(\mathcal{H})$ denotando o conjunto de todos os operadores $S : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ limitados. Se $z \in \rho(T)$ denotamos por $R_z(T)$ o operador $(T - zI)^{-1} \in B(\mathcal{H})$. Se os conjuntos $\rho(T)$ e $\sigma(T)$ são ambos não-vazios, sempre vale

$$\|R_z(T)\| \geq \frac{1}{d(z, \sigma(T))}, \quad \forall z \in \rho(T),$$

sendo $d(z, \sigma(T)) := \inf_{w \in \sigma(T)} |w - z|$. No entanto, se T é auto-adjunto, tem-se a seguinte proposição.

Proposição 1.7 *Se T é auto-adjunto, então*

$$\|R_z(T)\| = \frac{1}{d(z, \sigma(T))}, \quad \forall z \in \rho(T).$$

Demonstração: [18] ■

O operador T é **não-negativo** se $\langle T\xi, \xi \rangle \geq 0$, $\forall \xi \in \text{dom } T$ (notação: $T \geq 0$).

Proposição 1.8 *Seja $T \geq 0$ um operador auto-adjunto. Então, para cada $n \in \mathbb{N}$, existe um único operador auto-adjunto $S \geq 0$ de forma que $S^n = T$ (notação: $S = T^{1/n}$).*

Demonstração: [18]. ■

Definição 1.9 Sejam (S_n) uma sequência de operadores em $B(\mathcal{H})$ e $S : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Dizemos que

(a) S_n **converge uniformemente**, ou em norma, para S se

$$\|S_n - S\| \rightarrow 0;$$

(b) S_n **converge fortemente** para S se

$$\|S_n \xi - S \xi\| \rightarrow 0, \quad \forall \xi \in \mathcal{H}.$$

Denotamos a convergência forte por $S_n \xrightarrow{s} S$ ou $s - \lim_{n \rightarrow \infty} S_n = S$.

(c) S_n **converge fracamente** para S se

$$|\langle S_n \xi, \eta \rangle - \langle S \xi, \eta \rangle| \rightarrow 0, \quad \forall \xi, \eta \in \mathcal{H}.$$

Denotamos a convergência fraca por $S_n \xrightarrow{w} S$ ou $w - \lim_{n \rightarrow \infty} S_n = S$.

Definição 1.10 Sejam (T_n) uma sequência de operadores auto-adjuntos e T um operador auto-adjunto. Se $\text{Im } z \neq 0$, dizemos que

(a) T_n converge para T no **sentido forte dos resolventes** se

$$R_z(T_n) \xrightarrow{s} R_z(T);$$

(b) T_n converge para T no **sentido uniforme dos resolventes** se

$$\|R_z(T_n) - R_z(T)\| \rightarrow 0.$$

Teorema 1.11 *Se T e $\{T_n\}_{n \in J}$ são operadores auto-adjuntos em \mathcal{H} , sendo J um conjunto de índices qualquer, de forma que $R_\lambda(T_n) \xrightarrow{s} R_\lambda(T)$ para algum valor real $\lambda \in \bigcap_{n \in J} \rho(T_n)$ e $\lambda \in \rho(T)$, então T_n converge para T no sentido forte dos resolventes.*

Demonstração: [18] ■

Agora vamos apresentar os principais resultados para uma possível caracterização de extensões auto-adjuntas de operadores hermitianos.

Teorema 1.12 (von Neumann) *Se T é hermitiano, então:*

(i) *com respeito ao produto interno do gráfico de T^* tem-se*

$$\text{dom } T^* = \overline{\text{dom } T} \oplus K_+(T) \oplus K_-(T).$$

(ii) *T é essencialmente auto-adjunto se, e somente se, $n_-(T) = 0 = n_+(T)$.*

(iii) *T possui extensões auto-adjuntas se, e somente se, $n_-(T) = n_+(T)$. No caso em que $n_-(T) = n_+(T) \geq 1$, existem infinitas delas.*

Demonstração: [24] ■

Desde que existem operadores hermitianos que não possuem extensão auto-adjunta, o Teorema de von Neumann acima nos diz sob quais condições elas existem. Dado um operador hermitiano T com índices de deficiência $n_-(T) = n_+(T) \geq 1$, o próximo teorema especifica o domínio de cada extensão auto-adjunta.

Teorema 1.13 *Seja T hermitiano com índices de deficiência $n_-(T) = n_+(T) \geq 1$. Se $U : K_-(T) \rightarrow K_+(T)$ é uma aplicação unitária, então a extensão hermitiana T_U de T definida por*

$$\text{dom } T_U = \{\xi + \xi_- - U\xi_- : \xi \in \text{dom } \overline{T}, \xi_- \in K_-\},$$

$$T_U(\xi + \xi_- - U\xi_-) = T\xi + i\xi_- + iU\xi_-,$$

é uma extensão auto-adjunta de T . A correspondência entre extensões auto-adjuntas de T e transformações unitárias $U : K_-(T) \rightarrow K_+(T)$ é bijetora.

Demonstração: [18] ■

Os resultados apresentados agora serão úteis para uma possível caracterização do espectro essencial de operadores auto-adjuntos.

Seja T auto-adjunto. O **espectro essencial** de T é o conjunto $\sigma_{ess}(T)$ dos pontos de acumulação de $\sigma(T)$ e os autovalores de T de multiplicidade infinita. O **espectro discreto** de T é o conjunto $\sigma_d(T) := \sigma(T) \setminus \sigma_{ess}(T)$, ou seja, os autovalores isolados de T de multiplicidade finita. Claramente $\sigma_{ess}(T) \subset \sigma(T)$ desde que este último é um conjunto fechado. Podemos escrever

$$\sigma(T) = \sigma_{ess}(T) \cup \sigma_d(T).$$

Sejam T e B operadores lineares em \mathcal{H} e $\rho(T) \neq \emptyset$. Dizemos que B é T -compacto se $\text{dom } T \subset \text{dom } B$ e $BR_z(T)$ é um operador compacto para algum $z \in \rho(T)$.

Corolário 1.14 *Seja T auto-adjunto e B hermitiano. Se B é T -compacto, então*

$$\sigma_{ess}(T + B) = \sigma_{ess}(T).$$

Demonstração: [18] ■

Proposição 1.15 *Se $K = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, $\text{dom } K = \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n)$, então $\sigma(K) = \sigma_{ess}(K) = [0, \infty)$.*

Demonstração: [18] ■

Seja $B^\infty(\mathbb{R}^n)$ denotando o conjunto das funções Borel limitadas com respeito a norma $\|f\| := \sup_{t \in \mathbb{R}^n} |f(t)|$. Escrevemos $B_\infty^\infty(\mathbb{R}^n)$ para os elementos de $B^\infty(\mathbb{R}^n)$ que se anulam no infinito.

Teorema 1.16 *Se $V \in L^2(\mathbb{R}^n) + B_\infty^\infty(\mathbb{R}^n)$ é uma função real, então V é K -compacto, $H = K + V$ com $\text{dom } H = \text{dom } K$ é auto-adjunto e $\sigma_{ess}(H) = [0, \infty)$.*

Demonstração: [18] ■

Seja $\{T_n\}_{n \in J}$ uma sequência de operadores auto-adjuntos em \mathcal{H} sendo J um conjunto de índices qualquer. Seja T também denotando um operador auto-adjunto.

Proposição 1.17 *Suponhamos que T_n converge para T no sentido uniforme dos resolventes. Se $\sigma_{ess}(T_n) = [a, b]$ ($-\infty \leq a < b \leq \infty$), $\forall n \in J$, então $\sigma_{ess}(T) = [a, b]$.*

Demonstração: [18] ■

Teorema 1.18 *Sejam T_1 e T_2 extensões auto-adjuntas de um operador fechado e hermitiano S com $n_-(S) = n_+(S) < \infty$, então $\sigma_{ess}(T_1) = \sigma_{ess}(T_2)$.*

Demonstração: [18] ■

1.2 Formas de Fronteira

Se $T \subset S$ são operadores hermitianos, então $T \subset S \subset S^* \subset T^*$, ou seja, extensões hermitianas de T são restrições hermitianas de T^* . Um operador auto-adjunto é maximal, no sentido de que não possui extensões hermitianas próprias.

Definição 1.19 *Seja T um operador hermitiano. A forma de fronteira de T é a forma sesquilinear $\Gamma = \Gamma_{T^*} : \text{dom } T^* \times \text{dom } T^* \rightarrow \mathbb{F}$ dada por*

$$\Gamma(\xi, \eta) := \langle T^* \xi, \eta \rangle - \langle \xi, T^* \eta \rangle, \quad \xi, \eta \in \text{dom } T^*.$$

No caso em que T^* é conhecido, Γ pode ser usado para encontrar o fecho de T . É o que diz a proposição abaixo.

Proposição 1.20 *Se T é hermitiano, então*

$$\text{dom } \bar{T} = \{\xi \in \text{dom } T^* : \Gamma(\xi, \zeta) = 0, \forall \zeta \in \text{dom } T^*\}.$$

Demonstração: Desde que $\bar{T} = T^{**} \subset T^*$, por definição de operador adjunto, temos $\xi \in \text{dom } \bar{T}$ se, e somente se, existe $\eta \in \mathcal{H}$ de forma que

$$\langle \xi, T^* \zeta \rangle = \langle \eta, \zeta \rangle, \quad \forall \zeta \in \text{dom } T^*,$$

e neste caso $\eta = \bar{T}\xi$. Como $\bar{T} \subset T^*$, temos $\eta = T^*\xi$ e a relação acima é equivalente a

$$0 = \Gamma(\xi, \zeta) = \langle T^*\xi, \zeta \rangle - \langle \xi, T^*\zeta \rangle, \quad \forall \zeta \in \text{dom } T^*.$$

A proposição está demonstrada. ■

Proposição 1.21 $\Gamma(\xi, \eta) = 0, \forall \xi, \eta \in \text{dom } T^*$ se, e somente se, T^* é auto-adjunto, ou seja, se, e somente se, T é essencialmente auto-adjunto.

Esta proposição é uma consequência direta da Proposição 1.20. Aqui notamos que de alguma forma Γ está relacionado com a “falta de auto-adjunção” de T^* .

Exemplo 1.1 (O Operador Momento) Uma verificação direta mostra que o operador momento $p\psi = -i\psi'$, $\text{dom } p = C_0^\infty(a, b) \subseteq L^2(a, b)$ ($-\infty \leq a < b \leq \infty$), é hermitiano. No entanto, vamos estudá-lo em algumas situações. Consideremos inicialmente $p\psi = -i\psi'$, $\text{dom } p = C_0^\infty(0, \infty)$. Assumimos que $p^*\psi = -i\psi$, $\text{dom } p^* = \mathcal{H}^1(0, \infty)$. Vamos calcular os índices de deficiência $n_+(p)$ e $n_-(p)$.

$n_+(p)$: precisamos determinar a dimensão do subespaço $N(p^* + iI)$.

Então, vamos encontrar as soluções da equação

$$-iu' + iu = 0 \tag{1.1}$$

que estão em $\text{dom } p^*$. O espaço das soluções de 1.1 é unidimensional gerado por $u(x) = e^x$. Desde que $u \notin \text{dom } p^*$ (observe que $u \notin L^2(0, \infty)$), temos $n_+(p) = 0$.

$n_-(p)$: vamos determinar a dimensão do subespaço $N(p^* - iI)$ encontrando as soluções da equação $-iu' - iu = 0$ que estão em $\text{dom } p^*$. O espaço das soluções desta equação é unidimensional gerado por $u(x) = e^{-x}$. Neste caso $u \in \text{dom } p^*$ e então $n_-(p) = 1$.

Desde que $n_-(p) = 1$ e $n_+(p) = 0$, o Teorema de von Neumann garante que p não possui extensões auto-adjuntas.

Agora consideremos $p\psi = -i\psi'$, $\text{dom } p = C_0^\infty(\mathbb{R})$. Novamente assumimos que $p^*\psi = -i\psi'$, $\text{dom } p^* = \mathcal{H}^1(\mathbb{R})$. Obtemos

$$\Gamma(\phi, \varphi) = -i \left(\phi(x) \overline{\varphi(x)} \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0, \quad \forall \phi, \varphi \in \text{dom } p^*,$$

desde que, da teoria de integração, funções em $\mathcal{H}^1(\mathbb{R})$ se anulam quando $x \rightarrow \pm\infty$. De acordo com a Proposição 1.20, o operador p é essencialmente auto-adjunto, ou seja, $\bar{p} = p^*$ é sua única extensão auto-adjunta.

Por último, consideremos $p\psi = -i\psi'$, $\text{dom } p = C_0^\infty(0, 1)$. Assumimos que $p^*\psi = -i\psi'$, $\text{dom } p^* = \mathcal{H}^1(0, 1)$. Desde que $n_-(p) = 1 = n_+(p)$, o operador p não é essencialmente auto-adjunto. Aplicando a Proposição 1.20,

$$\begin{aligned} \phi \in \text{dom } \bar{p} &\Leftrightarrow \Gamma(\phi, \varphi) = 0, \forall \varphi \in \text{dom } p^* \\ &\Leftrightarrow -i(\phi(1)\overline{\varphi(1)} - \phi(0)\overline{\varphi(0)}) = 0, \forall \varphi \in \text{dom } p^*, \end{aligned}$$

ou seja, $\phi(0) = \phi(1) = 0$. Para detalhes sobre o adjunto do operador momento, veja Seção 1.4 e Observação 1.2.

Proposição 1.22 *Se T é hermitiano, então*

$$\text{dom } \bar{T} = \{\xi \in \text{dom } T^* : \Gamma(\xi, \eta_\pm) = 0, \forall \eta_\pm \in K_\pm(T)\}.$$

Demonstração: De acordo com o Teorema de von Neumann, dado $\zeta \in \text{dom } T^*$ podemos escrever $\zeta = \eta + \eta_+ + \eta_-$, com $\eta \in \text{dom } \bar{T}$ e $\eta_\pm \in K_\pm(T)$. Desde que $\Gamma(\xi, \eta) = 0$ para todo $\xi \in \text{dom } T^*$ e todo $\eta \in \text{dom } \bar{T}$ segue que $\xi \in \text{dom } \bar{T}$ se, e somente se,

$$0 = \Gamma(\xi, \zeta) = \Gamma(\xi, \eta + \eta_+ + \eta_-) = \Gamma(\xi, \eta_+ + \eta_-), \quad \forall \zeta \in \text{dom } T^*.$$

A proposição está demonstrada. ■

Observação 1.1 Sejam ζ^1, ζ^2 elementos gerais de $\text{dom } T^*$. Escrevemos

$$\zeta^1 = \eta^1 + \eta_+^1 + \eta_-^1 \quad \text{e} \quad \zeta^2 = \eta^2 + \eta_+^2 + \eta_-^2,$$

sendo $\eta^1, \eta^2 \in \text{dom } \bar{T}$ e $\eta_\pm^1, \eta_\pm^2 \in K_\pm(T)$. Desde que $T^*\eta_\pm = \mp i\eta_\pm$, obtemos

$$\Gamma(\zeta^1, \zeta^2) = 2i (\langle \eta_+^1, \eta_+^2 \rangle - \langle \eta_-^1, \eta_-^2 \rangle).$$

Fica claro que o não anulamento de Γ está relacionado com os subespaços de deficiência. Assim, se T não é essencialmente auto-adjunto, formas de fronteira podem ser usadas para encontrar extensões auto-adjuntas de T , observando que tais extensões são restrições de T^* em domínios convenientes \mathcal{D} de forma que $\Gamma(\xi, \eta) = 0, \forall \xi, \eta \in \mathcal{D}$.

1.3 Triplas de Fronteira

Definição 1.23 Seja T um operador hermitiano com $n_-(T) = n_+(T) \geq 1$. Uma **tripla de fronteira** $(\mathbf{h}, \rho_1, \rho_2)$ para T é composta por um espaço de Hilbert \mathbf{h} e duas aplicações lineares $\rho_1, \rho_2 : \text{dom } T^* \rightarrow \mathbf{h}$, com imagens densas em \mathbf{h} , de forma que

$$\alpha \Gamma_{T^*}(\xi, \eta) = \langle \rho_1(\xi), \rho_1(\eta) \rangle - \langle \rho_2(\xi), \rho_2(\eta) \rangle, \quad \forall \xi, \eta \in \text{dom } T^*,$$

para alguma constante $\alpha \in \mathbb{F}$. $\langle \cdot \rangle$ também denota o produto interno em \mathbf{h} .

Diferentes triplas de fronteira podem ser associadas a T . Desde que T possui índices de deficiências iguais, vale relembrar a Observação 1.1:

$$\Gamma(\zeta^1, \zeta^2) = 2i (\langle \eta_+^1, \eta_+^2 \rangle - \langle \eta_-^1, \eta_-^2 \rangle), \quad \zeta^1, \zeta^2 \in \text{dom } T^*, \eta_\pm^1, \eta_\pm^2 \in K_\pm(T).$$

Os subespaços de deficiência aparecem na forma de fronteira e, por este motivo, tentamos encontrar triplas de fronteira de modo que $\dim \mathbf{h} = n_+(T)$.

Teorema 1.24 *Seja T hermitiano com índices de deficiência $n_-(T) = n_+(T) \geq 1$. Se $(\mathbf{h}, \rho_1, \rho_2)$ é uma tripla de fronteira para T , então as extensões auto-adjuntas T_U de T são dadas por*

$$\text{dom } T_U = \{\xi \in \text{dom } T^* : \rho_2(\xi) = U\rho_1(\xi)\}, \quad T_U\xi = T^*\xi,$$

sendo U um operador unitário $U : \mathbf{h} \rightarrow \mathbf{h}$.

Demonstração: Claramente, T_U é uma extensão hermitiana de T . Precisamos somente mostrar que, para cada $U : \mathbf{h} \rightarrow \mathbf{h}$ unitário, o operador T_U é auto-adjunto. Se $\eta \in \text{dom } T_U^*$, então

$$\langle T_U^*\eta, \xi \rangle = \langle \eta, T_U\xi \rangle = \langle \eta, T_U^*\xi \rangle, \quad \forall \xi \in \text{dom } T_U.$$

Segue que,

$$\begin{aligned} 0 = \Gamma_{T_U^*}(\eta, \xi) &= \langle T_U^*\eta, \xi \rangle - \langle \eta, T_U^*\xi \rangle \\ &= \langle \rho_1(\eta), \rho_1(\xi) \rangle - \langle \rho_2(\eta), \rho_2(\xi) \rangle \\ &= \langle \rho_1(\eta), \rho_1(\xi) \rangle - \langle \rho_2(\eta), U\rho_1(\xi) \rangle \\ &= \langle \rho_1(\eta), \rho_1(\xi) \rangle - \langle U^*\rho_2(\eta), \rho_1(\xi) \rangle \\ &= \langle \rho_1(\eta) - U^*\rho_2(\eta), \rho_1(\xi) \rangle, \quad \forall \xi \in \text{dom } T_U. \end{aligned}$$

Desde que $\overline{\text{img } \rho_1} = \mathbf{h}$, temos $\rho_1(\eta) - U^*\rho_2(\eta) = 0$, ou seja, $\rho_2(\eta) = U\rho_1(\eta)$ e então $\eta \in \text{dom } T_U$. Portanto, T_U é auto-adjunto. ■

Desde que $\dim \mathbf{h} = \dim K_+(T)$, a correspondência entre operadores unitários $\mathbf{h} \rightarrow \mathbf{h}$ e operadores unitários $K_-(T) \rightarrow K_+(T)$ é bijetora. Portanto, este teorema caracteriza todas as extensões auto-adjuntas de T .

Exemplo 1.2 (O Operador Momento) Neste exemplo vamos estudar o operador momento em $(\mathbb{R} \setminus \{0\})$:

$$p\phi = -i\phi', \quad \text{dom } p = C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\}).$$

Como vimos no Exemplo 1.1, p não admite extensões auto-adjuntas em $(0, \infty)$. No entanto, consideremos as restrições p_- e p_+ de p nos intervalos $(-\infty, 0)$ e $(0, \infty)$, respectivamente. Escrevemos $p = p_- \oplus p_+$. Combinando os resultados $n_-(p_-) = 0 = n_+(p_+)$ e $n_-(p_+) = 1 = n_+(p_-)$, obtemos $n_-(p) = 1 = n_+(p)$. Assumimos que $\text{dom } p^* = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) : \psi \in \mathcal{AC}(\mathbb{R} \setminus \{0\}), \psi' \in L^2(\mathbb{R})\}$ ¹. A fim de caracterizar todas as extensões auto-adjuntas de p consideremos sua forma de fronteira

$$\begin{aligned} \Gamma(\psi, \varphi) &= \langle p^* \psi, \varphi \rangle - \langle \psi, p^* \varphi \rangle \\ &= i(\psi(0^+) \overline{\varphi(0^+)} - \psi(0^-) \overline{\varphi(0^-)}), \quad \forall \psi, \varphi \in \text{dom } p^*. \end{aligned}$$

Definimos as aplicações lineares $\rho_1, \rho_2 : \text{dom } p^* \rightarrow \mathbb{C}$:

$$\rho_1(\psi) = \psi(0^+) \quad \text{e} \quad \rho_2(\psi) = \psi(0^-).$$

Notemos que

$$\langle \rho_1(\psi), \rho_1(\varphi) \rangle - \langle \rho_2(\psi), \rho_2(\varphi) \rangle = i\Gamma(\psi, \varphi), \quad \forall \psi, \varphi \in \text{dom } p^*,$$

ou seja, uma tripla de fronteira para p é encontrada.

Definimos os subespaços $X = \{\psi(0^+) : \psi \in \text{dom } p^*\}$ e $Y = \{\psi(0^-) : \psi \in \text{dom } p^*\}$. De acordo com o Teorema 1.24, extensões auto-adjuntas de p estão relacionadas com operadores unitários entre X e Y . Desde que $n_-(p) = 1 = n_+(p)$, tais operadores são a multiplicação por $e^{i\theta}$, $0 \leq \theta < 2\pi$. Portanto, a família de operadores

$$p_\theta \psi = -i\psi', \quad \text{dom } p_\theta = \{\psi \in \text{dom } p^* : \psi(0^-) = e^{i\theta} \psi(0^+)\}, \quad 0 \leq \theta < 2\pi,$$

caracterizam todas as extensões auto-adjuntas de p .

¹ $\mathcal{AC}(\mathbb{R} \setminus \{0\})$ denota o conjunto das funções absolutamente contínuas em cada subintervalo compacto de $(\mathbb{R} \setminus \{0\})$. Veja Seção 1.4 e Observação 1.2.

1.4 Operadores Diferenciais de Segunda Ordem

Esta seção é inteiramente dedicada a operadores diferenciais da forma

$$H\psi = -\psi'' + V(x)\psi,$$

atuando no espaço de Hilbert $L^2(a, b)$ ($-\infty \leq a < b \leq \infty$). Como referência indicamos [16, 18]. É claro que estes operadores não estão definidos em todo $L^2(a, b)$ desde que existem funções neste espaço que não são diferenciáveis. É preciso considerar um subconjunto denso em $L^2(a, b)$ no qual H fique bem definido. Definimos

$$H\psi = -\psi'' + V(x)\psi, \quad \text{dom } H = C_0^\infty(a, b).$$

É importante exigir que $V \in L_{loc}^2(a, b)$ pois é a condição mínima para que $V\psi \in L^2(a, b)$, $\forall \psi \in C_0^\infty(a, b)$. É natural chamar H de operador diferencial com domínio minimal. Também sabemos que existe um domínio maximal no sentido de que toda extensão auto-adjunta de H não pode ter um domínio maior do que este. Este domínio maximal corresponde ao domínio de H^* , o adjunto de H .

Seja I um subintervalo compacto de (a, b) . Dizemos que uma função ψ é absolutamente contínua em I se, e somente se, ψ pode ser escrita na forma

$$\psi(x) = \psi(c) + \int_c^x \phi(y)dy, \quad c \in I, \quad \phi \in L^1(I),$$

e $\psi'(x) = \phi(x)$ qtp..

Denotamos por $\mathcal{AC}(a, b)$ o conjunto de todas as funções absolutamente contínuas em cada subintervalo compacto de (a, b) . Se $\psi^{(k)}$ denota a k -ésima derivada da função ψ , o espaço de Sobolev $\mathcal{H}^m(a, b)$ consiste de todas as funções $\psi \in L^2(a, b)$ com $\psi^{(k)} \in \mathcal{AC}(a, b)$ para $k = 0, 1, \dots, m-1$ e $\psi^{(m)} \in L^2(a, b)$.

Lema 1.25 *Seja u uma distribuição em $C_0^\infty(a, b)$ de forma que $u' = 0$. Então, u é constante.*

Demonstração: [18]. ■

Com a ajuda deste lema vamos encontrar o domínio do operador adjunto H^* .

Teorema 1.26 *Seja $V : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ uma função real em $L^2_{loc}(a, b)$. Então o operador minimal*

$$(H\psi)(x) = -\psi''(x) + V(x)\psi(x), \quad \text{dom } H = C_0^\infty(a, b) \subset L^2(a, b),$$

é hermitiano e seu adjunto é $(H^\psi)(x) = -\psi''(x) + V(x)\psi(x)$ com domínio*

$$\text{dom } H^* = \{\psi \in L^2(a, b); \psi, \psi' \in \mathcal{AC}(a, b), H^*\psi \in L^2(a, b)\}.$$

Demonstração: Seja $A := \{\psi \in L^2(a, b); \psi, \psi' \in \mathcal{AC}(a, b), H^*\psi \in L^2(a, b)\}$. Uma verificação direta mostra que $A \subset \text{dom } H^*$. A tarefa agora é mostrar que $\text{dom } H^* \subset A$. Por definição, se $u \in \text{dom } H^*$, então

$$\langle H\phi, u \rangle = \langle \phi, H^*u \rangle = \langle -\phi'' + V(x)\phi, u \rangle, \quad \forall \phi \in \text{dom } H.$$

Desde que $u \in L^2(a, b)$ e $V \in L^2_{loc}(a, b)$, temos $Vu \in L^1_{loc}(a, b)$. Como $H^*u \in L^2(a, b) \subset L^1_{loc}(a, b)$, podemos definir, para algum $c \in (a, b)$, a função

$$W(x) = \int_c^x ds \int_c^s (V(t)u(t) - H^*u(t))dt.$$

Desde que $Vu - H^*u \in L^1_{loc}(a, b)$, ambas $W(x)$ e $W'(x)$ são absolutamente contínuas em cada subintervalo compacto de (a, b) . Vale também

$$W''(x) = V(x)u(x) - H^*u(x) \quad \text{qtp.}$$

Agora notemos que

$$\langle \phi'', u \rangle = \langle \phi, Vu - H^*u \rangle = \langle \phi, W'' \rangle = \langle \phi'', W \rangle.$$

Segue que

$$\int_a^b \phi''(u - W)dx = 0, \quad \forall \phi \in C_0^\infty(a, b).$$

Aplicando o Lema 1.25 esta relação implica $(u - W)''(x) = 0$ e então $(u - W)(x) = c_1x + c_2$, sendo c_1 e c_2 constantes arbitrárias. Logo, $u, u' \in \mathcal{AC}(a, b)$ e

$$-u''(x) + V(x)u(x) = H^*u(x) \in L^2(a, b).$$

Segue que $\text{dom } H^* \subset A$ e o teorema está demonstrado. ■

Este teorema especifica o domínio maximal de todas extensões auto-adjuntas de H . Pode acontecer do próprio H^* ser auto-adjunto. Neste caso, $H^* = H^{**} = \overline{H}$, ou seja, \overline{H} é a única extensão auto-adjunta de H .

Observemos que a condição $\psi \in \text{dom } H^*$ não implica $\psi'' \in L^2(a, b)$. Como exemplo, consideremos o operador $(H\psi)(x) = -\psi''(x) - 1/4x^2\psi(x)$, $\text{dom } H = C_0^\infty(0, 1)$. Temos $u(x) = \sqrt{x} \in \text{dom } H^* = \{\psi \in L^2(0, 1) : \psi, \psi' \in \mathcal{AC}(0, 1), H^*\psi \in L^2(0, 1)\}$, no entanto, $u''(x) = -1/4x^{3/2} \notin L^2(0, 1)$.

Observação 1.2 Uma demonstração similar à do Teorema 1.26 mostra que o adjunto do operador momento $p\psi = -i\psi'$, $\text{dom } p = C_0^\infty(a, b)$ ($-\infty \leq a < b \leq \infty$) é o operador $p^*\psi = -i\psi$, $\text{dom } p^* = \{\psi \in L^2(a, b) : \psi \in \mathcal{AC}(a, b), \psi' \in L^2(a, b)\} = \mathcal{H}^1(a, b)$, como assumimos em alguns exemplos.

Lema 1.27 *A forma de fronteira do operador minimal H é*

$$\Gamma(\psi, \varphi) = W_b[\psi, \varphi] - W_a[\psi, \varphi], \quad \psi, \varphi \in \text{dom } H^*,$$

sendo $W_x[\psi, \varphi] = \psi(x)\overline{\varphi'(x)} - \psi'(x)\overline{\varphi(x)}$ o wronskiano de ψ e φ no ponto x e

$$W_a[\psi, \varphi] = \lim_{x \rightarrow a^+} W_x[\psi, \varphi] \quad e \quad W_b[\psi, \varphi] = \lim_{x \rightarrow b^-} W_x[\psi, \varphi].$$

Demonstração: Seja $[c, d] \subset (a, b)$ e $\psi, \varphi \in \text{dom } H^*$. Desde que $V \in L_{loc}^2(a, b)$, por integração por partes, obtemos

$$\int_c^d \left((H^*\psi)(x)\overline{\varphi(x)} - \psi(x)\overline{(H^*\varphi)(x)} \right) dx = W_d[\psi, \varphi] - W_c[\psi, \varphi].$$

Desde que a integral é finita, os limites que definem $W_a[\psi, \varphi]$ e $W_b[\psi, \varphi]$ existem e $\Gamma(\psi, \varphi) = W_b[\psi, \varphi] - W_a[\psi, \varphi]$. ■

Voltando ao operador minimal H , dizemos que a é um **ponto regular** para H se $-\infty < a$ e para algum $c \in (a, b)$ tem-se $\int_a^c |V(x)|^2 dx < \infty$; b é regular para H se $b < \infty$ e $\int_c^b |V(x)|^2 dx < \infty$. Se a não é um ponto regular, então a é chamado de **ponto singular**. Consideremos a equação

$$H^*\psi = -\psi'' + V\psi = \pm i\psi. \quad (1.2)$$

O espaço das soluções de 1.2 é bidimensional. Se a é regular, toda solução ψ de 1.2 tem limites finitos $\psi(a) := \psi(a^+) = \lim_{x \rightarrow a^+} \psi(x)$ e $\psi'(a) := \psi'(a^+) = \lim_{x \rightarrow a^+} \psi'(x)$. Se a é singular tais limites podem divergir. Toda solução de 1.2 satisfaz $\psi, \psi' \in \mathcal{AC}(a, b)$. Para detalhes sobre estas propriedades indicamos [15].

Proposição 1.28 (i) *O fecho de H tem domínio*

$$\text{dom } \overline{H} = \{\psi \in \text{dom } H^* : W_b[\psi, \varphi] = 0, W_a[\psi, \varphi] = 0, \forall \varphi \in \text{dom } H^*\}.$$

(ii) *No caso de a ser um ponto regular, então a condição $W_a[\psi, \varphi] = 0, \forall \varphi \in \text{dom } H^*$, significa $\psi(a) = 0 = \psi'(a)$ (similarmente para b).*

Demonstração: (i) Usando a Proposição 1.20 e o Lema 1.27, obtemos

$$\text{dom } \overline{H} = \{\psi \in \text{dom } H^* : W_b[\psi, \varphi] - W_a[\psi, \varphi] = 0, \forall \varphi \in \text{dom } H^*\}.$$

Desde que o comportamento das funções de $\text{dom } H^*$ próximo de a independem de seus valores próximo de b , segue que $W_b[\psi, \varphi] - W_a[\psi, \varphi] = 0, \forall \varphi \in \text{dom } H^*$, é equivalente a $W_b[\psi, \varphi] = 0 = W_a[\psi, \varphi], \forall \varphi \in \text{dom } H^*$.

(ii) Se a é um ponto regular, então $\varphi(a)$ e $\varphi'(a)$ estão bem definidas (ou seja, têm limites finitos) para toda $\varphi \in \text{dom } H^*$. Então, $0 = W_a[\psi, \varphi] = \psi(a)\overline{\varphi'(a)} - \psi'(a)\overline{\varphi(a)}, \forall \varphi \in \text{dom } H^*$, implica $\psi(a) = 0 = \psi'(a)$, desde que $\varphi(a)$ e $\varphi'(a)$ podem tomar valores arbitrários. ■

Corolário 1.29 *Se a e b são pontos regulares, então*

$$\text{dom } \overline{H} = \{\psi \in \text{dom } H^*; \psi(a) = \psi'(a) = 0 = \psi(b) = \psi'(b)\}.$$

Corolário 1.30 *Se H tem um ponto regular, então \overline{H} não possui autovalores.*

Demonstração: Supondo a ponto regular, as soluções de $\overline{H}\psi = \lambda\psi$, $\psi \in \text{dom } \overline{H}$, $\lambda \in \mathbb{C}$, devem satisfazer $\psi(a) = 0 = \psi'(a)$. Por unicidade, ψ é a solução nula. ■

Definição 1.31 Um aplicação antilinear $C : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é uma **conjugação** se é uma isometria e $C^2 = I$.

A proposição a seguir é uma conseqüência do Teorema de von Neumann.

Proposição 1.32 *Se T é hermitiano e existe uma conjugação C de forma que $C(\text{dom } T) \subset \text{dom } T$ e C comuta com T , então T possui extensões auto-adjuntas.*

Demonstração: Desde que $C(\text{dom } T) \subset \text{dom } T$ segue que $\text{dom } T = C^2(\text{dom } T) \subset C(\text{dom } T)$, ou seja, $C(\text{dom } T) = \text{dom } T$. Se $\xi \in \text{img}(T - iI)^\perp$, então para cada $\eta \in \text{dom } T$ vale

$$0 = \langle \xi, (T - iI)\eta \rangle = \langle C\xi, C(T - iI)\eta \rangle = \langle C\xi, (T + iI)C\eta \rangle$$

e então $C\xi \in \text{img}(T + iI)^\perp$. Assim, $C : \text{img}(T - iI)^\perp \rightarrow \text{img}(T + iI)^\perp$. Um argumento similar mostra que $C : \text{img}(T + iI)^\perp \rightarrow \text{img}(T - iI)^\perp$. Desde que C é uma conjugação segue que $n_-(T) = n_+(T)$. ■

Tomando a conjugação $(C\psi)(x) = \overline{\psi(x)}$, o operador minimal H sempre possui extensões auto-adjuntas. Isto nem sempre é verdade para todo operador diferencial, que é o que acontece com o operador momento em $(0, \infty)$.

Teorema 1.33 (i) *Os índices de deficiência do operador minimal H são finitos e limitados por $0 \leq n_-(H) = n_+(H) \leq 2$.*

(ii) *Se a e b são regulares, então $n_-(H) = n_+(H) = 2$.*

Demonstração: (i) Segue da discussão acima.

(ii) Seja u solução de

$$H^* \psi = -\psi'' + V\psi = -i\psi, \quad \psi \in \text{dom } H^*.$$

Então, $u, u' \in \mathcal{AC}(a, b)$. Resta mostrar que $u \in L^2(a, b)$. Para cada subintervalo fechado $[c, d]$ de (a, b) tem-se $\int_c^d |u(x)|^2 dx < \infty$. Desde que os limites $u(a^+)$ e $u(b^-)$ existem e a e b são finitos obtemos $\int_a^b |u(x)|^2 dx < \infty$. Assim, $n_+(H) = 2$. Similarmente $n_-(H) = 2$. ■

Exemplo 1.3 (Partícula Livre) Neste exemplo vamos considerar o operador que descreve uma partícula livre em três situações. Consideremos inicialmente

$$H\phi = -\phi'', \quad \text{dom } H = C_0^\infty(\mathbb{R}).$$

O operador H^* com a mesma lei de H e com domínio $\text{dom } H^* = \mathcal{H}^2(\mathbb{R})$ é o adjunto de H . Desde que $n_-(H) = 0 = n_+(H)$, H é essencialmente auto-adjunto, ou seja, $\overline{H} = H^*$ é sua única extensão auto-adjunta. Consideremos agora

$$H\phi = -\phi'', \quad \text{dom } H = C_0^\infty(0, \infty).$$

O operador H^* com a mesma lei de H e com domínio $\mathcal{H}^2(0, \infty)$ é o adjunto de H . Os índices de deficiência de H são $n_-(H) = 1 = n_+(H)$, ou seja, H possui infinitas extensões auto-adjuntas. A fim de caracterizá-las consideremos a forma de fronteira de H

$$\Gamma(\psi, \varphi) = \left(\psi'(0) \overline{\varphi(0)} - \psi(0) \overline{\varphi'(0)} \right).$$

Definimos as aplicações lineares $\rho_1, \rho_2 : \text{dom } H^* \rightarrow \mathbb{C}$:

$$\rho_1(\psi) = \psi(0) - i\psi'(0) \quad \text{e} \quad \rho_2(\psi) = \psi(0) + i\psi'(0).$$

Observemos que

$$\langle \rho_1(\psi), \rho_1(\varphi) \rangle - \langle \rho_2(\psi), \rho_2(\varphi) \rangle = -2i\Gamma(\psi, \varphi), \quad \forall \psi, \varphi \in \text{dom } H^*,$$

ou seja, uma tripla de fronteira para H é encontrada.

Definimos os espaços vetoriais $X := \{\psi(0) - i\psi'(0) : \psi \in \text{dom } H^*\}$ e $Y := \{\psi(0) + i\psi'(0) : \psi \in \text{dom } H^*\}$. De acordo com o Teorema 1.24, domínio \mathcal{D} 's em que H^* é auto-adjunto estão relacionados com operadores unitários entre X e Y . Desde que $n_-(H) = 1 = n_+(H)$, tais operadores são a multiplicação por $e^{i\theta}$, $0 \leq \theta < 2\pi$. Mais precisamente, dado $\theta \in [0, 2\pi)$, o domínio da extensão auto-adjunta de H é formado por todas as funções $\psi \in \text{dom } H^*$ que satisfazem a condição $\rho_2(\psi) = e^{i\theta}\rho_1(\psi)$. A relação $\rho_2(\psi) = e^{i\theta}\rho_1(\psi)$ é

$$\psi(0) + i\psi'(0) = e^{i\theta}(\psi(0) - i\psi'(0)),$$

e também pode ser escrita na forma

$$(1 - e^{i\theta})\psi(0) = -i(1 + e^{i\theta})\psi'(0).$$

Se $\theta \neq 0$ temos

$$\psi(0) = \lambda\psi'(0), \quad \lambda = -i\frac{(1 + e^{i\theta})}{(1 - e^{i\theta})} \in \mathbb{R}.$$

Todas as extensões auto-adjuntas H_λ de H são caracterizadas pelas condições de contorno

$$\text{dom } H_\lambda = \{\psi \in \text{dom } H^* : \psi(0) = \lambda\psi'(0)\}, \quad \lambda \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}.$$

O valor $\lambda = \infty$ é para incluir $\theta = 0$ que corresponde a condição de Neumann $\psi'(0) = 0$. A condição de Dirichlet ocorre para $\lambda = 0$.

Finalmente,

$$H\phi = -\phi'', \quad \text{dom } H = C_0^\infty(0, 1).$$

O operador H^* com a mesma lei de H e com $\text{dom } H^* = \mathcal{H}^2(0, 1)$ é o adjunto de H . Desde $n_-(H) = 2 = n_+(H)$, H possui infinitas extensões auto-adjuntas. A fim de caracterizá-las consideremos a forma de fronteira de H

$$\Gamma(\psi, \phi) = \psi(1)\overline{\phi'(1)} - \psi'(1)\overline{\phi(1)} - \psi(0)\overline{\phi'(0)} + \psi'(0)\overline{\phi(0)}.$$

Definimos as aplicações lineares $\rho_1, \rho_2 : \text{dom } H^* \rightarrow \mathbb{C}^2$:

$$\rho_1(\psi) = \begin{pmatrix} \psi'(0) + i\psi(0) \\ \psi'(1) - i\psi(1) \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \rho_2(\psi) = \begin{pmatrix} \psi'(0) - i\psi(0) \\ \psi'(1) + i\psi(1) \end{pmatrix}.$$

Uma verificação simples mostra que

$$\langle \rho_1(\psi), \rho_1(\varphi) \rangle - \langle \rho_2(\psi), \rho_2(\varphi) \rangle = -2i\Gamma(\psi, \varphi), \quad \forall \psi, \varphi \in \text{dom } H^*,$$

ou seja, uma tripla de fronteira para H é encontrada. Como antes, domínios \mathcal{D} 's em que H^* é auto-adjunto são caracterizados por matrizes unitárias 2×2 que denotaremos por U . Mais precisamente, tais domínios são formados por todas as funções $\psi \in \text{dom } H^*$ que satisfazem a condição $\rho_2(\psi) = U\rho_1(\psi)$. Esta relação pode ser escrita na forma

$$(I - U) \begin{pmatrix} \psi'(0) \\ \psi'(1) \end{pmatrix} = -i(I + U) \begin{pmatrix} -\psi(0) \\ \psi(1) \end{pmatrix}, \quad \forall \psi \in \text{dom } H^*.$$

Assim, o domínio da extensão auto-adjunta H_U de H é composto por elementos $\psi \in \mathcal{H}^2(0, 1)$ de forma que as condições de contorno acima são satisfeitas e $H_U\psi = -\psi''$.

1.5 Critérios de Limit Point e Limit Circle

Esta seção é dedicada ao Teorema de Weyl que nos diz sob quais condições o operador minimal $H = -\psi'' + V(x)\psi$, $\text{dom } H = C_0^\infty(a, b)$, é essencialmente auto-adjunto. Lembremos que sempre assumimos $V \in L_{loc}^2(a, b)$ e $-\infty \leq a < b \leq \infty$. Para enunciar e demonstrar o Teorema, vamos precisar de alguns resultados e definições. Como referência para esta seção indicamos [18, 20].

Definição 1.34 Uma função mensurável $u : (a, b) \rightarrow \mathbb{C}$ está em $L^2(a, b)$ em a se existe $c \in (a, b)$ de forma que $u \in L^2(a, c)$; similarmente, u está em $L^2(a, b)$ em b se $u \in L^2(c, b)$.

Vamos investigar os índices de deficiência de H estudando as soluções de

$$-\psi'' + V(x)\psi = \lambda\psi, \quad \lambda \in \mathbb{C}. \quad (1.3)$$

Lema 1.35 *Se para algum $\lambda \in \mathbb{C}$, ambas soluções de 1.3 estão em $L^2(a, b)$ em a (respectivamente, em b), então, para todo $\lambda \in \mathbb{C}$, ambas soluções de 1.3 estão em $L^2(a, b)$ em a (respectivamente, em b).*

Demonstração: Sejam φ_1 e φ_2 duas soluções linearmente independentes de 1.3, para $\lambda_0 \in \mathbb{C}$, de forma que φ_1 e φ_2 estão em $L^2(a, b)$ em b . Supomos ainda $\varphi_1'(x)\varphi_2(x) - \varphi_1(x)\varphi_2'(x) = 1$. Seja u uma solução de 1.3 para $\lambda = \lambda_1 \neq \lambda_0$. Escolhemos $c \in (a, b)$. Uma verificação mostra que

$$u(x) - (\lambda_1 - \lambda_0) \int_c^x (\varphi_1(x)\varphi_2(\xi) - \varphi_1(\xi)\varphi_2(x))u(\xi)d\xi$$

satisfaz 1.3 com $\lambda = \lambda_0$. Assim,

$$u(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x) + (\lambda_1 - \lambda_0) \int_c^x (\varphi_1(x)\varphi_2(\xi) - \varphi_1(\xi)\varphi_2(x))u(\xi)d\xi,$$

sendo c_1 e c_2 constantes arbitrárias. Definimos $\|f\|_{[c,x]}^2 = \int_c^x |f(x)|^2 dx$ e escolhemos M de forma que $\|\varphi_1\|_{[c,x]} < M$ e $\|\varphi_2\|_{[c,x]} < M$. Pela Desigualdade de Schwarz,

$$|u(x)| \leq |c_1|\|\varphi_1(x)\| + |c_2|\|\varphi_2(x)\| + |\lambda_1 - \lambda_0|(\|\varphi_1(x)\| + \|\varphi_2(x)\|)M\|u\|_{[c,x]}$$

e então,

$$\|u\|_{[c,x]} \leq |c_1|M + |c_2|M + 2M^2|\lambda_1 - \lambda_0|\|u\|_{[c,x]}.$$

Podemos escolher M tão pequeno quanto queremos se tomarmos c suficientemente próximo de b . Assim, se $|\lambda_1 - \lambda_0| \leq 1/4M^2$ segue que $1/2\|u\|_{[c,x]} \leq (|c_1| + |c_2|)M$, para todo x , e então u está em $L^2(a, b)$ em b . Uma demonstração similar pode ser feita para o caso em que φ_1 e φ_2 estão em $L^2(a, b)$ em a . ■

Lema 1.36 *Pelo menos uma solução (não-nula) de*

$$-\psi'' + V(x)\psi = \pm i\psi \quad (1.4)$$

está em $L^2(a, b)$ em a e pelo menos uma em $L^2(a, b)$ em b .

Demonstração: Sejam $a', b' \in \mathbb{R}$ de forma que $a < a' < b' < b$. Para o operador hermitiano $S\psi = -\psi'' + V\psi$, $\text{dom } S = \{\psi, \psi' \in \mathcal{AC}[a', b'] \subset L^2[a', b'] : \psi(a') = \psi'(a') = 0 = \psi(b') = \psi'(b')\}$, a' e b' são pontos regulares. Pelo Teorema 1.33, $n_-(S) = 2 = n_+(S)$. Assim, $\overline{\text{img}(S - iI)} = K_+(S)^\perp \neq L^2(a', b')$. Desde que $C_0^\infty(a', b') \sqsubseteq L^2[a', b']$, existe $\phi \in C_0^\infty(a', b')$ com $\phi \notin \text{img}(S - iI)$. Seja \tilde{H} uma extensão auto-adjunta de H , vale que $\text{img}(\tilde{H} - iI) = L^2(a, b)$. Portanto, existe $\psi \in \text{dom } \tilde{H}$ de forma que $(\tilde{H} - iI)\psi = \phi$. ψ não pode se anular identicamente em ambos intervalos (a, a') e (b', b) , caso contrário, $\psi \in \text{dom } S$ e $(S - iI)\psi = \phi$, o que é uma contradição.

Supomos que ψ não se anula identicamente em (a, a') (similarmente, se ψ não se anula identicamente em (b', b)). Então, $u := \psi|_{(a, a')}$ é uma solução de 1.4 que está em $L^2(a, b)$ em a . A construção da solução que está em $L^2(a, b)$ em b segue abaixo.

Consideremos o operador $R - iI := (\tilde{H} - iI)|_{\text{dom } R}$, $\text{dom } R = \{v \in \text{dom } \tilde{H} : v(x) = 0, \forall x \in [b', b]\}$ (o qual é denso em $L^2(a, a')$). Desde que $\bar{u} \in \text{dom } R^*$ e $(R^* + iI)\bar{u} = 0$, segue que $\text{img}(R - iI)$ não é um subconjunto denso em $L^2(a, a')$ e como acima existe $\phi \in C_0^\infty(a, a')$ com $\phi \notin \text{img}(R - iI)$. A auto-adjunção de \tilde{H} implica que existe $w \in \text{dom } \tilde{H}$ de forma que $(\tilde{H} - iI)w = \phi$. Finalmente, w não se anula indenticamente em $[b', b)$ desde que $\phi \notin \text{img}(R - iI)$. A solução não-nula que está em $L^2(a, b)$ em b é encontrada. ■

Corolário 1.37 *Se $n_-(H) = 0 = n_+(H)$, ou seja, H é essencialmente auto-adjunto, então a e b são pontos singulares.*

Demonstração: Supondo a regular, todas as soluções da equação estão em L^2 em a . Pelo Lema 1.36, existe pelo menos uma solução de 1.4 em L^2 em b e assim pelo

menos uma solução está em $L^2(a, b)$, ou seja, $n_+(H) \geq 1$. ■

Definição 1.38 O operador H é **limit circle em a** (resp. em b) se para algum $\lambda \in \mathbb{C}$, e, portanto, para todo $\lambda \in \mathbb{C}$, todas as soluções de

$$-\psi'' + V(x)\psi = \lambda\psi$$

estão em $L^2(a, b)$ em a . Se H não é limit circle em a , dizemos que ele é **limit point em a** (resp. em b).

Teorema 1.39 (Teorema de Weyl) *O operador H é essencialmente auto-adjunto se, e somente se, é limit point em a e b .*

Demonstração: Se H é essencialmente auto-adjunto, então $n_-(H) = 0 = n_+(H)$. Segue que H é limit point em a e b . A tarefa agora é mostrar que se H é limit point em a e b , então H é essencialmente auto-adjunto. Pelo Lema 1.27, a forma de fronteira de H^* é

$$\Gamma_{H^*}(\psi, \varphi) = W_b[\psi, \varphi] - W_a[\psi, \varphi], \quad \forall \psi, \varphi \in \text{dom } H^*.$$

Lembremos que H^* é auto-adjunto se, e somente se, $\Gamma \equiv 0$. Seja $c \in (a, b)$, definimos os operadores A e B com a mesma expressão de H mas com domínios $\text{dom } A = \{\varphi \in C^\infty(a, c) : \varphi(c) = 0, \exists \xi > 0, \varphi(x) = 0, \forall x \in (a, a + \xi)\}$ e $\text{dom } B = C_0^\infty(a, c)$. Desde que $B \subset A$, tem-se $\overline{B} \subset \overline{A}$.

Afirmamos que \overline{A} é auto-adjunto. De fato, por hipótese as soluções de $-\varphi'' + V\varphi = \pm i\varphi$ que estão em $L^2(a, b)$ em a constituem um subespaço unidimensional e desde que c é regular todas as soluções estão em $L^2(a, b)$ em c . Assim, $n_-(B) = 1 = n_+(B)$. Observemos que existem funções em $\text{dom } \overline{A}$ com $\varphi'(c) \neq 0$ e tais funções não estão em $\text{dom } \overline{B}$. Assim, \overline{A} é uma extensão hermitiana fechada própria de \overline{B} e, então, $n_-(\overline{A}) = 0 = n_+(\overline{A})$. Portanto, \overline{A} é auto-adjunto.

Sejam $\psi, \varphi \in \text{dom } H^*$. Escolhemos $\psi_c, \varphi_c \in C_0^\infty(a, b)$ de forma que ambas funções $\psi_2 := \psi + \psi_c$ e $\varphi_2 := \varphi + \varphi_c$ se anulem em c . Então, $\psi_2, \varphi_2 \in$

$\text{dom } A^* = \text{dom } \bar{A}$ e desde que $W_c[\psi_2, \varphi_2] = 0$ encontramos

$$\begin{aligned} W_a[\psi, \varphi] &= W_a[\psi_2 - \psi_c, \varphi_2 - \varphi_c] = W_a[\psi_2, \varphi_2] \\ &= W_a[\psi_2, \varphi_2] - W_c[\psi_2, \varphi_2] = -\Gamma_{\bar{A}}(\psi_2, \varphi_2) = 0, \end{aligned}$$

já que \bar{A} é auto-adjunto. Argumentos similares mostram que $W_b[\psi, \varphi] = 0$. Assim, Γ se anula identicamente em $\text{dom } H^*$ e a demonstração está completa. ■

Exemplo 1.4 Consideremos o operador $H\psi = -\psi'' + \frac{a}{x^2}\psi$ ($a > 0$), $\text{dom } H = C_0^\infty(0, \infty)$. As soluções de $H\psi = 0$ são

$$\psi_+(x) = x^{c_+} \quad \text{e} \quad \psi_-(x) = x^{c_-},$$

sendo $c_\pm = \frac{1 \pm \sqrt{1 + 4a}}{2}$. Desde que $c_+ > 0$, a função ψ_+ está em $L^2(0, \infty)$ em zero e não está em $L^2(0, \infty)$ em ∞ . No entanto, ψ_- está em $L^2(0, \infty)$ em zero se, e somente se, $c_- > -1/2$, ou seja, se, e somente se, $a < 3/4$.

Assim, se $a < 3/4$, H é limit circle em zero e, portanto, pelo Teorema de Weyl, não é essencialmente auto-adjunto. Se $a > 3/4$, H é limit point em zero e ∞ e, portanto, pelo Teorema de Weyl, é essencialmente auto-adjunto.

Capítulo 2

O Átomo de Hidrogênio 3-D

O Hamiltoniano de um elétron se movendo livremente em \mathbb{R}^3 é $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$. No entanto, devemos definir este operador como um operador auto-adjunto no espaço de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$. Começamos a nossa discussão com

$$(\dot{K}\phi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(x), \quad \text{dom } \dot{K} = C_0^\infty(\mathbb{R}^3).$$

É fácil verificar que \dot{K} é hermitiano. Em [2] também podemos encontrar a demonstração de que \dot{K} é essencialmente auto-adjunto e sua única extensão auto-adjunta é o operador

$$(K\phi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(x), \quad \text{dom } K = \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^3).$$

Se o elétron se move sob a influência do potencial atrativo de Coulomb $V(x) = -\frac{Ze^2}{|x|}$ o Hamiltoniano total é $K + V$.

Consideremos algumas observações. Dado um operador auto-adjunto (essencialmente auto-adjunto) T e um operador hermitiano B , a soma $T + B$ nem sempre é auto-adjunta (essencialmente auto-adjunta) em $\text{dom } T \cap \text{dom } B$. No entanto, o Teorema de Kato-Rellich nos fornece condições suficientes para que $T + B$ seja auto-adjunto (essencialmente auto-adjunto).

Teorema 2.1 (Kato-Rellich) *Seja T auto-adjunto (essencialmente auto-adjunto) e B hermitiano. Se B é T -limitado com $N_T(B) < 1$, então o operador*

$$\text{dom}(T + B) = \text{dom}T, \quad (T + B)\xi := T\xi + B\xi, \quad \forall \xi \in \text{dom}T,$$

é auto-adjunto (essencialmente auto-adjunto).

Demonstração: [2]. ■

Lembremos que B é T -limitado se $\text{dom}T \subset \text{dom}B$ e existem constantes $a, b \geq 0$ de forma que

$$\|B\xi\| \leq a\|T\xi\| + b\|\xi\|, \quad \forall \xi \in \text{dom}T.$$

O T -limite de B , denotado por $N_T(B)$, é o ínfimo dos a 's admissíveis. Mais tarde, Kato demonstra o seguinte teorema.

Teorema 2.2 (Kato) *Se $n \leq 3$ e $B \in L^2(\mathbb{R}^n) + L^\infty(\mathbb{R}^n)$ é uma função real, então B é K -limitado com $N_K(B) = 0$.*

Demonstração: [2]. ■

Os Teoremas 2.1 e 2.2 são de grande importância no estudo de operadores. No entanto, também são muito conhecidos e escolhemos por omitir as demonstrações.

Vamos aplicar o Teorema 2.2 aos operadores K e $V(x)$. Fixado $\varepsilon > 0$, escrevemos $V = V_0 + V_\infty$ sendo

$$V_0(x) = V(x)\chi_{[0,\varepsilon)}(|x|) \quad \text{e} \quad V_\infty(x) = V(x)\chi_{[\varepsilon,\infty)}(|x|).$$

É fácil verificar que $V_\infty \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$. O ponto principal é que $V_0(x) \in L^2(\mathbb{R}^3)$, mesmo com o potencial contendo a singularidade na origem. Mais precisamente, usando coordenadas esféricas,

$$\int_{\mathbb{R}^3} |V_0(x)|^2 dx^3 = Z^2 e^4 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^\varepsilon \frac{1}{r^2} r^2 dr = Z^2 e^4 4\pi\varepsilon < \infty.$$

Desde que $V(x) = -\frac{Ze^2}{|x|} \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ o Teorema de Kato-Rellich garante que o operador

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{|x|}, \quad \text{dom } H = \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^3), \quad (2.1)$$

é auto-adjunto. Aproveitando a discussão, desde que $V(x) = -\frac{Ze^2}{|x|} \in L^2(\mathbb{R}^3) + B_\infty^\infty(\mathbb{R}^3)$, o Teorema 1.16 garante que $\sigma_{\text{ess}}(H) = [0, \infty)$.

Devido à singularidade no ponto 0 o nosso objetivo neste capítulo é analisar o que acontece com o operador 2.1 retirando a origem de seu domínio. Especificamente, queremos saber se ele continua auto-adjunto. Não podemos repetir a mesma análise com o operador $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ no domínio $C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ (resp. $\mathcal{H}^2(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$) pois aqui ele não é essencialmente auto-adjunto (resp. auto-adjunto). Nossa idéia é estudar o operador 2.1 partindo do domínio $C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$. Assim, fica natural analisar sua decomposição em coordenadas esféricas, isto reduz o estudo à teoria de operadores diferenciais do Capítulo 1.

2.1 A Decomposição em Coordenadas Esféricas

Consideremos o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio 3-D

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{|x|}, \quad \text{dom } H = C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}). \quad (2.2)$$

O objetivo desta seção é caracterizar o operador 2.2 em coordenadas esféricas. Mais precisamente como segue.

Cada função $\phi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ pode ser considerada como uma função de r e duas variáveis

$\xi = (\theta, \varphi)$ na esfera unitária S^2 . Por exemplo, o ponto (x_1, x_2, x_3) em coordenadas esféricas fica $x_1 = r \sin \theta \cos \varphi$, $x_2 = r \sin \theta \sin \varphi$ e $x_3 = r \cos \theta$. Em termos destas variáveis,

$$\|\phi\|_2^2 = \int_{S^2} d\xi \int_0^\infty |\phi(r, \xi)|^2 r^2 dr \quad (d\xi = \sin \theta d\theta d\varphi).$$

Seja \mathcal{D} o conjunto de todas as funções que são combinações lineares finitas de produtos $f(r)w(\xi)$ com $f \in C_0^\infty(0, \infty) \subset L^2((0, \infty), r^2 dr)$ e $w \in L^2(S^2, d\xi)$. Devido a decomposição em coordenadas esféricas

$$L^2(\mathbb{R}^3) = L^2((0, \infty), r^2 dr) \otimes L^2(S^2, d\xi),$$

\mathcal{D} é um conjunto denso em $L^2(\mathbb{R}^3)$. Tomando $\phi(r, \xi) = f(r)w(\xi)$, o operador 2.2 toma a forma

$$Hf(r)w(\xi) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) f(r) - \frac{Ze^2}{r} f(r) \right] w(\xi) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{f(r)}{r^2} \mathcal{B}w(\xi),$$

sendo \mathcal{B} o operador de Laplace-Beltrami

$$(\mathcal{B}w)(\theta, \varphi) = -(\sin\theta)^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \left((\sin\theta) \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left((\sin\theta)^{-1} \frac{\partial w}{\partial \varphi} \right) \right],$$

agindo em $L^2(S^2)$. \mathcal{B} é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(S^2)$ e o conjunto de seus autovetores formam uma base ortonormal para $L^2(S^2)$. Mais precisamente,

$$(\mathcal{B}Y_{lm})(\theta, \varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (l \in \mathbb{N}, -l \leq m \leq l)$$

sendo $\{Y_{lm} : l \in \mathbb{N}, -l \leq m \leq l\}$ o conjunto das funções harmônicas esféricas. Para uma discussão detalhada sobre este operador de Laplace-Beltrami consulte [21].

Consideremos o subespaço $\mathcal{J}_l = [Y_{lm} : -l \leq m \leq l]$ correspondente ao autovalor $l(l+1)$. Definimos $L_l := L^2((0, \infty), r^2 dr) \otimes \mathcal{J}_l$, então

$$L^2((0, \infty), r^2 dr) \otimes L^2(S^2) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} L_l.$$

Seja $\mathcal{D}_l = \mathcal{D} \cap L_l$, então

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{|x|} \right) \Big|_{\mathcal{D}_l} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{r} \right] \otimes I_l,$$

sendo I_l o operador identidade agindo em \mathcal{J}_l . Nossa tarefa se reduz em verificar se para cada valor $l \in \mathbb{N}$, o operador

$$\dot{H}_l := -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{r},$$

é ou não é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(0, \infty) \subset L^2((0, \infty), r^2 dr)$.

Seja $U : L^2((0, \infty), r^2 dr) \rightarrow L^2(0, \infty)$ o operador unitário $(U\varphi)(r) = r\varphi(r)$. Notemos que U deixa $C_0^\infty(0, \infty)$ invariante e então definimos o operador

$$H_l := U\dot{H}_l U^{-1} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{r}, \quad (2.3)$$

$\text{dom } H_l = C_0^\infty(0, \infty) \subset L^2(0, \infty)$.

2.2 As Extensões Auto-Adjuntas

Consideremos inicialmente a família de operadores

$$\dot{K}_l = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right),$$

$\text{dom } \dot{K}_l = C_0^\infty(0, \infty) \subset L^2((0, \infty), r^2 dr)$, que não sofrem influência de potencial.

Definimos

$$K_l := U\dot{K}_l U^{-1} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right), \quad \text{dom } K_l = C_0^\infty(0, \infty).$$

O Teorema 1.26 diz que o operador K_l^* com a mesma lei de K_l e com domínio

$$\text{dom } K_l^* = \{\varphi \in L^2(0, \infty) : \varphi, \varphi' \in \mathcal{AC}(0, \infty), K_l^* \varphi \in L^2(0, \infty)\},$$

é o adjunto de K_l .

Proposição 2.3 K_0 não é essencialmente auto-adjunto, enquanto K_l é essencialmente auto-adjunto para $l \neq 0$.

Demonstração: A equação $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' = \frac{\hbar^2}{2m}i\varphi$ tem duas soluções linearmente independentes

$$\varphi_1(r) = e^{(1-i)r/\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad \varphi_2(r) = e^{-(1-i)r/\sqrt{2}}.$$

Desde que $\varphi_1 \notin \text{dom } K_0^*$, tem-se $n_-(K_0) = 1$. Similarmente, $n_+(K_0) = 1$. Portanto, K_0 não é essencialmente auto-adjunto. Analisemos agora as soluções de $K_l\varphi = 0$, ou seja,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\varphi = 0. \quad (2.4)$$

Desde que $l \neq 0$, as soluções são $\varphi_1(r) = r^{l+1}$ e $\varphi_2(r) = r^{-l}$. Fica fácil ver que K_l é limit point em 0 e limit point em ∞ . Portanto, K_l é essencialmente auto-adjunto para $l \neq 0$. ■

De acordo com o Exemplo 1.3 do Capítulo 2, todas as extensões auto-adjuntas de K_0 são dadas por

$$\text{dom } K_0^\lambda = \{\psi \in \text{dom } K_0^* : \psi(0) = \lambda\psi'(0)\}, \quad \lambda \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}.$$

Consideremos agora a família de operadores definida na Seção 2.1,

$$H_l = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{r}, \quad \text{dom } H_l = C_0^\infty(0, \infty).$$

Novamente, o Teorema 1.26 diz que o operador H_l^* com a mesma lei de H_l e com domínio

$$\text{dom } H_l^* = \{\varphi \in L^2(0, \infty) : \varphi, \varphi' \in \mathcal{AC}(0, \infty), H_l^*\varphi \in L^2(0, \infty)\},$$

é o adjunto de H_l .

Fixando l e m , denotamos por F_{lm} a projeção cuja imagem em $L^2(S^2)$ é o subespaço gerado por Y_{lm} . Definimos o operador $E_{lm} := I \otimes F_{lm}$ que é uma projeção em $L^2((0, \infty), r^2 dr) \otimes L^2(S^2)$. Vale

$$KE_{lm} = K_l \otimes F_{lm}. \quad (2.5)$$

Lembremos que $K = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, $\text{dom } K = \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^3)$. A demonstração da igualdade 2.5 pode ser encontrada em [2]. No teorema abaixo usaremos a notação V para ambos potenciais $-\frac{Ze^2}{|x|}$ em \mathbb{R}^3 e $-\frac{Ze^2}{r}$ em $(0, \infty)$.

Teorema 2.4 H_0 não é essencialmente auto-adjunto, enquanto H_l é essencialmente auto-adjunto para $l \neq 0$.

Demonstração: Seja $f \in C_0^\infty(0, \infty)$. Da igualdade 2.5 temos $U^{-1}f \otimes Y_{lm} \in \text{dom } K$. Desde que $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, o Teorema de Kato garante que existem $a, b \in \mathbb{R}$ de forma que

$$\|V(U^{-1}f \otimes Y_{lm})\| \leq a\|K(U^{-1}f \otimes Y_{lm})\| + b\|U^{-1}f \otimes Y_{lm}\|,$$

sendo que a pode ser tomado arbitrariamente pequeno. Por 2.5,

$$\begin{aligned} \|K(U^{-1}f \otimes Y_{lm})\| &= \|KE_{lm}(U^{-1}f \otimes Y_{lm})\| \\ &= \|(\dot{K}_l \otimes F_{lm})(U^{-1}f \otimes Y_{lm})\| \\ &= \|\dot{K}_l(U^{-1}f)\| \\ &= \|K_l f\|. \end{aligned}$$

Portanto, $\|Vf\| \leq a\|K_l f\| + b\|f\|$, ou seja, V é K_l -limitado com $N_{K_l}(V) = 0$. Para $l \neq 0$, a Proposição 2.3 diz que K_l é essencialmente auto-adjunto. Aplicando o Teorema de Kato-Rellich, o operador $H_l = K_l + V$, $\text{dom } H_l = \text{dom } K_l$, é essencialmente auto-adjunto.

Desde que V é K_0 -limitado com $N_{K_0}(V) = 0$ segue que V é H_0 -limitado com $N_{H_0}(V) < 1$ ¹. Se H_0 for essencialmente auto-adjunto, o operador $K_0 = H_0 - V$, $\text{dom } K_0 = \text{dom } H_0$, também será essencialmente auto-adjunto. Mas isto contradiz a Proposição 2.3. ■

Para cada $l \neq 0$ a única extensão auto-adjunta de H_l é H_l^* . No entanto, H_0 possui infinitas extensões auto-adjuntas.

¹Sejam A e B operadores densamente definidos num espaço de Hilbert \mathcal{H} de forma que B é A -limitado com $N_A(B) < 1/2$, então B é $(A+B)$ -limitado com $N_{(A+B)}(B) < 1$. Veja referência [2].

Observação 2.1 Cada função $\psi \in \text{dom } H_0^*$ é limitada numa vizinhança da origem. Se $\psi \in \text{dom } H_0^*$ e $\psi(0^+) = 0$, então $\psi'(x) = \mathcal{O}(1)$ quando $x \rightarrow 0^+$ [12]. No entanto, se $\psi(0^+) \neq 0$, a função ψ' possui uma divergência logarítmica quando $x \rightarrow 0^+$ [14].

O lema a seguir será útil para a caracterização das extensões auto-adjuntas de H_0 .

Lema 2.5 *Se $\phi \in \text{dom } H_0^*$, então o limite lateral*

$$\tilde{\phi}(0^+) := \lim_{r \rightarrow 0^+} \left(\phi'(r) + \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \phi(r) \ln(Ze^2r) \right)$$

é finito.

Demonstração: Para $\phi \in \text{dom } H_0^*$, a função $u := H_0^* \phi = -\frac{\hbar^2}{2m} \phi'' - \frac{Ze^2}{r} \phi \in L^2(0, \infty)$. Integrando u no intervalo $0 < r < c < \infty$, obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\phi'(c) - \phi'(r)) + \int_r^c -\frac{Ze^2}{t} \phi(t) dt = \int_r^c u(t) dt.$$

Fazendo integração por partes,

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} (\phi'(c) - \phi'(r)) - Ze^2 (\phi(c) \ln(Ze^2c) - \phi(r) \ln(Ze^2r)) \\ & + \int_r^c Ze^2 \phi'(t) \ln(Ze^2t) dt = \int_r^c u(t) dt, \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned} & \phi'(r) + \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \phi(r) \ln(Ze^2r) = \\ & \phi'(c) + \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \phi(c) \ln(Ze^2c) - \frac{2m}{\hbar^2} \int_r^c Ze^2 \phi'(t) \ln(Ze^2t) dt + \frac{2m}{\hbar^2} \int_r^c u(t) dt. \end{aligned}$$

Relembrando a Observação 2.1, desde que as integrais são finitas, para $r \rightarrow 0^+$, segue o resultado. ■

A partir de agora, usaremos a notação $\phi(0) = \phi(0^+)$. A fim de caracterizar todas as extensões auto-adjuntas de H_0 , consideremos sua forma de fronteira

$$\Gamma(\psi, \varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi(0) \overline{\varphi'(0)} - \psi'(0) \overline{\varphi(0)} \right).$$

Embora $\Gamma(\psi, \varphi)$ seja finito, cada limite lateral pode divergir. Com a ajuda do Lema 2.5 é fácil verificar que

$$\Gamma(\psi, \varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi(0)\overline{\tilde{\varphi}(0)} - \tilde{\psi}(0)\overline{\varphi(0)} \right).$$

Agora os limites laterais existem e são finitos.

Definimos as aplicações lineares $\rho_1, \rho_2 : \text{dom } H_0^* \rightarrow \mathbb{C}$:

$$\rho_1(\psi) = \psi(0) + i\tilde{\psi}(0) \quad \text{e} \quad \rho_2(\psi) = \psi(0) - i\tilde{\psi}(0).$$

Observemos que

$$\langle \rho_1(\psi), \rho_1(\varphi) \rangle - \langle \rho_2(\psi), \rho_2(\varphi) \rangle = \frac{4m}{\hbar^2} i\Gamma(\psi, \varphi), \quad \forall \psi, \varphi \in \text{dom } H_0^*,$$

ou seja, obtemos uma tripla de fronteira para H_0 .

Definimos os subespaços $X := \{\psi(0) + i\tilde{\psi}(0) : \psi \in \text{dom } H_0^*\}$ e $Y := \{\psi(0) - i\tilde{\psi}(0) : \psi \in \text{dom } H_0^*\}$. De acordo com o Teorema 1.24, domínios \mathcal{D} 's em que H_0^* é auto-adjunto estão relacionados com operadores unitários entre X e Y . Desde que $n_+(H_0) = 1 = n_-(H_0)$, tais operadores são a multiplicação por $e^{i\theta}$, $0 \leq \theta < 2\pi$. Portanto, dado $\theta \in [0, 2\pi)$, o domínio da extensão auto-adjunta de H_0 é formado por todas as funções $\psi \in \text{dom } H_0^*$ que satisfazem a condição $\rho_2(\psi) = e^{i\theta}\rho_1(\psi)$. A relação $\rho_2(\psi) = e^{i\theta}\rho_1(\psi)$ é

$$(1 - e^{i\theta})\psi(0) = i(1 + e^{i\theta})\tilde{\psi}(0).$$

Se $\theta \neq 0$ temos

$$\psi(0) = \lambda\tilde{\psi}(0), \quad \lambda = i\frac{(1 + e^{i\theta})}{(1 - e^{i\theta})} \in \mathbb{R}.$$

Todas as extensões auto-adjuntas H_0^λ de H_0 são caracterizadas pelas condições de contorno

$$\text{dom } H_0^\lambda = \{\psi \in \text{dom } H^* : \psi(0) = \lambda\tilde{\psi}(0)\}, \quad \lambda \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}.$$

O valor $\lambda = \infty$ é para incluir $\theta = 0$, que corresponde à condição de Neumann $\tilde{\psi}(0) = 0$. A condição de Dirichlet ocorre para $\lambda = 0$.

A “falta de auto-adjunção” de H_0 é intuitivamente explicada: a ausência da barreira centrífuga permite que o elétron se aproxime da origem, tal acontecimento ocorre com condições de contorno em $r = 0$.

Sabendo que H_l é essencialmente auto-adjunto para $l \neq 0$ e que H_0 possui infinitas extensões auto-adjuntas, sendo que conhecemos o domínio de cada uma delas, temos condições de enunciar o seguinte Teorema.

Teorema 2.6 *Todas as extensões auto-adjuntas de 2.2 são dadas por*

$$S^\lambda = \left[(U^{-1}H_0^\lambda U \otimes I_0) \bigoplus_{l=1}^{l=+\infty} (U^{-1}H_l^* U \otimes I_l) \right], \quad \lambda \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}. \quad (2.6)$$

Este teorema especifica todas as extensões auto-adjuntas do operador 2.2. Bem diferente de partir do domínio $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, no qual H é essencialmente auto-adjunto, em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ o operador H possui infinitas extensões auto-adjuntas.

2.3 O Espectro Discreto

Nesta seção vamos analisar os autovalores negativos das extensões auto-adjuntas do operador 2.2. Vamos precisar de algumas informações. Para um dado valor de $l(l+1)$ ($l \neq 0$), a correspondente equação que determina os níveis de energia é a equação radial

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(R''(r) + \frac{2}{r} R'(r) \right) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} - E \right) R(r) = 0. \quad (2.7)$$

Relembrando a transformação unitária U da Seção 2.1, se $R(r)$ é uma solução de 2.7 fica natural escrever $R(r) = \frac{u(r)}{r}$, com $u \in L^2(0, \infty)$. Assim, $u(r)$ é uma solução de

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(u''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) \right) - \left(\frac{Ze^2}{r} + E \right) u(r) = 0. \quad (2.8)$$

Multiplicando a equação 2.7 por r^2 e tomando o limite $r \rightarrow 0^+$ obtemos $\lim_{r \rightarrow 0} R(r) = 0$ e, conseqüentemente, $\lim_{r \rightarrow 0} u(r) = 0$. Portanto, as autofunções $u(r)$ de H_l^* ($l \neq 0$) são caracterizadas pela condição de contorno $u(0) = 0$.

Agora, para cada $\lambda \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$, temos condições de analisar o espectro discreto de S^λ . Devido a decomposição de S^λ em coordenadas esféricas, precisamos encontrar os autovalores de H_l ($l \neq 0$) e H_0^λ .

A análise que faremos agora é para o caso $\lambda = 0$. Lembremos que este caso corresponde à extensão auto-adjunta H_0^0 de H_0 cujo domínio é

$$\text{dom } H_0^0 = \{\psi \in \text{dom } H_0^* : \psi(0) = 0\}.$$

Para cada l , o primeiro passo é analisar a função de Green de $(H_l - E)^{-1}$ denotada por $G(r, s)$. Mais precisamente,

$$(H_l - E)^{-1}u(r) = \int_0^r G(r, s)u(s)ds.$$

Se $u \in \text{img}(H_l - E)$, o procedimento é encontrar as soluções de

$$(H_l - E)g = u \tag{2.9}$$

o obter uma expressão para $(H_l - E)^{-1}u = g$. Pelo método da variação dos parâmetros, a solução de 2.9 é dada por

$$g(r) = g_1(r) \int_0^r -\frac{g_2(s)u(s)}{W_r(g_1, g_2)}ds + g_2(r) \int_0^r \frac{g_1(s)u(s)}{W_r(g_1, g_2)}ds,$$

sendo g_1 e g_2 soluções da equação homogênea $(H_l - E)g = 0$, ou seja, da equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(g''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}g(r) \right) - \left(\frac{Ze^2}{r} + E \right) g(r) = 0. \tag{2.10}$$

Lembremos que $W_r(g_1, g_2)$ denota o wrosnkiano de g_1 e g_2 no ponto r . Tomando $a = \frac{2mZe^2}{\hbar^2}$, $b = \frac{2mE}{\hbar^2}$ e fazendo a mudança de variável $y = (-4b)^{1/2}r$, a equação 2.10 toma a forma

$$h''(y) + \left(-\frac{l(l+1)}{y^2} + \frac{\tau}{y} - \frac{1}{4} \right) h(y) = 0,$$

sendo $\tau = a/(-4b)^{1/2}$. Esta equação tem duas soluções linearmente independentes [1, 8]:

$$h_1(y) = \mathcal{M}_{\tau, \mu}(y) \quad \text{e} \quad h_2(y) = \mathcal{W}_{\tau, \mu}(y), \tag{2.11}$$

sendo $\mu = l + 1/2$. As funções $\mathcal{W}_{\tau,\mu}(y)$ e $\mathcal{M}_{\tau,\mu}(y)$ são conhecidas como **funções de Whittaker**. Estas funções são escritas em termos de funções hipergeométricas. Para mais detalhes e propriedades das funções de Whittaker indicamos [1, 8].

Voltando à variável original, desde que $W_r(g_1, g_2) = -\frac{(-4b)^{1/2}\Gamma(2l+2)}{\Gamma(l+1-\tau)}$, a única solução de 2.9 satisfazendo $g(0) = 0$ é

$$g(r) = \int_0^r \frac{\Gamma(l+1-\tau)}{(-4b)^{1/2}\Gamma(2l+2)} \left(\mathcal{W}_{\tau,\mu}((-4b)^{1/2}r) \mathcal{M}_{\tau,\mu}((-4b)^{1/2}s) - \mathcal{M}_{\tau,\mu}((-4b)^{1/2}r) \mathcal{W}_{\tau,\mu}((-4b)^{1/2}s) \right) u(s) ds,$$

sendo Γ a função Gama [1, 8]. Sendo assim, o kernel do “operador resolvente” $(H_l - E)^{-1}$ é

$$G(r, s) = \Theta(r - s) \frac{\Gamma(l+1-\tau)}{(-4b)^{1/2}\Gamma(2l+2)} \left[\mathcal{W}_{\tau,\mu}((-4b)^{1/2}r) \mathcal{M}_{\tau,\mu}((-4b)^{1/2}s) - (r \leftrightarrow s) \right],$$

sendo Θ a função de Heaviside ².

Os autovalores de H_l são os valores de E para os quais o operador $(H_l - E)^{-1}$ não está definido. Estes valores são obtidos dos pontos em que a função Gama Γ não está definida, ou seja, quando $l + 1 - \tau$ é um inteiro negativo. Para detalhes sobre a função Gama indicamos [1, 8]. Relembrando as definições de τ , a e b , se $l + 1 - \tau = -n$, $n = 0, 1, 2, \dots$, obtemos

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Quando $y \rightarrow \infty$, o comportamento assintótico das possíveis autofunções são [1, 8]:

$$\mathcal{W}_{\tau,\mu}(y) \sim e^{-y/2} y^\tau \quad \mathcal{M}_{\tau,\mu}(y) \sim e^{y/2} (-y)^{-\tau}.$$

Assim, a solução que nos interessa é somente $\mathcal{W}_{\tau,\mu}((-4b)^{1/2}r)$. Fixado $l \in \{0, 1, 2, \dots\}$ a autofunção de H_l correspondente ao autovalor E_n ($n \geq l + 1$) é

$$g_{nl}(r) = \mathcal{W}_{n,\mu}((-4b)^{1/2}r).$$

²A função de Heaviside Θ é a função definida como $\Theta(x) = 0$ para $x \leq 0$ e $\Theta(x) = 1$ para $x > 0$.

Agora temos condições de analisar as autofunções da extensão auto-adjunta S^0 de H . Lembrando que $L^2(\mathbb{R}^3) = L^2((0, \infty), r^2 dr) \otimes L^2(S^2, d\xi)$ e que as funções harmônicas esféricas formam uma base para $L^2(S^2, d\xi)$, as autofunções de S^0 são

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = r^{-1} g_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Observemos que dado $n \in \{1, 2, \dots\}$, l assume os valores $l = 0, 1, \dots, n-1$. Para n e l fixos, existem ainda $2l + 1$ possibilidades para m . Assim, dado um nível de energia E_n , existem

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

autofunções linearmente independentes $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$, ou seja, a multiplicidade do autovalor E_n é n^2 .

Os números n, l, m determinam completamente a função $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$. Fisicamente, eles são chamados, respectivamente, de **número quântico principal**, **número quântico orbital** e **número quântico magnético**.

Vamos fazer apenas algumas observações sobre os autovalores negativos de S^λ ($\lambda \neq 0$). A equação de autovalores é igual a 2.10 e as soluções dadas por 2.11.

A fim de encontrar os autovalores de H_l ($l \neq 0$), a análise é exatamente a mesma feita acima. No entanto, os autovalores de H_0^λ não podem ser obtidos pelo mesmo método. Lembremos que

$$\text{dom } H_0^\lambda = \{\psi \in \text{dom } H_0^* : \psi(0) = \lambda \tilde{\psi}(0)\}.$$

Sendo assim, a candidata a autofunção $\mathcal{W}_{\tau, 1/2}((-4b)^{1/2}r)$ de H_0^λ deve satisfazer a condição

$$\mathcal{W}_{\tau, 1/2}(0) = \lambda \lim_{r \rightarrow 0^+} \left(\frac{d}{dr} \mathcal{W}_{\tau, 1/2}((-4b)^{1/2}r) + \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \mathcal{W}_{\tau, 1/2}((-4b)^{1/2}r) \ln(Ze^2r) \right)$$

que é equivalente à

$$[\Gamma(l + 1 - \tau)]^{-1} = \lambda \omega(E) [\Gamma(l + 1 - \tau)]^{-1}, \quad (2.12)$$

sendo

$$\omega(E) := \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \left[\ln \left(\frac{\hbar^2}{2m} \tau \right) + 2\Psi(1) - \Psi(l+1-\tau) - 1 \right] - \frac{(-2Em)^{1/2}}{\hbar}$$

e $\Psi(r) := \frac{d}{dr}(\ln \Gamma(r))$. Estes cálculos foram obtidos tomando a representação da função $\mathcal{W}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}r)$ em série de potências [1, 8] e calculando os respectivos limites para $r \rightarrow 0^+$. Os autovalores negativos de H_0^λ são obtidos à partir da equação 2.12.

Capítulo 3

O Átomo de Hidrogênio 2-D

O Hamiltoniano que descreve um elétron se movendo livremente em \mathbb{R}^2 é $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$. No entanto, queremos definir este operador como sendo auto-adjunto em $L^2(\mathbb{R}^2)$. Então, consideremos

$$(\dot{K}\phi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(x), \quad \text{dom } \dot{K} = C_0^\infty(\mathbb{R}^2).$$

Este operador é essencialmente auto-adjunto e sua única extensão auto-adjunta é

$$(K\phi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(x), \quad \text{dom } K = \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^2).$$

Se o elétron sofre a influência do potencial atrativo de Coulomb $V(x) = -\frac{Ze^2}{|x|}$ é natural pensar que o Hamiltoniano total $K + V$ é auto-adjunto assim como acontece com o caso tridimensional. No entanto, o Teorema de Kato-Rellich não pode ser aplicado neste caso. O fato é que $V(x)\phi(x) \in L^2(\mathbb{R}^2)$ nem sempre é verdade para $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$. Por este motivo precisamos excluir a origem do domínio de definição de $K + V$.

O nosso objetivo neste capítulo é estudar o operador $K + V$ partindo do domínio $C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\})$. Seguindo a mesma idéia do Capítulo 2, vamos caracterizá-lo em coordenadas polares. Isto reduz o estudo aos operadores diferenciais do Capítulo

1. Assim, teremos condições de analisar se $K + V$ é ou não é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\})$.

3.1 A Decomposição em Coordenadas Polares

Consideremos o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio 2-D

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{|x|}, \quad \text{dom } H = C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\}). \quad (3.1)$$

Nesta seção, vamos caracterizá-lo em coordenadas polares.

Cada função $\phi \in L^2(\mathbb{R}^2)$ pode ser considerada como uma função de r e uma variável θ no círculo unitário S^1 . Em termos destas variáveis,

$$\|\phi\|_2^2 = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty |\phi(r, \theta)|^2 r dr,$$

sendo $d\theta$ denotando a medida usual em S^1 . Seja \mathcal{D} o conjunto de todas as funções que são combinações lineares finitas de produtos $f(r)g(\theta)$ com $f \in C(0, \infty) \subset L^2((0, \infty), r dr)$ e $g \in L^2(S^1, d\theta)$. Devido a decomposição em coordenadas polares

$$L^2(\mathbb{R}^2) = L^2((0, \infty), r dr) \otimes L^2(S^1, d\theta),$$

\mathcal{D} é um conjunto denso em $L^2(\mathbb{R}^2)$. Para funções do tipo $f(r)g(\theta)$, o operador 3.1 é dado por

$$\begin{aligned} Hf(r)g(\theta) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - \frac{Ze^2}{r} \right] f(r)g(\theta) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{Ze^2}{r} \right] f(r)g(\theta) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \mathcal{B}f(r)g(\theta), \end{aligned}$$

sendo \mathcal{B} o operador de Laplace-Beltrami

$$\mathcal{B} = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2},$$

agindo $L^2(S^1)$. \mathcal{B} é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(S^1)$ e o conjunto de seus autovetores formam uma base ortonormal para $L^2(S^1)$. Mais precisamente,

$$(\mathcal{B}g_l)(\theta) = -l^2 g_l(\theta), \quad g_l(\theta) = e^{il\theta} / \sqrt{2\pi} \quad (l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots).$$

Denotamos por $[g_l(\theta)]$ o subespaço gerado por $g_l(\theta)$. Seja $L_l := L^2((0, \infty), r dr) \otimes [g_l(\theta)]$, escrevemos

$$L^2((0, \infty), r dr) \otimes L^2(S^1) = \bigoplus_{l=-\infty}^{l=\infty} L_l.$$

Definimos $\mathcal{D}_l = \mathcal{D} \cap L_l$, então

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{|x|} \right) \Big|_{\mathcal{D}_l} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{r} \right] \otimes I_l,$$

sendo I_l o operador identidade agindo em $[g_l(\theta)]$. Precisamos somente verificar se para cada valor de l o operador

$$\dot{H}_l := -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{r},$$

é ou não é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(0, \infty) \subset L^2((0, \infty), r dr)$. Usando o operador unitário $U : L^2((0, \infty), r dr) \rightarrow L^2(0, \infty)$, $U(\varphi)(r) = r^{1/2}\varphi(r)$, temos

$$S_l := U \dot{H}_l U^{-1} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{1}{4} - l^2 \right) \frac{1}{r^2} \right] - \frac{Ze^2}{r}.$$

Notemos que U deixa $C_0^\infty(0, \infty)$ invariante e então definimos $\text{dom } S_l = C_0^\infty(0, \infty) \subset L^2(0, \infty)$.

3.2 As Extensões Auto-Adjuntas

Vamos estudar a família de operadores

$$S_l := U H_l U^{-1} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{1}{4} - l^2 \right) \frac{1}{r^2} \right] - \frac{Ze^2}{r},$$

$\text{dom } S_l = C_0^\infty(0, \infty) \subset L^2(0, \infty)$. O operador S_l^* com a mesma lei de S_l e com domínio

$$\text{dom } S_l^* = \{ \phi \in L^2(0, \infty) : \phi, \phi' \in \mathcal{AC}(0, \infty), S_l^* \phi \in L^2(0, \infty) \},$$

é o adjunto de S_l .

Proposição 3.1 *O operador S_0 não é essencialmente auto-adjunto, enquanto S_l é essencialmente auto-adjunto para $l \neq 0$.*

Demonstração: A demonstração será feita usando critérios de limit point e limit circle, então analisemos as soluções de $S_l\phi = i\phi$, ou seja,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi'' - \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{4} - l^2 \right) \frac{1}{r^2} + \frac{Ze^2}{r} + i \right] \phi = 0. \quad (3.2)$$

Tomando $a = \frac{2mZe^2}{\hbar^2}$, $b = \frac{2mi}{\hbar^2}$ e fazendo a mudança de variável $y = (-4b)^{1/2}r$, a equação 3.2 fica

$$\varphi'' + \left[\left(\frac{1}{4} - l^2 \right) \frac{1}{y^2} + \frac{\tau}{y} - \frac{1}{4} \right] \varphi = 0, \quad (3.3)$$

sendo $\tau = a/(-4b)^{1/2}$. A equação 3.3 tem duas soluções linearmente independentes [1, 8]:

$$\varphi_1(y) = \mathcal{M}_{\tau,|l|}(y) \quad \text{e} \quad \varphi_2(y) = \mathcal{W}_{\tau,|l|}(y).$$

O comportamento assintótico quando $|y| \rightarrow \infty$ é [1, 8]:

$$\varphi_1(y) \sim e^{y/2}(-y)^{-\tau} \quad \text{e} \quad \varphi_2(y) \sim e^{-y/2}y^\tau.$$

Desde que não existe $c \in \mathbb{R}$ de forma que $\varphi_2 \in L^2(c, \infty)$, segue que S_l é limit point em ∞ . Notemos que o comportamento assintótico quando $|y| \rightarrow \infty$ independe do valor de l , no entanto, o comportamento próximo da origem difere para $l = 0$ e $l \neq 0$. No caso $l = 0$,

$$\varphi_1(0^+) = 0 \quad \text{e} \quad \varphi_2(0^+) = 0.$$

Neste caso $\varphi_2 \in L^2(0, \infty)$ e ainda S_0 é limit circle em 0. Portanto, S_0 não é essencialmente auto-adjunto. Para o caso $l \neq 0$, $\varphi_1(0^+) = 0$ enquanto $\varphi_2(y)$ diverge tanto quanto

$$\sum_{k=0}^{2|l|-1} \frac{\Gamma(2|l| - k)}{k!} \Gamma(k - |l| - \tau + 1/2) (-y)^{-2|l|+k},$$

quando $y \rightarrow 0^+$. Portanto, S_l ($l \neq 0$) é limit point em 0. Pelo Teorema de Weyl, S_l é essencialmente auto-adjunto para $l \neq 0$. ■

Desde que S_0 não é essencialmente auto-adjunto precisamos caracterizar suas extensões auto-adjuntas. De acordo com a demonstração da proposição anterior, o subespaço de deficiência $K_-(S_0)$ é unidimensional, mais precisamente, gerado por $\phi_2(r) = \mathcal{M}_{\tau,0}((-4b)^{1/2}r)$. O subespaço $K_+(S_0)$ também é unidimensional e gerado por $\overline{\phi_2(r)}$. Por simplicidade, escrevemos $\phi_2 = \phi_-$ e $\overline{\phi_2} = \phi_+$. Segue, pelo Teorema 1.13, que para cada $\omega \in [0, 2\pi)$ existe uma extensão auto-adjunta associada a S_0 , ou seja, no domínio

$$\text{dom } S_0^\omega = \{\underline{\phi} + c(\phi_+ - e^{i\omega}\phi_-) : \underline{\phi} \in \text{dom } \overline{S}_0, c \in \mathbb{C}\},$$

o operador

$$S_0^\omega := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \left[\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{4} \right) \frac{1}{r^2} \right]$$

é uma extensão auto-adjunta de S_0 .

A Proposição 3.1 mostra que S_l é essencialmente auto-adjunto para $l \neq 0$, ou seja, sua única extensão auto-adjunta é $\overline{S}_l = S_l^*$. Também sabendo que S_0 possui infinitas extensões auto-adjuntas e conhecendo o domínio de cada uma delas, enunciamos o Teorema.

Teorema 3.2 *Todas as extensões auto-adjuntas de 3.1 são dadas por*

$$H^\omega = \left[\bigoplus_{l=-\infty}^{l=-1} (U^{-1} S_l^* U \otimes I_l) \bigoplus (U^{-1} S_0^\omega U \otimes I_0) \bigoplus \bigoplus_{l=1}^{l=+\infty} (U^{-1} S_l^* U \otimes I_l) \right],$$

com $\omega \in [0, 2\pi)$.

Poucos trabalhos sobre o átomo de hidrogênio 2-D aparecem na literatura. Não encontramos nada a respeito de extensões auto-adjuntas do problema. Diante a decomposição por coordenadas esféricas no caso tridimensional surgiu a idéia da decomposição por coordenadas polares no caso bidimensional.

3.3 O Espectro Discreto

Yang, Guo, Chan, Wong e Ching [28] estudam as soluções analíticas do átomo de hidrogênio bidimensional. Segundo estes autores, o “espectro contínuo” do átomo 2-D corresponde ao intervalo $[0, \infty)$ e o espectro discreto aos valores

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2} \frac{1}{(n - \frac{1}{2})^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.4)$$

Em nenhum momento eles comentam sobre extensões auto-adjuntas do problema. Como observado na introdução deste trabalho, o nosso principal interesse é estudar o átomo de hidrogênio unidimensional. Por este motivo, não entraremos em detalhes na discussão sobre o espectro do átomo de hidrogênio bidimensional.

Capítulo 4

O Átomo de Hidrogênio 1-D

O operador de Schrödinger unidimensional com um potencial de Coulomb tem sido muito discutido na literatura. Este operador atrai a atenção de muitos matemáticos porque contém um potencial aparentemente simples com uma singularidade “forte”. Este problema continua despertando interesse e, de certa forma, muita confusão.

Loudon [13] parece ter sido o primeiro a investigar de maneira mais sistemática este modelo e afirma que os níveis de energia do átomo de hidrogênio unidimensional são duas vezes degenerados, tendo uma autofunção par e uma ímpar para cada autovalor, exceto para o estado fundamental (que corresponde à energia infinita!) o qual possui apenas uma autofunção par.

Haines e Roberts [9] afirmam que os níveis de energia são não-degenerados. No entanto, existem autofunções ímpares que correspondem ao espectro discreto e autofunções pares que correspondem ao “espectro contínuo”.

Segue abaixo uma síntese da análise feita por Loudon, por Haines e Roberts e outros autores, mantendo, inclusive, algumas de suas imprecisões. Todas as afirmações podem ser encontradas em seus respectivos artigos. Adiante retomaremos uma postura matematicamente correta.

A equação que corresponde aos autovalores do átomo de hidrogênio

1-D é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \left(\frac{Ze^2}{|x|} + E \right) = 0. \quad (4.1)$$

Para os possíveis autovalores negativos, introduz-se a quantidade dimensional α definindo

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2\alpha^2}, \quad (4.2)$$

sendo $a_0 = \hbar^2/mZe^2$ o **comprimento de Bohr**. Fazendo a mudança de variável $z = 2x/\alpha a_0$, a equação 4.1 fica

$$\varphi''(z) + \left(\frac{\alpha}{|z|} - \frac{1}{4} \right) \varphi(z) = 0. \quad (4.3)$$

As funções de Whittaker $\mathcal{W}_{\alpha,1/2}(|z|)$ e $\mathcal{M}_{\alpha,1/2}(|z|)$ são soluções linearmente independentes de 4.3. Ambas tem limites finitos quando $z \rightarrow 0^\pm$. No entanto, quando $|z| \rightarrow \infty$, o comportamento assintótico é $\mathcal{M}_{\alpha,1/2}(|z|) \sim |z|^{-\alpha} e^{|z|/2}$ e $\mathcal{W}_{\alpha,1/2}(|z|) \sim |z|^\alpha e^{-|z|/2}$. Então, a solução conveniente é apenas $\varphi(z) = \mathcal{W}_{\alpha,1/2}(|z|)$.

De acordo com Loudon o problema de autovalores se reduz em encontrar os valores de α de forma que os limites laterais $\varphi(0^\pm)$ e $\varphi'(0^\pm)$ sejam finitos. Estas são as condições que Loudon exige para que φ seja considerada uma autofunção. Desde que φ tem sempre um limite finito quando $z \rightarrow 0^\pm$ o problema se reduz em estudar o comportamento de φ' próximo à origem. Uma análise detalhada feita em seu artigo mostra que se α é um inteiro positivo, então φ' tem um limite finito quando $z \rightarrow 0^\pm$. Mas o que acontece se α não for um inteiro positivo, existem outros valores de forma que $\varphi'(0^\pm)$ seja finito? A resposta é não. Para confirmar esta afirmação Loudon definiu a classe de potenciais

$$V_a(x) = -\frac{Ze^2}{|x| + a}, \quad a \in \mathbb{R}, \quad 0 < a < a_0, \quad (4.4)$$

também chamados de **potenciais suavizados**. Estes potenciais simulam, de alguma forma, a barreira centrífuga do caso tridimensional. Sua idéia foi resolver a equação de autovalores

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \left(\frac{Ze^2}{|x| + a} + E \right) = 0, \quad (4.5)$$

para depois reproduzir o potencial original com $a \rightarrow 0^+$. Fazendo as mudanças de variáveis

$$\begin{aligned} z &= \frac{2(a+x)}{\alpha a_0} && \text{para } x > 0, \\ z &= -\frac{2(a-x)}{\alpha a_0} && \text{para } x < 0, \end{aligned}$$

a equação que corresponde aos níveis de energia fica igual à equação 4.3. Como antes, a única solução aceitável é $\varphi(z) = \mathcal{W}_{\alpha,1/2}(|z|)$. No entanto, o domínio de definição de z é $|z| > \frac{2a}{\alpha a_0}$.

Trabalhando com esta nova classe de potenciais, segue a conclusão de Loudon: no limite $a \rightarrow 0^+$ tem-se $\alpha \rightarrow n$, sendo n um inteiro positivo. Combinações pares e ímpares de $\varphi(z)$ e $\varphi(-z)$ são construídas. Por este motivo, segue o fato de que cada autovalor tem multiplicidade dois. Quanto ao estado fundamental, que é obtido tomando $\alpha = 0$ em 4.3, a autofunção correspondente é apenas

$$\varphi(z) = e^{-|z|/2}.$$

Sendo $E = -\infty$ pertencente ao espectro do átomo de hidrogênio, foi conjecturado por Loudon que este operador não é limitado inferiormente. Apenas destacamos que, da teoria de operadores, o valor $-\infty$ não é considerado autovalor.

Numa crítica ao trabalho de Loudon, Haines e Roberts resolvem a equação 4.1 e consideram as soluções

$$\varphi_+(z) = B_+ \mathcal{W}_{\alpha,1/2}(z) \quad (z > 0) \quad \text{e} \quad \varphi_-(z) = B_- \mathcal{W}_{\alpha,1/2}(-z) \quad (z < 0).$$

Notemos aqui a presença das constantes B_+ e B_- a serem determinadas. Para $\varphi = \varphi_{\pm}$ ser uma autofunção, Haines e Roberts exigem apenas que ela seja contínua em $z = 0$. O problema de autovalores se reduz em encontrar condições sobre B_+ e B_- . Para $\alpha \neq 0, 1, 2, \dots$, a continuidade de φ em $z = 0$ é satisfeita se $B_- = B_+$. Tem-se assim uma classe de autofunções pares. Para $\alpha = 1, 2, \dots$, a continuidade de φ é automaticamente satisfeita não dando informações sobre B_- e

B_+ . Mas neste caso φ' é contínua em $z = 0$ e esta continuidade implica $B_+ = -B_-$. Desta forma outra classe de autofunções é obtida e neste caso são funções ímpares.

Segundo os autores, as autofunções encontradas incluem funções ligadas ao “espectro contínuo”. Esta propriedade não é uma característica normal em mecânica quântica. Por este motivo Haines e Roberts, seguindo a idéia de Loudon, decidiram estudar a classe de potenciais definidos em 4.5. As candidatas a autofunções são

$$\varphi_+(z) = B_+ \mathcal{W}_\alpha(z) \quad \text{e} \quad \varphi_-(z) = B_+ \mathcal{W}_\alpha(-z),$$

sendo que o domínio de definição de z é $|z| > \frac{2a}{\alpha a_0}$ e os sinais de $+$ e $-$ indicam, respectivamente, as regiões $x > 0$ e $x < 0$. Para o potencial suavizado Haines e Roberts exigem a continuidade de φ e φ' em $z = 0$.

Segue a conclusão de Haines e Roberts: Todas as autofunções ímpares do potencial original (Coulomb) podem ser obtidas como o limite de autofunções do potencial suavizado. No entanto, isto não acontece com as autofunções pares. Haines e Roberts se questionam: por qual motivo manter estas autofunções? Como resposta eles explicam: suponha que o sistema átomo de hidrogênio unidimensional (composto de um “próton” e um “elétron”) exista na natureza. Alguém poderia medir o “raio do próton” experimentalmente e assim o potencial para este modelo seria exatamente o potencial suavizado. Segue que o átomo de hidrogênio unidimensional tem autovalores de energia de dois tipos: (1) energias correspondentes às autofunções ímpares do potencial suavizado bem próximas das energias correspondentes às autofunções ímpares do potencial original; (2) energias correspondentes às autofunções pares do potencial suavizado não tendo correspondência alguma com as energias do potencial original que correspondem às autofunções pares. Por este motivo, Haines e Roberts acreditam que manter somente os níveis discretos de energia do potencial original não seria uma descrição satisfatória do problema físico.

Gomes e Zimmerman [7] discutem as autofunções pares $\psi(z) = \psi(-z)$

propostas por Haines e Roberts. Sendo ψ solução de

$$-\frac{d^2}{dz^2}\psi - \frac{1}{4}\psi + \frac{\alpha}{|z|}\psi = 0,$$

pode-se integrar esta equação de $-\varepsilon$ a ε obtendo

$$\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) - \frac{1}{4} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(z) dz + \alpha \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\psi(z)}{|z|} dz = 0. \quad (4.6)$$

O fato é que as autofunções pares propostas por Haines e Roberts não satisfazem a condição 4.6. Sob uma análise, Gomes e Zimmerman mostram que

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\psi(z)}{|z|} dz = \infty,$$

excluindo as autofunções ligadas ao “espectro contínuo”, segundo Haines e Roberts.

Notemos que houve um pouco de confusão na escolha de quais soluções podem ser consideradas como autofunção. Andrews [3] diz resolver o problema de soluções aceitáveis. Ele estuda a equação de Schrödinger para potenciais $V(x)$ que são contínuos q.t.p e $|V(x)| \rightarrow \infty$ quando $x \rightarrow 0^+$. Mais precisamente, considerando as seguintes classes de potenciais: a classe MS (mildly singular) com $\int_0 V(x) dx < \infty$; a classe S com $\int_0 x|V(x)| dx < \infty$ mas com $\int_0 V(y) dy = \infty$; a classe XS com $\int_0 x|V(x)| dx = \infty$ (notação: $\int_0 f(x) dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\varepsilon}^x f(x) dx$, $a > \varepsilon > 0$). De acordo com Andrews, ψ é uma autofunção se, e somente se, $\int_0 |\psi(x)|^2 V(x) dx < \infty$. No Apêndice A de seu artigo é argumentado que se V está na classe MS ou S, então a equação da energia tem duas soluções linearmente independentes, F e G , de forma que $F \sim x$ e $G \sim 1$ quando $x \rightarrow 0$. Assim, para a classe MS ambas soluções são aceitáveis, enquanto para a classe S somente a solução F é aceitável.

Andrews também afirma que quando somente uma solução é aceitável não pode existir fluxo de probabilidade não-nulo. De fato, desde que F é uma função real o fluxo $j(x) = i[\overline{F'(x)}F(x) - \overline{F(x)}F'(x)]$ é zero. Portanto, não pode haver fluxo na classe S, somente para a classe MS onde combinações complexas de F e G são construídas criando um fluxo não-nulo. A classe S inclui o átomo de hidrogênio

unidimensional $-1/|x|$, de acordo com Andrews, a singularidade em $x = 0$ atua com uma barreira impermeável.

Gesztesy [5] define rigorosamente o Hamiltoniano de Coulomb discutindo suas propriedades espectrais e investigando uma aproximação para elas. Em resumo, segue sua análise. Seja $V(x) = \frac{c}{|x|}$ ($c \in \mathbb{R}$), define-se

$$\dot{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad \text{dom } \dot{H} = C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\}).$$

Considere $\dot{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2}$, $\text{dom } \dot{H}_0 = C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\})$. Este operador possui infinitas extensões auto-adjuntas. Em particular, uma associada às condições de Dirichlet,

$$H_0\varphi = \dot{H}_0\varphi, \quad \text{dom } H_0 = \{\varphi \in \text{dom } \dot{H}_0^* : \varphi(0^+) = 0 = \varphi(0^-)\}.$$

É importante observarmos que o operador \dot{H}_0 está bem definido no domínio $\text{dom } \dot{H}_0 = C_0^\infty(\mathbb{R})$, onde é essencialmente auto-adjunto. Há uma particularidade quando se toma $\text{dom } \dot{H}_0 = C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\})$. Voltando à análise de Gesztesy, desde que V é H_0 -limitado com $N_{H_0}(V) = 0$, o operador

$$H := H_0 + V, \quad \text{dom } H = \text{dom } H_0,$$

é uma extensão auto-adjunta de \dot{H} . Como antes, define-se a classe de potenciais suavizados

$$V_a(x) = \frac{c}{|x| + a}, \quad a \in \mathbb{R}, \quad a > 0.$$

Estes potenciais são limitados e assim os operadores

$$H_a := H_0 + \frac{c}{|x| + a}, \quad \text{dom } H_a = \text{dom } H_0,$$

são auto-adjuntos. Gesztesy encontra informações sobre o espectro de H_a , em particular, para o caso $c < 0$ com $|ca| < 1$. Para uma análise sobre o espectro de H , ele demonstra o seguinte resultado: se $z \in \rho(H)$, então $z \in \rho(H_a)$ para a suficientemente pequeno e $R_z(H_a)$ converge fortemente para $R_z(H)$ quando $a \rightarrow 0^+$. Com

estes resultados, informações sobre o espectro de H são encontradas. Ao contrário de Loudon, Gesztesy mostrou que o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio é limitado inferiormente. Destacamos que apesar de uma rigorosa análise, Gesztesy trabalhou com uma extensão auto-adjunta particular do Hamiltoniano de Coulomb, ou seja, com funções satisfazendo as condições de Dirichlet.

Moshinsky [14] discute a permeabilidade do potencial $-1/x$. A equação da energia

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) - \frac{Ze^2}{x} \phi(x) = E\phi(x),$$

tem duas soluções linearmente independentes em cada região $x > 0$ e $x < 0$. Sob as mudanças de variáveis $E = (\hbar^2 k^2 / 2m)$ e $z = 2ik|x|$, as soluções são: $\mathcal{W}_{\lambda,1/2}(z)$ e $\mathcal{W}_{-\lambda,1/2}(-z)$ para $x < 0$ e $\mathcal{W}_{-\lambda,1/2}(z)$ e $\mathcal{W}_{\lambda,1/2}(-z)$ para $x > 0$ sendo $\lambda = (ikD)^{-1}$ e $D = \hbar^2(me^2Z)^{-1}$. No entanto, as soluções do problema são tomadas da forma

$$\begin{aligned} \phi_{\lambda}^{-}(z) &= \mathcal{W}_{\lambda,1/2}(z) - R(\lambda)\mathcal{W}_{-\lambda,1/2}(-z) & (x < 0), \\ \phi_{\lambda}^{+}(z) &= T(\lambda)\mathcal{W}_{\lambda,1/2}(-z) & (x > 0), \end{aligned}$$

sendo $R(\lambda)$ e $T(\lambda)$, respectivamente, os coeficientes de reflexão e transmissão. A restrição é que ϕ_{λ}^{\pm} e suas derivadas sejam contínuas em $z = 0$. Com estas exigências, Moshinsky demonstra a relação

$$|R(\lambda)|^2 + e^{2\pi/kD}|T(\lambda)|^2 = 1$$

e mostra que para os estados correspondentes às energias

$$E_n = -\frac{me^4Z^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

obtem-se $R(\lambda) = 0$, ou seja, não existe reflexão.

Roger Newton [17] faz uma crítica ao trabalho de Moshinsky. Seguindo o argumento de Andrews, em cada região $x > 0$ e $x < 0$ somente uma solução é aceitável, concluindo que o potencial $-\gamma/x$ é impermeável.

Os autores citados até o momento (com exceção de Gesztesy) não se preocuparam, em seus respectivos trabalhos, em definir o Hamiltoniano do átomo

de hidrogênio como um operador auto-adjunto no espaço de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$. *Acreditamos que a falta de um domínio, em que as autofunções deveriam satisfazer certas condições, é a causa principal de tantas contradições. No entanto, sabemos que infinitas extensões auto-adjuntas podem representar o mesmo Hamiltoniano inicial. Assim, podemos obter resultados diferentes de acordo com a extensão tomada. Os trabalhos citados abaixo apresentam um pouco mais de rigor matemático.*

Werner, Leschke e Müller [25], partindo do domínio minimal $C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\})$, afirmam ter caracterizado todas as extensões do Hamiltoniano de Coulomb. No entanto, apenas resultados são apresentados.

Kurasov [12] faz uma rigorosa análise com o potencial $-\gamma/x$ usando a teoria de distribuições. O operador de Schrödinger $H_k\psi = -\psi'' - \frac{\gamma}{x}\psi$ é definido no sentido do valor principal, mais precisamente

$$\text{dom } H_k = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) : PV \left(-\psi'' - \frac{\gamma}{x}\psi \right) \text{ define uma distribuição em } C_0^\infty(\mathbb{R}) \right\}.$$

Este domínio está contido no domínio do operador \dot{H}^* , sendo \dot{H} a restrição do operador H_k no conjunto $C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\})$. O Teorema 1 de seu artigo mostra que H_k é auto-adjunto e que $\psi \in \text{dom } H_k$ satisfaz a condição $\psi(0^-) = \psi(0^+)$. Kurasov comenta que os índices de deficiência de \dot{H} são $(2, 2)$ e que todas as extensões auto-adjuntas de \dot{H} podem ser construídas com a ajuda da teoria de von Neumann. No entanto, afirma que H_k é o único operador auto-adjunto correspondente ao potencial $-1/x$ pois $\text{dom } H_k$ é o “domínio natural” a ser tomado. Sobre permeabilidade e impermeabilidade, Kurasov afirma que este potencial é “permeável” no sentido que as condições de contorno correspondentes ao operador H_k juntam os valores das funções dos eixos positivo e negativo. No apêndice de seu artigo é argumentado que o operador de Schrödinger $H_c\psi = -\psi'' - \frac{\gamma}{|x|}\psi$ não pode ser definido no sentido do valor principal sendo, então, definido no domínio

$$\text{dom } H_c = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) : -\psi'' - \frac{\gamma}{|x|}\psi \text{ define uma distribuição em } C_0^\infty(\mathbb{R}) \right\}.$$

Seu Teorema A1 mostra que H_c é hermitiano mas não é auto-adjunto. Considerando o operador \dot{H}_c , que é a restrição de H_c no conjunto $C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\})$, tem-

se que o domínio de H_c está contido no domínio de \dot{H}_c^* . De acordo com Kurasov, é natural definir um operador auto-adjunto pela extensão de Friedrichs [18, 24] do operador H_c . Para concluir, Kurasov afirma que o potencial $-1/|x|$ é “impermeável” no sentido que a extensão de Friedrichs é escrita como soma direta de operadores definidos no eixo positivo e negativo.

Mais tarde, Werner, Leschke e Muller [26] criticam o trabalho de Kurasov pela particularidade do domínio tomado. Eles afirmam que se poderia aplicar a teoria de von Neumann ao operador \dot{H} . Isto produziria uma família de extensões auto-adjuntas sendo que operador H_k é um membro desta família. A teoria de von Neuman pode ser aplicada aos potenciais $-1/x$ e $-1/|x|$. Em ambos os casos a família pode conter membros descritos como penetráveis e impenetráveis (veja Seção 4.3). A auto-adjunção é somente uma propriedade de um Hamiltoniano exigido por axiomas de mecânica quântica. Somente ferramentas matemáticas não podem dizer qual membro da família deve ser escolhido como modelo de uma situação experimental. Não existe justificativa para a afirmação que a extensão auto-adjunta natural de \dot{H} é aquela construída no sentido das distribuições.

Devemos esquecer as notações utilizadas nesta discussão para não causar confusão com notações futuras.

Neste capítulo nos concentraremos em discutir o problema do átomo de hidrogênio unidimensional. Especificamente, considerando o operador

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{Ze^2}{|x|}, \quad \text{dom } H = C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\}), \quad (4.7)$$

abordaremos os seguintes assuntos:

- caracterizar todas as extensões auto-adjuntas de H tendo em vista que seus índices de deficiência são $(2, 2)$;
- estudar os autovalores negativos de tais extensões, sempre que possível, e analisar degenerescência dos autovalores;
- definir claramente o conceito de permeabilidade e impermeabilidade;

• selecionar uma extensão particular de H usando um critério dado por Wüst [27].

O objetivo é discutir soluções a essas questões, do ponto de vista matemático, até então, confusas e/ou contraditórias.

4.1 As Extensões Auto-Adjuntas

Nesta seção vamos caracterizar todas as extensões auto-adjuntas do operador 4.7. Devido a singularidade no ponto 0 e o domínio inicial $C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\})$ vamos considerar as restrições H_+ e H_- de H nos intervalos $(0, \infty)$ e $(-\infty, 0)$, respectivamente. Mais precisamente, escrevemos o espaço de Hilbert $L^2(\mathbb{R} \setminus \{0\})$ como a soma direta $L^2(\mathbb{R} \setminus \{0\}) = L^2(0, \infty) \oplus L^2(-\infty, 0)$ e

$$H = H_+ \oplus H_-, \quad \text{dom } H_\pm = C_0^\infty(0, \pm\infty).$$

Assim podemos estudar H_+ e H_- separadamente. Fica claro que uma extensão auto-adjunta de H não pode ser definida sem a especificação de uma condição de contorno na origem. A singularidade do potencial exige isto. Também fica claro porque devemos discutir sobre permeabilidade e impermeabilidade.

Partimos por analisar

$$H_+ = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{Ze^2}{x}, \quad \text{dom } H_+ = C_0^\infty(0, \infty). \quad (4.8)$$

O operador H_+^* com a mesma lei de H_+ e com domínio

$$\text{dom } H_+^* = \{\phi \in L^2(0, \infty) : \phi, \phi' \in \mathcal{AC}(0, \infty), H_+^* \phi \in L^2(0, \infty)\},$$

é o adjunto de H_+ . O próximo passo é encontrar os índices de deficiência. Vamos determinar a dimensão do subespaço $K_+(H_+)$ encontrando as soluções de

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi'' + \left(-\frac{Ze^2}{x} + i\right) \phi = 0 \quad (4.9)$$

que estão em $\text{dom } H_+^*$. Tomando $a = \frac{2mZe^2}{\hbar^2}$, $b = -\frac{2mi}{\hbar^2}$ e fazendo a mudança de variável $y = (-4b)^{1/2}x$, a equação 4.9 toma a forma

$$\varphi'' + \left(\frac{\tau}{y} - \frac{1}{4} \right) \varphi = 0,$$

sendo $\tau = a/(-4b)^{1/2}$. Esta equação tem duas soluções linearmente independentes [1, 8]:

$$\varphi_{1+}(y) = \mathcal{W}_{\tau,1/2}(y) \quad \text{e} \quad \varphi_{2+}(y) = \mathcal{M}_{\tau,1/2}(y).$$

As funções $\varphi_{1+}(y)$ e $\varphi_{2+}(y)$ tem limites finitos quando $y \rightarrow 0$. No entanto, o comportamento assintótico quando $|y| \rightarrow \infty$ é

$$\varphi_{1+}(y) \sim y^\tau e^{-y/2} \quad \text{e} \quad \varphi_{2+}(y) \sim (-y)^{-\tau} e^{y/2}.$$

Voltando à variável original, o subespaço de deficiência $K_+(H_+)$ é unidimensional gerado por $\varphi_{1+}(x) = \mathcal{W}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}x)$. O Teorema 1.33 garante que $n_+(H_+) = n_-(H_+)$. Assim, $K_-(H_+)$ é unidimensional gerado por $\overline{\varphi_{1+}(x)}$. Portanto, H_+ tem índices de deficiência (1, 1).

Similarmente, o operador H_-^* com a mesma lei de H_- e com domínio

$$\text{dom } H_-^* = \{ \phi \in L^2(-\infty, 0) : \phi, \phi' \in \mathcal{AC}(-\infty, 0), H_-^* \phi \in L^2(-\infty, 0) \},$$

é o adjunto de H_- . Os subespaços de deficiência $K_+(H_-)$ e $K_-(H_-)$ são unidimensionais gerados, respectivamente, por $\varphi_{1-}(x) = \mathcal{W}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}|x|)$ e $\overline{\varphi_{1-}(x)}$. Portanto, H_- tem índices de deficiência (1, 1).

De acordo com os resultados obtidos acima, o operador H^* com mesma lei de H e com domínio

$$\text{dom } H^* = \left\{ \phi \in L^2(\mathbb{R} \setminus \{0\}) : \phi, \phi' \in \mathcal{AC}(\mathbb{R} \setminus \{0\}), -\frac{\hbar^2}{2m} \phi'' - \frac{Ze^2}{|x|} \phi \in L^2(\mathbb{R} \setminus \{0\}) \right\},$$

é o adjunto de H . O subespaço de deficiência $K_+(H)$ tem dimensão 2. Especificamente, é gerado por

$$\psi_1(x) = \begin{cases} \varphi_{1+}(x) & \text{se } x > 0 \\ 0 & \text{se } x < 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad \psi_2(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x > 0 \\ \varphi_{1-}(x) & \text{se } x < 0 \end{cases}.$$

O subespaço $K_-(H)$ tem dimensão 2 e é gerado por $\overline{\psi}_1$ e $\overline{\psi}_2$. Portanto, H tem índices de deficiência (2, 2). O Teorema de von Neumann garante que H possui infinitas extensões auto-adjuntas.

Triplas de fronteira serão usadas para encontrar as extensões auto-adjuntas de H . No entanto, também vamos precisar do seguinte lema.

Lema 4.1 *Se $\phi \in \text{dom } H^*$, então os limites laterais*

$$\tilde{\phi}(0^\pm) := \lim_{x \rightarrow 0^\pm} \left(\phi'(x) \pm \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \phi(x) \ln(\pm Ze^2 x) \right)$$

são finitos. (Notemos a diferença de sinais na definição de $\tilde{\phi}(0^+)$ e $\tilde{\phi}(0^-)$)

A demonstração do Lema 4.1 aparece no Capítulo 2. Sejam $\psi, \varphi \in \text{dom } H^*$, a forma de fronteira de H é

$$\Gamma(\psi, \varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi(0^+) \overline{\varphi'(0^+)} - \psi'(0^+) \overline{\varphi(0^+)} - \psi(0^-) \overline{\varphi'(0^-)} + \psi'(0^-) \overline{\varphi(0^-)} \right).$$

Embora $\Gamma(\psi, \varphi)$ seja finito, cada limite lateral pode divergir. Usando o Lema 4.1 é fácil verificar que

$$\Gamma(\psi, \varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi(0^+) \overline{\tilde{\varphi}(0^+)} - \tilde{\psi}(0^+) \overline{\varphi(0^+)} - \psi(0^-) \overline{\tilde{\varphi}(0^-)} + \tilde{\psi}(0^-) \overline{\varphi(0^-)} \right).$$

Agora cada limite lateral é finito.

Definimos as aplicações lineares $\rho_1, \rho_2 : \text{dom } H^* \rightarrow \mathbb{C}^2$:

$$\rho_1(\psi) = \begin{pmatrix} \tilde{\psi}(0^+) + i\psi(0^+) \\ \tilde{\psi}(0^-) - i\psi(0^-) \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \rho_2(\psi) = \begin{pmatrix} \tilde{\psi}(0^+) - i\psi(0^+) \\ \tilde{\psi}(0^-) + i\psi(0^-) \end{pmatrix}.$$

Uma verificação direta mostra que

$$\langle \rho_1(\psi), \rho_1(\varphi) \rangle - \langle \rho_2(\psi), \rho_2(\varphi) \rangle = -\frac{4m}{\hbar^2} i\Gamma(\psi, \varphi), \quad \forall \psi, \varphi \in \text{dom } H^*,$$

e então uma tripla de fronteira para H é encontrada.

Aplicando o Teorema 1.24, desde que $n_-(H) = 2 = n_+(H)$, domínios \mathcal{D} 's em que H^* é auto-adjunto são caracterizados por matrizes unitárias 2×2 que

denotaremos por U . Tais domínios são formados por todas as funções $\psi \in \text{dom } H^*$ que satisfazem a condição $\rho_2(\psi) = U\rho_1(\psi)$. Lembremos que a forma geral de tais matrizes unitárias é

$$U = e^{i\theta} \begin{pmatrix} a & -\bar{b} \\ b & \bar{a} \end{pmatrix}, \quad \theta \in [0, 2\pi), \quad a, b \in \mathbb{C}, |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

A expressão $\rho_2(\psi) = U\rho_1(\psi)$ pode ser escrita na forma

$$(I - U) \begin{pmatrix} \tilde{\psi}(0^+) \\ \tilde{\psi}(0^-) \end{pmatrix} = -i(I + U) \begin{pmatrix} -\psi(0^+) \\ \psi(0^-) \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

O domínio da extensão auto-adjunta H_U de H é composto por todas as funções $\psi \in \text{dom } H^*$ que satisfazem a condição 4.10 e $H_U\psi = H^*\psi$. Vale lembrar que a correspondência entre as extensões auto-adjuntas de H e matrizes unitárias 2×2 é bijetora. Portanto, temos aqui a caracterização de todas as extensões auto-adjuntas de H .

No caso em que $(I - U)$ é invertível (similarmente, se $(I + U)$ é invertível) podemos escrever as condições de contorno como

$$\begin{pmatrix} \tilde{\psi}(0^+) \\ \tilde{\psi}(0^-) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} -\psi(0^+) \\ \psi(0^-) \end{pmatrix},$$

sendo $A = -i(I - U)^{-1}(I + U)$ uma matriz auto-adjunta 2×2 . Alguém pode argumentar se todas as extensões auto-adjuntas podem ser parametrizadas por matrizes auto-adjuntas B . A forma geral de tais matrizes é

$$B = \begin{pmatrix} \alpha & \zeta \\ \bar{\zeta} & \beta \end{pmatrix}, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}, \zeta \in \mathbb{C}.$$

Por exemplo, permitindo que algumas entradas assumam o valor ∞ , as condições de Dirichlet $\phi(0^-) = 0 = \phi(0^+)$ seriam obtidas tomando $\alpha = \beta = \infty$ e $\zeta = 0$. No entanto, é uma tarefa difícil cobrir alguns casos.

Fischer, Leschke e Müller [25] afirmam ter caracterizado todas as extensões auto-adjuntas de H . Segundo estes autores, existe uma correspondência

bijetora entre matrizes auto-adjuntas $B_{2 \times 2}$ e extensões auto-adjuntas de H . Mais precisamente, sendo B uma matriz auto-adjunta, o operador H_B com a mesma lei de H e

$$\text{dom } H_B = \left\{ \psi \in \text{dom } H^* : \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}(0^+) \\ \tilde{\varphi}(0^-) \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} \varphi(0^+) \\ \varphi(0^-) \end{pmatrix} \right\},$$

é uma extensão auto-adjunta de H . Todas são obtidas assim.

Os autores apenas apresentam estes resultados não dando detalhes sobre a análise feita. No entanto, diante da nossa caracterização, as extensões encontradas por Werner, Leschke e Müller constituem uma subfamília das extensões auto-adjuntas de H . Acreditamos que a representação destes autores não cobre todos os casos.

4.2 O Espectro Discreto

Nesta seção vamos analisar os autovalores negativos de algumas extensões auto-adjuntas de H . Alguns autores [9, 13] tem focado a atenção na viabilidade de autofunções pares ou ímpares devido à paridade do potencial $V(x) = -\frac{Ze^2}{|x|}$. Esta análise estaria correta se o potencial fosse contínuo em toda a reta. Outra questão é sobre a degenerescência dos autovalores. Se $U(x)$ é um potencial contínuo em \mathbb{R} , consideremos a equação de autovalores para o operador de Schrödinger unidimensional

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[U(x) - E]\psi = 0. \quad (4.11)$$

Os níveis de energia deste problema são não-degenerados. De fato, suponhamos ψ_1 e ψ_2 autofunções correspondentes ao mesmo autovalor E . Desde que ambas satisfazem a equação 4.11, obtemos

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2},$$

ou seja, $\psi_1''\psi_2 - \psi_1\psi_2'' = 0$. Integrando esta relação, temos

$$\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = \text{constante}.$$

Desde que ψ_1 e ψ_2 se anulam no infinito, a constante deve ser zero. Nestas condições, $\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = 0$. Nos pontos em que ψ_1 e ψ_2 são não-nulas podemos dividir por $\psi_1\psi_2$ e obtemos

$$\psi_1'/\psi_1 = \psi_2'/\psi_2. \quad (4.12)$$

Integrando novamente, temos

$$\psi_1 = c\psi_2, \quad (4.13)$$

sendo c uma constante. No entanto, a equação 4.12 pode não ser válida nos pontos em que $\psi_1\psi_2$ é zero. Segue que 4.13 pode, também, não ser verdade entre zeros adjacentes de $\psi_1\psi_2$. Neste caso existe a possibilidade da constante c mudar entre os zeros de ψ_1 e ψ_2 . Desde que $U(x)$ é contínuo em toda a reta, ψ_1 e ψ_2 também são contínuas. Assim, a constante c não muda, mesmo entre os zeros de ψ_1 e ψ_2 . Concluimos que os autovalores são não-degenerados. A discussão acima foi apenas para destacar o fato de que para potenciais singulares o problema da constante c ter valores diferentes realmente pode acontecer, pois, neste caso, as autofunções nem sempre são contínuas. É o que acontece com o potencial de Coulomb e, então, não podemos aplicar este resultado. A singularidade no ponto zero de $V(x) = -\frac{Ze^2}{|x|}$ não permite concluir que as autofunções sejam pares ou ímpares e que os autovalores sejam não-degenerados. O domínio de cada extensão auto-adjunta é caracterizado por condições de contorno na origem e são essas condições que vão dizer algo sobre o comportamento das autofunções e a multiplicidade dos autovalores.

Voltando à expressão 4.10, nossa primeira análise será para o caso $U = I$ que corresponde às condições de Dirichlet na origem. Denotamos por H_D o operador

$$H_D = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{Ze^2}{|x|}, \quad \text{dom } H_D = \{\phi \in \text{dom } H^* : \phi(0^+) = 0 = \phi(0^-)\}.$$

A tarefa agora é caracterizar os autovalores negativos de H_D . Para isto vamos analisar a função de Green de $(H_D - E)^{-1}$ denotada por $G(x, y)$, mais

precisamente

$$(H_D - E)^{-1}u(x) = \Theta(x) \int_0^x G(x, y)u(y)dy + \Theta(-x) \int_x^0 G(x, y)u(y)dy.$$

O procedimento será o mesmo aplicado no caso tridimensional. Seu $\in \text{img}(H_D - E)$, vamos encontrar as soluções de

$$(H_D - E)\phi = u \quad (4.14)$$

o obter uma expressão para $(H_D - E)^{-1}u = \phi$. Novamente, devido a singularidade no ponto 0, faremos nossa análise em $(-\infty, 0)$ e $(0, \infty)$ separadamente.

Para $x \in (0, \infty)$, usando o método da variação dos parâmetros, a solução de 4.14 é

$$\phi(x) = \phi_1(x) \int_0^x -\frac{\phi_2(y)u(y)}{W_x(\phi_1, \phi_2)}dy + \phi_2(x) \int_0^x \frac{\phi_1(y)u(y)}{W_x(\phi_1, \phi_2)}dy,$$

sendo ϕ_1 e ϕ_2 são soluções da equação homogênea $(H_D - E)\phi = 0$, ou seja, da equação

$$-\frac{h^2}{2m}\phi'' - \left(\frac{Ze^2}{x} + E\right)\phi = 0. \quad (4.15)$$

Tomando $a = \frac{2mZe^2}{h^2}$, $b = \frac{2mE}{h^2}$ e fazendo a mudança de variável $z = (-4b)^{1/2}x$, a equação 4.15 toma a forma

$$\varphi'' + \left(\frac{\tau}{z} - \frac{1}{4}\right)\varphi = 0,$$

sendo $\tau = a/(-4b)^{1/2}$. Esta equação tem duas soluções linearmente independentes

$$\varphi_1(z) = \mathcal{W}_{\tau, 1/2}(z) \quad \text{e} \quad \varphi_2(z) = \mathcal{M}_{\tau, 1/2}(z).$$

Lembremos que $\mathcal{W}_{\tau, 1/2}(z) \sim e^{-z/2}z^\tau$ e $\mathcal{M}_{\tau, 1/2}(z) \sim e^{z/2}(-z)^{-\tau}$, quando $z \rightarrow \infty$. Voltando à variável original, desde que $W_x(\phi_1, \phi_2) = -\frac{(-4b)^{1/2}}{\Gamma(1-\tau)}$, a única solução de 4.14 satisfazendo $\phi(0^+) = 0$ é

$$\begin{aligned} \phi(x) = \int_0^x \frac{\Gamma(1-\tau)}{(-4b)^{1/2}} & \left(\mathcal{W}_{\tau, 1/2}((-4b)^{1/2}x) \mathcal{M}_{\tau, 1/2}((-4b)^{1/2}y) - \right. \\ & \left. \mathcal{M}_{\tau, 1/2}((-4b)^{1/2}x) \mathcal{W}_{\tau, 1/2}((-4b)^{1/2}y) \right) u(y)dy. \end{aligned}$$

Similarmente, para $x \in (-\infty, 0)$, a única solução satisfazendo $\phi(0^-) = 0$ é

$$\phi(x) = \int_x^0 \frac{\Gamma(1-\tau)}{(-4b)^{1/2}} \left(\mathcal{W}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}|x|) \mathcal{M}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}|y|) - \mathcal{M}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}|x|) \mathcal{W}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}|y|) \right) u(y) dy.$$

Finalmente, a função de Green do “operador resolvente” $(H_D - E)^{-1}$ é

$$G(x, y) = \Theta(xy) \frac{\Gamma(1-\tau)}{(-4b)^{1/2}} \left[\Theta(|x| - |y|) \mathcal{W}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}|x|) \mathcal{M}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}|y|) - (x \leftrightarrow y) \right].$$

Os valores de E para os quais $(H_D - E)^{-1}$ não existe são os autovalores de H_D . Eles são obtidos dos pontos em que a função Gama Γ não está definida, ou seja, quando $1 - \tau$ é um inteiro negativo. Relembrando as definições de a , b e τ , se $1 - \tau = -n$, $n = 0, 1, 2, \dots$, obtemos

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots.$$

Os autovalores E_n são duas vezes degenerados e a base $\{\varphi_{n,1}, \varphi_{n,2}\}$ do autoespaço correspondente é

$$\varphi_{n,k}(x) = \Theta((-1)^k x) \mathcal{W}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}|x|), \quad k = 1, 2.$$

Observação 4.1 Os autovalores negativos de outras extensões auto-adjuntas de H não podem ser analisados da mesma forma. Os exemplos abaixo mostram casos particulares, as observações a seguir serão importantes para compreendê-los. Definimos

$$\omega(E) := \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \left[\ln \left(\frac{\hbar^2}{2m} \tau \right) + 2\Psi(1) - \Psi(1 - \tau) - 1 \right] - \frac{(-2Em)^{1/2}}{\hbar}$$

sendo que $[\Gamma(1 - \tau)]^{-1}$ e $\pm\omega(E)[\Gamma(1 - \tau)]^{-1}$ são, respectivamente, os valores correspondentes aos limites laterais $\lim_{x \rightarrow 0^\pm} \mathcal{W}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}|x|)$ e

$$\lim_{x \rightarrow 0^\pm} \left(\frac{d}{dx} \mathcal{W}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}|x|) \pm \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \mathcal{W}_{\tau,1/2}((-4b)^{1/2}|x|) \ln(\pm Ze^2 x) \right).$$

Fixada uma matriz unitária U , a candidata à autofunção deve satisfazer as condições dadas em 4.10.

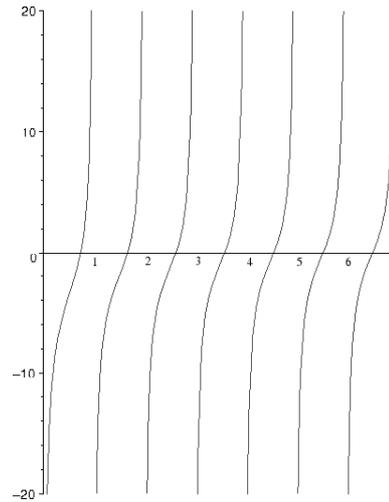


Figura 4.1: Gráfico da função $\omega(E)$, para $E < 0$, como uma função de τ .

Exemplo 4.1 Tomando $\theta = \frac{\pi}{2}$, $a = 1$ e $b = 0$ obtemos a matriz unitária

$$U = i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Relembrando a Observação 4.1, os valores de E para os quais $\omega(E) = -1$ (veja Gráfico 4.1) são autovalores de H_U com multiplicidade dois. O autoespaço correspondente é gerado por

$$\varphi_k(x) = \Theta((-1)^k x) \mathcal{W}_{\tau, 1/2}((-4b)^{1/2}|x|), \quad k = 1, 2.$$

Exemplo 4.2 Tomando $\theta = \frac{\pi}{2}$, $a = i$ e $b = 0$ obtemos

$$U = i \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}.$$

Relembrando a Observação 4.1, os valores de E para os quais $\omega(E) = 0$ (veja Gráfico 4.1) são autovalores de H_U com multiplicidade um. O autoespaço correspondente é gerado apenas por

$$\varphi(x) = \Theta(x) \mathcal{W}_{\tau, 1/2}((-4b)^{1/2}|x|).$$

Estes exemplos mostram que o comportamento das autofunções não estão relacionadas com a paridade do potencial $V(x) = \frac{Ze^2}{|x|}$. Destacamos também a questão da multiplicidade dos autovalores. Vimos a existência de autofunções que não são pares e não são ímpares e a presença de autovalores degenerados e não-degenerados. Estas características são determinadas pelas condições de contorno exigidas pela singularidade.

4.3 Densidade de Corrente

A divisão do eixo x em duas regiões, devido a singularidade no ponto zero, tem causado muita discussão. Alguns autores consideram a singularidade como uma barreira impermeável [3, 12] enquanto outros como uma barreira permeável [14]. A verdade é que alguns autores não deixam claro o conceito de permeabilidade para uma possível análise. O que faremos nesta seção é tentar esclarecer este conceito. Vamos considerar $\hbar = m = 1$ para simplificar os cálculos.

Fixada uma extensão auto-adjunta H_U de H , uma ferramenta útil na discussão de permeabilidade é a **densidade de corrente** $j(x)$ que em uma dimensão é definida por

$$j(x) = \frac{i}{2}(\varphi(x)\overline{\varphi'(x)} - \varphi'(x)\overline{\varphi(x)}), \quad \varphi \in \text{dom } H_U.$$

Embora $j(x)$ dependa apenas de $\varphi \in \text{dom } H_U$, observamos que a **densidade de probabilidade** $\rho(x, t) := |\psi(t, x)|^2$ e a densidade de corrente satisfazem a equação de continuidade

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t, x)|^2 + \frac{\partial}{\partial x}j(t, x) = 0.$$

Esta equação está diretamente relacionada com a lei de conservação de probabilidade.

Para cada $\varphi \in \text{dom } H_U$, uma integração por partes usando o valor

principal mostra que

$$0 = \langle H_U \varphi, \varphi \rangle - \langle \varphi, H_U \varphi \rangle = i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [j(\varepsilon) - j(-\varepsilon)].$$

Concluimos que a função $j(x)$ pode ser definida de modo que seja contínua na origem. Do ponto de vista físico esta condição significa que a densidade de corrente de um elétron incidente do menos infinito até a origem é igual a densidade de corrente de um elétron incidente do mais infinito até a origem. É fácil verificar que

$$j(x) = \text{Im}(\varphi'(x)\overline{\varphi(x)}), \quad \varphi \in \text{dom } H_U.$$

Nosso interesse é saber o que acontece com o elétron quando ele se aproxima da origem. Como já observado, os limites laterais $j(0^+)$ e $j(0^-)$ existem e $j(0^-) = j(0^+) =: j(0)$. Escrevemos

$$j(0) = \lim_{x \rightarrow 0^+} \text{Im}(\varphi'(x)\overline{\varphi(x)}) = \lim_{x \rightarrow 0^-} \text{Im}(\varphi'(x)\overline{\varphi(x)}).$$

Assim, $j(0) = 0$, $\forall \varphi \in \text{dom } H_U$, significa que o elétron é refletido quando se aproxima da origem, ou seja, podemos dizer que a singularidade atua como uma barreira impermeável.

Como antes $\varphi'(0^+)$ e $\varphi'(0^-)$ podem divergir. Usando novamente o Lema 4.1, uma simples verificação mostra que

$$j(0) = \lim_{x \rightarrow 0^+} \text{Im}(\tilde{\varphi}(x)\overline{\varphi(x)}) = \lim_{x \rightarrow 0^-} \text{Im}(\tilde{\varphi}(x)\overline{\varphi(x)}).$$

Esta última relação garante que $j(0) < \infty$. Para estudar densidade de corrente de uma extensão auto-adjunta H_U de H , dividimos nossa análise em três casos.

Caso 1. $(I - U)$ é invertível. Faremos um estudo detalhado deste caso, os outros podem ser analisados similarmente. Desde que $A = -i(I - U)^{-1}(I + U)$ é uma matriz auto-adjunta, as condições de contorno da extensão auto-adjunta H_U de H

podem ser escritas na forma

$$\begin{pmatrix} \tilde{\varphi}(0^+) \\ \tilde{\varphi}(0^-) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \zeta \\ \bar{\zeta} & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\varphi(0^+) \\ \varphi(0^-) \end{pmatrix} \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{R}, \zeta \in \mathbb{C}),$$

sendo α , ζ e β dependendo dos elementos a e b da matriz U e de $\theta \in [0, 2\pi)$. Obtemos as condições

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} \tilde{\varphi}(x) = -\alpha \lim_{x \rightarrow 0^+} \varphi(x) + \zeta \lim_{x \rightarrow 0^-} \varphi(x) \quad (4.16)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0^-} \tilde{\varphi}(x) = -\bar{\zeta} \lim_{x \rightarrow 0^+} \varphi(x) + \beta \lim_{x \rightarrow 0^-} \varphi(x) \quad (4.17)$$

Escolhemos a equação 4.16 e multiplicamos por $\lim_{x \rightarrow 0^+} \overline{\varphi(x)}$. Obtemos

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} \tilde{\varphi}(x) \overline{\varphi(x)} = -\alpha \lim_{x \rightarrow 0^+} |\varphi(x)|^2 + \zeta \lim_{x \rightarrow 0^+} \varphi(-x) \overline{\varphi(x)}.$$

Assim,

$$j(0) = \lim_{x \rightarrow 0^+} \text{Im}(\tilde{\varphi}(x) \overline{\varphi(x)}) = \lim_{x \rightarrow 0^+} \text{Im}(\zeta \varphi(-x) \overline{\varphi(x)}).$$

Em consequência, a escolha $\zeta = 0$ implica $j(0) = 0$, $\forall \varphi \in \text{dom } H_U$, o que significa, fisicamente, que as regiões $x > 0$ e $x < 0$ estão separadas pela singularidade. Encontramos uma família de operadores em que a singularidade atua como uma barreira impermeável. Se $\zeta \neq 0$, certamente existe $\varphi \in \text{dom } H_U$ de forma que $j(0) \neq 0$ e, portanto, existe a possibilidade do elétron ser transmitido ao se aproximar da origem.

O Exemplo 4.1 corresponde à matriz auto-adjunta

$$-i(I - U)^{-1}(I + U) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Nossa análise garante que a singularidade da extensão auto-adjunta correspondente H_U não permite que o elétron seja transmitido ao se aproximar da origem.

Caso 2. $(I + U)$ é invertível. Neste caso, $A = i(I + U)^{-1}(I - U)$ também é uma matriz auto-adjunta. Escrevemos as condições de contorno da extensão auto-adjunta

H_U de H na forma

$$\begin{pmatrix} \alpha & \zeta \\ \bar{\zeta} & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}(0^+) \\ \tilde{\varphi}(0^-) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\varphi(0^+) \\ \varphi(0^-) \end{pmatrix} \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{R}, \zeta \in \mathbb{C}),$$

sendo que os valores α , ζ e β dependem dos elementos a e b da matriz U e de $\theta \in [0, 2\pi)$. A tabela abaixo mostra a densidade de corrente no ponto 0 sob possíveis valores de α , ζ e β .

Tabela 4.1: Densidade de corrente. Caso $(I + U)$ invertível.

$\alpha, \zeta, \beta \neq 0$	$j(0) = \text{Im} \left(-\frac{\zeta}{\alpha} \lim_{x \rightarrow 0^-} \tilde{\varphi}(x) \overline{\varphi(-x)} \right)$
$\zeta = 0$	$j(0) = 0$
$\zeta \neq 0$ e $\alpha = 0$	$j(0) = \text{Im} \left(-\frac{1}{\zeta} \lim_{x \rightarrow 0^+} \varphi(x) \overline{\varphi(-x)} \right)$
$\zeta \neq 0$ e $\beta = 0$	$j(0) = \text{Im} \left(\frac{1}{\zeta} \lim_{x \rightarrow 0^-} \varphi(x) \overline{\varphi(-x)} \right)$

Concluimos que a densidade de corrente no ponto zero é nula se, e somente se, $\zeta = 0$.

Caso 3. $(I + U)$ e $(I - U)$ são não-invertíveis. Este é o caso em que a matriz U é da forma

$$U = \begin{pmatrix} -a & b \\ \bar{b} & a \end{pmatrix}, \quad a \in \mathbb{R}, b \in \mathbb{C}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

A densidade de corrente no ponto 0 é nula se, e somente se, $b = 0$, ou seja, se U é a matriz

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Se $b \neq 0$, obtemos

$$j(0) = \text{Im} \left(\frac{b}{1+a} \lim_{x \rightarrow 0^-} \tilde{\varphi}(x) \overline{\varphi(-x)} - \frac{ib}{(1+a)} \lim_{x \rightarrow 0^-} \varphi(x) \overline{\varphi(-x)} + i \frac{1-a}{1+a} \lim_{x \rightarrow 0^+} |\varphi(x)|^2 \right)$$

e certamente existe $\varphi \in \text{dom } H_U$ de forma que $j(0) \neq 0$.

Exemplo 4.3 Consideremos a seguinte extensão auto-adjunta de H :

$$H_D \psi = H^* \psi, \quad \text{dom } H_D = \{\psi \in \text{dom } H^* : \psi(0^+) = 0 = \psi(0^-)\}.$$

Pela definição de densidade de corrente no ponto zero, podemos observar que $j(0) = 0, \forall \psi \in \text{dom } H_D$. Assim, para esta extensão auto-adjunta, não existe possibilidade de transmissão.

Exemplo 4.4 Consideremos a extensão auto-adjunta H_U de H correspondente a matriz unitária

$$U = i \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}.$$

O domínio de H_U é formado por todas as funções $\psi \in \text{dom } H^*$ que satisfazem

$$\begin{pmatrix} \tilde{\psi}(0^+) \\ \tilde{\psi}(0^-) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & -i \\ i & \sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\psi(0^+) \\ \psi(0^-) \end{pmatrix}.$$

Combinando estas condições com a definição de densidade de corrente no ponto zero, podemos reescrever

$$j(0) = \lim_{x \rightarrow 0^+} \text{Im}(-i\psi(-x)\overline{\psi(x)}).$$

Os valores de E para os quais $\omega(E) = -\sqrt{2}$ são autovalores de H_U de multiplicidade dois. As autofunções correspondentes são

$$\varphi_k(x) = \Theta((-1)^k x) \mathcal{W}_{\tau, 1/2}((-4b)^{1/2}|x|), \quad k = 1, 2.$$

Tomando $\psi(x) = \varphi_1(x) + \varphi_2(x)$, segue que

$$j(0) = \lim_{x \rightarrow 0^+} \text{Im}(-i\psi(-x)\overline{\psi(x)}) = -[\Gamma(1 - \tau)]^{-2} \neq 0,$$

ou seja, existe a possibilidade do elétron ser transmitido ao se aproximar da origem (veja Seção 4.2 para o comportamento assintótico das autofunções quando $x \rightarrow 0^+$).

Concluimos que existem extensões auto-adjuntas em que a singularidade atua como uma barreira impermeável e outras em que a singularidade atua como uma barreira permeável. Vale lembrar que Andrews [3] define o fluxo de probabilidade como sendo $j(x) = i[\overline{F'(x)}F(x) - \overline{F(x)}F'(x)]$ mas considera o cálculo apenas para autofunções. É claro que para autovalores não-degenerados o fluxo é nulo pois a autofunção correspondente é real. No entanto, nossa definição exige que, dado uma extensão auto-adjunta H_U de H , a densidade de corrente $j(x)$ deve ser analisada para toda $\varphi \in \text{dom } H_U$. Andrews também comenta que no caso de autovalores degenerados combinações complexas podem ser construídas criando um fluxo não-nulo. Vimos no Exemplo 4.1 a existência de autovalores degenerados e uma densidade de corrente nula. Isto mostra que o argumento de Andrews está incorreto. Nossa análise deixa claro que o conceito de permeabilidade está diretamente relacionado com as entradas da matriz unitária U e não com a multiplicidade dos autovalores. Apenas como observação destacamos a análise de Moshinsky [14] que, apesar de um interessante estudo sobre permeabilidade, considera as “autofunções” $\mathcal{W}_\lambda(-z)$ e $\mathcal{W}_\lambda(z)$ que não estão em $L^2(\mathbb{R} \setminus \{0\})$.

Esta seção esclarece que o conceito de permeabilidade e impermeabilidade não está relacionado apenas com a singularidade na origem, que é o mais natural a se pensar num primeiro momento, mas sim com as condições de contorno que ela exige.

4.4 Uma Aproximação

Nesta seção seguimos como referência [5] onde Gesztesy estuda a classe de potenciais suavizados, mas agora com um domínio mais geral. O Hamiltoniano de um elétron se movendo livremente em \mathbb{R} é o operador auto-adjunto

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad \text{dom } H_0 = \mathcal{H}^2(\mathbb{R}).$$

Definimos a família de operadores auto-adjuntos

$$H_a = H_0 - \frac{Ze^2}{|x| + a}, \quad \text{dom } H_a = \text{dom } H_0 \quad (a > 0).$$

Vamos mostrar que o limite forte do gráfico (veja apêndice A.1) de H_a é igual a H_D ou, equivalentemente, o resolvente de H_a converge fortemente para o resolvente de H_D quando $a \rightarrow 0^+$. Para isto vamos precisar da descrição de $\sigma(H_a)$. Lembremos que H_D é extensão auto-adjunta de H caracterizada pelas condições de Dirichlet na origem.

Lema 4.2 *Para $a/a_0 < 1$, os autovalores de H_a são aproximados por*

$$\begin{aligned} E_0^{(e)}(a) = E_0(a) &\approx -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} [2 \ln(a_0/a)]^2 \\ E_n^{(e)} &\approx -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2 n^2} \left(1 - \frac{2}{n \ln(a_0/a)}\right) \quad n = 1, 2, \dots \\ E_n^{(o)} &\approx -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2 n^2} \left(1 - \frac{4a}{na_0}\right) \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

sendo (e) e (o) indicando os autovalores correspondentes às autofunções pares e ímpares, respectivamente. (Lembremos que a_0 é o comprimento de Bohr)

Demonstração: Como vimos na introdução deste capítulo, a equação de autovalores

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) - \left(\frac{Ze^2}{|x| + a} + E \right) \varphi(x) = 0,$$

tem como única solução aceitável a função $\varphi(z) = \mathcal{W}_{\alpha, 1/2}(|z|)$. Lembremos que o intervalo de definição e z é $|z| > \frac{2a}{\alpha a_0}$ e as variáveis são $E = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2 \alpha^2}$ e $a_0 = \frac{\hbar^2}{mZe^2}$.

Desde que o potencial $-\frac{Ze^2}{|x| + a}$ é par, as soluções para valores positivos e negativos de x podem se juntar na origem formando autofunções pares ou autofunções ímpares. Assim, os autovalores de H_a são obtidos dos valores de α para os quais φ se torna uma função par ou uma função ímpar, ou seja, sob as condições

$$\left. \frac{d}{dz} \mathcal{W}_{\alpha, 1/2}(z) \right|_{\frac{2a}{\alpha a_0}} = 0 \quad (\text{autofunções pares}) \quad (4.18)$$

$$\mathcal{W}_{\alpha,1/2}\left(\frac{2a}{\alpha a_0}\right) = 0 \quad (\text{autofunções ímpares}). \quad (4.19)$$

Usando a expressão em série de potências de $\mathcal{W}_{\alpha,1/2}(z)$ [1, 8], mantendo somente os termos dominantes quando $z = \frac{2a}{\alpha a_0}$, as condições 4.18 e 4.19 tornam-se, respectivamente,

$$\ln\left(\frac{2a}{\alpha a_0}\right) + \Psi(1 - \alpha) = 0 \quad (4.20)$$

$$\Psi(1 - \alpha) \frac{2a}{\alpha a_0} - \frac{1}{\alpha} = 0. \quad (4.21)$$

Desde que estamos considerando $a/a_0 < 1$, as condições 4.20 e 4.21 admitem solução somente para valores de α próximos de inteiros positivos $n = 1, 2, \dots$. Desde que

$$\Psi(1 - \alpha) \rightarrow \frac{1}{\alpha - n} \quad (\alpha \rightarrow n),$$

as condições 4.20 e 4.21 tornam-se, respectivamente,

$$\alpha = n + \frac{1}{\ln(a_0/a)} \quad \text{e} \quad \alpha = n + \frac{2a}{a_0}.$$

Substituindo α em $E = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2\alpha^2}$ os autovalores $E_n^{(e)}(a)$ e $E_n^{(o)}(a)$, $n = 1, 2, \dots$, são obtidos por aproximações.

Para valores de α próximos de 0 a equação 4.21 não admite solução¹. No entanto, assumindo $z = \frac{2a}{\alpha a_0} < 1$, $\Psi(1 - \alpha)$ não é um fator importante na representação em série de $\frac{d}{dz}\mathcal{W}_{\alpha,1/2}(|z|)$ e $1/\alpha$ torna-se o termo dominante em α . A condição 4.20 fica

$$\frac{1}{2\alpha} + \ln\left(\frac{2a}{a_0\alpha}\right) = 0. \quad (4.22)$$

Esta equação pode ser escrita da forma

$$\alpha = \frac{1}{2\ln(a_0/a)}.$$

¹Haines e Roberts [9] mostram que para $\alpha < 1$ a função $\mathcal{W}_{\alpha,1/2}(|z|)$ nunca se anula. Vamos assumir este resultado pois a demonstração parece ser bastante técnica não fornecendo informações adicionais, além de sua conclusão, sobre o assunto.

Com este valor de α , encontramos a energia do estado fundamental

$$E_0(a) = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} [2 \ln(a_0/a)]^2.$$

■

Desde que o potencial $-\frac{Ze^2}{|x|+a}$ é contínuo em \mathbb{R} , a não-degenerescência dos autovalores segue da discussão da Seção 4.2. Para demonstrar a convergência de H_a para H_D no sentido forte dos resolventes vamos usar um critério dado por Wüst [27].

Teorema 4.3 *Para $\text{Im } z \neq 0$, $R_z(H_a)$ converge fortemente para $R_z(H_D)$ quando $a \rightarrow 0^+$.*

Demonstração: Vamos aplicar o Teorema A.6 à sequência de operadores auto-adjuntos $\{H_a\}_{a \in J}$, sendo J um intervalo da forma $J = (0, b]$ ($b \in \mathbb{R}$). Com a ajuda do Lema 4.2, escolhemos b de modo que o autovalor $E_0(b)$ de H_b satisfaça $E_0(b) < -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$. Assim, para cada $a \in J$, vale $\sigma(H_a) \setminus \{E_0(a)\} \subset \left[-\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}, \infty\right)$. Tomemos $\lambda \in \left(E_0(b), -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}\right)$. Nestas condições, $\lambda \in \rho(H_a)$, $\forall a \in J$. Desde que H_a ($a \in J$) é auto-adjunto, vale

$$\|R_\lambda(H_a)\varphi\| \leq \frac{1}{d(\sigma(H_a), \lambda)} \|\varphi\|, \quad \forall \varphi \in \text{img}(H_a - \lambda I),$$

ou seja,

$$\|(H_a - \lambda I)\psi\| \geq d(\sigma(H_a), \lambda) \|\psi\|, \quad \forall \psi \in \text{dom } H_a.$$

Tomando $\alpha = \inf_{a \in J} \{d(\sigma(H_a), \lambda)\}$, segue que

$$\|(H_a - \lambda I)\psi\| \geq \alpha \|\psi\|, \quad \forall a \in J, \psi \in \text{dom } H_a.$$

A condição (b) do Teorema A.6 é satisfeita. Seja $\psi \in \mathcal{H}^2(\mathbb{R})$. A sequência $\{\psi_a\}_{a \in J}$ ($\psi_a = \psi$, $\forall a \in J$) satisfaz $\psi_a \rightarrow \psi$ com $\psi_a \in \text{dom } H_a$. No entanto, a sequência $\{H_a\psi_a\}_{a \in J}$ converge se, e somente se, $\psi(0) = 0$. De fato, pelo

teorema da convergência dominda,

$$\begin{aligned}
\lim_{a \rightarrow 0^+} \|(H_a - H_D)\psi\|^2 &= \lim_{a \rightarrow 0^+} \int_{\mathbb{R}} |(H_a - H_D)\psi(x)|^2 dx \\
&= \lim_{a \rightarrow 0^+} \int_{\mathbb{R}} \left| \left(-\frac{Ze^2}{|x| + a} + \frac{Ze^2}{|x|} \right) \psi(x) \right|^2 dx \\
&= \int_{\mathbb{R}} \lim_{a \rightarrow 0^+} \left| \left(-\frac{Ze^2}{|x| + a} + \frac{Ze^2}{|x|} \right) \psi(x) \right|^2 dx \\
&= 0
\end{aligned}$$

se, e somente se, $\psi \in \text{dom } H_0 \cap \text{dom } H_D = \text{dom } H_D$. Portanto, $H_D = g - \lim_{a \rightarrow 0^+} H_a$ e a condição (a) do Teorema A.6 é satisfeita. Desde que

$$H_{a_1} - H_{a_2} = -\frac{Ze^2}{|x| + a_1} + \frac{Ze^2}{|x| + a_2} \geq 0,$$

sempre que $0 < a_2 < a_1 \leq b$, as condições (c)-(e) também são satisfeitas. Nestas condições $H_D = R(\lambda)^{-1} + \lambda I$ sendo que $R(\lambda) := s - \lim_{a \rightarrow 0^+} R_\lambda(H_a)$. Aplicando o Teorema 1.11, segue o resultado. ■

Quando $a \rightarrow 0^+$ o estado fundamental $E_0(a)$ de H_a tende a $-\infty$ e por esta razão foi conjecturado por Loudon [13] que o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio unidimensional não é limitado inferiormente. No entanto, desde que as autofunções de H_D devem satisfazer a condição de Dirichlet no ponto zero, o estado fundamental $E_0(a)$ desaparece no limite $a \rightarrow 0^+$, ou seja, não está contido no espectro de H_D . Fica claro que a conjectura dada por Loudon está incorreta e que o valor $-\infty$ não corresponde à energia fundamental de H_D . Da aproximação de H_a para o operador H_D no sentido usual, todos os autovalores de H_D são obtidos pelo limite de $a \rightarrow 0^+$ dos autovalores de H_a . Como esperado, estes valores coincidem com os autovalores encontrados na Seção 4.2.

Como argumentado em [26], a questão de qual extensão auto-adjunta de H é a mais adequada não pode ser respondida somente sob considerações matemáticas, argumentos físicos devem ser considerados uma vez que extensões auto-adjuntas diferentes descrevem fenômenos físicos diferentes [20]. O Teorema A.6 é apenas um critério a fim de selecionar uma extensão auto-adjunta de H .

Klaus [11], inspirado no trabalho de Gesztesy [5], demonstra o seguinte resultado: para $\text{Im } z \neq 0$, $R_z(H_a)$ converge uniformemente para $R_z(H_D)$ quando $a \rightarrow 0^+$. Não apresentaremos a demonstração pois é uma abordagem essencialmente técnica que parece não trazer esclarecimentos adicionais (além de sua conclusão, é claro). Este resultado será útil para a caracterização do espectro essencial das extensões auto-adjuntas de H .

4.5 O Espectro Essencial

Para cada $a > 0$ o espectro essencial de H_a é dado por $\sigma_{ess}(H_a) = [0, \infty)$. Basta observar-mos que $V(x) = -\frac{Ze^2}{|x| + a} \in L^2(\mathbb{R}) + B_\infty^\infty(\mathbb{R})$ e então aplicar o Teorema 1.16. Da convergência de H_a para H_D no sentido uniforme dos resolventes o Teorema 1.17 garante que $\sigma_{ess}(H_D) = [0, \infty)$. Para concluir, aplicamos a Teorema 1.18 e assim $\sigma_{ess}(H_U) = [0, \infty)$, para toda matriz unitária $U_{2 \times 2}$. O espectro essencial não muda de acordo com a extensão auto-adjunta tomada. Como vimos, esta característica não ocorre com o espectro discreto.

Capítulo 5

Potenciais Soluções da Equação de Laplace

Este capítulo é dedicado aos operadores de Schrödinger cujos potenciais são obtidos como solução fundamental da equação de Laplace

$$\Delta V = 0.$$

Alguns autores acreditam que são estes os potenciais a representarem o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio. Mais precisamente, $-\frac{1}{4\pi} \frac{Ze^2}{|x|}$ no caso tridimensional; $\frac{e^2}{2\pi} \ln|x|$ no caso bidimensional; $\frac{e^2}{2}|x|$ no caso unidimensional. Detalhes sobre como encontrar as soluções fundamentais da equação de Laplace podem ser encontradas em [4, 23].

Neste capítulo vamos fazer alguns breves comentários sobre os potenciais acima. O objetivo é fazer uma comparação com alguns dos resultados obtidos para o potencial de Coulomb.

5.1 O Potencial tridimensional $-\frac{1}{4\pi} \frac{Ze^2}{|x|}$

Como já observado no Capítulo 2, considerando o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio em \mathbb{R}^3 como o operador

$$\dot{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{1}{4\pi} \frac{Ze^2}{|x|}, \quad \text{dom } \dot{H} = C_0^\infty(\mathbb{R}^3), \quad (5.1)$$

o Teorema de Kato-Rellich garante que \dot{H} é essencialmente auto-adjunto e sua única extensão auto-adjunta é

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{1}{4\pi} \frac{Ze^2}{|x|}, \quad \text{dom } H = \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^3).$$

Este operador possui ambos espectro discreto e essencial não-vazios.

5.2 O Potencial bidimensional $\frac{e^2}{2\pi} \ln |x|$

Nesta seção vamos fazer uma síntese do trabalho de Gesztesy e Pittner [6] o qual diz respeito ao potencial bidimensional $\frac{e^2}{2\pi} \ln |x|$. Sugerindo [10, 22] para uma consulta, os autores enunciam o seguinte teorema.

Teorema 5.1 *O operador*

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{e^2}{2\pi} \ln |x|, \quad \text{dom } H = C_0^\infty(\mathbb{R}^2), \quad (5.2)$$

é essencialmente auto-adjunto.

Por conveniência, Gesztesy e Pittner estudam o operador 5.2 em $C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\})$. Decompondo o espaço de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^2)$ em coordenadas polares (veja Seção 3.1), o estudo se reduz aos operadores unidimensionais

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l^2}{r^2} \right) + \frac{e^2}{2\pi} \ln r, \quad l = 0, 1, 2, \dots,$$

com domínio $C_0^\infty(0, \infty) \subset L^2((0, \infty), r dr)$. Estes operadores são transformados unitariamente na família $\{H_l : l = 0, 1, 2, \dots\}$:

$$H_l = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U_l(r), \quad U_l(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(l^2 - \frac{1}{4} \right) \frac{1}{r^2} + \frac{e^2}{2\pi} \ln r$$

com domínio $C_0^\infty(0, \infty)$ contido no espaço de Hilbert usual $L^2(0, \infty)$. Segundo os autores, H_l é limit point em ∞ para $l = 0, 1, 2, \dots$ e limit point em zero para $l = 1, 2, \dots$; o operador H_0 é limit circle em zero. Aplicando o Teorema de Weyl, vale o seguinte resultado: H_l é essencialmente auto-adjunto para $l \neq 0$, enquanto H_0 não é essencialmente auto-adjunto.

Trabalhando com esta família de operadores, Gesztesy e Pittner enunciam o Teorema:

Teorema 5.2 *Para $l = 0, 1, 2, \dots$, os operadores H_l são limitados inferiormente e possuem espectro essencial vazio.*

Segundo os autores, é conveniente tomar a extensão de Friedrichs de H_0 para obter equivalência com o operador essencialmente auto-adjunto H definido em $C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$.

5.3 O Potencial unidimensional $\frac{e^2}{2}|x|$

Consideremos o operador de Schrödinger unidimensional

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{e^2}{2}|x|, \quad \text{dom } H = C_0^\infty(\mathbb{R}).$$

O operador H^* com a mesma lei de H e com domínio

$$\text{dom } H^* = \{\phi \in L^2(0, \infty) : \phi, \phi' \in \mathcal{AC}(\mathbb{R}), H^*\phi \in L^2(\mathbb{R})\},$$

é o adjunto de H . Com a ajuda do teorema abaixo vamos analisar se H é ou não é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R})$.

Teorema 5.3 *Seja $H = -\Delta + V$, $\text{dom } H = C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Se $V \in L_{loc}^2(\mathbb{R}^n)$, é limitado inferiormente e*

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} V(x) = \infty,$$

então H é essencialmente auto-adjunto e $\sigma_{ess}(H) = \emptyset$.

Demonstração: [20] ■

Desde que o potencial $V(x) = \frac{e^2}{2}|x|$ satisfaz as condições do Teorema 5.3, H é essencialmente auto-adjunto e $\sigma_{\text{ess}}(H) = \emptyset$. Assim, o espectro de H é formado apenas por autovalores isolados de multiplicidade finita. Então, vamos resolver a equação de autovalores

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi'' + \left(\frac{e^2}{2}|x| - E\right)\phi = 0. \quad (5.3)$$

Esta equação tem duas soluções linearmente independentes [19]:

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= Ai \left[\left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^{2/3} \left(\frac{me^2}{\hbar^2}|x| - \frac{2Em}{\hbar^2}\right) \right] \quad \text{e} \\ \phi_2(x) &= Bi \left[\left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^{2/3} \left(\frac{me^2}{\hbar^2}|x| - \frac{2Em}{\hbar^2}\right) \right]. \end{aligned}$$

As funções Ai e Bi são conhecidas como **funções de Airy**. Para detalhes sobre o comportamento assintótico e os zeros das funções de Airy indicamos [19]. Estas informações serão úteis para a caracterização dos autovalores de H .

O comportamento assintótico das funções $Ai(y)$ e $Bi(y)$ quando $y \rightarrow \infty$ é

$$Ai(y) \sim \frac{e^{-2/3y}}{2\sqrt{\pi}y^{1/4}} \quad \text{e} \quad Bi(y) \sim \frac{e^{2/3y}}{2\sqrt{\pi}y^{1/4}}.$$

A solução interessa é somente $\phi_1(x)$. Desde que $V(x) = \frac{e^2}{2}|x|$ é um potencial par, uma solução de 5.3 deve ser ou par ou ímpar. Assim, se ϕ é uma autofunção, então $\phi(0) = 0$ ou $\phi'(0) = 0$. Nestas condições,

$$\phi_1(0) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad -\frac{2mE}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^{2/3} \quad \text{é um zero da função } Ai(x).$$

Os zeros da função $Ai(x)$ formam uma sequência a_1, a_2, \dots , que satisfazem a condição

$$a_n \sim - \left[\frac{3}{8}\pi(4n-1) \right]^{2/3} \quad (n \rightarrow \infty).$$

Portanto,

$$E_n \sim \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{me^2}{\hbar^2} \frac{3\pi}{8} (4n-1) \right]^{2/3}.$$

Por outro lado,

$$\phi_1'(0) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad -\frac{2mE}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2}{me^2} \right)^{2/3} \quad \text{é um zero da função } Ai(x).$$

Novamente, os zeros de $\frac{d}{dx} Ai(x)$ formam uma sequência b_1, b_2, \dots , que satisfazem a condição

$$b_n \sim - \left[\frac{3}{8} \pi (4n-3) \right]^{2/3} \quad (n \rightarrow \infty).$$

Portanto,

$$E_n \sim \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{me^2}{\hbar^2} \frac{3\pi}{8} (4n-3) \right]^{2/3} \quad (n \rightarrow \infty).$$

5.4 Uma Comparação

Para os operadores de Schrödinger cujos potenciais são obtidos como solução fundamental da equação de Laplace, temos os resultados:

- (i) essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ com ambos espectro discreto e essencial não-vazios;
- (ii) essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$ com espectro puramente discreto;
- (iii) essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R})$ com espectro puramente discreto.

No entanto, para os operadores de Schrödinger cujo potencial é o de Coulomb, obtemos os resultados:

(i) índices de deficiência $(0, 0)$ em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ com ambos espectro discreto e essencial não-vazios;

(ii) índices de deficiência $(1, 1)$ em $C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\})$;

(iii) índices de deficiência $(2, 2)$ em $C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\})$ com ambos espectro discreto e essencial não-vazios.

Apêndice A

g-Convergência

Seja \mathcal{H} um espaço de Hilbert e $\{A_t\}_{t \in J}$ ($J = \mathbb{N}$ ou $J = [t_0, \infty)$ com $t_0 \in \mathbb{R}$) uma família de operadores auto-adjuntos em \mathcal{H} . O principal objetivo deste apêndice é encontrar condições para $\{A_t\}_{t \in J}$ de forma que um operador limite exista e seja auto-adjunto. Como referência indicamos [27].

A.1 Resultados sobre g-Convergência

Consideremos inicialmente o conjunto

$$D = \{\xi \in \mathcal{H} : \text{existe uma sequência } \{\xi_t\}_{t \in J} \text{ com } \xi_t \in \text{dom } A_t \text{ (} t \in J \text{),}$$

$$\|\xi_t - \xi\| \rightarrow 0 \text{ (} t \rightarrow \infty \text{) e } \{A_t \xi_t\}_{t \in J} \text{ convergente}\}.$$

Definição A.1 A sequência $\{A_t\}_{t \in J}$ é **g-convergente** se, e somente se, D é um conjunto denso em \mathcal{H} .

Mais precisamente provemos a seguinte proposição:

Proposição A.2 *Se D é denso em \mathcal{H} , então o conjunto*

$$G := \{(\xi, \eta) \in \mathcal{H} \times \mathcal{H} : \text{existe uma sequência } \{\xi_t\}_{t \in J} \text{ com } \xi_t \in \text{dom } A_t \text{ (} t \in J \text{) e}$$

$$\{\|\xi_t - \xi\| + \|A_t\xi_t - \eta\| \rightarrow 0 \ (t \rightarrow \infty)\}$$

é o gráfico de um operador hermitiano A com $\text{dom } A = D$.

Demonstração: Claramente G é um subespaço linear de $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$. Precisamos somente mostrar que $(0, \eta) \in G$ implica $\eta = 0$. Se $(0, \eta) \in G$ e $u \in D$, então existem seqüências $\{\xi_t\}_{t \in J}$, $\{u_t\}_{t \in J}$ e $w \in \mathcal{H}$ com $\xi_t, u_t \in \text{dom } A_t$ ($t \in J$) tais que $\xi_t \rightarrow 0$, $A_t\xi_t \rightarrow \eta$, $u_t \rightarrow u$ e $A_tu_t \rightarrow w$. Obtemos

$$\langle \eta, u \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle A_t\xi_t, u_t \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \xi_t, A_tu_t \rangle = \langle 0, w \rangle = 0.$$

Desde que D é um conjunto denso em \mathcal{H} , temos $\eta = 0$. Definindo um operador A por $\text{gráfico}(A) = G$, fica claro que $\text{dom } A = D$. Sejam $\xi, \eta \in D$, existem seqüências convenientes $\{\xi_t\}_{t \in J}$, $\{\eta_t\}_{t \in J}$ de forma que $\langle A\xi, \eta \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle A_t\xi_t, \eta_t \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \xi_t, A_t\eta_t \rangle = \langle \xi, A\eta \rangle$. Portanto, A é um operador hermitiano. ■

No caso em que $\{A_t\}_{t \in J}$ é g-convergente, denotamos por $A_g := g - \lim_{t \rightarrow \infty} A_t$ o operador A da Proposição A.2.

Lema A.3 *Se valem as seguintes condições:*

- (a) $\{A_t\}_{t \in J}$ é g-convergente e $g - \lim_{t \rightarrow \infty} A_t =: A_g$;
- (b) existe um valor $\lambda \in \bigcap_{t \in J} \rho(A_t)$ tal que $\{R_t(\lambda)\}_{t \in J}$ é fracamente convergente e $w - \lim_{t \rightarrow \infty} R_t(\lambda) =: R(\lambda)$.

Então,

- (i) $w - \lim_{t \rightarrow \infty} R_t(\bar{\lambda}) =: S(\bar{\lambda})$ existe;
- (ii) $R(\lambda)$ e $S(\bar{\lambda})$ tem inversos densamente definidos.

$$\text{Sejam } A := R(\lambda)^{-1} + \lambda I \text{ e } B := S(\bar{\lambda})^{-1} + \bar{\lambda} I.$$

- (iii) $A^* = B$ e $B^* = A$;

(iv) $A_g \subset A \subset A_g^*$ e $A_g \subset B \subset A_g^*$;

(v) $\{\xi \in \mathcal{H} : \{R_t(\lambda)\xi\}_{t \in J} \text{ é convergente}\} = \text{img}(A_g - \lambda I)$.

Demonstração: (i) Desde que A_t ($t \in J$) é auto-adjunto temos $R_t(\lambda)^* = R_t(\bar{\lambda})$ ($t \in J$). Por (b) obtemos

$$\langle R(\lambda)\xi, \eta \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle R_t(\lambda)\xi, \eta \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \xi, R_t(\bar{\lambda})\eta \rangle.$$

Portanto, $\{R_t(\bar{\lambda})\}_{t \in J}$ é fracamente convergente. Definindo $S(\bar{\lambda}) := w - \lim_{t \rightarrow \infty} R_t(\bar{\lambda})$, vale

$$R(\lambda)^* = S(\bar{\lambda}) \quad \text{e} \quad S(\bar{\lambda})^* = R(\lambda).$$

(ii) Primeiro vamos mostrar que $R(\lambda)$ e $S(\bar{\lambda})$ são invertíveis. Se $\xi \in \mathcal{H}$ e $R(\lambda)\xi = 0$, então

$$\eta_t := R_t(\lambda)\xi \xrightarrow{w} 0 \quad \text{e} \quad A_t\eta_t = \xi + \lambda\eta_t \xrightarrow{w} \xi \quad (t \rightarrow \infty).$$

Para $v \in \text{dom } A_g$ existe uma sequência $\{v_t\}_{t \in J}$ com $v_t \in \text{dom } A_t$ ($t \in J$), $v_t \rightarrow v$ e $A_tv_t \rightarrow A_gv$. Obtemos

$$\langle \xi, v \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle A_t\eta_t, v_t \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \eta_t, A_tv_t \rangle = \langle 0, A_gv \rangle = 0.$$

Desde que $\text{dom } A_g$ é denso em \mathcal{H} , a equação acima implica $\xi = 0$. Portanto, $R(\lambda)$ é invertível e similarmente $S(\bar{\lambda})$ é invertível.

Agora vamos provar que $R(\lambda)^{-1}$ está densamente definido mostrando que $\text{img}(R(\lambda))^\perp = \{0\}$. Seja $\xi \in \text{img}(R(\lambda))^\perp$, então $0 = \langle R(\lambda)\eta, \xi \rangle = \langle \eta, S(\bar{\lambda})\xi \rangle$, para todo $\eta \in \mathcal{H}$. Assim, $S(\bar{\lambda})\xi = 0$ que implica $\xi = 0$. Similarmente, $S(\bar{\lambda})$ está densamente definido.

(iii) Basta usar o fato de que $R(\lambda)^* = S(\bar{\lambda})$ e $S(\bar{\lambda})^* = R(\lambda)$.

(iv) Vamos mostrar que $A_g \subset A$. Seja $\xi \in \text{dom } A_g$, então existe uma sequência $\{\xi_t\}_{t \in J}$ com $\xi_t \in \text{dom } A_t$ ($t \in J$), $\xi_t \rightarrow \xi$ e $A_t\xi_t \rightarrow A_g\xi$. Obtemos

$$\langle R(\lambda)(A_g - \lambda I)\xi, \eta \rangle = \langle (A_g - \lambda I)\xi, S(\bar{\lambda})\eta \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle (A_t - \lambda I)\xi_t, R_t(\bar{\lambda})\eta \rangle \\
&= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle R_t(\lambda)(A_t - \lambda I)\xi_t, \eta \rangle \\
&= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \xi_t, \eta \rangle = \langle \xi, \eta \rangle, \quad \forall \eta \in \mathcal{H}.
\end{aligned}$$

Portanto, $R(\lambda)(A_g - \lambda I)\xi = \xi$ e conseqüentemente $\xi \in \text{img}(R(\lambda)) = \text{dom } A$ e $A_g\xi = R(\lambda)^{-1}\xi + \lambda\xi = A\xi$. Similarmente, $A_g \subset B$. Assim, $A^* \subset A_g^*$ e $B^* \subset A_g^*$. Desde que $A^* = B$ e $B^* = A$, segue que $B \subset A_g^*$ e $A \subset A_g^*$.

(v) Denotamos $M := \{\xi \in \mathcal{H} : \{R_t(\lambda)\xi\}_{t \in J} \text{ é convergente}\}$. Se $\xi \in M$, então

$$\eta_t := R_t(\lambda)\xi \rightarrow \eta \quad \text{e} \quad A_t\eta_t = \xi + \lambda\eta_t \rightarrow \xi + \lambda\eta$$

com $\eta_t \in \text{dom } A_t$ ($t \in J$). Assim, $\eta \in \text{dom } A_g$, $A_g\eta = \xi + \lambda\eta$ e $\xi \in \text{img}(A_g - \lambda I)$.

Agora notemos que

$$\|R(\lambda)\| \leq \liminf_{t \rightarrow \infty} \inf_{t \in J} \|R_t(\lambda)\| \leq \sup_{t \in J} \|R_t(\lambda)\| =: C < \infty.$$

Se $\xi \in \text{img}(A_g - \lambda I)$, então existe $\eta \in \text{dom } A_g$ e uma seqüência $\{\eta_t\}_{t \in J}$ com $\eta_t \in \text{dom } A_t$ ($t \in J$) tal que $\eta_t \rightarrow \eta$, $A_t\eta_t \rightarrow A_g\eta = \xi + \lambda\eta$ e $(A_t - \lambda I)\eta_t =: \xi_t \rightarrow \xi$. Obtemos

$$\begin{aligned}
\|R(\lambda)\xi - R_t(\lambda)\xi\| &\leq \|R(\lambda)\xi - R_t(\lambda)\xi_t\| + \|R_t(\lambda)\xi_t - R_t(\lambda)\xi\| \\
&\leq \|\eta - \eta_t\| + \|R_t(\lambda)\|\|\xi - \xi_t\| \\
&\leq \|\eta - \eta_t\| + C\|\xi - \xi_t\| \rightarrow 0.
\end{aligned}$$

Portanto, $\xi \in M$. ■

Proposição A.4 *Se valem as seguintes condições:*

- (a) $\{A_t\}_{t \in J}$ é g -convergente e $g - \lim_{t \rightarrow \infty} A_t =: A_g$;
- (b) para algum valor real $\lambda \in \bigcap_{t \in J} \rho(A_t)$ a seqüência $\{R_t(\lambda)\}_{t \in J}$ é fracamente convergente e $w - \lim_{t \rightarrow \infty} R_t(\lambda) =: R(\lambda)$;

(c) $R_t(\lambda) - R(\lambda) \geq 0, \forall t \in J$ (ou $R(\lambda) - R_t(\lambda) \geq 0, \forall t \in J$).

Então, $\{R_t(\lambda)\}_{t \in J}$ é fortemente convergente, $R(\lambda) = s - \lim_{t \rightarrow \infty} R_t(\lambda)$ é invertível e $A_g = R(\lambda)^{-1} + \lambda I$ é auto-adjunto.

Demonstração: Vamos supor $R_t(\lambda) - R(\lambda) \geq 0, \forall t \in J$. Consideremos a sequência de operadores $\{R_t(\lambda) - R(\lambda)\}_{t \in J}$. Para cada $t \in J$, definimos a forma sesquilinear gerada por $R_t(\lambda) - R(\lambda)$:

$$b^t : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad b^t(\xi, \eta) := \langle \xi, (R_t(\lambda) - R(\lambda))\eta \rangle.$$

Temos

$$|b^t(\xi, \eta)| \leq \|R_t(\lambda) - R(\lambda)\| \|\xi\| \|\eta\| \leq \beta \|\xi\| \|\eta\|,$$

sendo $\beta = \sup_{t \in J} \{\|R_t(\lambda)\| - \|R(\lambda)\|\} < \infty$. Assim,

$$\|b^t\| = \sup_{\|\xi\|, \|\eta\| \neq 0} \frac{|b^t(\xi, \eta)|}{\|\xi\| \|\eta\|} \leq \beta, \quad \forall t \in J.$$

Usando a desigualdade de Schwarz, para formas sesquilineares, obtemos

$$\begin{aligned} \|(R_t(\lambda) - R(\lambda))\xi\|^4 &= |b^t((R_t(\lambda) - R(\lambda))\xi, \xi)|^2 \leq |b^t((R_t(\lambda) - R(\lambda))\xi)| |b^t(\xi)| \\ &\leq \|b^t\| \|(R_t(\lambda) - R(\lambda))\xi\|^2 \langle \xi, (R_t(\lambda) - R(\lambda))\xi \rangle, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \|(R_t(\lambda) - R(\lambda))\xi\|^2 &\leq \|b^t\| \langle \xi, (R_t(\lambda) - R(\lambda))\xi \rangle \\ &\leq \beta \langle \xi, (R_t(\lambda) - R(\lambda))\xi \rangle \rightarrow 0 \quad (t \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

já que a sequência $\{R_t(\lambda) - R(\lambda)\}_{t \in J}$ converge fracamente a zero. Esta relação implica que $\{R_t(\lambda) - R(\lambda)\}_{t \in J}$ converge fortemente a zero. Portanto, $s - \lim_{t \rightarrow \infty} R_t(\lambda) = R(\lambda)$. Desde que $\lambda \in \mathbb{R}$, segue do Lema A.3 que

$$R(\lambda)^* = S(\bar{\lambda}) = w - \lim_{t \rightarrow \infty} R_t(\lambda) = R(\lambda).$$

Assim, o operador $A = R(\lambda)^{-1} + \lambda I$ é auto-adjunto. Novamente pelo Lema A.3 e da convergência forte de $\{R_t(\lambda)\}_{t \in J}$, obtemos $\text{img}(A_g - \lambda I) = \mathcal{H}$. Portanto, A_g é auto-adjunto e A é uma extensão auto-adjunta de A_g . Isto implica $A_g = A$. \blacksquare

Proposição A.5 *Sejam A_1 e A_2 operadores auto-adjuntos satisfazendo as condições:*

- (a) $\text{dom } A_1 = \text{dom } A_2$;
- (b) *existe um valor real $\lambda \in \rho(A_1) \cap \rho(A_2)$;*
- (c) $A_1 - A_2 \geq 0$;
- (d) $\overline{A_1 - A_2} \in B(\mathcal{H})$ e $\|(\overline{A_1 - A_2})^{1/2}(A_2 - \lambda I)^{-1}(\overline{A_1 - A_2})^{1/2}\| \leq 1$.

Então, $(A_2 - \lambda I)^{-1} - (A_1 - \lambda I)^{-1} \geq 0$.

Demonstração: Desde que $\text{dom } A_1 = \text{dom } A_2$, temos

$$\begin{aligned} (A_2 - \lambda I)^{-1}(\overline{A_1 - A_2})(A_1 - \lambda I)^{-1} &= (A_2 - \lambda I)^{-1}((A_1 - \lambda I) - (A_2 - \lambda I))(A_1 - \lambda I)^{-1} \\ &= (A_2 - \lambda I)^{-1} - (A_1 - \lambda I)^{-1}. \end{aligned}$$

Seja $R_i := (A_i - \lambda I)^{-1}$ ($i = 1, 2$). Desde que $\lambda \in \mathbb{R}$ temos $R_1^* = R_1$ e $R_2^* = R_2$. As condições (c) e (d) garantem a existência do operador $(\overline{A_1 - A_2})^{1/2}$. Este operador é limitado, auto-adjunto, não-negativo e $(\overline{A_1 - A_2})^{1/2}(\overline{A_1 - A_2})^{1/2} = \overline{A_1 - A_2}$. Assim, para $\xi \in \mathcal{H}$, obtemos

$$\begin{aligned} \langle R_2 \xi, \xi \rangle - \langle R_1 \xi, \xi \rangle &= \langle (R_2 - R_1) \xi, \xi \rangle = \langle R_2(\overline{A_1 - A_2})R_1 \xi, \xi \rangle \\ &= \langle (\overline{A_1 - A_2})R_1 \xi, R_2 \xi \rangle \\ &= \langle (\overline{A_1 - A_2})R_1 \xi, R_1 \xi \rangle + \langle (\overline{A_1 - A_2})R_1 \xi, (R_2 - R_1) \xi \rangle \\ &= \langle (\overline{A_1 - A_2})^{1/2}R_1 \xi, (\overline{A_1 - A_2})^{1/2}R_1 \xi \rangle \\ &+ \langle (\overline{A_1 - A_2})^{1/2}R_1 \xi, (\overline{A_1 - A_2})^{1/2}R_2(\overline{A_1 - A_2})^{1/2}(\overline{A_1 - A_2})^{1/2}R_1 \xi \rangle \\ &\geq \|(\overline{A_1 - A_2})^{1/2}R_1 \xi\|^2 (1 - \|(\overline{A_1 - A_2})^{1/2}R_2(\overline{A_1 - A_2})^{1/2}\xi\|^2) \geq 0. \end{aligned}$$

A proposição está demonstrada. ■

Teorema A.6 *Se valem as seguintes condições:*

- (a) $\{A_t\}_{t \in J}$ é g -convergente, $J = [t_0, \infty)$;
- (b) existem números $\alpha > 0$, $\lambda \in \mathbb{R}$ tais que

$$\|(A_t - \lambda I)\xi\| \geq \alpha \|\xi\|, \quad \forall \xi \in \text{dom } A_t, \forall t \in J;$$

- (c) $\text{dom } A_t = C$ ($t \in J$);
- (d) $A_t - A_s \geq 0$ para todo $t, s \in J$ com $t \geq s$ (ou para todo $t, s \in J$ com $s \geq t$);
- (e) $(\overline{A_t - A_s}) \in B(\mathcal{H})$ ($t, s \in J$) e $\lim_{t \rightarrow s} \|\overline{A_t - A_s}\| = 0$ ($s \in J$).

Então,

- (i) $\lambda \in \bigcap_{t \in J} \rho(A_t)$ e $\{R_t(\lambda)\}_{t \in J}$ é fortemente convergente;
- (ii) $s - \lim_{t \rightarrow \infty} R_t(\lambda) =: R(\lambda)$ tem inverso densamente definida;
- (iii) $A_g := g - \lim_{t \rightarrow \infty} A_t$ é auto-adjunto.

Demonstração: Desde que A_t é auto-adjunto ($t \in J$) segue de (b) que $\lambda \in \bigcap_{t \in J} \rho(A_t)$ e $\|R_t(\lambda)\| \leq 1/\alpha$ ($t \in J$). Vamos supor $A_t - A_s \geq 0$ sempre que $t \geq s \geq t_0$. Observemos que, para todo $\xi \in \mathcal{H}$,

$$\begin{aligned} & \left\| (\overline{A_t - A_s})^{1/2} R_s(\lambda) (\overline{A_t - A_s})^{1/2} \xi \right\|^2 = \\ & = \langle R_s(\lambda) (\overline{A_t - A_s})^{1/2} \xi, (\overline{A_t - A_s}) R_s(\lambda) (\overline{A_t - A_s})^{1/2} \xi \rangle \\ & \leq \|(\overline{A_t - A_s})\| \|R_s(\lambda)\|^2 \|(\overline{A_t - A_s})^{1/2} \xi\|^2 \\ & = \|(\overline{A_t - A_s})\| \|R_s(\lambda)\|^2 \langle (\overline{A_t - A_s}) \xi, \xi \rangle \\ & \leq \|(\overline{A_t - A_s})\|^2 \|R_s(\lambda)\|^2 \|\xi\|^2. \end{aligned}$$

Assim,

$$\|(\overline{A_t - A_s})^{1/2} R_s(\lambda) (\overline{A_t - A_s})^{1/2}\| \leq 1/\alpha \|(\overline{A_t - A_s})\|. \quad (\text{A.1})$$

Para $s > t_0$ existe $\delta(s) > 0$ tal que $\|(\overline{A_t - A_s})\| \leq \alpha$ para todo $t \geq t_0$ com $|t - s| \leq \delta(s)$. Por (A.1), para todo $t, s \in J$ com $t \geq s > t_0$ e $|t - s| \leq \delta(s)$, vale a desigualdade

$$\|(\overline{A_t - A_s})^{1/2} R_s(\lambda) (\overline{A_t - A_s})^{1/2}\| \leq 1.$$

Aplicando a Proposição A.5, obtemos, para $\xi \in \mathcal{H}$,

$$\langle R_s(\lambda)\xi, \xi \rangle \geq \langle R_t(\lambda)\xi, \xi \rangle, \quad \forall t \geq s > t_0.$$

Observemos que $\langle R_t(\lambda)\xi, \xi \rangle$ é limitado:

$$|\langle R_t(\lambda)\xi, \xi \rangle| \leq 1/\alpha \|\xi\|^2, \quad \forall t \in J;$$

e $\langle R_t(\lambda)\xi, \xi \rangle$ é contínuo em t :

$$\begin{aligned} |\langle R_s(\lambda)\xi, \xi \rangle - \langle R_t(\lambda)\xi, \xi \rangle| &= \langle R_s(\lambda) (\overline{A_t - A_s}) R_t(\lambda)\xi, \xi \rangle \\ &\leq 1/\alpha^2 \|(\overline{A_t - A_s})\| \|\xi\|^2 \rightarrow 0 \quad (t \rightarrow s). \end{aligned}$$

Para cada $\xi \in \mathcal{H}$, obtemos uma sequência $\{\langle R_t(\lambda)\xi, \xi \rangle\}_{t \in J}$ monótona, limitada e contínua em t . Isto implica que o limite $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle R_t(\lambda)\xi, \xi \rangle = \inf_{t \rightarrow \infty} \langle R_t(\lambda)\xi, \xi \rangle$ ($\xi \in \mathcal{H}$) existe. Por polarização, o limite $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle R_t(\lambda)\xi, \eta \rangle$ ($\xi, \eta \in \mathcal{H}$) também existe. Portanto, $\{R_t(\lambda)\}_{t \in J}$ é fracamente convergente e com $R(\lambda) := w - \lim_{t \rightarrow \infty} R_t(\lambda)$ vale

$$R_t(\lambda) - R(\lambda) \geq 0 \quad (t \in J).$$

Aplicando a Proposição A.4, o teorema está demonstrado. ■

Referências Bibliográficas

- [1] Abramowitz, M. e Stegun, I. A.: *Handbook of Mathematical Functions* New York: Dover Publications. 1972.
- [2] Amrein, Werner O.; Jauch, Josef M.; Sinha, Kalyan B.: *Scattering Theory in Quantum Mechanics*. W. A. Benjamin, Inc. 1977.
- [3] Andrews, M.: Singular potentials in one dimension, *Am. J. Phys.* **44**, 1064–1066 (1976).
- [4] Barton, G.: *Elements of Green's Functions and Propagation: Potentials, Diffusion, and Waves*. Oxford Science Publications. 1989.
- [5] Gesztesy, F.: On the one-dimensional Coulomb Hamiltonian, *J. Phys. A: Math. Gen.* **13**, 867–875 (1980).
- [6] Gesztesy, F.; Pittner, L.: Electrons in logarithmic potentials I. Solution of the Schrödinger equation, *J. Phys. A: Math. Gen.* **11**, 679–686 (1978).
- [7] Gomes, J. F. e Zimmerman, A. H.: One-dimensional hydrogen atom, *Am. J. Phys.* **48**, 579–580 (1980).
- [8] Gradshteyn, L. S. e Ryzhik, I. M.: *Table of Integrals, Series, and Products* San Diego: Academic Pres. 1994.
- [9] Haines, L. K. e Roberts, D. H.: One-Dimensional Hydrogen Atom, *Am. J. Phys.* **27**, 1145–1154 (1969).

- [10] Ikebe, T e Kato, T.: Uniqueness of the self-adjoint extension of singular elliptic differential operators, *Arch. Rational Mech. Anal.* **9**, 77–92 (1962).
- [11] Klaus, M.: Removing cut-offs from one-dimensional Schrödinger operators, *J. Phys. A: Math. Gen.* **13**, L295–L298 (1980).
- [12] Kurasov, P.: On the Coulomb potential in one dimension, *J. Phys. A: Math Gen.* **29**, 1767–1771 (1996).
- [13] Loudon, Rodney.: One-dimensional hydrogen atom, *Am. J. Phys.* **48**, 649–655 (1959).
- [14] Moshinsky, M.: Penetrability of a one-dimensional Coulomb potential, *J. Phys. A: Math Gen.* **26**, 2445–2450 (1993).
- [15] Naimark, M. A. *Linear Differential Operators. PART I.* (English translation), G.G. Harrap, London. 1968.
- [16] Naimark, M. A. *Linear Differential Operators. PART II.* (English translation), G.G. Harrap, London. 1968.
- [17] Newton, R. G.: Comment on “Penetrability of a one-dimensional Coulomb potential”, *J. Phys. A: Math Gen.* **27**, 4717–4718 (1994).
- [18] de Oliveira, C. R.: *Intermediate Spectral Theory and Quantum Dynamics.* Notas de Aula, DM-UFSCar (em preparação).
- [19] Olver, F. W. J.: *Asymptotics and Special Functions.* New York: Academic Press, 1974.
- [20] Reed, M. e Simon, B.: *Methods of Modern Mathematical Physics II Fourier Analysis, Self-Adjointness.* San Diego: Academic Press, 1972.
- [21] Robinett, Richard W. *Quantum Mechanics: classical results, modern systems, and visualized examples.* New York: Editora Oxford University Press, 1997.

- [22] Stummel, F.: Singuläre elliptische Differential-operatoren in Hilbertschen Räumen, *Math. Annln.* **132**, 150–176 (1956).
- [23] Vladimirov, V. S.: *Equations of mathematical physics*. Mir, Moscou, 1984.
- [24] Weidmann, Joachim. *Linear Operators in Hilbert Space*. New York: Springer-Verlag, 1980.
- [25] Werner, F.; Leschke, H.; Müller, P.: The functional-analytic versus the functional-integral approach to quantum Hamiltonians: The one-dimensional hydrogen atom, *Am. J. Phys.* **36**, 2313–2323 (1995).
- [26] Werner, F.; Leschke, H.; Müller, P.: Comment on “on the Coulomb potential in one dimension” by P Kurasov, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 5579–5581 (1997).
- [27] Wüst. R.: A Convergence Theorem for Selfadjoint Operators Applicable to Dirac Operators with Cutoff Potentials, *Math. Z.* **131**, 339–349 (1973).
- [28] Yang, X. L.; Guo, S. H.; Chan, F. T.; Wong, K. W. and Ching, W. Y.: Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory, *Am. S. Phys.* **43**, 1186–1195 (1991).