UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA

Bruna da Silva Magno

HAMILTONIANOS ATÔMICOS

Santo André - SP

2018

Bruna da Silva Magno

HAMILTONIANOS ATÔMICOS

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Matemática da Universidade Federal do ABC para obtenção do título de Mestre em Matemática

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Fresneda

Santo André - SP

2018

Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do ABC
Elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da UFABC
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Silva Magno, Bruna da
Hamiltonianos Atômicos / Bruna da Silva Magno. — 2018.

79 fls.

Orientador: Rodrigo Fresneda

Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do ABC, Programa de Pós-Graduação em Matemática, Santo André, 2018.

1. hamiltonianos atômicos. 2. mecânica quântica. 3. extensões auto-adjuntas. I. Fresneda, Rodrigo. II. Programa de Pós Graduação em Matemática, 2018. III. Título.

Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original, de acordo com as observações levantadas pela banca no dia da defesa, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

Santo André, 24 **de** Outubro **de 20**18**.**

Assinatura do autor: Bruna S Magno

Assinatura do orientador: Rodrigo Fresneda

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
Fundação Universidade Federal do ABC
Programa de Pós-Graduação em Matemática
Avenida dos Estados, 5001 – Bairro Santa Terezinha – Santo André – SP
CEP 09210-580 · Fone: (11) 4996-0017
ppg.matematica@ufabc.edu.br

FOLHA DE ASSINATURAS

Assinaturas dos membros da Banca Examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Dissertação de Mestrado da candidata Bruna da Silva Magno, realizada em 23 de julho de 2018:

Prof.(a) Dr.(a) **Rodrigo Fresneda** (Universidade Federal do ABC) – Presidente

Prof.(a) Dr.(a) **Marcus Antônio Mendonça Marrocos** (Universidade Federal do ABC) – Membro Titular

Prof.(a) Dr.(a) **Maurício Richartz** (Universidade Federal do ABC) – Membro Titular

Prof.(a) Dr.(a) **João Paulo Pitelli Manoel** (Universidade Estadual de Campinas) – Membro Titular

Prof.(a) Dr.(a) **Igor Leite Freire** (Universidade Federal do ABC) – Membro Suplente

Prof.(a) Dr.(a) **Dmitry Vasilevich** (Universidade Federal do ABC) – Membro Suplente

Prof.(a) Dr.(a) **Mario Cesar Baldiotti** (Universidade Estadual de Londrina) – Membro Suplente

DEDICATÓRIA

Dedico essa dissertação à minha família e amigos.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço à minha família pelo incentivo aos estudos.

As minhas amigas e amigos pelo apoio, entre eles destaco Juliete Vitorino, Gabriela Sabino, Daniel Carneiro, Jorge Costa, Jorge Américo, Adressa Romero e Diana Mendes. Agradeço também pela experiência e todos do Coletivo Negro Vozes (UFABC) e do Bloco Afro-Afirmativo Ilú Inã.

E ao Rodrigo Fresneda pelo apoio, compreensão e sensibilidade ao me orientar durante o mestrado.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Há dois abrigos para o homem, um é a terra e o outro o infinito.

— Milton Santos

RESUMO

Apresentamos um estudo dos Hamiltonianos Atômicos, operadores que descrevem os níveis de energia de um elétron no átomo. Acreditava-se que para $Z > 137$ (onde Z é a quantidade de prótons no núcleo do átomo) o operador de Dirac (Hamiltoniano Relativístico) era desprovido de sentido pois a energia do estado fundamental do espectro discreto torna-se imaginária, $E_{1s} = mc^2\sqrt{1-(Z\alpha)^2}$ (onde $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$). Mas basta definir o operador de Dirac como um operador auto-adjunto para contornarmos este problema no espectro. Analisando o operador Hamiltoniano, vemos que em uma abordagem relativística, para átomos mais pesados, i.e. de número atômico Z maior que 118, o operador tem mais de uma extensão auto-adjunta.

Palavras-chave: hamiltonianos atômicos, mecânica quântica, extensões auto-adjuntas.

ABSTRACT

Insira o Abstract e as Keywords We present a study of Atomic Hamiltonians, operators who describe the energy levels of an eléctron of the atom. It was believed that for $Z > 137$ (where Z is the number of protons in the nucleus of the atom) the Dirac operator (Relativistic Hamiltonian) was devoid of meaning since the fundamental state energy of the discrete spectrum becomes imaginary, $E_{1s} = mc^2\sqrt{1-(Z\alpha)^2}$ (with $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$). But just set the Dirac operator as an self-adjoint operator to avoid this problem in the spectrum. Analyzing the Hamiltonian operator, we see that in a relativistic approach, for heavier atoms, i.e. of atomic number Z greater that 118, the operator has more than one self-adjoint extension.

Keywords: atomic hamiltonians, quantum mechanics, self-adjoint extensions.

CONTEÚDO

1 INTRODUÇÃO

Neste projeto tivemos como objetivo estudar hamiltonianos atômicos, operadores que descrevem os níveis de energia de um elétron no átomo. Analisando o operador Hamiltoniano, vemos que em uma abordagem relativística, para átomos mais pesados, i.e. $Z > 118$, o operador tem mais de uma extensão auto-adjunta. Núcleos com supercarga ($Z > 118$) são difíceis de serem sintetizados, sendo que até o presente momento o núcleo de maior número atômico é com $Z = 118$. Apesar disso é possível imitar um núcleo pesado a partir de colisões, as forças nucleares podem manter os núcleos colisores unidos por cerca de $10^{-19}s$[34].

Estudamos se o hamiltoniano, seja ele relativístico ou não, possui a propriedade de ser auto-adjunto, pois caso seja então teremos

- Espectro real $\sigma_H \subset \mathbb{R}$.
- Evolução unitária do sistema $U(t) = e^{\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}, U^\dagger = U^{-1}$.
- Decomposição espectral $H = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_\lambda$, onde $(E_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ é a família de projeções ortogonais.

Nem sempre nossos operadores serão auto-adjuntos, mas podemos nos perguntar se haverá extensão auto-adjunta e se ela é única. Aqui nos concentramos em analisar o elétron sob um potencial Coulombiano $\left(\frac{Ze^2}{\|x\|}\right)$ gerado pelo núcleo de número atômico Z. O fato de que o potencial de Coulomb é um potencial central será fundamental no estudo das extensões auto-adjuntas no caso relativístico.

Entretanto, antes de estudarmos o átomo de uma perspectiva relativística, começamos com um estudo não-relativístico do átomo de hidrogênio. O átomo mais simples é o átomo de hidrogênio, composto por um elétron e um próton, e é descrito, no caso não-relativístico, pelo operador Hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{x_1} - \frac{\hbar^2}{2m_p}\Delta_{x_2} - \frac{e^2}{\|x_1 - x_2\|},$$

em que m_e e m_p são as massas do elétron e do próton, e é a carga elétrica do próton e $-e$ é a carga elétrica do elétron. Aqui $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^3$ são as coordenadas do elétron e do próton em um referencial cartesiano inercial. Esse problema pode ser simplificado consideravelmente passando-se ao referencial do centro de massa. Colocando a origem no centro de massa, $m_e x_1 + m_p x_2 = 0$, e considerando o vetor distância que separa as duas partículas, $x = x_1 - x_2$, temos

$$x_1 = \frac{m_p}{m_e + m_p} x \, , \; x_2 = -\frac{m_e}{m_e + m_p} x \, .$$

Então podemos separar o movimento do centro de massa, que tem o aspecto do movimento de uma única partícula de massa reduzida

$$m_r = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

no campo potencial $-e^2/\|x\|$,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_r}\Delta_x - \frac{e^2}{\|x\|} \, .$$

No caso de átomos relativísticos, isto é, para hamiltonianos atômicos de Dirac, a situação é um pouco mais delicada. Aqui a existência de extensões auto-adjuntas é um fato para átomos com grande número de cargas positivas. O espaço de Hilbert relevante é $\left[L^2\left(\mathbb{R}^3\right)\right]^4$ das funções $\psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}^4$ de quadrado integrável (espinores de Dirac), com produto escalar $\langle \psi, \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^\dagger(x)\, \phi(x)\, dx$. O operador Hamiltoniano é dado por

$$H = \frac{1}{i}\sum_{j=1}^{3} \alpha_j \frac{\partial}{\partial x_j} + \beta + q(x) \, , \; D(H) = \left[C_0^\infty\left(\mathbb{R}^3 \backslash \{0\}\right)\right]^4 \, , \tag{1}$$

em que α_1, α_2, α_3 e β são matrizes hermitianas de ordem 4 que satisfazem a álgebra de Clifford

$$\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 2\delta_{jk} \, , \; j,k = 1,2,3,4 \, , \; \alpha_4 \equiv \beta \, .$$

Para $q(x) = -Z\alpha/|x|$, onde Z é o número atômico e α a constante de estrutura fina, Rellich [9], mostra que H é essencialmente auto-adjunto(possui uma única extensão auto-adjunta) para $\alpha Z \leq \sqrt{\frac{3}{4}}$ ou $Z \leq 118$.

Antes de estudarmos tais casos, tanto o não-relativístico como o relativístico, preocupamo-nos em criar uma base em análise funcional, iniciando pelo estudo de operadores limitados e após isso estudando operadores ilimitados. Analisamos o operador laplaciano Δ, para que depois fosse mais simples analisar o Hamiltoniano como $H = \Delta + V$, onde V é o potencial.

Teorema 1.1. *O operador* Δ *é essencialmente auto-adjunto em* $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$.

Em relação ao caso não-relativístico nossa abordagem é através do Teorema de Kato, que nos dá um critério em relação à forma do potencial V no Hamiltoniano.

Teorema 1.2. *(Kato) Seja* $V \in L^2\left(\mathbb{R}^3\right) + L^\infty\left(\mathbb{R}^3\right)$ *uma função mensurável a valores reais. Então* $-\Delta + V\left(x\right)$ *é essencialmente auto-adjunto em* $C_0^\infty\left(\mathbb{R}^3\right)$.

Por exemplo, para potenciais esfericamente simétricos, $V\left(r\right) = -e^2/r$, onde $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$, temos que $-\Delta - e^2/r$ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty\left(\mathbb{R}^3\right)$. Analisamos também outros potenciais, por exemplo, de Kato [27]

Teorema 1.3. *Seja* $V \in L^2\left(\mathbb{R}^3\right)_{loc}$ *com* $V \geq 0$ *pontualmente. Então* $-\Delta + V$ *é essencialmente auto-adjunto em* $C_0^\infty\left(\mathbb{R}^3\right)$.

Também enunciamos o caso relativístico em dimensão $2+1$ (duas dimensões espaciais e uma temporal), onde assim como no caso de $3+1$ dimensões nós reescrevemos o operador como uma soma ortogonal de operadores. O caso $2+1$ possui aplicações no grafeno, por causa de sua estutura de folha.

2 TÓPICOS DE ANÁLISE FUNCIONAL

Aqui discutiremos a Teoria Espectral em espaços de dimensão finita e infinita. A Teoria Espectral é uma importante subárea da análise funcional. Trata, resumidamente, da análise de certos tipos de operadores que são invertíveis/inversíveis e como se relacionam com o operador original.

Iremos tratar de teoria espectral de operadores limitados em espaços normados e com produto interno e, ao final, de operadores não limitados em espaços de Hilbert e suas aplicações.

Observação: Excluímos o espaço vetorial nulo $\{0\}$ e assumimos que todos os espaços sejam complexos a menos que dito o contrário, de modo a obter teoremas mais gerais.

2.1 TEORIA ESPECTRAL EM ESPAÇOS NORMADOS COM DIMENSÃO FINITA

Comecemos então com a teoria espectral em espaços normados e de dimensão finita:

Seja X um espaço vetorial normado de dimensão finita e $T : X \to X$ um operador linear. A teoria espectral de tais operadores é mais simples do que de operadores definidos em espaços de dimensão infinita. Como a dimensão do espaço é finita, T pode ser representado por uma matriz (que depende da escolha da base de X). Assim a teoria espectral de T se reduz essencialmente ao cálculo de autovalores e autovetores de matrizes.

Para uma dada matriz quadrada $A = (a_{ij})$ de ordem n, que seja real (ou complexa), o conceito de autovalores e autovetores são definidos em termos da equação

$$Ax = \lambda x \,. \tag{2}$$

Definição 2.1. *Um* autovalor *de uma matriz quadrada $A = (a_{ij})$ é um número λ tal que a equação (2) tem solução $x \neq 0$. Tal x é chamado de* autovetor *de A correspondente ao autovalor*

λ. Os autovetores correspondentes ao autovalor λ e o vetor zero formam um subespaço vetorial de X que é chamado autoespaço *de A correspondente ao autovalor λ.*

O conjunto $\sigma(A)$ de autovalores de A é chamado de espectro *de A. Seu complemento $\rho(A) = \mathbb{C} - \sigma(A)$ é chamado de* conjunto resolvente *de A.*

O espectro e o resolvente serão conjuntos centrais no desenvolvimento da teoria espectral.

Teorema 2.2. *[19] Todas as matrizes representando um operador linear $T : X \to X$ de um espaço normado X de dimensão finita, relativamente às bases de X, têm os mesmos autovalores.*

Assim temos que ao mudarmos a base de um espaço, não mudamos os conjuntos resolvente e espectro. Mostraremos o teorema abaixo no contexto mais geral de operadores lineares limitados.

Teorema 2.3. [19] Existência de autovalores. *Um operador linear de um espaço normado X complexo cuja dimensão é finita, tem ao menos um autovalor.*

2.2 CONCEITOS BÁSICOS

Nesta seção iremos considerar espaços de dimensão qualquer, e veremos que para espaços de dimensão infinita a teoria espectral se torna mais complexa.

Seja $X \neq \{0\}$ um espaço normado complexo e $T : D(T) \to X$ um operador linear com domínio $D(T) \subset X$. Associaremos à T o operador

$$T_\lambda = T - \lambda I := T - \lambda, \tag{3}$$

onde λ é um número complexo e I é o operador identidade em $D(T)$ que omitimos por comodidade.

Se T_λ tem uma inversa, a denotaremos por $R_\lambda(T)$, isto é

$$R_\lambda(T) = T_\lambda^{-1} = (T - \lambda)^{-1} \tag{4}$$

e a chamaremos de *operador resolvente* de T ou de *resolvente* de T. Em vez de $R_\lambda(T)$ também podemos escrever R_λ se estiver claro qual o operador referido.

O nome resolvente é apropriado, pois $R_\lambda(T)$ nos ajuda a resolver a equação $T_\lambda x = y$. Portanto, $x = T_\lambda^{-1} y = R_\lambda(T)y$, se $R_\lambda(T)$ existir.

O estudo das propriedades de R_λ serão fundamentais para o entendimento do operador T. Diversas propriedades de T_λ e R_λ dependem de λ, e a *teoria espectral* está preocupada com estas propriedades. Por exemplo, é de interesse o conjunto de todos os λ no plano complexo tal que R_λ exista, e a limitação de R_λ é outra propriedade que será essencial. Iremos também nos questionar para quais λ's o domínio de R_λ é denso em X, para nomear apenas alguns aspectos que serão do nosso interesse.

Para os estudos de T, T_λ e R_λ precisaremos dos seguintes conceitos que são básicos para a teoria espectral.

Definição 2.4. *(valor regular, conjunto resolvente, espectro)*

Seja $X \neq \{0\}$ um espaço complexo normado e $T : D(T) \to X$ um operador linear com domínio $D(T) \subset X$. Um valor regular *λ de T é um número complexo tal que*

(R1) $R_\lambda(T)$ existe,

(R2) $R_\lambda(T)$ é limitada

(R3) $R_\lambda(T)$ é definida em um conjunto que é denso em X

O conjunto resolvente *$\rho(T)$ de T é o conjunto de todos os valores regulares λ de T. Seu complemento $\sigma(T) = \mathbb{C} - \rho(T)$ no plano complexo $\mathbb{C}$ é chamado* espectro *de T, e um $\lambda \in \sigma(T)$ é chamado de* valor espectral *de T. Além disso, o espectro $\sigma(T)$ é particionado em três conjuntos disjuntos.*

O espectro pontual *ou* espectro discreto *$\sigma_p(T)$ é o conjunto tal que $R_\lambda(T)$ não existe. Um $\lambda \in \sigma_p(T)$ é chamado de* autovalor *de T.*

O espectro contínuo *$\sigma_c(T)$ é o conjunto tal que $R_\lambda(T)$ existe e satisfaz (R3), mas não (R2), isto é, $R_\lambda(T)$ é ilimitada.*

O espectro residual *$\sigma_r(T)$ é o conjunto tal que $R_\lambda(T)$ existe (e pode ser limitada ou não), mas não satisfaz (R3), isto é, o domínio de $R_\lambda(T)$ não é denso em X.*

Alguns destes conjuntos nesta definição podem ser vazios. Por exemplo, $\sigma_c(T) = \sigma_r(T) = \emptyset$ no caso de dimensão finita, ou seja, o espectro se resume aos autovalores.

As condições dadas na definição acima podem ser resumidas na tabela

Satisfaz	Não satisfaz	λ pertence à
(R1), (R2), (R3)		$\rho(T)$
	(R1)	$\sigma_p(T)$
(R1), (R3)	(R2)	$\sigma_c(T)$
(R1)	(R3)	$\sigma_r(T)$

Para entender estes conceitos seguirão algumas observações gerais.

Primeiro note que os quatro conjuntos na tabela são disjuntos e sua união forma todo o plano complexo: $\mathbb{C} = \rho(T) \cup \sigma(T) = \rho(T) \cup \sigma_p(T) \cup \sigma_c(T) \cup \sigma_r(T)$. Além disso se o resolvente $R_\lambda(T)$ existe, ele é linear. Sabe-se que $R_\lambda(T) : \mathrm{Im}(T_\lambda) \to D(T_\lambda)$ existe se, e somente se, $T_\lambda x = 0$ implicar $x = 0$, isto é, o espaço nulo de T_λ é $\{0\}$; aqui, $\mathrm{Im}(T_\lambda)$ denota a imagem de T_λ e $D(T_\lambda)$ denota o domínio de T_λ.

Portanto se $T_\lambda x = (T - \lambda)x = 0$ para algum $x \neq 0$, então $\lambda \in \sigma_p(T)$, por definição, isto é, λ é autovalor de T. O vetor x é então chamado de *autovetor* de T (ou *autofunção* de T se X é um espaço de funções) correspondente ao autovalor λ. O subespaço de $D(T)$ que contém 0 e todos os autovetores de T correspondentes ao autovalor λ de T é chamado de *autoespaço* de T correspondente ao autovalor λ.

Esta definição de autovalor corresponde com a dada anteriormente. O espectro de um operador linear de um espaço de dimensão finita é um *espectro pontual puro*, isto é, o espectro contínuo e o residual são vazios, como foi mencionado antes, então todo valor espectral é um autovalor.

Um motivação similar para que a partição de $\sigma(T)\backslash\sigma_p(T)$ em $\sigma_c(T)$ e $\sigma_r(T)$ é dada pelo fato de $\sigma_r(T) = \emptyset$ para a classe de operadores lineares auto-adjuntos em espaços de Hilbert.

Definição 2.5. *Um espaço X é de Banach se é um espaço vetorial normado e completo, na qual toda sequência de Cauchy converge para um elemento de X. Analogamente, um espaço de Hilbert é um espaço vetorial com produto interno e completo, considerando a norma induzida pelo produto interno.*

Se X tem dimensão infinita, então T pode ter valores espectrais que não são autovalores.

Exemplo 2.6. *(Operador com valor espectral que não é autovalor)*

No espaço de Hilbert de sequências $X = l^2$ com produto interno dado por $\langle(\xi_j),(\eta_j)\rangle = \sum_j \xi_j\bar{\eta}_j$, definimos um operador linear $T : l^2 \to l^2$ por

$$(\xi_1, \xi_2, \ldots) \longmapsto (0, \xi_1, \xi_2, \ldots), \tag{5}$$

onde $x = (\xi_j) \in l^2$. O operador T é chamado de operador right-shift. *T é limitado (e $\|T\|$=1) porque*

$$\|Tx\|^2 = \sum_{j=1}^{\infty} |\xi_j|^2 = \|x\|^2.$$

O operador $R_0(T) = T^{-1} : X \to X$ existe, é o operador left-shift *dado por $(\xi_1, \xi_2, \ldots) \longmapsto (\xi_2, \xi_3, \ldots)$. Mas $R_0(T)$ não satisfaz (R3), porque (5) mostra que $T(X)$ não é denso em X; de fato, $T(X)$ é o subespaço Y que consiste de todos $y = (\eta_j)$ com $\eta_1 = 0$. Portanto, por definição, $\lambda = 0$ é um valor espectral de T. Além disso, $\lambda = 0$ não é um autovalor. Podemos ver isto diretamente de (5) pois $Tx = 0$ implica que $x = 0$ e o vetor zero não é um autovetor.*

Teorema 2.7. *Seja T um operador linear limitado $T : X \to Y$ com X e Y espaços normados. Se existe $b > 0$ tal que $\|Tx\| \geq b\|x\|$ para todo $x \in X$ então $T^{-1} : Y \to X$ existe e é limitado.*

Do teorema acima temos que se para algum λ o resolvente $R_\lambda(T)$ existe e é definido em todo espaço X, então para este λ o resolvente é limitado.

Lema 2.8. *(Domínio de R_λ) Seja X um espaço de Banach complexo, $T : X \to X$ um operador linear, e $\lambda \in \rho(T)$. Se T é fechado ou T é limitado, então $R_\lambda(T)$ está definido em todo espaço X e é limitado.*

Demonstração. (a) Assuma T fechado. Se $\lambda \in \rho(T)$ então valem (R1), (R2) e (R3). Como T é fechado então T_λ também é fechado. Portanto R_λ é fechado. R_λ é limitado por (R2). Assim seu domínio $D(R_\lambda)$ é fechado pelo Teorema 4.13-5 de [19], que coloca que se $T : D(T) \subset X \to Y$ é fechado e Y é completo então $D(T)$ é um subconjunto fechado de X, logo aplicado à R_λ temos que $D(R_\lambda)$ é fechado, então (R3) implica $D(R_\lambda) = \overline{D(R_\lambda)} = X$.

(b) Assuma T limitado. Como $D(T) = X$ é fechado, T é fechado, pois para T limitado se $D(T)$ é um subconjunto fechado de X então T é fechado, e a prova segue pelo item (a). $\square$

2.3 PROPRIEDADES ESPECTRAIS DE OPERADORES LINEARES

As propriedades gerais de um espectro irão depender do tipo de espaço em que o operador está definido e no tipo de operador considerado. Começaremos com operadores lineares limitados T em um espaço de Banach complexo X com $T : X \to X$, ou seja, $T \in B(X, X)$.

Teorema 2.9. *(Inversa). Seja $T \in B(X, X)$ onde X é um espaço de Banach. Se $\| T \| < 1$, então $(I - T)^{-1}$ existe como um operador linear limitado definido em todo espaço X e*

$$(I - T)^{-1} = \sum_{j=0}^{\infty} T^j = I + T + T^2 + \cdots \tag{6}$$

[onde a série da direita é convergente na norma $B(X, X)$]

Como primeira aplicação deste teorema iremos provar o fato de que o espectro de um operador linear limitado é fechado no plano complexo.

Teorema 2.10. *(Espectro fechado) O conjunto resolvente $\rho(T)$ de um operador linear limitado T em um espaço de Banach complexo é aberto, portanto o espectro $\sigma(T)$ é fechado.*

Demonstração. Se $\rho(T) = \emptyset$, então é aberto. Seja $\rho(T) \neq \emptyset$. Para um $\lambda_0 \in \rho(T)$ fixo e qualquer $\lambda \in \mathbb{C}$ temos:

$$\begin{aligned} T - \lambda I &= T - \lambda_0 I - (\lambda - \lambda_0) I \\ &= (T - \lambda_0 I)[I - (\lambda - \lambda_0)(T - \lambda_0 I)^{-1}]. \end{aligned}$$

Denotaremos o operador $[I - (\lambda - \lambda_0)(T - \lambda_0 I)^{-1}]$ por V, assim podemos escrever

$$T_\lambda = T_{\lambda_0} V, \tag{7}$$

onde $V = I - (\lambda - \lambda_0) R_{\lambda_0}$. Como $\lambda_0 \in \rho(T)$ e T é limitado, o Lema 2.8 implica que $R_{\lambda_0} = T_{\lambda_0}^{-1} \in B(X, X)$. Além disso o Teorema anterior nos mostra que V tem inversa.

$$\begin{aligned} V^{-1} &= (I - (\lambda - \lambda_0) R_{\lambda_0})^{-1} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} [(\lambda - \lambda_0) R_{\lambda_0}]^j \qquad (8) \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} (\lambda - \lambda_0)^j R_{\lambda_0}^j \qquad (9) \end{aligned}$$

em $B(X, X)$ para todo λ tal que $\|(\lambda - \lambda_0) R_{\lambda_0}\| < 1$, isto é

$$|\lambda - \lambda_0| < \frac{1}{\|R_{\lambda_0}\|}. \tag{10}$$

Como $T_{\lambda_0}^{-1} = R_{\lambda_0} \in B(X, X)$, vemos disto e de (7) que para todo λ satisfazendo (10) o operador T_λ tem uma inversa

$$R_\lambda = T_\lambda^{-1} = (T_{\lambda_0} V)^{-1} = V^{-1} R_{\lambda_0}.$$

Portanto (10) representa a vizinhança de λ_0 consistindo de valores regulares λ de T. Como $\lambda_0 \in \rho(T)$ é arbitrário, $\rho(T)$ é aberto, então seu complemento $\sigma(T) = \mathbb{C} - \rho(T)$ é fechado. □

Note que esta prova também nos dá uma representação básica do Resolvente por um série de potências.

Teorema 2.11. *(Representação do Resolvente) Para X e T como no teorema anterior e todo $\lambda_0 \in \rho(T)$ o resolvente $R_\lambda(T)$ tem a representação*

$$R_\lambda = \sum_{j=0}^{\infty} (\lambda - \lambda_0)^j R_{\lambda_0}^{j+1}$$

a série é absolutamente convergente para todo λ no disco aberto dado por

$$|\lambda - \lambda_0| < \frac{1}{\|R_{\lambda_0}\|}$$

no plano complexo. O disco é subconjunto de $\rho(T)$.

Uma outra consequência do Teorema 2.10 nos permitirá provar o fato de que para um operador linear limitado o espectro é um conjunto limitado no plano complexo.

Teorema 2.12. *(Espectro) O espectro $\sigma(T)$ de um operador linear limitado $T : X \to X$ em um espaço de Banach complexo X é compacto e está no disco dado por*

$$|\lambda| \leq \|T\| \tag{11}$$

Demonstração. Seja $\lambda \neq 0$ e $k = \frac{1}{\lambda}$. Do Teorema 2.9 nós obtemos a representação

$$R_\lambda = (T - \lambda I)^{-1} = -\tfrac{1}{\lambda}(I - kT)^{-1} = -\tfrac{1}{\lambda} \sum_{j=0}^{\infty} (kT)^j = -\tfrac{1}{\lambda} \sum_{j=0}^{\infty} (\tfrac{1}{\lambda} T)^j$$

onde, pelo Teorema 2.9, a série converge para todo λ tal que

$$\|\tfrac{1}{\lambda} T\| < 1 \Longrightarrow \|T\| < |\lambda|.$$

Do Teorema 2.9 também nos mostra que λ está em $\rho(T)$. Portanto o espectro $\sigma(T) = \mathbb{C} - \rho(T)$ deve estar no disco dado por (11), então $\sigma(T)$ é limitado.

Além disso, $\sigma(T)$ é fechado pelo Teorema 2.10. Portanto $\sigma(T)$ é compacto (fechado e limitado). □

Deste teorema temos que para um operador limitado T em um espaço de Banach complexo o espectro é limitado, então parece natural nos perguntarmos sobre o menor disco sobre a origem que contém todo o espectro. Esta questão sugere o seguinte conceito.

Definição 2.13. *(Raio Espectral) O* raio espectral $r_\sigma(T)$ *de um operador* $T \in B(X, X)$ *em um espaço de Banach complexo* X *é o raio*

$$r_\sigma(T) = \sup_{\lambda \in \sigma(T)} |\lambda|$$

do menor disco fechado centrado na origem do plano complexo λ *e contendo* $\sigma(T)$.

De (11) é óbvio que o raio espectral do operador linear limitado T no espaço de Banach complexo satisfaz

$$r_\sigma(T) \leq \|T\|$$

pois $|\lambda| \leq \|T\|$ implica que

$$\sup_{\lambda \in \sigma(T)} |\lambda| \leq \|T\|$$

2.4 PROPRIEDADES ADICIONAIS DO RESOLVENTE E ESPECTRO

A seguir temos algumas outras propriedades do resolvente

Teorema 2.14. *(Equação resolvente, comutatividade)*

Seja X *um espaço de Banach complexo,* $T \in B(X, X)$ *e* $\lambda, \mu \in \rho(T)$*, temos*

(a) O resolvente R_λ *de* T *satisfaz a relação de Hilbert (ou equação resolvente)*

$$R_\mu - R_\lambda = (\mu - \lambda) R_\mu R_\lambda$$

(b) R_λ comuta com qualquer $S \in B(X, X)$ que comuta com T

(c) Temos

$$R_\lambda R_\mu = R_\mu R_\lambda$$

O próximo resultado será o teorema de Mapeamento Espectral. Começaremos pela motivação, que é sugerida pela teoria de autovalores para matrizes.

Se λ é um autovalor de uma matriz quadrada A, então $Ax = \lambda x$ para algum $x \neq 0$. Aplicando A temos

$$A^2 x = A\lambda x = \lambda A x = \lambda^2 x$$

Deste modo, para qualquer inteiro positivo m

$$A^m x = \lambda^m x.$$

Se λ é autovalor de A, então λ^m é autovalor de A^m. De modo geral temos que

$$\rho(\lambda) = \alpha_n \lambda^n + \alpha_{n-1}\lambda^{n-1} + \cdots + \alpha_0$$

é autovalor da matriz

$$\rho(A) = \alpha_n A^n + \alpha_{n-1} A^{n-1} + \cdots + \alpha_0 I.$$

Esta propriedade se estende para espaços de Banach complexos de qualquer dimensão. Na prova desta propriedade usa-se o fato de que um operador linear limitado tem um espectro não vazio.

Usaremos a notação

$$p(\sigma(T)) = \{\mu \in \mathbb{C} | \mu = p(\lambda), \lambda \in \sigma(T)\}$$

isto é, $p(\sigma(T))$ é o conjunto de todos os números complexos μ tais que $\mu = p(\lambda)$ para algum $\lambda \in \sigma(T)$. Também usaremos $p(\rho(T))$ com sentido similar.

Teorema 2.15. *(Mapeamento Espectral para Polinômios)*

Seja X um espaço de Banach complexo, $T \in B(X, X)$ e

$$p(\lambda) = \alpha_n \lambda^n + \alpha_{n-1}\lambda^{n-1} + \cdots + \alpha_0$$

com $\alpha_n \neq 0$. Então

$$\sigma(p(T)) = p(\sigma(T))$$

isto é, o espectro $\sigma(p(T))$ do operador

$$\rho(T) = \alpha_n T^n + \alpha_{n-1} T^{n-1} + \cdots + \alpha_0 I$$

consiste de todos os valores que o polinômio assume no espectro $\sigma(T)$ de T.

Agora consideraremos uma propriedade básica de autovetores

Teorema 2.16. *(Independência linear)*
Autovetores $x_1, \ldots, x_n$ correspondendo a diferentes autovalores $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ de um operador linear T em um espaço vetorial X constituem um conjunto linearmente independente.

Demonstração. A prova se dá por contradição, assumindo que os autovetores são dependentes, exatamente como no caso de dimensão finita. Para o caso finito toma-se $\{x_1, \cdots, x_n\}$ autovetores correspondendo aos autovalores $\{\lambda_1, \cdots, \lambda_n\}$ respectivamente.

Seja x_m o primeiro vetor que é combinação linear de seus antecessores, representamo-no da seguinte forma

$$x_m = \alpha_1 x_1 + ... + \alpha_{m-1} x_{m-1} = \sum_{j=1}^{m-1} \alpha_j x_j.$$

Deste modo temos que $\{x_1, \cdots, x_{m-1}\}$ são vetores linearmente independentes. Aplicando $T - \lambda_m I$ em ambos os lados da equação acima ficamos com

$$\begin{aligned} (T - \lambda_m I)x_m &= \textstyle\sum_{j=1}^{m-1} \alpha_j (T - \lambda_m I)x_j \\ &= \textstyle\sum_{j=1}^{m-1} \alpha_j (\lambda_j - \lambda_m)x_j \end{aligned}$$

pois $Tx_j = \lambda_j x_j$ e ainda disto temos que o lado esquerdo é zero. Como no lado direito temos uma combinação linear de vetores linearmente independentes então

$$\sum_{j=1}^{m-1} \alpha_j (\lambda_j - \lambda_m)x_j = 0$$

implica $\alpha_j(\lambda_j - \lambda_m) = 0$, o que dá $\alpha_j = 0$ para $j \in \{1, ..., m-1\}$, pois $\lambda_j \neq \lambda_m$. E disto teríamos que $x_m = \sum_{j=1}^{m-1} \alpha_j x_j = 0$ e isto contradiz o fato de x_m ser autovetor. Portanto os autovetores formam um conjunto linearmente independente. $\square$

Agora trataremos da teoria espectral de operadores lineares auto-adjuntos limitados em espaços de Hilbert.

2.5 PROPRIEDADES ESPECTRAIS DE OPERADORES LINEARES AUTO-ADJUNTOS LIMITADOS

No caso estudado nesta parte do projeto, ou seja, para operadores limitados, não há diferença entre falarmos de operadores auto-adjuntos limitados ou operadores simétricos limitados. Mas veremos que para operadores ilimitados, ser auto-adjunto e ser simétrico não é equivalente.

Se $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ é um operador linear limitado em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, então seu operador adjunto $T^* : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$ é definido como o operador que satisfaz

$$\langle Tx, y\rangle = \langle x, T^* y\rangle$$

para todo $x \in \mathcal{H}_1$ e $y \in \mathcal{H}_2$.

Teorema 2.17. *Seja $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ um operador linear limitado, onde $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$ são espaços de Hilbert. Então o operador adjunto T^*de T existe, é único e é um operador linear limitado com norma $\|T^*\| = \|T\|$*

Demonstração. Defina $h(y, x) = \langle y, Tx\rangle$ uma forma sesquilinear em $\mathcal{H}_2 \times \mathcal{H}_1$, temos que h é limitado pois T é limitado e pela desigualdade de Schwarz $|h(y, x)| \leq \|T\|\|x\|\|y\|$, disto temos $\|h\| \leq \|T\|$. Mas também temos $\|h\| \geq \|T\|$ de

$$\|h\| = \sup_{\substack{x \neq 0 \\ y \neq 0}} \frac{|\langle y, Tx\rangle|}{\|y\|\|x\|} \geq \sup_{\substack{x \neq 0 \\ Tx \neq 0}} \frac{|\langle Tx, Tx\rangle|}{\|Tx\|\|x\|} = \|T\|.$$

Logo $\|h\| = \|T\|$. Pelo Teorema de Representação de Riesz, que pode ser visto em [19], existe um operador linear limitado, que neste caso denotaremos T^*, unicamente determinado por h, com norma $\|T^*\| = \|h\|$ tal que $h(y, x) = \langle T^* y, x\rangle$.

Disto temos $\langle y, Tx\rangle = \langle T^* y, x\rangle$ e $\|T^*\| = \|h\| = \|T\|$. □

Pelo Teorema 2.17 temos que se $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é um operador linear limitado em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ então T^* existe e é único com norma $\|T^*\| = \|T\|$. Ainda temos que T é dito ser auto-adjunto se $T = T^*$.

Assim, se T é auto-adjunto então $\langle Tx, x\rangle$ é real para todo $x \in \mathcal{H}$ pois $\langle Tx, x\rangle = \langle x, Tx\rangle = \overline{\langle Tx, x\rangle}$ e se um número é igual ao seu conjugado então este número é real.

Agora iremos começar a analisar o espectro de um operador linear auto-adjunto limitado.

Um operador linear auto-adjunto limitado pode não ter autovalores, mas se os tiver, então podemos estabelecer o que segue.

Teorema 2.18. *(autovalores, autovetores)*

Seja $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um operador linear auto-adjunto limitado em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ complexo. Então

(a) Todos os autovalores de T, se existirem, são reais;

(b) Autovetores correspondendo a diferentes autovalores (numericamente) de T são ortogonais.

A partir da caracterização do conjunto resolvente $\rho(T)$ de T poderemos aferir que todo o espectro de um operador linear auto-adjunto limitado é real (Teorema 17 de [19]).

Teorema 2.19. *Seja $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um operador linear auto-adjunto limitado em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$. Então λ pertence ao conjunto resolvente $\rho(T)$ de T se, e somente se, existe $c > 0$ tal que para todo $x \in \mathcal{H}$*

$$\| T_\lambda x \| \geq c \| x \|$$

onde $T_\lambda = T - \lambda$.

Demonstração. Se $\lambda \in \rho(T)$ então existe e é limitado o operador $R_\lambda(T)$, logo existe $c > 0$ tal que $\| T_\lambda x \| \geq c \| x \|$ para todo $x \in \mathcal{H}$. A volta se dá pelo Teorema 2.7. □

Usando este teorema podemos então mostrar que

Teorema 2.20. *O espectro $\sigma(T)$ de um operador linear auto-adjunto limitado $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$ é real.*

Demonstração. Usando o Teorema anterior, iremos mostrar que se $\lambda = \alpha + i\beta$ (α, β reais) com $\beta \neq 0$ então λ deve estar em $\rho(T)$, e assim temos $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$.

Tome $x \neq 0$ em $\mathcal{H}$ qualquer, temos

$$\langle T_\lambda x, x\rangle = \langle Tx, x\rangle - \lambda \langle x, x\rangle .$$

Mas $\langle Tx, x\rangle$ e $\langle x, x\rangle$ são reais, pois $\langle x, x\rangle = \|x\|^2$ e $\langle Tx, x\rangle = \langle x, Tx\rangle$ pois T é auto-adjunto, e além disso, $\langle x, Tx\rangle = \overline{\langle Tx, x\rangle}$, ou seja, $\langle Tx, x\rangle = \overline{\langle Tx, x\rangle}$. Assim, tomando o conjugado da equação acima ficamos com

$$\overline{\langle T_\lambda x, x\rangle} = \langle Tx, x\rangle - \overline{\lambda} \langle x, x\rangle$$

onde $\overline{\lambda} = \alpha - i\beta$. Agora por subtração

$$\overline{\langle T_\lambda x, x\rangle} - \langle T_\lambda x, x\rangle = (\lambda - \overline{\lambda}) \langle x, x\rangle = 2\imath\beta\|x\|^2.$$

O lado esquerdo fica $-2\imath\mathrm{im}(\langle T_\lambda x, x\rangle)$, onde aqui im denota a parte imaginária. Usando a desigualdade de Schwarz, $|\langle T_\lambda x, x\rangle| \leq \|T_\lambda x\|\|x\|$ temos

$$|\beta|\|x\|^2 = |\mathrm{im}(\langle T_\lambda x, x\rangle)| \leq |\langle T_\lambda x, x\rangle| \leq \|T_\lambda\|\|x\|.$$

Como $\|x\| \neq 0$, ficamos com $|\beta|\|x\| \leq \|T_\lambda x\|$. Se $\beta \neq 0$ então $\lambda \in \rho(T)$ pelo teorema anterior. Assim, para $\lambda \in \sigma(T)$ devemos ter $\beta = 0$, ou seja, λ real. □

2.6 PROPRIEDADES ADICIONAIS DE OPERADORES LINEARES AUTO-ADJUNTOS LIMITADOS

Agora que temos essa importante caracterização do espectro de operadores lineares auto-adjuntos limitados podemos nos aprofundar ainda mais em seus detalhes.

Teorema 2.21. *O espectro $\sigma(T)$ de um operador linear auto-adjunto limitado $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$ está contido em um intervalo fechado $[m, M]$ da reta real, onde*

$$m = \inf_{\|x\|=1} \langle Tx, x\rangle$$

$$M = \sup_{\|x\|=1} \langle Tx, x\rangle$$

Demonstração. Como T é auto-adjunto temos que $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$. Mostraremos que se $\lambda = M + c$ com $c > 0$ então $\lambda \in \rho(T)$. Para todo $x \neq 0$ e $v = \|x\|^{-1}x$ temos $x = \|x\|v$ e assim

$$\langle Tx, x\rangle = \|x\|^2\langle Tv, v\rangle \leq \|x\|^2 \sup_{\|\tilde{v}\|=1} \langle T\tilde{v}, \tilde{v}\rangle = \langle x, x\rangle\, M.$$

Disto $\langle Tx, x\rangle \leq \langle x, x\rangle\, M$, aplicando a desigualdade de Schwarz ficamos com

$$\begin{aligned} \|T_\lambda x\|\|x\| \geq -\langle T_\lambda x, x\rangle &= -\langle Tx, x\rangle + \lambda\langle x, x\rangle \\ &\geq (-M + \lambda)\langle x, x\rangle \\ &\geq c\|x\|^2, \end{aligned}$$

onde $c = \lambda - M > 0$. Como $x \neq 0$, podemos fazer a divisão por $\|x\|$ e ficamos com $\|T_\lambda x\| \geq c\|x\|$ e pelo Teorema 2.19 temos que $\lambda \in \rho(T)$. A prova segue análoga para $\lambda < m$. □

Podemos relacionar m e M à norma do operador T.

Teorema 2.22. *Para qualquer operador linear auto-adjunto limitado T em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$ nós temos que*

$$\| T \| = \max(|m|, |M|) = \sup_{\|x\|=1} |\langle Tx, x\rangle|$$

onde m e M são da forma como no teorema anterior.

Agora podemos ver que os limites para $\sigma(T)$ no Teorema 2.21 não podem ser melhorados.

Teorema 2.23. *(m e M como valores espectrais) Sejam $\mathcal{H}$ e T como no Teorema 2.21 e $\mathcal{H} \neq \{0\}$. Então m e M, como definidos no mesmo teorema, são valores espectrais de T.*

Agora olharemos par a outra parte do espectro.

Teorema 2.24. *O espectro residual $\sigma_r(T)$ de um operador linear auto-adjunto limitado $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$ é vazio.*

Demonstração. A prova deste teorema se dá por contradição, assumindo que $\sigma_r(T) \neq \emptyset$. Seja $\lambda \in \sigma_r(T)$. Como vimos, se $\lambda \in \sigma_r(T)$ então existe $R_\lambda(T)$, ou seja, existe a inversa de T_λ, mas seu domínio $D(T_\lambda^{-1}) = \mathrm{Im}(T_\lambda)$ não é denso em $\mathcal{H}$. Assim existe $y \neq 0$ que é ortogonal à $D(T_\lambda^{-1}) = \mathrm{Im}(T_\lambda)$, $\langle T_\lambda x, y\rangle = 0$, para todo $x \in \mathcal{H}$. Como λ é real e T

é auto-adjunto então $\langle x, T_\lambda y\rangle = 0$ para todo $x \in \mathcal{H}$. Fazendo $x = T_\lambda y$ ficamos com $\langle T_\lambda y, T_\lambda y\rangle = \|T_\lambda y\| = 0$, portanto $T_\lambda y = Ty - \lambda y = 0$ implicando que $Ty = \lambda y$. Como $y \neq 0$ concluimos que λ é autovalor de T, ou seja, $\lambda \in \sigma_p(T)$, contrariando o fato de assumirmos $\lambda \in \sigma_r(T)$. Portanto $\sigma_r(T)$=∅. □

2.7 OPERADORES POSITIVOS

Sabemos que se T é auto-adjunto, então $\langle Tx, x\rangle$ é real. Logo podemos considerar o conjunto de todos os operadores lineares auto-adjuntos limitados em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$ e introduzir uma ordem parcial $\leq$, definindo

$$T_1 \leq T_2 \iff \langle T_1 x, x\rangle \leq \langle T_2 x, x\rangle \tag{12}$$

para todo $x \in \mathcal{H}$. Podemos escrever também $T_2 \geq T_1$.

Um operador linear auto-adjunto limitado $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é dito ser *positivo* se

$$T_1 \geq 0 \iff \langle T_1 x, x\rangle \geq 0 \tag{13}$$

para todo $x \in \mathcal{H}$. Em vez de $T \geq 0$ também escrevemos $0 \leq T$.

De (12) e (13) temos

$$T_1 \leq T_2 \iff 0 \leq T_2 - T_1$$

isto é, (12) se mantém se, e somente se, $T_2 - T_1$ é positiva.

Faremos uma breve pausa para vermos operadores positivos, que nos servirão de ferramenta para entendimento da representação espectral para operadores lineares auto-adjuntos limitados.

Segue direto da definição que a soma de operadores positivos é positiva.

Teorema 2.25. *(Produto de operadores positivos) Se dois operadores lineares auto-adjuntos limitados S e T em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ são positivos e comutam ($ST = TS$), então seu produto é positivo.*

A relação de ordem parcial definida por (13) também sugere o seguinte conceito.

Definição 2.26. *(Sequência Monótona) A* sequência monótona (T_n) *de operadores lineares auto-adjuntos* T_n *em um espaço de Hilbert* $\mathcal{H}$ *é uma sequência* (T_n) *que é ou* monótona crescente*, isto é,*

$$T_1 \leq T_2 \leq T_3 \leq \cdots$$

ou monótona decrescente*, isto é,*

$$T_1 \geq T_2 \geq T_3 \geq \cdots$$

Uma sequência monótona crescente tem a seguinte propriedade.(Uma sequência monótona decrescente terá uma propriedade análoga)

Teorema 2.27. *(Sequência monótona) Seja* (T_n) *uma sequência de operadores lineares auto-adjuntos limitados em um espaço de Hilbert complexo* $\mathcal{H}$ *tal que*

$$T_1 \leq T_2 \leq \cdots \leq T_n \leq \cdots \leq K$$

onde K *é um operador linear auto-adjunto limitado em* $\mathcal{H}$*. Suponha que* T_j *comuta com* K *e com todo* T_m*. Então* (T_n) *converge fortemente (*$T_n x \to Tx$ *para todo* $x \in \mathcal{H}$*) e o operador limite* T *é linear auto-adjunto limitado e satisfaz* $T \leq K$*.*

2.8 OPERADORES DE PROJEÇÃO

Um *operador de projeção* P, ou simplesmente *projeção* P é dado a partir da soma direta de um subespaço fechado Y e seu complemento ortogonal $Y^{\perp}$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= Y \oplus Y^{\perp} \\ x &= y + z \end{aligned} \tag{14}$$

onde $y \in Y$ e $z \in Y^{\perp}$.

Como a soma é direta temos que y é único para todo $x \in \mathcal{H}$ dado. Assim conseguimos definir um operador linear

$$\begin{array}{rccc} P: & \mathcal{H} & \to & \mathcal{H} \\ & x & \to & y = Px \end{array}$$

P é chamado de *projeção ortogonal*, ou *projeção de* $\mathcal{H}$ *em* Y, ou *projeção em* $\mathcal{H}$.

Portanto um operador linear limitado $P : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é uma projeção em $\mathcal{H}$ se existir um subespaço fechado Y de $\mathcal{H}$ tal que Y é a imagem de P e $Y^\perp$ é o espaço nulo de P e $P|_Y$ é o operador identidade em Y.

Assim escrevemos (14) como

$$x = y + z = Px + (I - P)x.$$

Vemos então que a projeção de $\mathcal{H}$ em $Y^\perp$ é $I - P$.

Podemos usar também a seguinte caracterização:

Teorema 2.28. *(Projeção) Um operador linear limitado $P : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é uma projeção se, e somente se, P é auto-adjunto e idempotente ($P^2 = P$).*

Veremos que projeções tem propriedades relativamente simples, isto nos impele a representar operadores lineares mais complicados através destes, resultando na chamada *representação espectral*. Este nome é devido ao fato de que as projeções usadas para esta representação estão relacionadas com o espectro do operador.

Agora veremos propriedades básicas de projeções, primeiro que projeções são sempre operadores positivos.

Teorema 2.29. *(Positividade) Para qualquer projeção P em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$.*

$$\langle Px, x\rangle = \| Px \|^2; \tag{15}$$

$$P \geq 0; \tag{16}$$

$$\| P \| \leq 1; \quad \| P \| = 1 \quad se \quad P(\mathcal{H}) \neq \{0\} \ . \tag{17}$$

Nem sempre o produto de projeções será uma projeção, mas podemos garantir o seguinte.

Teorema 2.30. *(Produto de projeções) Considerando projeções em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, as seguintes afirmações são válidas:*

(a) $P = P_1P_2$ é uma projeção em $\mathcal{H}$ se, e somente se, as projeções P_1 e P_2 comutam, isto é, $P_1P_2 = P_2P_1$. Então P projeta $\mathcal{H}$ em $Y = Y_1 \cap Y_2$, onde $Y_j = P_j(\mathcal{H})$

(b) Dois subespaços fechados Y e V de $\mathcal{H}$ são ortogonais se, e somente se, as projeções correspondentes satisfazem $P_YP_V = 0$.

Também, nem sempre a soma de projeções é uma projeção.

Teorema 2.31. *(Soma de projeções) Sejam P_1 e P_2 projeções em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$. Então:*

(a) A soma $P = P_1 + P_2$ é uma projeção em $\mathcal{H}$ se, e somente se, $Y_1 = P_1(\mathcal{H})$ e $Y_2 = P_2(\mathcal{H})$ são ortogonais.

(b) Se $P = P_1 + P_2$ é uma projeção, P projeta $\mathcal{H}$ para $Y = Y_1 \oplus Y_2$.

O teorema que segue se refere à relação de ordem parcial definida por $P_1 \leq P_2$ e é uma ferramenta básica para o entendimeto e resolução de teoremas que seguirão.

Teorema 2.32. *(Ordem Parcial) Sejam P_1 e P_2 projeções definidas em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$. Denote por $Y_1 = P_1(\mathcal{H})$ e $Y_2 = P_2(\mathcal{H})$ os subespaços no qual $\mathcal{H}$ é projetado por P_1e P_2, e sejam $N(P_1)$ e $N(P_2)$ os espaços nulos dessas projeções. Então as seguintes condições são equivalentes.*

(1) $P_2P_1 = P_1P_2 = P_1$

(2) $Y_1 \subset Y_2$

(3) $N(P_2) \subset N(P_1)$

(4) $\|P_1x\| \leq \|P_2x\|$ para todo $x \in H$

(5) $P_1 \leq P_2$

Já foi considerada a soma de projeções e agora será considerada a diferença ou subtração de projeções. O teorema acima é aplicado na demonstração deste teorema que segue.

Teorema 2.33. *(Diferença de Projeções) Sejam P_1 e P_2 projeções em um espaço de Hilbert H. Então*

(a) A diferença $P = P_2 - P_1$ é uma projeção em $\mathcal{H}$ se, e somente se, $Y_1 \subset Y_2$, onde $Y_j = P_j(\mathcal{H})$.

(b) Se $P = P_2 - P_1$ é uma projeção, P projeta $\mathcal{H}$ em Y, onde Y é o complemento ortogonal de Y_1 em Y_2.

A partir destes dois últimos teoremas podemos derivar um resultado básico sobre a convergência de uma sequência monótona crescente de projeções.

Teorema 2.34. *(Sequência monótona crescente) Seja (P_n) uma sequência monótona crescente de projeções P_n definidas em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$. Então*

(a) P é um operador de convergência forte , diga-se $P_nx \to Px$ para todo $x \in \mathcal{H}$, e o operador limite P é uma projeção definida em $\mathcal{H}$.

(b) P projeta $\mathcal{H}$ em

$$P(\mathcal{H}) = \overline{\bigcup_{n=1}^{\infty} P_n(\mathcal{H})}$$

(c) P tem o espaço nulo

$$N(P) = \bigcap_{n=1}^{\infty} N(P_n)$$

2.9 FAMÍLIA ESPECTRAL

Agora temos como objetivo a representação de operadores lineares auto-adjuntos limitados em um espaço de Hilbert em termos de projeções, pois podemos assim mais facilmente investigar suas propriedades. Chama-se a esta representação de *representação espectral* do operador em questão.

Para um operador linear auto-adjunto limitado $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ dado, obtemos uma representação espectral de T através de uma família de projeções que é chamada de *família espectral associada a T.* Primeiro será estudado o conceito de uma *família espectral.*

Aqui pode-se adicionar motivação para o caso de dimensão finita

Definição 2.35. *(Família espectral) Uma família espectral é uma família a um parâmetro $E = (E_\lambda)_{\lambda \in \mathbb{R}}$ de projeções E_λ definidas em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ (de qualquer dimensão) que depende de uma parâmetro real λ e é tal que para $\forall x \in \mathcal{H}$*

(1) $E_\lambda \leq E_\mu$ portanto $E_\lambda E_\mu = E_\mu E_\lambda$ $(\lambda < \mu)$

(2a)

$$\lim_{\lambda \to -\infty} E_\lambda x = 0$$

(2b)

$$\lim_{\lambda \to +\infty} E_\lambda x = x$$

(3)

$$E_{\lambda+0} x = \lim_{\mu \to \lambda+0} E_\mu x = E_\lambda x$$

Disto temos que a família espectral real pode ser considerada como um mapeamento

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{R} & \longrightarrow & B(\mathcal{H}, \mathcal{H}) \\ \lambda & \longmapsto & E_\lambda \end{array}$$

que a cada $\lambda \in \mathbb{R}$ faz corresponder uma projeção $E_\lambda \in B(\mathcal{H}, \mathcal{H})$, lembrando que $B(\mathcal{H}, \mathcal{H})$ é o espaço dos operadores lineares limitados de $\mathcal{H}$ em $\mathcal{H}$.

E é chamado de uma *família espectral em um intervalo* $[a, b]$ se 00.00.0000

$E_\lambda = 0$ para $\lambda < a$, $E_\lambda = I$ para $\lambda \geq b$ Observa-se que (2*) implica em (2a) e (2b).

O limite $\mu \to \lambda + 0$ em (3) indica que só se considera valores tais que $\mu > \lambda$

2.10 FAMÍLIA ESPECTRAL DE UM OPERADOR LINEAR AUTO-ADJUNTO LIMITADO

A um operador linear auto-adjunto limitado $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$ podemos associar uma família espectral E tal que E pode ser usada para uma representação espectral de T.

Para definir E serão necessários os operadores $T_\lambda = T - \lambda I$, a raiz quadrada positiva de T_λ^2 , $B_\lambda = (T_\lambda^2)^{\frac{1}{2}}$, e o operador $T_\lambda^+ = \frac{1}{2}(B_\lambda + T_\lambda)$ que é chamado de *parte positiva* de T_λ.

A *família espectral* E de T é então definida por $E = (E_\lambda)_{\lambda \in \mathbb{R}}$, onde E_λ é a projeção de $\mathcal{H}$ no espaço nulo $N(T_\lambda^+)$ de T_λ^+.

Iremos provar que E é de fato uma família espectral segundo a Definição 32. A prova disto produz uma ferramenta para encontrarmos a representação espectral.

Consideraremos os operadores

$$B = (T^2)^{1/2} \qquad \text{(raiz quadrada positiva de } T^2\text{)}$$

$$T^+ = \frac{1}{2}(B + T) \qquad \text{(parte positiva de } T\text{)}$$

$$T^- = \frac{1}{2}(B - T) \qquad \text{(parte negativa de } T\text{)}$$

e a projeção de $\mathcal{H}$ no espaço nulo de T^+, denotada por E

$$E : \mathcal{H} \to Y = N(T^+)$$

Por subtração e adição de T^+ e T^- temos que

$$T = T^+ - T^-$$
$$B = T^+ + T^-$$

Tais operadores possuem as propriedades descritas no lema que segue.

Lema 2.36. *(Operadores relacionados a T) Os operadores já definidos possuem as seguintes propriedades*

(a) B, T^+ e T^- são limitados e auto-adjuntos;

(b) B, T^+ e T^- comutam com todo operador linear limitado que comuta com T, em particular $BT = TB$, $TT = TT^+$, $T^-T = TT^-$ e $T^+T^- = T^-T^+$;

(c) B, T^+ e T^- comutam com todo operadores linear auto-adjunto limitado, em particular $ET = TE$, $EB = BE$;

(d) Além disso

$$\begin{array}{cc} T^+T^- = 0 & T^-T^+ = 0 \\ T^+E = ET^+ = 0 & T^-E = ET^- = T^- \\ TE = -T^- & T(I-E) = T^+ \\ T^+ \geq 0 & T^- \geq 0 \end{array}$$

Agora, em vez de considerarmos T iremos considerar $T_\lambda = T - \lambda I$. Em vez de B, T^+, T^- e E nós tomaremos $B_\lambda = (T_\lambda^2)^{1/2}$, e os outros operadores serão $T_\lambda^+ = \frac{1}{2}(B_\lambda + T_\lambda)$, $T_\lambda^- = \frac{1}{2}(B_\lambda - T_\lambda)$ e a projeção $E_\lambda : \mathcal{H} \to Y_\lambda = N(T_\lambda^+)$ de $\mathcal{H}$ no espaço nulo $Y_\lambda = N(T_\lambda^+)$ de T_λ^+.

A partir do Lema 2.36 anterior torna-se fácil provar o seguinte.

Lema 2.37. *(Operadores relacionados à T_λ) O Lema anterior permanece verdadeiro se substituirmos T, B, T^+, T^-, E por T_λ, B_λ, T_λ^+, T_λ^-, E_λ respectivamente, onde λ é real. Além disso, os seguintes operadores comutam: T_κ, B_λ, T_μ^+, T_ν^-, E_τ.*

Agora podemos provar que dado um operador linear auto-adjunto limitado T, pode-se definir uma família espectral $E = (E_\lambda)$ de modo único. Este E é chamado de *família espectral associada ao operador T*.

Teorema 2.38. *(Família espectral associada a um operador) Seja $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um operador linear auto-adjunto limitado em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$. Seja E_λ (λ real) uma projeção de $\mathcal{H}$ no espaço nulo $Y_\lambda = N(T_\lambda^+)$ da parte positiva T_λ^+ de $T_\lambda = T - \lambda I$. Então $E = (E_\lambda)_{\lambda \in \mathbb{R}}$ é uma família espectral no intervalo $[m, M] \subset \mathbb{R}$, onde m e M são*

$$m = \inf_{\|x\|=1} \langle Tx, x \rangle \qquad M = \sup_{\|x\|=1} \langle Tx, x \rangle \tag{18}$$

Demonstração. Iremos provar

$$\lambda < \mu \Rightarrow E_\lambda \leq E_\mu \tag{19}$$

$$\lambda < m \Rightarrow E_\lambda = 0 \tag{20}$$

$$\lambda \geq M \Rightarrow E_\lambda = I \tag{21}$$

$$\mu \longrightarrow \lambda + 0 \Rightarrow E_\mu x \longrightarrow E_\lambda x \tag{22}$$

Usaremos as seguintes partes extraídas do Lema 2.37, mas reformulando para T_λ, T_μ, T_λ^+, T_λ^-, E_λ.

$$T_\mu^+ T_\mu^- = 0, \tag{23}$$

$$T_\lambda E_\lambda = -T_\lambda^-, \qquad T_\lambda(I - E_\lambda) = T_\lambda^+, \qquad T_\mu E_\mu = -T_\mu^-, \tag{24}$$

$$T_\lambda^+ \geq 0, \qquad T_\lambda^- \geq 0, \qquad T_\mu^+ \geq 0, \qquad T_\mu^- \geq 0. \tag{25}$$

Prova de (19):

Seja $\lambda < \mu$. Nós temos que $T_\lambda = T_\lambda^+ - T_\lambda^- \leq T_\lambda^+$ pois $-T_\lambda^- \leq 0$ por (25). Portanto $T_\lambda^+ - T_\mu \geq T_\lambda - T_\mu = (\mu - \lambda)I \geq 0$.

$T_\lambda^+ - T_\mu$ é auto-adjunto e comuta com T_μ^+ pelo Lema 2.37. E $T_\mu^+ \geq 0$ por (25). De $T_\lambda^+ \geq T_\mu$, temos $T_\mu^+(T_\lambda^+ - T_\mu) = T_\mu^+(T_\lambda^+ - T_\mu^+ + T_\mu^-) \geq 0$.

Aqui $T_\mu^+ T_\mu^- = 0$ por (23). Portanto $T_\mu^+ T_\lambda^+ \geq (T_\mu^+)^2$. Isto é, para todo $x \in \mathcal{H}$,

$$\left\langle T_\mu^+ T_\lambda^+ x, x \right\rangle \geq \left\langle (T_\mu^+)^2 x, x \right\rangle = \|T_\mu^+ x\| \geq 0$$

Isto mostra que $T_\lambda^+ x = 0$ implica $T_\mu^+ x = 0$. Portanto $N(T_\lambda^+) \subset N(T_\mu^+)$, então $E_\lambda \leq E_\mu$ pelo Teorema 2.25.

Prova de (20):

Seja $\lambda < m$, mas suponha que $E_\lambda \neq 0$. Então $E_\lambda z \neq 0$ para algum z. Defina $x = E_\lambda z$. Então $E_\lambda x = E_\lambda^2 z = E_\lambda z = x$, podemos assumir $\|x\| = 1$ sem perda de generalidade. Segue que

$$\begin{aligned}
\langle T_\lambda E_\lambda x, x \rangle &= \langle T_\lambda x, x \rangle \\
&= \langle Tx, x \rangle - \lambda \langle x, x \rangle \\
&= \langle Tx, x \rangle - \lambda \\
&\geq \inf_{\|\tilde{x}\|=1} \langle T\tilde{x}, \tilde{x} \rangle - \lambda \\
&\geq m - \lambda > 0
\end{aligned}$$

Mas isto contradiz $T_\lambda E_\lambda = -T_\lambda^- \leq 0$, que é obtido de (23) e (24).

Prova de (21):

Suponha que $\lambda > M$, mas $E_\lambda \neq I$. Então $I - E_\lambda \neq 0$ e $(I - E_\lambda)x = x$ para algum x de norma $\|x\| = 1$. Portanto

$$\begin{aligned}
\langle T_\lambda (I - E_\lambda)x, x\rangle &= \langle T_\lambda x, x\rangle \\
&= \langle Tx, x\rangle - \lambda \langle x, x\rangle \\
&= \langle Tx, x\rangle - \lambda \\
&\leq \sup_{\|\tilde{x}\|=1} \langle T\tilde{x}, \tilde{x}\rangle - \lambda \\
&\leq M - \lambda > 0
\end{aligned}$$

Mas isto contradiz $T_\lambda(I - E_\lambda) = T_\lambda^+ \geq 0$ que é obtido de (24) e (25). Também $E_M = I$ pela continuidade à direita que será provada a seguir.

Prova de (22):

A um intervalo $\Delta = (\lambda, \mu]$ nós associamos o operador $E(\Delta) = E_\mu - E_\lambda$.

Como $\lambda < \mu$, nós temos que $E_\lambda \leq E_\mu$ por (19), assim $E_\lambda(\mathcal{H}) \subset E_\mu(\mathcal{H})$ pelo Teorema 2.32, e $E(\Delta)$ é uma projeção pelo Teorema 2.33. Novamente pelo Teorema 2.32 temos

$$\begin{aligned}
E_\mu E(\Delta) &= E_\mu^2 - E_\mu E_\lambda = E_\mu - E_\lambda = E(\Delta) \\
\\
(I - E_\lambda)E(\Delta) &= E(\Delta) - E_\lambda(E_\mu - E_\lambda) \\
&= E(\Delta) - E_\lambda E_\mu + E_\lambda = E(\Delta)
\end{aligned} \tag{26}$$

Como $E(\Delta)$, T_μ^- e T_λ^+ são positivos e sabemos que comutam pelo Lema 2.37, os produtos $T_\mu^- E(\Delta)$ e $T_\lambda^+ E(\Delta)$ são positivos pelo Teorema 2.25. Assim por (26) e (24) temos

$$\begin{aligned}
T_\mu E(\Delta) &= T_\mu E_\mu E(\Delta) = T_\mu E_\mu E(\Delta) \leq 0 \\
T_\lambda E(\Delta) &= T_\lambda (I - E_\lambda) E(\Delta) = T_\lambda^+ E(\Delta) \geq 0.
\end{aligned}$$

Isto implica $TE(\Delta) \leq \mu E(\Delta)$ e $TE(\Delta) \geq \lambda E(\Delta)$, que juntos são

$$\lambda E(\Delta) \leq TE(\Delta) \leq \mu E(\Delta), \quad E(\Delta) = E_\mu - E_\lambda. \tag{27}$$

Mantemos λ fixo e fazemos $\mu \longrightarrow \lambda$ pela direita de modo monótono. Então $E(\Delta)x \longrightarrow P(\lambda)x$ como análogo do Teorema (2.27) para sequências decrescentes. Aqui $P(\lambda)$ é limitado e auto-adjunto. Como $E(\Delta)$ é idempotente, então $P(\lambda)$ também é. Assim, $P(\lambda)$ é uma projeção. Também $\lambda P(\lambda) = TP(\lambda)$ por (27).

Pela definição, E_λ projeta $\mathcal{H}$ em $N(T_\lambda^+)$. Consequentemente, temos $E_\lambda P(\lambda)x = P(\lambda)x$, isto é, $E_\lambda P(\lambda) = P(\lambda)$.

Por outro lado, se fizermos $\mu \longrightarrow \lambda + 0$ em (26) então

$$(I - E_\lambda)P(\lambda) = P(\lambda)$$

As duas dão $P(\lambda) = 0$. Lembrando que $E(\Delta)x \longrightarrow P(\lambda)x$, vemos que isto prova(22), isto é, E é contínuo pela direita.

Isto completa a prova que $E = (E_\lambda)$ dada no teorema é uma família espectral em $[m, M]$. □

2.11 REPRESENTAÇÃO ESPECTRAL DE OPERADORES LINEARES AUTO-ADJUNTOS LIMITADOS

Agora nosso objetivo será mostrar que E pode ser usada para obter uma representação de T, esta é uma representação integral que envolve E e é tal que $\langle Tx, y\rangle$ é representada por uma integral de Riemann-Stieltjes.

Teorema 2.39. *(Teorema Espectral para Operadores Lineares Auto-Adjuntos Limitados) Seja $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um operador linear auto-adjunto limitado em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$. Então*

(a) T tem uma representação espectral

$$T = \int_{m-0}^{M} \lambda dE_\lambda \tag{28}$$

onde $E = (E_\lambda)$ é a família espectral associada a T. A integral é entendida no sentido de convergência operatorial uniforme (convergência na norma $B(\mathcal{H}, \mathcal{H})$), e para todo $x, y \in H$

$$\langle Tx, y\rangle = \int_{m-0}^{M} \lambda dw(\lambda) \qquad w(y) = \langle E_\lambda x, y\rangle \tag{29}$$

em que a integral é uma integral de Riemann-Stieltjes.

(b) de modo mais geral, se p é um polinômio em λ com coeficiente reais, digamos

$$p(\lambda) = \alpha_n\lambda^n + \alpha_{n-1}\lambda^{n-1} + \cdots + \alpha_0$$

então o operador $p(T)$ *definido por*

$$p(T) = \alpha_n T^n + \alpha_{n-1} T^{n-1} + \cdots + \alpha_0 I$$

tem a representação espectral

$$p(T) = \int_{m-0}^{M} p(\lambda) dE_\lambda \tag{30}$$

e para todo $x, y \in \mathcal{H}$

$$\langle p(T)x, y\rangle = \int_{m-0}^{M} p(\lambda) dw(\lambda), \qquad w(\lambda) = \langle E_\lambda x, y\rangle \tag{31}$$

Nota. $m - 0$ *é escrito para indicar que deve-se levar em conta uma contribuição em* $\lambda = m$ *que ocorre se* $E_m \neq 0$ *(e* $m \neq 0$*), assim, usando qualquer* $a < m$*, podemos escrever*

$$\int_{a}^{M} \lambda dE_\lambda = \int_{m-0}^{M} \lambda dE_\lambda = mE_m + \int_{m}^{M} \lambda dE_\lambda$$

Similarmente

$$\int_{a}^{M} p(\lambda) dE_\lambda = \int_{m-0}^{M} \lambda dE_\lambda = p(m)E_m + \int_{m}^{M} p(\lambda) dE_\lambda$$

Demonstração. (a) Escolhendo uma sequência $(\mathcal{P}_n)$ de partições de $(a, b]$, onde $a < m$ e $b > M$, temos que todo $\mathcal{P}_n$ é partição de $(a, b]$ em intervalos

$$\Delta_{nj} = (\lambda_{nj}, \mu_{nj}]$$

onde $j = 1, ..., n$ e o tamanho do intervalo é $l(\Delta_{nj}) = \mu_{nj} - \lambda_{nj}$. Da definição de partição temos que $\mu_{nj} = \lambda_{nj+1}$ para $j = 1, ..., n-1$. Assumimos que a sequência $(\mathcal{P}_n)$ seja tal que

$$\eta(\mathcal{P}_n) := \max_j l(\Delta_{nj}) \longrightarrow 0 \tag{32}$$

quando $n \longrightarrow \infty$. Nós usamos (27) com $\Delta = \Delta_{nj}$, isto é,

$$\lambda_{nj} E(\Delta_{nj}) \leq TE(\Delta_{nj}) \leq \mu_{nj} E(\Delta_{nj})$$

Somando sobre j de 1 até n nós obtemos para todo n

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_{nj} E(\Delta_{nj}) \leq \sum_{j=1}^{n} TE(\Delta_{nj}) \leq \sum_{j=1}^{n} \mu_{nj} E(\Delta_{nj}) \tag{33}$$

Como $\mu_{nj} = \lambda_{nj+1}$ para $j = 1, ..., n-1$, usando (20) e (21) nós temos

$$T \sum_{j=1}^{n} E(\Delta_{nj}) = T \sum_{j=1}^{n} (E_{\mu_{nj}} - E_{\lambda_{nj}}) = T(E_{\mu_{nn}} - E_{\lambda_{n1}}) = T(I - 0) = T,$$

então $\sum_{j=1}^{n} E(\Delta_{nj}) = I$. Fórmula (32) implica que para todo $\epsilon > 0$ existe um n tal que $n(\mathcal{P}_n) < \epsilon$, portanto em (33) nós temos

$$0 \leq \sum_{j=1}^{n} \mu_{nj} E(\Delta_{nj}) - \sum_{j=1}^{n} \lambda_{nj} E(\Delta_{nj}) = \sum_{j=1}^{n} (\mu_{nj} - \lambda_{nj}) E(\Delta_{nj}) < \epsilon \sum_{j=1}^{n} E(\Delta_{nj}) < \epsilon I.$$

Disto e de (33) segue que, dado qualquer $\epsilon > 0$, existe um N tal que para todo $n > N$ e toda a escolha de $\hat{\lambda}_{nj} \in \Delta_{nj}$ nós temos

$$\| T - \sum_{j=1}^{n} \hat{\lambda}_{nj} E(\Delta_{nj}) \| < \epsilon$$

De (33) temos que $T = \sum_{j=1}^{n} TE(\Delta_{nj}) \leq \sum_{j=1}^{n} \mu_{nj} E(\Delta_{nj})$ e $0 \leq \sum_{j=1}^{n} TE(\Delta_{nj}) - \sum_{j=1}^{n} \hat{\lambda}_{nj} E(\Delta_{nj}) \leq \sum_{j=1}^{n} \mu_{nj} E(\Delta_{nj}) - \sum_{j=1}^{n} \hat{\lambda}_{nj} E(\Delta_{nj}) < \epsilon I$, o que implica

$$\| T - \sum_{j=1}^{n} \hat{\lambda}_{nj} E(\Delta_{nj}) \| < \epsilon \tag{34}$$

Como E_λ é contante para $\lambda < m$ e para $\lambda > M$, a esolha particular de um $a < m$ e um $b > M$ é imaterial.

Isto prova (28), onde (34) nos mostra que a integral é entendida no sentido de um operador convergente uniforme. O produto interno é contínuo e a soma em (34) é de Stieltjes. Portanto (28) implica (29) para toda escolha de x e y em $\mathcal{H}$.

(b) iremos provar o teorema para polinômios começando com $p(\lambda) = \lambda^r$, onde $r \in \mathbb{N}$. Para qualquer $\kappa < \lambda \leq \mu < \nu$ nós temos de (1) da Definição (2.35)

$$\begin{aligned}(E_\lambda - E_\kappa)(E_\mu - E_\nu) = & \quad E_\lambda E_\mu - E_\lambda E_\nu - E_\kappa E_\mu + E_\kappa E_\nu \\ = & \quad E_\lambda - E_\lambda - E_\kappa + E_\kappa = 0\end{aligned}$$

Isto mostra que $E(\Delta_{nj})E(\Delta_{nk}) = 0$ para $j \neq k$. Também como $E(\Delta_{nj})^s = E(\Delta_{nj})$ para todo $s = 1, 2, ...$, consequentemente, nós obtemos

$$\left[\sum_{j=1}^{n} \hat{\lambda}_{nj} E(\Delta_{nj})\right]^r = \sum_{j=1}^{n} \hat{\lambda}_{nj}^r E(\Delta_{nj}) \tag{35}$$

Se a soma em (34) se aproxima de T, a expressão em (35) do lado esquerdo se aproximará de T^r, pois a multiplicação (composição) de operadores lineares limitados é contínuo. Assim, por (35), dado $\epsilon > 0$, existe N tal que para todo $n > N$

$$\|T^r - \sum_{j=1}^{n} \hat{\lambda}_{nj}^r E(\Delta_{nj})\| < \epsilon.$$

Isto prova (30) e (31) para $p(\lambda) = \lambda^r$. Disto, as duas fórmulas (30) e (31) seguem para um polinômio arbitrário com coeficientes reais □

A determinação da família espectral para um dado operador linear auto-adjunto limitado não é fácil no geral. Em alguns casos, relativamente simples, a família pode ser conjecturada de (28).

Agora iremos listar algumas propriedades de operadores $p(T)$ que nos ajudarão na extensão do teorema espectral para funções contínuas gerais.

Teorema 2.40. *(Propriedades de $p(T)$) Seja T como no teorema anterior e sejam p, p_1 e p_2 polinômios com coeficientes reais. Então*

(a) $p(T)$ é auto-adjunto

(b) Se $p(\lambda) = \alpha p_1(\lambda) + \beta p_2(\lambda)$, então $p(T) = \alpha p_1(T) + \beta p_2(T)$

(c) Se $p(\lambda) = p_1(\lambda)p_2(\lambda)$, então $p(T) = p_1(T)p_2(T)$

(d) Se $p(\lambda) \geq 0$ para todo $\lambda \in [m, M]$, então $p(T) \geq 0$

(e) Se $p_1(\lambda) \leq p_2(\lambda)$ para todo $\lambda \in [m, M]$, então $p_1(T) \leq p_2(T)$

(f) $\|p(T)\| \leq \max_{\lambda \in J} |p(\lambda)|$, onde $J = [m, M]$

(g) Se um operador linear limitado comuta com T, também comuta com $p(T)$

Esse teorema é uma importante ferramenta para generalizar o teorema espectral.

2.12 EXTENSÃO DO TEOREMA ESPECTRAL PARA FUNÇÕES CONTÍNUAS

Queremos estender o teorema espectral para operadores $f(T)$, onde T é limitado e f é uma função contínua a valores reais. Primeiramente devemos definir o que queremos dizer por $f(T)$.

Seja $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um operador linear auto-adjunto limitado em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$, seja f uma função real contínua em $[m, M]$, tomados como em (18). Então, pelo Teorema de Aproximação de Weierstrass, sabemos que existe uma sequência de polinômios (p_n) com coeficientes reais tal que

$$p_n(\lambda) \longrightarrow f(\lambda)$$

uniformemente em $[m, M]$. Correspondendo a isso temos uma sequência de operadores lineares auto-adjuntos limitados $p_n(T)$. Pelo Teorema 2.40

$$\|p_n(T) - p_r(T)\| \leq \max_{\lambda \in J} |p_n(\lambda) - p_r(\lambda)|$$

onde $J = [m, M]$. Mas $p_n(\lambda) \longrightarrow f(\lambda)$, logo, dado $\epsilon > 0$, existe N tal que $|p_n(\lambda) - p_r(\lambda)| < \epsilon$ para todo $n, r > N$, ou seja, $(p_n(T))$ é de Cauchy e tem um limite em $B(\mathcal{H}, \mathcal{H})$, pois $B(\mathcal{H}, \mathcal{H})$ é completo.

Deste modo definimos $f(T)$ como sendo este limite $p_n(T) \longrightarrow f(T)$. Também é possível ver que $f(T)$ está bem definida, ou seja, não depende da escolha dos polinômios que convergem à f uniformemente. Tendo isto em vista, podemos estender nosso Teorema Espectral inicial para funções contínuas a valores reais.

Teorema 2.41. *(Teorema Espectral) Seja $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um operador linear auto-adjunto limitado atuando em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$ e f uma função real contínua em $[m, M]$. Então $f(T)$ tem representação espectral*

$$f(T) = \int_{m-0}^{M} f(\lambda) dE_\lambda \tag{36}$$

onde $E = (E_\lambda)$ é a família espectral associada a T, a integral é entendida no sentido de um operador uniformemente convergente. Para todo $x, y \in \mathcal{H}$ temos

$$\langle f(T)x, y\rangle = \int_{m-0}^{M} f(\lambda) dw(\lambda) \qquad w(\lambda) = \langle E_\lambda x, y\rangle \tag{37}$$

em que a integral é uma integral de Riemann-Stieltjes.

Uma propriedade da família espectral $E = (E_\lambda)$ é que esta é a única família em $[m, M]$ que nos leva à representação em (36) e (37). As propriedades de $p(T)$ listadas no Teorema 2.40 se estendem para $f(T)$, e podemos formular o seguinte.

Teorema 2.42. *(Propriedades de $f(T)$) O Teorema 2.40 continua válido se p, p_1, p_2 forem substituídos por funções contínuas f, f_1, f_2 de valores reais em $[m, M]$.*

2.13 PROPRIEDADES DA FAMÍLIA ESPECTRAL DE UM OPERADOR LINEAR AUTO-ADJUNTO LIMITADO

É de interesse que a família espectral E reflita as propriedades do espectro de um jeito simples. Para isso iremos usar a definição de família espectral junto com a representação espectral.

Se o espaço $\mathcal{H}$ tem dimensão finita temos que a família espectral E tem "saltos", ou seja, é descontínua, mais especificamente nos autovalores de T. De fato, $E_{\lambda_0} - E_{\lambda_0 - 0} \neq 0$ se e somente se λ é autovalor. Esta propriedade também se reflete no caso de dimensão infinita.

Teorema 2.43. *(Autovalores) Seja $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um operador linear auto-adjunto limitado em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ complexo e $E = (E_\lambda)$ a família espectral correspondente. Então $\lambda \longmapsto E_\lambda$ tem uma descontinuidade $\lambda = \lambda_0$ (isto é, $E_\lambda \neq E_{\lambda_0}$) se e somente se λ_0 é autovalor de T. Neste caso, o autoespaço correspondente é $N(T - \lambda_0 I) = (E_{\lambda_0} - E_{\lambda_0 - 0})(\mathcal{H})$.*

Sabemos que o espectro de um operador linear auto-adjunto limitado está no eixo real de um plano complexo. O eixo real também contém pontos do conjunto resolvente $\rho(T)$, por exemplo, $\lambda \in \rho(T)$ se λ é real e $\lambda < m$ ou $\lambda > M$.

O próximo teorema irá nos levar à uma caracterização de $\sigma_c(T)$, e assim completaremos nossa discussão pois $\sigma_r(T) = \emptyset$.

Teorema 2.44. *(Conjunto Resolvente) Seja T e $E = (E_\lambda)$ como no teorema anterior. Então λ_0 real pertence ao conjunto resolvente $\rho(T)$ de T se, e somente se, existe um $\gamma > 0$ tal que $E = (E_\lambda)$ é constante no intervalo $[\lambda_0 - \gamma, \lambda_0 + \gamma]$.*

O Teorema 2.44 também nos mostra que $\lambda_0 \in \sigma(T)$ se, e somente se, E não é constante em qualquer vizinhança de λ_0 em $\mathbb{R}$. Como $\sigma_r(T) = \emptyset$ e os pontos de $\sigma_p(T)$ correspondem à descontinuidades de E nós chegamos ao seguinte teorema.

Teorema 2.45. *(Espectro contínuo) Seja T e $E = (E_\lambda)$ como no Teorema 2.43. Então λ_0 real pertence ao espectro contínuo $\sigma_c(T)$ de T se, e somente se, E é contínuo em λ_0 (deste modo $E_{\lambda_0} = E_{\lambda_0 - 0}$) e não é constante em nenhuma vizinhança de λ_0 em $\mathbb{R}$.*

2.14 EXEMPLOS DO TEOREMA ESPECTRAL

Caso com dimensão finita:

Exemplo 2.46. *Seja A um operador auto-adjunto no espaço de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$. Então existem autovalores reais $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_n\}$ (que podem ser repetidos) e uma base ortonormal $\{v_1, \ldots, v_n\}$ de $\mathbb{C}^n$ autovetores de A, tais que $\langle v_i, v_j \rangle = \delta_{ij}$ e $Av_i = \lambda_i v_i$. Logo A é completamente determinado por estes autovalores e autovetores*

$$Aw = \sum_{i=1}^{n} \langle v_j, w \rangle \lambda_j v_j. \tag{38}$$

Para cada j defina P_j como o operador projeção ortogonal do j-ésimo autovetor v_j tal que $P_j w = \langle v_j, w \rangle v_j$. Para todo $\lambda \in \mathbb{R}$, defina

$$E_\lambda := \sum_{\{j : \lambda_j \leq \lambda\}} P_j \tag{39}$$

então a família E_λé a família espectral dos operadores projeção para A. Para provar que de fato E_λ forma uma família espectral então deve satisfazer a Definição 2.35:

Note que para $\lambda < \mu$

$$\begin{aligned}
\left(E_\lambda E_\mu\right) w &= \left(\sum_{\{j:\lambda_j<\lambda\}} P_j \sum_{\{i:\lambda_i<\mu\}} P_i\right) w \\
&= \sum_{\{j:\lambda_j<\lambda\}} \sum_{\{i:\lambda_i<\mu\}} P_j \langle v_i, w\rangle v_i \\
&= \sum_{\{j:\lambda_j<\lambda\}} \sum_{\{i:\lambda_i<\mu\}} \langle v_i, w\rangle \langle v_j, v_i\rangle v_j \\
&= \sum_{\{j:\lambda_j<\lambda\}} \sum_{\{i:\lambda_i<\mu\}} \langle v_i, w\rangle \delta_{ij} v_j \\
&= \sum_{\{j:\lambda_j<\lambda\}} \langle v_j, w\rangle v_j \\
&= E_\lambda .
\end{aligned}$$

Analogamente temos $E_\mu E_\lambda = E_\lambda$.

É óbvio que $\lim_{\{\lambda\to-\infty\}} E_\lambda x = 0$ *e* $\lim_{\{\lambda\to\infty\}} E_\lambda x = x$. *Por último,*

$$\lim_{\mu\to\lambda+0} E_\mu x = E_\lambda x.$$

De (38) e da definição de E_λ *temos que:*

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_\lambda .$$

Caso com dimensão infinita:

Exemplo 2.47. *Aqui veremos que mesmo para espaços de Hilbert com dimensão infinita, contanto que o operador* A *tenha uma base ortonormal e completa de autovetores, a situação similar ao do caso com dimensão finita, como no Exemplo 2.46. Sejam* $I = (0,1) \subset \mathbf{R}$ *e* $\mathcal{H} = L^2(I)$ *o espaço das funções de quadrado integrável. Defina*

$$D(A) = \{\psi \in \mathcal{H} : \psi' \in \mathcal{H}, \psi(0) = \psi(1)\}$$

e $(A\psi) = \imath\psi'(x)$. *Seja* $e_j(x) = e^{-2\pi\imath jx}$, *então* $Ae_j = 2\pi j e_j$. *Disso temos que cada* e_j *é um autovetor, com autovalor* $\lambda_j = 2\pi j$. *Note que* $\{e_j\}_{j=-\infty}^{\infty}$ *é uma base ortonormal completa de* $\mathcal{H}$*.Agora, analogamente à (38), temos*

$$A\psi = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \langle e_j, \psi\rangle \lambda_j e_j$$

para $\psi \in D(A)$. *Defina* $P_j w = \langle e_j, \psi\rangle e_j$, *então para todo* $\lambda \in \mathbf{R}$, *defina*

$$E_\lambda := \sum_{j:\lambda_j\leq\lambda} P_j .$$

Então, analogamente ao Exemplo 2.46, $\{E_\lambda\}$ *será uma família espectral para* A.

2.15 OPERADORES ILIMITADOS E O LAPLACIANO

O estudo de operadores ilimitados foi estimulado para construir uma fundamentação matemática rigorosa para mecânica quântica. Aqui, para que o adjunto, A^*, de um operador A exista e seja único é necessário que A esteja densamente definido em $\mathcal{H}$, $D(A)$ seja denso em $\mathcal{H}$. Além disso, se A é simétrico e ilimitado então seu domínio não pode ser todo $\mathcal{H}$.

Analisaremos o operador Laplaciano, Δ, para que depois seja mais simples analisarmos o Hamiltoniano como $H = \Delta + V$, onde V é o potencial.

Seja A um operador linear em um espaço de Banach X com domínio $D(A) \subset X$. Definimos que A é invertível se existe um operador limitado, A^{-1}, tal que $A^{-1} : X \to D(A)$ com $AA^{-1} = 1_X$ e $A^{-1}A = 1_{D(A)}$. Note que fazemos distinção entre ser invertível e inversível, pois a inversa de A pode ser ilimitada. Agora iremos considerar a invertibilidade de $A - \lambda I$, onde I é o operador identidade em X e $\lambda \in \mathbb{C}$. Isto nos dará uma decomposição disjunta de $\mathbb{C}$.

Definição 2.48. *Seja A um operador linear em X com domínio $D(A)$.*

(1) O espectro de A, $\sigma(A)$, é conjunto dos pontos $\lambda \in \mathbb{C}$ para os quais $A - \lambda I$ não é invertível.

(2) O conjunto resolvente de A, $\rho(A)$, é o conjunto de todos os pontos $\lambda \in \mathbb{C}$ para os quais $A - \lambda I$ é invertível.

Discutiremos brevemente algumas questões em relação aos critérios para que um operador ilimitado seja auto-adjunto e apresentaremos algumas outras definições.

Definição 2.49. *Um operador A em um domínio denso $D(A)$ é simétrico se para todo $u, v \in D(A)$*

$$\langle Au, v\rangle = \langle u, Av\rangle$$

Com esta definição nos basta apenas algumas noções em Teoria das Distribuições, [23, 24], para termos o seguinte exemplo de operador simétrico.

Exemplo 2.50. *O Laplaciano, denotado por Δ, onde $\Delta = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$, é simétrico em $H^2(\mathbb{R}^n)$.*

Antes de provarmos o exemplo acima definiremos o espaço $H^2(\mathbb{R}^n)$.

$H^2(\mathbb{R}^n)$ é o espaço de Sobolev de ordem 2, mais especificamente é o espaço de Banach obtido como o conjunto $(C_0^\infty(\mathbb{R}^n), \|.\|_{2,2})$ com

$$\|f\|_{2,2} = \left[\sum_{|\sigma|\leq 2} \sum_{i=1}^{n} \left\| \frac{\partial^{\sigma_i} f}{\partial x_i^{\sigma_i}} \right\|_2^2 \right]^{1/2}$$

ou com sua norma equivalente

$$\|f\|_2^2 \equiv \int (1 + \|k\|^2)^2 |\hat{f}(k)|^2 dk$$

onde $\hat{f}$ é a Transformada de Fourier de f

$$\hat{f}(k) \equiv (2\pi)^{\frac{-n}{2}} \int e^{-\imath k\cdot x} f(x) dx$$

Demonstração. O Laplaciano Δ é simétrico em $H^2(\mathbb{R}^n)$, onde definimos $\langle f, g\rangle = \int f\overline{g}$ para $f, g \in H^2(\mathbb{R}^n)$

Uma das propriedades da Transformada de Fourier que pode ser facilmente obtida é

$$\left(\widehat{\frac{\partial f}{\partial x_i}}\right)(k) = -\imath k_i \hat{f}(k)$$

Logo, similarmente, $(\widehat{\Delta f})(k) = -\|k\|^2 \hat{f}(k)$, onde $\|k\|^2 = \sum_{i=1}^n k_i^2$. Também temos pelo Teorema de Plancherel $\left\langle \hat{f}, \hat{g} \right\rangle = \langle f, g\rangle$ ou seja $\int \hat{f}\overline{\hat{g}} = \int f\bar{g}$. Considerando o produto interno como

$$\langle u, v\rangle = \sum_{|\sigma|\leq 2} \sum_{i=1}^{n} \int \frac{\partial^{\sigma_i} u}{\partial x_i^{\sigma_i}} \frac{\partial^{\sigma_i} \overline{v}}{\partial x_i^{\sigma_i}}.$$

$$\begin{aligned}
\langle \Delta u, v\rangle &= \sum_{|\sigma|\leq 2} \sum_{i=1}^{n} \int \frac{\partial^{\sigma_i} \widehat{\Delta u}}{\partial x_i^{\sigma_i}} \frac{\partial^{\sigma_i} \widehat{\overline{v}}}{\partial x_i^{\sigma_i}} = \sum_{|\sigma|\leq 2} \sum_{i,j=1}^{n} \int \left(-\|k\|^2 k_i k_j \widehat{u} k_i k_j \widehat{\overline{v}}\right) \\
&= \sum_{|\sigma|\leq 2} \sum_{i,j=1}^{n} \int \left(k_i k_j \widehat{u} k_i k_j (-\|k\|^2 \widehat{\overline{v}})\right) \\
&= \sum_{|\sigma|\leq 2} \sum_{i,j=1}^{n} \int \left(k_i k_j \widehat{u} k_i k_j (\widehat{\Delta \overline{v}})\right) \\
&= \sum_{|\sigma|\leq 2} \sum_{i=1}^{n} \int \frac{\partial^{\sigma_i} u}{\partial x_i^{\sigma_i}} \frac{\partial^{\sigma_i} \Delta \overline{v}}{\partial x_i^{\sigma_i}} \\
&= \langle u, \Delta v\rangle .
\end{aligned}$$

□

Definição 2.51. *Seja A um operador(não necessariamente limitado) em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$. O adjunto de A, A^*, é definido no domínio*

$$D(A^*) \equiv \{x \in \mathcal{H}; |\langle Ay, x\rangle| \leq C_x\|y\| \text{ para algum } C_x \text{ (independente de } y\text{) e para todo } y \in D(A)\}$$

como um mapa $A^* : D(A^*) \to \mathcal{H}$ satisfazendo $\langle Ay, x\rangle = \langle y, A^*x\rangle$ para todo $y \in D(A)$ e todo $x \in D(A^*)$.

Agora que definimos adjunto de um operador para o caso geral, podemos definir o que é um operador auto-adjunto.

Definição 2.52. *Um operador A é chamado auto-adjunto se $A = A^*$, ou seja, se A é simétrico e $D(A) = D(A^*)$.*

Para operadores limitados não havia diferença entre ser simétrico e ser auto-adjunto, pois $|\langle Ay, x\rangle| \leq \|Ay\|\|x\| \leq \|A\|\|x\|\|y\|$ e podemos tomar $C_x = \|A\|\|x\|$.

Teorema 2.53. *Seja $A : D(A) \to \mathcal{H}$ um operador linear auto-adjunto densamente definido no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$. Então $\lambda \in \rho(A)$ se, e somente se, existe $c > 0$ tal que para todo $x \in D(A)$*

$$\|A_\lambda x\| \geq c\|x\| \tag{40}$$

onde $A_\lambda = A - \lambda I := A - \lambda$.

Demonstração. Seja $\lambda \in \rho(A)$ então pela Definição 2.4 temos que o resolvente $R_\lambda = (A-\lambda)^{-1}$ existe e é limitado, $\|R_\lambda\| = k > 0$. Como $R_\lambda A_\lambda x = x$ para $x \in D(A)$

$$\|x\| = \|R_\lambda A_\lambda x\| \leq \|R_\lambda\|\|A_\lambda x\| = k\|A_\lambda x\|$$

dividindo por k temos $\|A_\lambda x\| \geq c\|x\|$, onde $c = \frac{1}{k}$.

Iremos dar uma noção da implicação de volta. Supondo que $\|A_\lambda x\| \geq c\|x\|$ para algum $c > 0$ e todo $x \in D(A)$. Considere $\mathrm{Im}(A_\lambda) = \{y | y = A_\lambda x,\ x \in D(A)\}$, deve-se mostrar que:

(i) $A_\lambda : D(A) \to \mathrm{Im}(A_\lambda)$ é bijetiva;

(ii) $\mathrm{Im}(A_\lambda)$ é denso em $\mathcal{H}$;

(iii) $\mathrm{Im}(A_\lambda)$ é fechado.

Isto implicará que o resolvente $R_\lambda = A_\lambda^{-1}$ esta definido em todo $\mathcal{H}$. A limitação de R_λ seguirá de 40, e assim teremos $\lambda \in \rho(A)$. □

Do Teorema acima teremos que o espectro de um operador auto-adjunto, seja ele llimitado ou não, é real.

Teorema 2.54. *O espectro $\sigma(A)$ de um operador linear auto-adjunto $A : D(A) \to \mathcal{H}$ é real e fechado, onde $\mathcal{H}$ é um espaço de Hilbert complexo e $D(A)$ é denso em $\mathcal{H}$.*

Demonstração. Primeiro iremos provar que $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$. Para $x \neq 0$ em $D(A)$ temos

$$\langle A_\lambda x, x\rangle = \langle Ax, x\rangle - \lambda \langle x, x\rangle ,$$

como $\langle Ax, x\rangle = \langle x, Ax\rangle = \overline{\langle Ax, x\rangle}$ então $\langle x, x\rangle$ e $\langle Ax, x\rangle$ são reais. Assim

$$\overline{\langle A_\lambda x, x\rangle} = \langle Ax, x\rangle - \overline{\lambda}\,\langle x, x\rangle\,.$$

Escrevendo $\lambda = \alpha + \imath\beta$ com $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ temos que $\overline{\lambda} = \alpha - \imath\beta$ e disso

$$\overline{\langle A_\lambda x, x\rangle} - \langle A_\lambda x, x\rangle = \left(\lambda - \overline{\lambda}\right)\langle x, x\rangle = 2\imath\beta\|x\|^2,$$

enquanto que o lado esquerdo fica $-2\imath \mathrm{im}\,\langle A_\lambda x, x\rangle$, onde $\mathrm{im}\,\langle A_\lambda x, x\rangle$ é a parte imaginária de $\langle A_\lambda x, x\rangle$. Como a parte imaginária de um número é sempre menor ou igual ao valor absoluto, pela desigualdade de Schwarz ficamos com

$$|\beta|\|x\|^2 \leq |\langle A_\lambda x, x\rangle| \leq \|A_\lambda x\|\|x\|.$$

Como $\|x\| \neq 0$ podemos dividir ambos os lados por $\|x\|$ e disto $|\beta|\|x\| \leq \|A_\lambda x\|$, $\forall x \in D(A)$. Se λ não for real então $\beta \neq 0$, então $\lambda \in \rho$ pelo Teorema 2.53. Assim temos que $\sigma(A)$ é real.

Agora iremos provar que $\sigma(A)$ é fechado. Provaremos que seu complemento $\rho(A)$ é aberto. Seja $\lambda_0 \in \rho(A)$ então para λ suficientemente perto de λ_0 teremos que $\lambda \in \rho(A)$.

Pela desigualdade triangular

$$\begin{aligned} \|Ax - \lambda_0 x\| &= \|Ax - \lambda_0 x - \lambda x + \lambda x\| \\ &\leq \|Ax - \lambda x\| + |\lambda - \lambda_0|\|x\| \end{aligned}$$

ou também podemos escrever $\|Ax - \lambda x\| \geq \|Ax - \lambda_0 x\| - |\lambda - \lambda_0|\|x\|$. Como $\lambda_0 \in \rho(A)$, pelo Teorema 2.53, existe $c > 0$ tal que para todo $x \in D(A)$ temos $\|Ax - \lambda_0 x\| \geq c\|x\|$. Agora assuma λ perto de λ_0, $|\lambda - \lambda_0| \leq \frac{c}{2}$, então ficamos com

$$\|Ax - \lambda x\| \geq c\|x\| - \frac{1}{2}c\|x\| = \frac{1}{2}c\|x\|.$$

Novamente pelo Teorema 2.53 temos que $\lambda \in \rho(A)$. Concluindo que existe uma vizinhança aberta de λ_0 inteiramente contida em $\rho(A)$, portanto $\rho(A)$ é um conjunto aberto e assim $\sigma(A) = \mathbb{C}\backslash\rho(A)$ é fechado. □

Com isto podemos provar a seguinte Proposição.

Proposição 2.55. *Seja um operador A auto-adjunto densamente definido. Então $A \geq 0$ se, e somente se, $\sigma(A) \subset [0, \infty)$.*

Demonstração. Com $A \geq 0$, queremos dizer que A é positivo, ou seja, $\langle u, Au \rangle \geq 0$ para qualquer $u \in D(A)$. Provaremos aqui somente a primeira implicação, se $A \geq 0$ então $\sigma(A) \subset [0, \infty)$.

Seja $\lambda \in \mathbb{R}$, então $\|(A-\lambda)u\|^2 = \|Au\|^2 + |\lambda|^2\|u\| - 2\lambda \langle u, Au \rangle$.

Com $\lambda < 0$ temos claramente que $\|(A-\lambda)u\|^2 \geq |\lambda|^2\|u\|$, logo pelo Teorema 2.53 temos que $\lambda < 0$ está em $\rho(A)$. Portanto $\sigma(A) \in [0, \infty)$ □

A próxima proposição é simples, porém será necessária para podermos determinar o domínio onde o operador Δ é auto-adjunto.

Proposição 2.56. *Se A é fechado e simétrico, então $Im(A \pm \imath)$ é fechado.*

Demonstração. Tome A fechado e simétrico, seja $(A \pm \imath)y_n$ sequência em $\mathrm{Im}(A \pm \imath)$ convergente, então $\|(A \pm \imath)y_n\|^2 = \langle (A \pm \imath)y_n, (A \pm \imath)y_n \rangle = \|Ay_n\|^2 + \|y_n\|^2$, onde usamos simetria $\langle y_n, Ay_n \rangle = \langle Ay_n, y_n \rangle$. Como A é fechado então $Ay_n \to Ay \in Im(A)$ e $\pm \imath y_n \to \pm \imath y$ e deste modo $(A \pm \imath)y_n \to (A \pm \imath)y \in \mathrm{Im}(A \pm \imath)$. Logo $\mathrm{Im}(A \pm \imath)$ é fechado. □

Trataremos o Laplaciano Δ separadamente e depois analisaremos o operador Hamiltoniano ou de Schrödinger $H = -\Delta + V$. Primeiro veremos como é seu espectro.

Teorema 2.57. *O espectro do operador $-\Delta$ em $H^2(\mathbb{R}^n)$ é $\sigma(-\Delta) \subset [0, \infty)$.*

Demonstração. Temos $\lambda \in \rho(\Delta) \iff \Delta - \lambda$ é invertível. Suponha que existe $(\Delta - \lambda)^{-1}$, então dado $f \in \mathrm{Im}(\Delta - \lambda)$, existe um único $u \in D(\Delta - \lambda)$ tal que

$$(\Delta - \lambda)u = f \iff \left(-\|k\|^2 - \lambda\right)\hat{u} = \hat{f} \iff \hat{u} = \left(-\|k\|^2 - \lambda\right)^{-1}\hat{f}$$

ou seja, λ deve ser positivo, $\lambda \in (0, \infty)$. Logo, $\sigma(\Delta) \subset (-\infty, 0]$. □

Teorema 2.58. *Seja A um operador linear densamente definido, então $\overline{Im(A)} \oplus Ker(A^*) = \mathcal{H}$.*

Iremos provar que o complemento ortogonal de $\mathrm{Im}(A)$ é $\mathrm{Ker}(A)$. Seja $u \in \mathrm{Im}(A)$ e $v \in \mathrm{Ker}(A^*)$, então existe $f \in D(A)$ tal que $u = Af$, assim

$$\langle u, v \rangle = \langle Af, v \rangle = \langle f, A^*v \rangle = 0$$

e portanto $\mathrm{Ker}(A^*) \subset (\mathrm{Im}(A))^{\perp}$. Agora tome $w \in (\mathrm{Im}(A))^{\perp}$, para algum $u = Af \in \mathrm{Im}(A)$ temos

$$0 = \langle u, w \rangle = \langle Af, w \rangle = \langle f, A^*w \rangle,$$

pois $\langle Af, w\rangle = 0$ implica que $w \in D(A^*)$. Como A é densamente definido então devemos ter $A^*w = 0$ e disto segue que $w \in \mathrm{Ker}(A^*)$, ou seja, $(\mathrm{Im}(A))^{\perp} \subset \mathrm{Ker}(A^*)$.

É relativamente fácil provar que um operador é simétrico, porém suas propriedades são mais fracas, ou seja, ser auto-adjunto nos dá mais informações do operador do que a propriedade simétrica. Entretanto é mais difícil provar que um operador A é auto-adjunto, pois o cálculo de $D(A^*)$ para provarmos que $D(A) = D(A^*)$ não é natural, então precisamos de certos critérios.

Teorema 2.59. *(Critério Básico Para um Operador ser Auto-Adjunto) Seja A um operador simétrico fechado densamente definido. Então as seguintes afirmações são equivalentes*

(a) A é auto-adjunto em $\mathcal{H}$

(b) Ker$(A^* \pm \imath) = \{0\}$

(c) Im$(A \pm \imath) = \mathcal{H}$

Demonstração. As afirmações (b) e (c) são equivalentes pois $\mathrm{Ker}(A^*) \oplus \overline{\mathrm{Im}(A)} = \mathcal{H}$ e do enunciado temos que $\mathrm{Im}(A \pm \imath)$ é fechado pelo Teorema 2.56.

(a) implica (b) pois $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ (se A é auto-adjunto, seu espectro é real).

(b) e (c) implicam (a). Sabemos que $D(A) \subset D(A^*)$, precisamos mostrar que $D(A^*) \subset D(A)$.

Seja $f \in D(A^*)$ e defina $\phi \equiv (A^* + \imath)f$. Por (c), existe uma $g \in D(A)$ tal que $(A + \imath)g = \phi$.

Além disso, como A é simétrico e $g \in D(A) \subset D(A^*)$, $Ag = A^*g$.

Portanto temos

$$(A^* + \imath)f = \phi = (A^* + \imath)g \quad \text{ou} \quad (A^* + \imath)(f - g) = 0$$

Por (b), $f = g$ e disso resulta $f \in D(A)$. Portanto $D(A) = D(A^*)$ e A é auto-adjunto. □

Agora veremos um Lema que nos servirá de ferramenta para provarmos quando um operador, com dadas propriedades, é auto-adjunto.

Lema 2.60. *Seja H um operador simétrico, positivo, fechado e densamente definido. Então H é auto-adjunto se, e somente se, Ker$(H^* + b) = \{0\}$ para algum $b > 0$. Similarmente, se H é um operador simétrico positivo e densamente definido, então o fecho de H, H^{**}, é auto-adjunto se, e somente se, esta condição é válida.*

Demonstração. (1) Primeiro iremos assumir que $\mathrm{Ker}(H^* + b) = \{0\}$. Sem perda de generalidade podemos tomar $b = 1$.

(a) Nosso primeiro passo é mostrar que $\mathrm{Im}(H+1)$ é fechado. Seja $u_n \in \mathrm{Im}(H+1)$ uma sequência convergente, temos que existe uma sequência $\{f_n\} \subset D(H)$ tal que $u_n = (H+1)f_n$. Então

$$\langle f_n, u_n \rangle = \langle f_n, Hf_n + f_n \rangle = \langle f_n, Hf_n \rangle + \|f_n\|^2 \geq \|f_n\|^2$$

pois H é positivo, e pela desigualdade de Schwarz $\|f_n\|^2 \leq \langle f_n, u_n \rangle \leq \|f_n\| \|u_n\|$, o que implica

$$\|f_n\| \leq \|u_n\| \tag{41}$$

Como $u_n \longrightarrow u$, o conjunto $\{u_n\}$ é uniformemente limitado (isto é, $\sup_n \|u_n\| < \infty$) e então (41) implica que $\sup_n \|f_n\| < \infty$. Agora

$$\begin{aligned} \|f_n - f_m\| &\leq \langle (f_n - f_m), (H+1)(f_n - f_m) \rangle \\ &\leq \|f_n - f_m\| \|u_n - u_m\| \\ &\leq (\|f_n\| + \|f_m\|) \|u_n - u_m\| \\ &\leq C \|u_n - u_m\| \end{aligned}$$

onde $C \geq 0$, e assim a sequência $\{f_n\}$ é de Cauchy. Como H é fechado, existe $f = s - \lim_{n\to\infty} f_n \in D(H)$ tal que $(H+1)f = u$. Portanto, $\mathrm{Im}(H+1)$ é fechado.

(b) Como $\ker B^* \oplus \overline{\mathrm{Im}(B)} = \mathcal{H}$ para qualquer operador linear B densamente definido então o fato de que $\ker(H^*+1) = \{0\}$ implica que $\mathrm{Im}(H+1) = \mathcal{H}$

(c) Agora iremos mostrar que $D(H^*) \subset D(H)$. Tome $f \in D(H^*)$ e coloque $\phi = (H^*+1)f$. Então existe $g \in D(H)$, por (b), tal que

$$(H+1)g = (H^*+1)g = \phi = (H^*+1)f$$

como $D(H) \subset D(H^*)$. De (41), $(H^*+1)(f-g) = 0$ então $f = g$.

(2) A volta é trivial pois se $H = H^*$e $H \geq 0$, então $\ker(H+b) = \{0\}$ para qualquer $b > 0$, pois $\sigma(H) \subset \mathbb{R}_+$, pela Proposição 2.55. □

Agora provaremos que o Laplaciano é auto-adjunto.

Teorema 2.61. *O Laplaciano Δ em $H^2(\mathbb{R}^n)$ é auto-adjunto.*

Demonstração. Provaremos que $\mathrm{Im}(\Delta + 1) = L^2(\mathbb{R}^n)$.

Do Exemplo 2.50 sabemos que Δ é simétrico.

O Laplaciano é fechado em $H^2(\mathbb{R}^n)$, suponha $\{f_n\} \subset H^2(\mathbb{R}^n)$ uma sequência de Cauchy no sentido L^2 tal que Δf_n é também de Cauchy. Isto significa que $f = \lim f_n \in H^2(\mathbb{R}^n)$ e portanto Δf_nconverge para Δf (pois $\hat{\Delta f_n}(k) = -\|k\|^2 \hat{f}_n(k)$).

Agora pelo Teorema 2.57 temos que $\sigma(\Delta) \subset (-\infty, 0]$, então $-\imath \in \rho(\Delta)$, ou seja, $(\Delta + \imath)$ tem inversa limitada e isto só é possível se $\text{Im}(\Delta + \imath) = L^2(\mathbb{R}^n)$. Mas $H^2(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ e $f \in D(\Delta)$ se, e somente se $f \in H^2(\mathbb{R}^n)$([22], p. 83), logo pelo Teorema crit=0000E9rio auto adjunto temos que Δ é auto-adjunto em $H^2(\mathbb{R}^n)$. □

Um operador simétrico A com domínio $D(A)$, tendo a propriedade que seu fecho é auto-adjunto, é chamado de **essencialmente auto-adjunto**.

Teorema 2.62. *O operador Δ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$.*

Como do Teorema 2.62 temos que Δ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ então podemos nos concentrar em operadores de Schrödinger $H = -\Delta + V$ com potenciais específicos. Para isso iremos precisar de algumas ferramentas e de alguns conceitos de Teoria das Distribuições.

3 O TEOREMA DE KATO

O átomo mais simples é o átomo de hidrogênio, composto por um elétron e um próton, e é descrito pelo operador Hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{x_1} - \frac{\hbar^2}{2m_p}\Delta_{x_2} - \frac{e^2}{\|x_1 - x_2\|}\,, \tag{42}$$

em que m_e e m_p são as massas do elétron e do próton, e é a carga elétrica do próton e $-e$ é a carga elétrica do elétron. Aqui $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^3$ são as coordenadas do elétron e do próton em um referencial cartesiano inercial. Esse problema pode ser simplificado consideravelmente passando-se ao referencial do centro de massa. Colocando a origem no centro de massa, $m_e x_1 + m_p x_2 = 0$, e considerando o vetor distância que separa as duas partículas, $x = x_1 - x_2$, temos

$$x_1 = \frac{m_p}{m_e + m_p}x\,,\ \ x_2 = -\frac{m_e}{m_e + m_p}x\,.$$

Então podemos separar o movimento do centro de massa, que tem o aspecto do movimento de uma única partícula de massa reduzida

$$m_r = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

no campo potencial $-e^2/\|x\|$,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_r}\Delta_x - \frac{e^2}{\|x\|}\,. \tag{43}$$

A menos de uma escolha de unidades físicas, o Hamiltoniano H pode ser escrito como $H = -\Delta + V$, em que $V(x) = -1/\|x\|$.

Nesta parte mostraremos que $H = -\Delta - \frac{1}{\|x\|}$ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty\left(\mathbb{R}^3\right)$. Este resultado se estende também para o caso do operador Hamiltoniano de um sistema de n partículas de carga $-e$ no campo central de uma partícula de carga positiva ne,

$$H = -\Delta - \sum_{k=1}^{n} \frac{ne^2}{|\mathbf{x}_i|} + \sum_{i<j}^{n} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}.$$

Nesta parte focamos no estudo do Teorema de Kato [22].

Teorema 3.1. *(Kato) Seja $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ uma função mensurável a valores reais. Então $-\Delta + V(x)$ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$.*

Precisaremos da Desigualdade de Kato, conforme apresentada em [22]:

Teorema 3.2. *(Desigualdade de Kato) Seja $u \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^n)$ e suponha que o Laplaciano distribucional $\Delta u \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^n)$. Então*

$$\Delta|u| \geq Re[(sgn(u))\Delta u] \tag{44}$$

no sentido de distribuição, onde

$$sgnu(x) = \begin{cases} 0 & se\ u(x) = 0 \\ \bar{u}(x)|u(x)|^{-1} & se\ u(x) \neq 0 \end{cases}$$

e com isso $|u(x)| = sgn(u)(u)$.

A desigualdade de Kato nos permitirá dizer para quais potenciais V teremos H essencialmente auto-adjunto. Então podemos concluir que o operador Hamiltoniano é essencialmente auto-adjunto para o caso do potencial de Coulomb.

Definição 3.3. *Para qualquer $1 \leq p < \infty$, definimos um espaço localmente L^p por $L^p_{loc}(\mathbb{R}^n) = \{f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C};\ \int_\Omega |f(x)|^p dx < \infty,\ para\ qualquer\ \Omega \subset \mathbb{R}^n\ limitado\}$*

Ou seja, $L^p(\mathbb{R}^n) \subset L^p_{loc}(\mathbb{R}^n)$. Além disso, através da desigualdade de Hölder

$$\|uv\|_1 \leq \|u\|_p \|v\|_q \tag{45}$$

onde $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ com $p, q \in [0, \infty]$, temos que se $f \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^n)$ e $g \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, então $\int f\bar{g}$ converge, pois $\|fg\|_1 \leq \|f\|_1 \|g\|_0$.

Definição 3.4. *Seja $\omega \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$, com $\omega \geq 0$ e $\int \omega(x)dx = 1$. Para $\delta > 0$, nós definimos $\omega_\delta(x) \equiv \delta^{-n}\omega(\delta^{-1}x)$. Note que então $\int \omega_\delta(x)dx = 1$. Definimos um mapa I_δ por $I_\delta u \equiv \omega_\delta \star u$ sempre que o lado direito existe, e onde $(f \star g)(x) \equiv \int f(x-y)g(y)dy$ é a convolução de g e f. O mapeamento I_δ é chamado de uma aproximação da unidade.*

Usaremos essa definição para provarmos importantes resultados e para isso precisamos entender algumas propriedades de I_δ.

Lema 3.5. *Seja I_δ uma aproximação da unidade.*

(i) Se $u \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^n)$, então $I_\delta u \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$.

(ii) Para qualquer função diferenciável u, $\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\right) I_\delta u = I_\delta \left(\frac{\partial u}{\partial x_i}\right)$, isto é, o mapeamento I_δ comuta com $\partial/\partial x_i$.

(iii) O mapeamento $I_\delta : L^p(\mathbb{R}^n) \to L^p(\mathbb{R}^n)$ é limitado, e $\|I_\delta\| \leq 1$.

(iv) Para qualquer $u \in L^p(\mathbb{R}^n)$, $\lim_{\delta \to 0} \|I_\delta u - u\|_p = 0$.

(v) Para qualquer $u \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^n)$, $I_\delta u \to u$ no sentido distribucional, quando $\delta \to 0$.

Com estas ferramentas em mente podemos prosseguir e provar que o operador de Schrödinger é essencialmente auto-adjunto para $V \in L^2_{loc}$ e $V \geq 0$.

Teorema 3.6. *Seja $V \in L^2_{loc}$ e $V \geq 0$. Então o operador de Schrödinger $H = -\Delta + V$ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$.*

Demonstração. Pelo Lema 2.60 é suficiente mostrar que $\mathrm{Ker}(H^* + 1) = \{0\}$.

Partindo disso, como $D(H^*) \subset L^2$, basta provarmos a afirmação

$$\text{Se } -\Delta u + Vu + u = 0,\ u \in L^2, \text{ então } u = 0 \tag{46}$$

Para isto iremos usar a Desigualdade de Kato. Mas primeiro note que $u \in L^2$ e $V \in L^2_{loc}$ implica, pela desigualdade de Schwarz, $|\langle u, v\rangle| \leq \|u\|\|v\|$, que $uV \in L^1_{loc}$.

Mas como $\langle u, v\rangle = \int u\bar{v}$ e $\|u\| = (\langle u, u\rangle)^{\frac{1}{2}}$ temos que

$$|\langle u, V\rangle| = \left|\int u\bar{V}\right| \leq \left(\int |u|^2\right)^{1/2} \left(\int |V|^2\right)^{1/2} < \infty.$$

Provando que de fato $uV \in L^1_{loc}$. Como temos a inclusão $L^2 \subset L^2_{loc} \subset L^1_{loc}$ que segue também da desiguldade de Schwarz

$$\int_\Omega |u(x)| \cdot 1 \leq V(\Omega) \left[\int_\Omega |u(x)|^2\right]^{1/2}$$

onde $V(\Omega)$ é o volume de Ω, temos então $u \in L^1_{loc}$.

Portanto por (46), $\Delta u \in L^1_{loc}$, pois assumimos $\Delta u = Vu + u$, onde a derivada é uma derivada distribucional.

Agora podemos aplicar a Desigualdade de Kato (44), donde obtemos

$$\begin{aligned}\Delta|u| &\geq \mathrm{Re}[(\mathrm{sgn}u)\Delta u] \\ &\geq \mathrm{Re}[(\mathrm{sgn}u)(V+1)u] \\ &\geq |u|(V+1) \geq 0.\end{aligned}$$

Portanto a função $\Delta|u| \geq 0$, e pelo Lema 3.5, I_δ comuta com Δ,

$$\Delta I_\delta|u| = I_\delta \Delta|u| \geq 0 \tag{47}$$

Por outro lado, $I_\delta|u| \in D(\Delta)$ e portanto, utilizando propriedades da Transformada de Fourier vistas na prova do Teorema 2.61

$$\begin{aligned}\langle \Delta(I_\delta|u|), (I_\delta|u|)\rangle &= \int \widehat{\Delta(I_\delta|u|)}\overline{\widehat{(I_\delta|u|)}} \\ &= \int [-\|k\|^2\widehat{(I_\delta|u|)}\overline{\widehat{(I_\delta|u|)}}] \\ &= -\int [-\imath k\widehat{(I_\delta|u|)}\overline{-\imath k\widehat{(I_\delta|u|)}}] \\ &= -\int \nabla(I_\delta|u|)\overline{\nabla(I_\delta|u|)} \\ &= -\langle \nabla(I_\delta|u|), \nabla(I_\delta|u|)\rangle \\ &= -\|\nabla(I_\delta|u|)\|^2 \leq 0.\end{aligned}$$

Por (47) temos que $\langle \Delta(I_\delta|u|), (I_\delta|u|)\rangle$ é não-negativo e então $\nabla(I_\delta|u|) = 0$ (no sentido L^2) e portanto $(I_\delta|u|)$ deve ser uma constante não-negativa, diga-se $I_\delta|u| = c \geq 0$. Mas $u \in L^2$ e $I_\delta|u| \longrightarrow |u|$ no sentido L^2(pelo Lema 3.5 novamente), então $c = 0$. Assim, $I_\delta|u| = 0$ o que implica $|u| = 0$ e logo $u = 0$. Com isso e utilizando o Lema 2.60 temos que H é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. □

Com estas informações então podemos notar que o potencial $\frac{1}{\|x\|}$ torna H essencialmente auto-adjunto.

De fato, basta provarmos que $\frac{1}{\|x\|} \in L^2_{loc}$, é suficiente tomar a bola $\|x\| \leq 1$:

$$\int_{\|x\|\leq 1} \frac{1}{\|x\|^2}dx = 4\pi \int_0^1 \frac{1}{r^2}r^2 dr = 4\pi < \infty,$$

logo a função $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ com $f(x) = \frac{1}{\|x\|}$ está em L^2_{loc}.

Como nosso objetivo principal é provar que (42) é essencialmente auto-adjunto, então precisamos de um critério que aborde $V(x) = -\frac{1}{\|x\|}$.

Definição 3.7. *Um operador B é chamado de A-limitado se $D(A) \subset D(B)$.*

Note que se B for um operador limitado então será A-limitado.

Se $\rho(A) \neq \emptyset$ e B for um operador A-limitado, então existem constantes a e b tais que

$$\|Bu\| \leq a\|Au\| + b\|u\|, \tag{48}$$

para todo $u \in D(A)$.

Teorema 3.8. *Seja $V(x)$, $x \in \mathbb{R}^3$, da forma $V = f_1 + f_2$, em que $f_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ e $f_2 \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Então $-\Delta + V$ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$.*

Primeiro note que

$$\frac{1}{\|x\|} = \frac{1}{\|x\|}(1 - \chi(x)) + \frac{1}{\|x\|}\chi(x),$$

em que $\chi(x)$ é a função característica do conjunto $\|x\| \leq 1$. Como $\frac{1}{\|x\|}\chi(x) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ e $\frac{1}{\|x\|}(1 - \chi(x)) \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$, temos $\frac{1}{\|x\|} \in L^\infty(\mathbb{R}^3) + L^2(\mathbb{R}^3)$.

Para provar o teorema, precisamos dos Lemas abaixo:

Lema 3.9. *Seja B um operador simétrico com domínio $D(B)$, e seja A essencialmente auto-adjunto com domínio $D(A) \subset D(B)$. Suponha*

$$\|B\phi\| \leq a\|A\phi\| + b\|\phi\| \tag{49}$$

para constantes $a < 1$ e b, $\phi \in D(A)$. Então $A + B$ é essencialmente auto-adjunto no domínio $D(A)$.

Demonstração. Pela desigualdade triangular e por $A + B$ ser operador simétrico nós temos

$$\begin{aligned}
\langle (A + B - \imath\lambda)u, (A + B - \imath\lambda)u \rangle &= \|(A+B)u\|^2 + \lambda^2\|u\|^2 + \imath\lambda\langle (A+B)u, u\rangle - \imath\lambda\langle u, (A+B)u\rangle \\
&= \|(A+B)u\|^2 + \lambda^2\|u\|^2 + \imath\lambda\langle (A+B)u, u\rangle - \imath\lambda\langle (A+B)u, u\rangle \\
&= \|(A+B)u\|^2 + \lambda^2\|u\|^2,
\end{aligned}$$

considerando $\lambda > 0$, disso segue

$$\begin{aligned}
2\|(A + B - \imath\lambda)u\| &\geq \|(A+B)u\| + \lambda\|u\| \\
&\geq \|Au\| - \|Bu\| + \lambda\|u\|
\end{aligned}$$

para qualquer $u \in D(A)$ e $\lambda > 0$. Pela desigualdade (49) com $a < 1$ e $\lambda > b$ então ficamos com

$$2\|(A+B-\imath\lambda)u\| \geq (1-a)\|Au\| + (\lambda-b)\|u\|$$

Portanto, nós obtemos

$$\begin{aligned} 4\|(A+B-\imath\lambda)u\|^2 &\geq (1-a)^2\|Au\|^2 + (\lambda-b)^2\|u\|^2 \\ &\geq (1-a)^2[\|Au\|^2 + \mu^2\|u\|^2] \\ &\geq (1-a)^2\|(A-\imath\mu)u\|^2 \end{aligned}$$

onde $\mu \equiv (\lambda-b)(1-a)^{-1} > 0$, e usamos o fato de A ser operador simétrico para obtermos a última linha. Se $(A+B-\imath\lambda)u = 0$, então $(A-\imath\mu)u = 0$, como A é essencialmente auto-adjunto então pelo Teorema 2.60, $\mathrm{Ker}(A \pm \imath\mu) = \{0\}$ e assim $u = 0$. Portanto, $\mathrm{Ker}(A+B-\imath\lambda) = \{0\}$, e novamente pelo Teorema 2.60 temos que $A+B$ é essencialmente auto-adjunto. □

Lema 3.10. *Seja $f \in L^2\left(\mathbb{R}^3\right) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ e seja $\varepsilon > 0$. Então existe $b < \infty$ tal que*

$$\|f\phi\|_2 \leq \varepsilon \|\Delta\phi\|_2 + b\|\phi\|_2$$

$\phi \in D(\Delta)$.

Demonstração. Seja $f = f_1 + f_2$, com $f_1 \in L^2(\mathbb{R}^3)$ e $f_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$. O operador f_2 é um operador limitado,

$$\|f_2 u\| \leq \|f_2\|_\infty \|u\|$$

Agora considere $f = f_1 \in L^2(\mathbb{R}^3)$ e $\lambda \neq 0$. Como Δ é auto-adjunto pelo Teorema 2.61, qualquer $\imath\lambda$, $\lambda \in \mathbb{R}$, está em $\rho(\Delta)$. Da desigualdade de Hölder, se $\frac{1}{r} = \frac{1}{p} + \frac{1}{q}$ com $g \in L^p$ e $g \in L^q$ entao$\|gh\|_r \leq \|g\|_p \|h\|_q$, temos que $\|gh\|_2 \leq \|g\|_2\|h\|_\infty$, então

$$\|fR_\Delta(\imath\lambda)g\| \leq \|f\|_2 \|R_\Delta(\imath\lambda)g\|_\infty \tag{50}$$

claramente a norma $\|R_\Delta(\imath\lambda)g\|_\infty$ é finita. Considere agora a representação de $R_\Delta(\imath\lambda)g$, que podemos consultar no Capítulo 4 de [22]

$$(R_\Delta(\imath\lambda)g)(x) = (4\pi^2)^{-1} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-(\imath\lambda)^{1/2}\|x-y\|} \|x-y\|^{-1} g(y)dy. \tag{51}$$

Podemos utilizar a desigualdade de Young, $\|f \star g\|_r \leq \|f\|_p \|g\|_q$, com $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 + \frac{1}{r}$, na convolução (51) e teremos

$$\|R_\Delta(\imath\lambda)g\|_\infty \leq \|g\|_2 \|G_\lambda\|_2 \tag{52}$$

onde

$$(\|G_\lambda\|_2)^2 \equiv (2\pi)^{-4} \int e^{-2Re(\imath\lambda)^{1/2}\|x\|} \|x\|^{-2} dx$$

Como $\lim_{\lambda\to\infty}\|G_\lambda\|_2 = 0$, para $\epsilon > 0$ conseguimos encontrar $\lambda > 0$ tal que

$$\|G_\lambda\|_2 \leq \epsilon \|f\|_2^{-1}. \tag{53}$$

Logo por (50), (52) e (53) segue que para λ grande o suficiente $\|fR_\Delta(\imath\lambda)g\|_2 \leq \epsilon\|g\|_2$. Agora faça $g = (\Delta - \imath\lambda)u$

$$\|fu\| \leq \epsilon\|\Delta u\| + \epsilon\lambda\|u\|$$

para qualquer $\epsilon > 0$ e todo $u \in D(\Delta)$. □

Agora provaremos o Teorema 3.8

Demonstração. Seja $V = f_1 + f_2$, com $f_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ e $f_2 \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Pelo Lema 3.10,

$$\begin{aligned} \|V\phi\|_2 &\leq \|f_1\phi\|_2 + \|f_2\phi\|_2 \leq \|f_1\phi\|_2 + \varepsilon\|\Delta\phi\|_2 + b\|\phi\|_2 \\ &\leq \varepsilon\|\Delta\phi\|_2 + (b + \|f_1\|_\infty)\|\phi\|_2 \end{aligned}$$

Então pelo Lema 3.9, com $B = V$ e $A = -\Delta$, $-\Delta + V$ é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. □

4 HAMILTONIANOS RELATIVÍSTICOS

Até aqui vimos parte da teoria não-relativística. Tal teoria desconsidera o fato de que um ponto material, por exemplo, um elétron, não pode se mover com velocidade igual ou superior à velocidade da luz no vácuo [29]. Com a introdução do spin, um grau a mais de liberdade para o elétron, precisamos modificar como abordamos o problema, já que com essas informações não conseguimos interpretá-lo como feito antes. Dirac sugere uma formulação que generaliza a equação de Schrodinger para a teoria da relatividade.

Considere o operador formal de Dirac para o caso de um potencial central

$$H = -c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - \beta mc^2 + V(x)I_4 \tag{54}$$

onde m é a massa da partícula, o operador de momento $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$ é formalmente dado pela expressão diferencial $p_j = -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial x^j}$, $V(x)$ é um potencial central (que só depende da distância à origem), e finalmente, $\boldsymbol{\alpha}$ e β são matrizes hermitianas 4×4, $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, onde α_j e $\beta := \alpha_4$ satisfazem a relação de anti-comutação

$$\alpha_j\alpha_k + \alpha_k\alpha_j = 2\delta_{jk}I_4\,,\ j,k = 1,2,3,4. \tag{55}$$

Adotaremos para essas matrizes a forma padrão

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \ \alpha_4 = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \tag{56}$$

onde σ_j são as matrizes de Pauli e $\sigma_0 = I_2$,

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \ \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\imath \\ \imath & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Note que as matrizes de Pauli são hermitianas e satisfazem $\sigma_j \sigma_k = i\varepsilon_{jkl}\sigma_l$ se $j \neq k$ e $\sigma_j^2 = 1$, $j,k = 1,2,3$[1].

Quando o operador de Dirac não é tomado como auto-adjunto, os autovalores do Hamiltoniano (54) para o caso do potencial de Coulomb $V(x) = \frac{Z\alpha}{\|x\|}$, para um átomo de número atômico Z, são conhecidos [30, p. 931]

$$E_{n,j} = mc^2 \left(1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left[n - j - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2} \right]} \right)^{-\frac{1}{2}}, \tag{57}$$

onde α é a constante de estrutura fina, $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$. A partir disso vemos que $E_{n,j}$ é real quando $Z < 137$, enquanto que para o caso não-relativístico,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{|x|},$$

temos que os autovalores são reais para todo Z,

$$E_n = -\frac{Z^2 m e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{mc^2 (Z\alpha)^2}{2n^2}, \tag{58}$$

que pode ser visto em [31, p. 267].

Note que expandindo (57) em série de potência com respeito à $(Z\alpha)^2$ conforme [30], temos

$$E_{n,j} = mc^2 \left(1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right).$$

Vemos que o primeiro termo é inercial, o segundo termo é exatamente (58) e os termos restantes são chamados de correções relativísticas da ordem de 10^{-4}eV à 10^{-6}eV [30].

A teoria não-relativística descreve corretamente o espectro do átomo apenas quando a velocidade das partículas envolvidas forem muito menores que a velocidade da luz.

1 O tensor de Levi-Civita ε_{jmn} é definido por

$$\varepsilon_{jmn} = \begin{cases} +1 & \text{se } (j,m,n) \text{ é } (1,2,3), (2,3,1) \text{ ou } (3,1,2) \\ -1 & \text{se } (j,m,n) \text{ é } (3,2,1), (1,3,2) \text{ ou } (2,1,3) \\ 0 & \text{se } j = m \text{ ou } j = n \text{ ou } m = n \end{cases}.$$

Além disso temos que o número atômico Z interfere na auto-adjunticidade do operador de Dirac, o que não acontecia para o operador não-relativísticos.

4.1 OPERADOR DE DIRAC

Para tratar o operador de Dirac definimos primeiro o espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2 := L_2(\mathbb{R}^3)^4$ dado por

$$L_2(\mathbb{R}^3)^4 := \{u; u : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}^4, \|u\|_{\mathcal{L}^2} < \infty\}$$

onde $u = (u_1, u_2, u_3, u_4)$ com $u_j : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ e a norma $\|\cdot\|_{\mathcal{L}^2}$ é definida por

$$\|u\|^2_{\mathcal{L}^2} = \int_{\mathbb{R}^3} \sum_{j=1}^{4} |u_j(x)|^2 d^3x$$

Aqui consideraremos o operador de Dirac (54) definido nas funções suaves de suporte compacto,

$$D(H) = C_0^\infty := C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{\mathbf{0}\}; \mathbb{C}^4)\,.$$

Iremos trabalhar com potenciais reais da forma $V(x) = \phi(x)I_4$, com $\lim_{x\to 0}|x|\phi(x) = \nu \in \mathbb{R}$. Denotaremos H_0 o operador de Dirac livre e $H = H_0 + V$ o operador Dirac-Coulomb. Estamos mais interessados no potencial de Coulomb, onde

$$\phi(x) = \frac{\nu}{|x|}\,,\ \nu = -Z\alpha$$

é o modelo para um elétron em um campo elétrico gerado por uma carga positiva na origem. Nosso objetivo é mostrar o seguinte teorema:

Teorema 4.1. *(Extensões auto-adjuntas do operador Dirac-Coulomb, [33]) Seja $T = T_0 + V$ um operador Dirac-Coulomb definido em C_0^∞ com $V(x) = \phi(x)I_4$ e*

$$\lim_{x\to 0}|x|\phi(x) = \nu$$

Então

(i) se $|\nu| < \frac{\sqrt{3}}{2}$, então o operador T é essencialmente auto-adjunto e sua única extensão auto-adjunta tem domínio

$$D(\overline{T}) = \mathcal{H}^1 := H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4, d^3x)$$

(ii) se $\frac{\sqrt{3}}{2} < |\nu| < 1$, *então o operador* T *tem infinitas extensões auto-adjuntas e se* $\phi(x)$ *é limitado por baixo ou por cima existe uma única extensão distinguível* T_d *com as propriedades*

$$D(T_d) \subset D(|x|^{-1/2}),\ D(T_d) \subset D(|T_0|^{1/2})$$

(iii) se $|\nu| > 1$, *então existem infinitas extensões auto adjuntas de* T.

Um fato interessante é que para o valor $|\nu| = \frac{\sqrt{3}}{2}$ não é possível determinar se o operador T é essencialmente auto-adjunto ou não, é necessário mais informação sobre V. Para o caso particular do potencial de Coulomb temos que, para $|\nu| = \frac{\sqrt{3}}{2}$ o operador T é essencialmente auto-adjunto.

Para estudarmos as extensões auto-adjuntas faz-se necessário o cálculo dos índices de deficiência do operador Dirac-Coulomb. Segundo [16], temos

Definição 4.2. *Suponha que* A *seja um operador simétrico. Seja*

$$\mathcal{K}_+ = Ker(\imath - A^*) = Im(\imath + A)^{\perp}$$

$$\mathcal{K}_- = Ker(\imath + A^*) = Im(-\imath + A)^{\perp}$$

onde $\mathcal{K}_+$ *e* $\mathcal{K}_-$ *são chamados* subespaços deficientes *de* A. *O par de números* n_+, n_-, *dados por* $n_+(A) = dim(\mathcal{K}_+)$, $n_-(A) = dim(\mathcal{K}_-)$ *são chamados índices de deficiência de* A.

De certo modo, os índices de deficiência, medem 'quão longe' o operador está de ser auto-adjunto. De [16], Corolário do Teorema X.2 , temos que um operador simétrico densamente definido admite extensões auto-adjuntas não triviais se, e somente se, os índices de deficiência forem iguais e não nulos($n_+ = n_- \neq 0$). Se além disso tivermos $n_+ < \infty$ então todas as extensões de T são parametrizadas por n_+^2 parâmetros reais. Dada a importancia dos índices de deficiência é natural que seja um dos nossos primeiros objetos de estudo, mas primeiro iremos separar o operador de Dirac em sua forma radial.

4.2 A PARTE RADIAL DO OPERADOR DE DIRAC

Nesta seção iremos obter a decomposição radial do operador (54).

Para simplificar a notação, adotaremos a notação de Einstein, em que índices latinos repetidos subentendem uma soma, exceto pelo índice r que representa a projeção na coordenada radial. Precisaremos das seguintes definições:

$$\begin{aligned}
\pi_r &:= \frac{1}{r}(x_j p_j - \imath\hbar) = -\imath\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) , \\
\sigma_r &:= \frac{1}{r}\sigma_j x_j , \\
\alpha_r &:= \frac{1}{r}\alpha_j x_j = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} x_j .
\end{aligned}$$

O operador de momento angular $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ tem componentes

$$L_j := \varepsilon_{jmn} x_m p_n ,$$

e o operador de spin é dado por

$$\begin{aligned}
S &:= \begin{pmatrix} s & 0 \\ 0 & s \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_j L_j & 0 \\ 0 & \sigma_j L_j \end{pmatrix} , \\
s &:= \hbar\sigma_0 + \sigma_j L_j ,
\end{aligned}$$

Com o auxílio destas definições, reescrevemos o operador H na forma (ver apêndice A)

$$H = -c\left(\alpha_r \pi_r + \frac{\imath}{r}\alpha_r S\right) - \beta mc^2 + V(x) I_4 .$$

Primeiro provaremos a decomposição do operador em uma parte radial e em uma parte esférica.

Teorema 4.3. *A matriz unitária* $U := \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\imath\sigma_r \end{pmatrix}$ *transforma* $H = -c\left(\alpha_r \pi_r + \frac{\imath}{r}\alpha_r S\right) - \beta mc^2 + V(x)$ *na forma*

$$U^* H U = -c\begin{pmatrix} 0 & -\imath\sigma_0 \\ \imath\sigma_0 & 0 \end{pmatrix}\pi_r - \frac{\imath c}{r}\begin{pmatrix} 0 & \imath s \\ \imath s & 0 \end{pmatrix} - \alpha_4 mc^2 + V(x) .$$

A demonstração do Teorema acima se encontra no Apêndice A.

Como queremos decompor o espaço $L_2(\mathbb{R}^3)^4$precisamos estudar as propriedades espectrais do operador s em $L_2(S^2)^2$.

Teorema 4.4. *Em $L_2(S^2)^2$ o operador s definido em $D(s) = C^\infty(S^2)$ é essencialmente auto-adjunto e sua extensão auto-adjunta tem espectro puramente discreto, que está contido em $\{\hbar k : k \in \mathbb{Z}\backslash\{0\}\}$.*

Demonstração. Será suficiente mostrar que s tem uma base ortonormal de autofunções com autovalores correspondentes em $\{\hbar k : k \in \mathbb{Z}\backslash\{0\}\}$.

Primeiro note que

$$\begin{aligned}
(s - \tfrac{\hbar}{2}\sigma_0)^2 &= \left(\sigma_j L_j + \tfrac{\hbar}{2}\sigma_0\right)^2 \\
&= \left(\sigma_j L_j\right)^2 + \hbar\sigma_j L_j + \tfrac{\hbar^2}{4}\sigma_0 \\
&= \sigma_j\sigma_k L_j L_k + \hbar\sigma_j L_j + \tfrac{\hbar^2}{4}\sigma_0 \\
&= \sigma_j^2 L_k^2 + \imath\varepsilon_{jkl}\sigma_l L_j L_k + \hbar\sigma_j L_j + \tfrac{\hbar^2}{4}\sigma_0 \\
&= L_j L_j + \tfrac{\hbar^2}{4}\sigma_0 = \hbar^2\sigma_0\left(\tfrac{1}{4} - B\right)
\end{aligned}$$

onde $B = -\frac{1}{\hbar^2}L_j L_j$ é o operador de Laplace-Beltrami em S^2. Seja K_l o subespaço com dimensão $4l + 2$ do espaço $L_2(S^2)^2$ gerado por

$$\begin{pmatrix} Y_{l,j} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{l,j} \end{pmatrix} \qquad j = -l, -l+1, \ldots, l-1, l\,,$$

em que $Y_{l,j}$ são os harmônicos esféricos de grau l, autovalores de B com $-BY_{l,j} = l\,(l+1)\,Y_{l,j}$. Então K_l são os autoespaços de $\left(s - \frac{\hbar}{2}\sigma_0\right)^2$ correspondendo aos autovalores

$$\hbar^2\left(\frac{1}{4} + l\,(l+1)\right) = \hbar^2\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 .$$

O subespaço K_l reduz s e portanto é gerado pelos autovetores de s. Iremos denotar a restrição de s no espaço K_l por s_l. Se λ é um autovalor de s_l, então

$$\left(\lambda - \frac{\hbar}{2}\right)^2 = \hbar^2\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 ,$$

e portanto

$$\lambda = \frac{\hbar}{2} \pm \hbar\left(l + \frac{1}{2}\right) = \hbar\,(l+1) \text{ ou } -\hbar l\,.$$

Temos que para $l = 0$ as funções em K_0 são constantes, o que implica $sf = \hbar f$ para todo $f \in K_0$, ou seja, $\lambda = \hbar = \hbar(0+1)$ é o único autovalor de s_0. Em particular s tem autovalores $\hbar k$ para $k \in \mathbb{Z}\backslash\{0\}$. $\square$

O Teorema acima implica que o espaço $L_2(S^2)^2$ é gerado por um sistema ortonormal

$$F_{k,j} = \begin{pmatrix} f_{k,j,1} \\ f_{k,j,2} \end{pmatrix} \qquad (k \in \mathbb{Z}\backslash\{0\},\, j = 1, \ldots, j(k)),$$

onde $F_{k,j}$ são autovetores de s correspondendo ao autovalor $\hbar k$. Definindo os operadores

$$W_{k,j} : L_2(0,\infty)^2 \to L_2(\mathbb{R}^3)^4 \qquad (k \in \mathbb{Z}\backslash\{0\},\, j = 1, \ldots, j(k)),$$

com ação

$$W_{k,j}\begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}(r\omega) = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} g_1(r)F_{k,j}(\omega) \\ g_2(r)F_{k,j}(\omega) \end{pmatrix} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} g_1(r)f_{k,j,1}(\omega) \\ g_1(r)f_{k,j,2}(\omega) \\ g_2(r)f_{k,j,1}(\omega) \\ g_2(r)f_{k,j,2}(\omega) \end{pmatrix}$$

para $r \in (0,\infty)$ e $\omega \in S^2$. Temos que tal operador é isométrico/unitário:

$$\begin{aligned} \left\langle W_{kj}\begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}, W_{kj}\begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix}\right\rangle_{L_2(\mathbb{R}^3)^4} &= \left\langle r^{-1}\begin{pmatrix} g_1(r)F_{k,j}(\omega) \\ g_2(r)F_{k,j}(\omega) \end{pmatrix}, r^{-1}\begin{pmatrix} h_1(r)F_{k,j}(\omega) \\ h_2(r)F_{k,j}(\omega) \end{pmatrix}\right\rangle_{L_2(\mathbb{R}^3)^4} \\ &= \int \frac{1}{r^2}\left(g_1(r)F_{k,j}(\omega)h_1^*(r)F_{k,j}^*(\omega) + g_2(r)F_{k,j}(\omega)h_2^*(r)F_{k,j}^*(\omega)\right) dx \end{aligned}$$

como $dx = dx_1dx_2dx_3 = r^2 dr d\omega$ ficamos com

$$\begin{aligned} \left\langle W_{kj}\begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}, W_{kj}\begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix}\right\rangle_{L_2(\mathbb{R}^3)^4} &= \left(\int_0^\infty g_1(r)h_1^*(r)dr + \int_0^\infty g_2(r)h_2^*(r)dr\right)\left(\int_{S^2} F_{k,j}(\omega)F_{k,j}^*(\omega)d\omega\right) \\ &= \left\langle \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix}\right\rangle_{L_2(0,\infty)^2} \end{aligned}$$

então $L_2(\mathbb{R}^3)^4 = \bigoplus_{k,j} H_{k,j}$, com $H_{k,j} = W_{k,j}L_2(0,\infty)^2$.

Finalmente temos

Teorema 4.5. *Se $V(x)$ é um potencial central, $V(x) = V(r)$, então H em (54) é unitariamente equivalente à soma de operadores ortogonais gerados pela expressão*

$$\hat{h}_{k,j} = \hat{h}_k = W_{k,j}^* U^* H U W_{k,j}$$

em $L_2(0,\infty)^2$ *com*

$$\hat{h}_{k,j} = \hat{h}_k \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}(r) = c\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_1'(r) \\ g_2'(r) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V(r) - mc^2 & \frac{c\hbar k}{r} \\ \frac{c\hbar k}{r} & V(r) + mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_1(r) \\ g_2(r) \end{pmatrix}.$$

Demonstração. A prova segue por cálculo direto considerando que $W_{k,j}^* \left(\frac{1}{r} \begin{pmatrix} g_1(r) F_{k,j}(\omega) \\ g_2(r) F_{k,j}(\omega) \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}(r\omega)$. □

O operador $\hat{h}_{k,j}$ é simétrico.

Teorema 4.6. *O operador*

$$\hat{h}_k = c\hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dr} \\ -\frac{d}{dr} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V(r) - mc^2 & \frac{c\hbar k}{r} \\ \frac{c\hbar k}{r} & V(r) + mc^2 \end{pmatrix} \tag{59}$$

é simétrico em $D(h) = \left\{ f \in L_2(0,\infty)^2, \lim_{r\to 0} f(r) = \lim_{r\to\infty} f(r) = 0 \right\}$ *com produto interno* $\langle u, v \rangle_{L_2(0,\infty)^2} = \int_0^\infty (u_1^* v_1 + u_2^* v_2)\, dr$, $u, v \in L_2(0,\infty)^2$.

Demonstração. Como

$$\hat{h}_k \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(V(r) - mc^2\right) \Psi_1 + \left(\frac{c\hbar k}{r} + c\hbar \frac{d}{dr}\right) \Psi_2 \\ \left(\frac{c\hbar k}{r} - c\hbar \frac{d}{dr}\right) \Psi_1 + \left(V(r) + mc^2\right) \Psi_2 \end{pmatrix}$$

e

$$\hat{h}_k \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(V(r) - mc^2\right) \Phi_1 + \left(\frac{c\hbar k}{r} + c\hbar \frac{d}{dr}\right) \Phi_2 \\ \left(\frac{c\hbar k}{r} - c\hbar \frac{d}{dr}\right) \Phi_1 + \left(V(r) + mc^2\right) \Phi_2 \end{pmatrix},$$

temos que

$$\begin{aligned} \langle \hat{h}_k \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix} \rangle &= \int_0^\infty \left(\left(V(r) - mc^2\right) \Psi_1^* \Phi_1 + \left(\frac{c\hbar k}{r} \Psi_2^* + c\hbar \frac{d}{dr} \Psi_2^*\right) \Phi_1 \right) dr \\ &+ \int_0^\infty \left(\left(\frac{c\hbar k}{r} \Psi_1^* - c\hbar \frac{d}{dr} \Psi_1^*\right) \Phi_2 + \left(V(r) + mc^2\right) \Psi_2^* \Phi_2 \right) dr \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\left\langle \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \hat{h}_k \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix} \right\rangle &= \int_0^\infty \left(\left(V(r) - mc^2\right) \Psi_1^* \Phi_1 + \Psi_1^* \left(\frac{c\hbar k}{r} \Phi_2 + c\hbar \frac{d}{dr} \Phi_2 \right) \right) dr \\ &+ \int_0^\infty \left(\Psi_2^* \left(\frac{c\hbar k}{r} \Phi_1 - c\hbar \frac{d}{dr} \Phi_1 \right) + \left(V(r) + mc^2\right) \Psi_2^* \Phi_2 \right) dr \end{aligned}.$$

Logo

$$\begin{aligned}\langle \hat{h}_k \Psi, \Phi \rangle - \langle \Psi, \hat{h}_k \Phi \rangle &= \int_0^\infty \left(c\hbar \frac{d\Psi_2^*}{dr} \Phi_1 - c\hbar \frac{d\Psi_1^*}{dr} \Phi_2 - c\hbar \Psi_1^* \frac{d\Phi_2}{dr} + c\hbar \Psi_2^* \frac{d\Phi_1}{dr} \right) dr \\ &= \int_0^\infty \left(c\hbar \frac{d}{dr} \left(\Psi_2^* \Phi_1\right) - c\hbar \frac{d}{dr} \left(\Psi_1^* \Phi_2\right) \right) dr \\ &= c\hbar \left[\Psi_2^* \Phi_1\right]_0^\infty - c\hbar \left[\Psi_1^* \Phi_2\right]_0^\infty \end{aligned}$$

□

Então o operador $\hat{h}_k$ é simétrico para funções que se anulam no infinito e na origem.

4.3 PONTO LIMITE E CÍRCULO LIMITE

Definição 4.7. *(i) Um operador diferencial T é dito ser* caso círculo limite *em* 0 *(respectivamente em ∞) se para todo $\lambda \in \mathbb{C}$ todas as soluções de $(T - \lambda)u = 0$ forem de quadrado integrável no intervalo $(0, 1)$(resp. em $(1, \infty)$).*

(ii) O operador diferencial T é dito ser caso ponto limite *em* 0 *(respectivamente em ∞) se para todo $\lambda \in \mathbb{C}$ existe pelo menos uma solução de $(T - \lambda)u = 0$ que não é de quadrado integrável no intervalo $(0, 1)$(resp. em $(1, \infty)$).*

Do Teorema 5.7 de [33] temos que

Teorema 4.8. *Os índices de deficiência de $\hat{h}_{k,j}$ são*

(i) $(2, 2)$ se $\hat{h}_{k,j}$ é do caso círculo limite em 0 e em ∞.

(ii) $(1, 1)$ se $\hat{h}_{k,j}$ em um dos pontos, 0 ou ∞, for do caso círculo limite e no outro for do caso ponto limite.

(iii) $(0, 0)$ se $\hat{h}_{k,j}$ estiver no caso ponto limite em 0 e em ∞.

A prova deste Teorema pode ser vista no Apêndice B.

Com isto podemos encontrar os índices de deficiência do operador de Dirac com potencial de Coulomb

Teorema 4.9. *Seja T o operador de Dirac com potencial de Coulomb com $V(x) = \frac{\nu}{|x|} I_4$ definido em C_0^∞. Então os índices de deficiência são*

(i) $(0,0)$ *se* $|\nu| \leq \frac{\sqrt{3}}{2}$

(ii) $(2n(n+1), 2n(n+1))$ *se* $n^2 - \frac{1}{4} < \nu^2$*, com* $n \in \mathbb{N}$

Demonstração. Tendo o operador (59) é necessário checar se $\hat{h}_{k,j}$ está no caso ponto limite ou no caso círculo limite, iremos considerar o operador $(\hat{h}_{k,j} - \gamma m)$, onde $\gamma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, pois a adição ou subtração de um operador limitado não muda o cálculo dos índices de deficiência. Tomando $\lambda = 0$, a equação fica $(\hat{h}_{k,j} - \gamma m)u = 0$, cujas soluções são

$$u(r) = \begin{pmatrix} u^+(r) \\ u^-(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm\sqrt{k_j^2 - \nu^2} - k_j \\ \nu \end{pmatrix} r^{\pm\sqrt{k_j^2 - \nu^2}},$$

que podem ser vistas no Apêndice C.

Para o caso do ponto em ∞, a expressão acima com expoente positivo não é de quadrado integrável em $(0, \infty)$ independente dos parâmetros k_j e ν, portanto se encaixa no caso ponto limite no infinito.

Agora para o ponto 0, considerando o expoente positivo, a solução é sempre de quadrado integrável em $(0, 1)$, enquanto que com o expoente negativo ela só é integrável nesse intervalo se, e somente se,

$$k_j^2 - \nu^2 < \frac{1}{4},$$

que pode ser escrito na forma

$$\nu^2 > k_j^2 - \frac{1}{4}. \tag{60}$$

Assim se ν satisfizer (60), o operador é do caso círculo limite em $(0, 1)$, pois do Teorema 5.3 de [33] temos que se as soluções são de quadrado integrável para o autovalor 0 então é para todo $\mathbb{C}$. Além disso o operador é do caso ponto limite em $(1, \infty)$. Deste modo, pelo Teorema 4.8, os índices de deficiência do operador são $(1, 1)$ se a desigualdade (60) é válida, caso contrário os índices de deficiência são $(0, 0)$.

Agora para calcular os índices de deficiência do operador completo teremos que contar quantos operadores reduzidos não são essencialmente auto-adjuntos, ficamos com

$$n_{\pm} = \sum_{j\in\mathbb{N}+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \sum_{m_j=-j}^{j} \sum_{k_j=\pm(j+\frac{1}{2})} \begin{cases} 1 & \text{se } \nu^2 > k_j^2 - \frac{1}{4} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} .$$

Como $-n \leq k_j \leq n$ então seja n um inteiro tal que $n^2 - \frac{1}{4} < \nu^2$, temos que

$$n_{\pm} = \sum_{j\in\mathbb{N}+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \sum_{m_j=-j}^{j} 2 = \sum_{j\in\mathbb{N}+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} 2(2j+1) = 2n(n+1) .$$

□

5 OPERADOR DE DIRAC PARA O CASO EM 2+1 DIMENSÕES

Aqui veremos o operador de Dirac para dimensão 2+1. De [35] temos que o operador pode ser escrito como:

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta mc^2 + V(x), \tag{61}$$

onde $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2)$, $\boldsymbol{p} = (p_1, p_2) = \left(-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}, -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial x_2}\right)$, $\beta = \sigma_3$, $\alpha_1 = -\sigma_2$, $\alpha_2 = \sigma_1$ e $V(x) = -\frac{Ze}{\|x\|}$. O momento angular, L, tera apenas uma componente $L = -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}$, onde $(x_1, x_2) = (r\cos\theta, r\sin\theta)$. Chame $S = \frac{\hbar}{2}\sigma_3$ e defina $J = L + S = -\imath\hbar\sigma_0\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\hbar}{2}\sigma_3$.

Assim podemos reescrever 61 como $H = \imath c\hbar\sigma_2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r}\right) + \frac{c}{r}\sigma_1 J + \beta mc^2 + V(x)$, isto segue de:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} &= \alpha_1\left(-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\right) + \alpha_2\left(-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial x_2}\right) \\
&= -\sigma_2\left(-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial r}\right) + \sigma_1\left(-\frac{\imath\hbar}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
&= \imath\hbar\sigma_2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sigma_1}{r}\left(-\imath\hbar\sigma_0\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\hbar}{2}\sigma_3 - \frac{\hbar}{2}\sigma_3\right) \\
&= \imath\hbar\sigma_2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sigma_1}{r}\left(J - \frac{\hbar}{2}\sigma_3\right) \\
&= \imath\hbar\sigma_2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r}\right) + \frac{\sigma_1}{r}J.
\end{aligned}$$

Como $[J, H] = 0$ e $JF_{k,j}(\omega) = k\hbar F_{k,j}(\omega)$, onde $F_{k,j}$ são harmônicos circulares, com $k = n + \frac{1}{2}$, $n \in \mathbb{Z}$. Assim podemos novamente definir os operadores $W_{k,j} : L_2(0,\infty)^2 \to L_2(\mathbb{R}^2)^2$, tais que

$$W_{k,j}\begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}(r\omega) = \frac{1}{\sqrt{r}}\begin{pmatrix} g_1(r)F_{k,j}(\omega) \\ g_2(r)F_{k,j}(\omega) \end{pmatrix},$$

com $r \in (0,\infty)$ e $\omega \in S^1$. Temos que cada $W_{k,j}$ é isométrico. Então $L_2(\mathbb{R}^2)^2 = \bigoplus_{k,j} H_{k,j}$, com $H_{k,j} = W_{k,j}L_2(0,\infty)^2$.

Com isto temos que:

Teorema 5.1. *O operador 61 é unitariamente equivalente à soma ortogonal dos operadores*

$$h_{k,j} = h_k = W_{k,j}^{*} H W_{k,j}$$

em $L_2\left(0,\infty\right)^2$.

Concluindo que

$$\hat{h}_k = \begin{pmatrix} mc^2 + V(r) & c\hbar\frac{d}{dr} + \frac{c\hbar k}{r} \\ -c\hbar\frac{d}{dr} + \frac{c\hbar k}{r} & -mc^2 + V(r) \end{pmatrix}.$$

6 ÍNDICES DE DEFICIÊNCIA PARA O CASO NÃO-RELATIVÍSTICO

No caso não relativístico tinhamos o operador

$$H = -\Delta + V\,,$$

que nos levava ao problema de autovalor

$$-\Delta v(x) + V(x)v(x) = \lambda v(x)\,, \tag{62}$$

onde $v \in L_2(\mathbb{R}^m)$. Do mesmo modo, que no caso relativístico, podemos usar coordenadas esféricas

$$(x_1, \ldots, x_m) = r\omega \qquad (r \in (0,\infty),\ \omega \in S^{m-1})$$

a equação 62 pode então ser escrita como

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{m-1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}B + V(r)\right) v(r\omega) = \lambda v(r\omega)\,,$$

onde $V(x)$ é um potencial central, por isso $V(x) = V(r)$, e B é o operador de Laplace-Beltrami em S^{m-1}(ou seja, a parte esférica de $-\Delta$)

$$Bf(\xi_1, \ldots, \xi_m) = -\sum_{1\leq j\leq k\leq m}\left(\xi_j\frac{\partial}{\partial\xi_k} - \xi_k\frac{\partial}{\partial\xi_j}\right)^2 f(\xi_1, \ldots, \xi_m) \qquad \text{para } |\xi|= 1\,.$$

Em particular, para $m = 2, 3$ podemos escrever:

- Para $m = 2$, $(x_1, x_2) = r(\cos\varphi, \sin\varphi)$,

$$Bf(r,\varphi) = -\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}f(r,\varphi)\,,$$

- Para $m = 3$, $(x_1, x_2, x_3) = r(\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta)$,

$$Bf(r,\varphi,\vartheta) = \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}f(r,\varphi,\vartheta) + \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}f(r,\varphi,\vartheta)\right)\,.$$

Agora usando o sistema de esféricos harmônicos

$$Y_{l,j} : S^{m-1} \to \mathbb{C}\,, \qquad l \in \mathbb{N}_0,\ j = 1, \ldots, N(l,m)$$

que é uma base ortonormal de $L_2(S^{m-1})$ e satisfaz

$$BY_{l,j}(\omega) = l(l+m-2)Y_{l,j}(\omega) \qquad \text{para todo } l, j\,.$$

Fazendo

$$H_{l,j} := \{Y_{l,j}(\omega)f(r) : f \in L_2(0,\infty;\, r^{m-1})\} \cong L_2(0,\infty;\, r^{m-1})$$

nós temos

$$L_2(\mathbb{R}^m) = \bigoplus_{l,j} H_{l,j}$$

e para $f \in C_0^\infty(0,\infty)$

$$(-\Delta + V(r))Y_{l,j}(\omega)f(r) = Y_{l,j}(\omega)\left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{m-1}{r}\frac{d}{dr} - \frac{1}{r^2}l(l+m-2) + V(r)\right)f(r)\,.$$

Isto divide a equação de Schrödinger em um sistema infinito de problemas de autovalores em $L_2(0,\infty;r^{m-1})$,

$$\sigma_l f(r) = \sigma_{l,j}f(r) = \left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{m-1}{r}\frac{d}{dr} - \frac{1}{r^2}l(l+m-2) + V(r)\right)f(r)\,,$$

com $U : L_2(0,\infty;r^{m-1}) \to L_2(0,\infty)$, $(Uf)(r) = r^{\frac{m-1}{2}}f(r)$, temos que a expressão σ_l se transforma em

$$\tau_l := U\sigma_l U^{-1} = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r^2}\left(l(l+m-2) + \frac{1}{4}(m-1)(m-3)\right) + V(r)$$

em $L_2(0,\infty)$. Ou seja, um novo problema de autovalor.

Considerando $V(r) = \frac{Ze}{r}$ então analogamente ao que fizemos no caso relativístico teremos que τ_l é do tipo ponto limite no infinito. Considerando $m = 3$ temos que $\tau_l = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r^2}\left(l(l+1)\right) + V(r)$ é do tipo círculo limite em 0 para $l = 0$ e do tipo ponto limite em 0 para $l \neq 0$. Assim para $m = 3$, pelo Teorema 4.8, teremos $n_\pm = 0$ para $l \neq 0$ e $n_\pm = 1$ para $l = 0$, ou seja, τ_l é essencialmente auto-adjunto para $l \neq 0$, independente do número atômico.

7 APÊNDICE A

Lema 7.1. *O operador $\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p}$ se decompõe como $\sum_{j=1}^{3} \alpha_j p_j = \alpha_r \pi_r + \frac{\imath}{r} \alpha_r S$.*

Demonstração. O lado direito da expressão é equivalente a

$$\alpha_r \pi_r + \tfrac{\imath}{r} \alpha_r S \quad = \quad \tfrac{(\alpha_i x_i)}{r^2} \left(x_j p_j + \imath \begin{pmatrix} \sigma_j & 0 \\ 0 & \sigma_j \end{pmatrix} L_j \right) \quad .$$

Sabendo que $\mathbf{r} \cdot \mathbf{L} = \sum_{j=1}^{3} x_j L_j = 0$ e

$$\alpha_i \begin{pmatrix} \sigma_j & 0 \\ 0 & \sigma_j \end{pmatrix} = i \varepsilon_{ijk} \alpha_k \, ,$$

podemos reescrever esta expressão como

$$\begin{aligned}
\alpha_r \pi_r + \tfrac{\imath}{r} \alpha_r S \quad &= \quad \tfrac{(\alpha_i x_i)}{r^2} \left(x_j p_j + \imath \begin{pmatrix} \sigma_j & 0 \\ 0 & \sigma_j \end{pmatrix} L_j \right) \\
&= \quad \tfrac{1}{r^2} \left(\alpha_i x_i x_j p_j + \imath x_i \alpha_i \begin{pmatrix} \sigma_j & 0 \\ 0 & \sigma_j \end{pmatrix} L_j \right) \\
&= \quad \tfrac{1}{r^2} \left(\alpha_i x_i x_j p_j + \imath x_i \varepsilon_{ijk} \imath \alpha_k L_j \right) \\
&= \quad \tfrac{1}{r^2} \left(\alpha_i x_i x_j p_j - x_i \varepsilon_{ijk} \alpha_k L_j \right) \\
&= \quad \tfrac{1}{r^2} \left(\alpha_i x_i x_j p_j - \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{jmn} \alpha_k x_i x_m p_n \right) \\
&= \quad \tfrac{1}{r^2} \left(\alpha_i x_i x_j p_j + \varepsilon_{jik} \varepsilon_{jmn} \alpha_k x_i x_m p_n \right) \\
&= \quad \tfrac{1}{r^2} \left(\alpha_i x_i x_j p_j + \left(\delta_{im} \delta_{kn} - \delta_{in} \delta_{km} \right) \alpha_k x_i x_m p_n \right) \\
&= \quad \tfrac{1}{r^2} \left(\alpha_i x_i x_j p_j + \left(\alpha_k x_i x_i p_k - \alpha_k x_k x_i p_i \right) \right) \\
&= \quad \tfrac{1}{r^2} \alpha_k x_i x_i p_k = \alpha_k p_k
\end{aligned} \quad .$$

□

A seguir, demonstramos o Teorema 4.3. Usando as identidades $\sigma_r^* = \sigma_r$ e $\sigma_r^2 = \sigma_0$, onde σ_r^* é o transposto conjugado de σ_r, temos que a matriz

$$U(x) := U := \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\imath \sigma_r \end{pmatrix}$$

é unitária. Iremos provar as identidades

$$U^*\alpha_r\pi_r U = \begin{pmatrix} 0 & -\imath\sigma_0 \\ \imath\sigma_0 & 0 \end{pmatrix}\pi_r\,,$$

$$U^*\frac{1}{r}\alpha_r S U = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} 0 & \imath s \\ \imath s & 0 \end{pmatrix}\,.$$

Primeiro temos

$$\pi_r U = -\imath\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)U = U\left[-\imath\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\right] = U\pi_r$$

e

$$\begin{aligned} U^*\alpha_r U &= \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & \imath\sigma_r \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_r \\ \sigma_r & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\imath\sigma_r \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_r \\ \imath\sigma_0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\imath\sigma_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\imath\sigma_0 \\ \imath\sigma_0 & 0 \end{pmatrix}\,. \end{aligned}$$

Assim,

$$U^*\alpha_r\pi_r U = U^*\alpha_r U\pi_r = \begin{pmatrix} 0 & -\imath\sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix}\pi_r\,.$$

A segunda identidade pode ser obtida diretamente a partir $\sigma_r s\sigma_r = -s$,

$$\begin{aligned} U^*SU &= \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & \imath\sigma_r \end{pmatrix}\begin{pmatrix} s & 0 \\ 0 & s \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\imath\sigma_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s & 0 \\ 0 & \sigma_r s\sigma_r \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} s & 0 \\ 0 & -s \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Para determinar $\sigma_r s\sigma_r = -s$, abrimos o lado direito e usamos a identidade $\sigma_j L_j\sigma_r = \sigma_j\sigma_r L_j - 2\hbar\sigma_r$,

$$\begin{aligned} \sigma_r s\sigma_r &= \sigma_r\left(\hbar\sigma_0+\sigma_j L_j\right)\sigma_r = \hbar\sigma_0+\sigma_r\sigma_j L_j\sigma_r \\ &= -\hbar\sigma_0+\sigma_r\sigma_j\sigma_r L_j \end{aligned}$$

Usando agora a identidade $\sigma_r\sigma_j\sigma_r = -\sigma_j+\frac{2x_j}{r}\sigma_r$, temos

$$\begin{aligned} \sigma_r s\sigma_r &= -\hbar\sigma_0-\sigma_j L_j+\frac{2x_j}{r}\sigma_r L_j \\ &= -s+\frac{2}{r}\sigma_r x_j L_j\,. \end{aligned}$$

Notando que $x_j L_j = 0$, chegamos à expressão desejada.

As indentidades $U^* \alpha_4 U = \alpha_4$ e $U^* V(x) I_4 U = V(x) I_4$ são óbvias.

8 APÊNDICE B

Iremos provar o Teorema 4.8.

Dizemos que uma função $f : (a, b) \to \mathbb{C}^m$ está *à esquerda* (respectivamente *à direita*) em $L_2(a, b; r)$ se para todo $c \in (a, b)$ temos $f \in L_2(a, c; r)$(respectivamente $f \in L_2(c, b; r)$). A partir disso podemos definir

Definição 8.1. *Seja $z \in \mathbb{C}$, então n_a^+ é definido como o número de soluções linearmente independentes de $(z - \tau)u = 0$ ($Im(z) > 0$) que estão à esquerda em $L_2(a, b; r)$. Analogamente n_a^- é definido para $Im(z) < 0$.*

Em [33], Theorem 4.3, temos o seguinte fato

Teorema 8.2. *As seguintes desigualdades são válidas:*

a) $n_a^+ + n_b^+ \geq p$, $n_a^- + n_b^- \geq p$,

b) $n_a^+ + n_a^- \geq p$, $n_b^+ + n_b^- \geq p$.

Onde p é a dimensão do espaço de soluções de $(z - \tau)u = 0$. No nosso caso $p = 2$.

Teorema 8.3. *Seja τ com coeficientes reais. Então uma das seguintes proposições acontece*

(a) para todo $\lambda \in \mathbb{C}$ todas as soluções de $(\tau - \lambda)\, u = 0$ estão à direita em $L_2(a, b; r)$.

(b) para todo $\lambda \in \mathbb{C} \backslash \mathbb{R}$ existe uma única solução u (à menos de uma constante multiplicativa) de $(\tau - \lambda)\, u = 0$ que está à direita em $L_2(a, b; r)$.

(Respectivamente o resultado é válido para soluções à esquerda em $L_2(a, b; r)$).

Demonstração. Assuma que para algum $\lambda_0 \in \mathbb{C}$ toda solução de $(\tau - \lambda_0)\, u = 0$ está à direita em $L_2(a, b; r)$. Como τ é real, as soluções de $\left(\tau - \bar{\lambda_0}\right) u = 0$ são os conjugados das soluções de $(\tau - \lambda_0)\, u = 0$. Assim todas as soluções de $(\tau - \lambda_0)\, u = 0$ e $\left(\tau - \bar{\lambda_0}\right) u = 0$ estão à direita em $L(a, b; r)$. Pelo Teorema 5.3, para todo $\lambda \in \mathbb{C}$ todas as soluções de $(\tau - \lambda)\, u = 0$ estão à direita em $L_2(a, b; r)$.

Agora resta mostrar que para todo $\lambda \in \mathbb{C} \backslash \mathbb{R}$ existe ao menos uma solução de $(\tau - \lambda)\, u = 0$ que está à direita em $L_2(a, b; r)$. O número de soluções é n_b^+ e n_b^- e do Teorema 8.2 sabemos que $n_b^+ = n_b^- \geq \frac{p}{2} = 1$. □

Agora podemos calcular os números de deficiência de T_0 usando a fórmula $n_+ = n_- = n = n_a + n_b - 2$, onde

$$n_a = n_a^+ = n_a^- = \begin{cases} 2 & \text{se } \tau \text{é do caso círculo limite em } a, \\ 1 & \text{se } \tau \text{é do caso ponto limite em } a, \end{cases}$$

$$n_b = n_b^+ = n_b^- = \begin{cases} 2 & \text{se } \tau \text{é do caso círculo limite em } b, \\ 1 & \text{se } \tau \text{é do caso ponto limite em } b. \end{cases}$$

Disto segue o seguinte teorema:

Teorema 8.4. *Os índices de deficiência de $\hat{h}_{k,j}$ são*

(i) $(2,2)$ *se* $\hat{h}_{k,j}$ *é do caso círculo limite em* 0 *e em* ∞.

(ii) $(1,1)$ *se* $\hat{h}_{k,j}$ *em um dos pontos,* 0 *ou* ∞, *for do caso círculo limite e no outro for do caso ponto limite.*

(iii) $(0,0)$ *se* $\hat{h}_{k,j}$ *estiver no caso ponto limite em* 0 *e em* ∞.

9 APÊNDICE C

Teorema 9.1. *As soluções de* $\hat{h}_{k,j} = c\hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dr} \\ -\frac{d}{dr} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V(r) - mc^2 & \frac{c\hbar k}{r} \\ \frac{c\hbar k}{r} & V(r) + mc^2 \end{pmatrix} = 0$ *estão em* $L_2(0, b)$ *se, e somente se,* $\alpha^2 Z^2 > k^2 - \frac{1}{4}$.

Demonstração. Como $\begin{pmatrix} -mc^2 & 0 \\ 0 & mc^2 \end{pmatrix}$ é constante e portanto limitada temos que basta analisarmos as soluções para $\hat{h}_0 = c\hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dr} \\ -\frac{d}{dr} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V(r) & \frac{c\hbar k}{r} \\ \frac{c\hbar k}{r} & V(r) \end{pmatrix}$, onde $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$, assim

$$\hat{h}_0 = c\hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dr} \\ -\frac{d}{dr} & 0 \end{pmatrix} + \frac{c\hbar}{r} \begin{pmatrix} -\alpha Z & k \\ k & -\alpha Z \end{pmatrix} .$$

Aplicando o operador acima em $u(r) = \begin{pmatrix} u_1(r) \\ u_2(r) \end{pmatrix}$ ficamos com o sistema

$$\begin{array}{c} u_2' - \alpha Z \frac{1}{r} u_1 + \frac{k}{r} u_2 = 0 \\ -u_1' + \frac{k}{r} u_1 - \alpha Z \frac{1}{r} u_2 = 0 \end{array} , \tag{63}$$

escrevendo $u(r) = r^s \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ temos

$$\begin{array}{c} -\alpha Z c_1 + (s + k) c_2 = 0 \\ (s - k) c_1 + \alpha Z c_2 = 0 \end{array} .$$

Da segunda equação

$$c_2 = \frac{k - s}{\alpha Z} c_1 ,$$

substituindo na primeira equação

$$-\alpha Z + (k^2 - s^2) \frac{1}{\alpha Z} = 0 .$$

Para $k^2 \neq \alpha^2 Z^2$(pois não nos interessa a solução trivial $u \equiv 0$) a equação acima tem soluções

$$s_\pm = \pm(k^2 - \alpha^2 Z^2)^{\frac{1}{2}}\,.$$

Ficamos com as seguintes soluções para $\hat{h}_0 u = 0$

$$u_+(r) = r^{s_+}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k-s_+}{\alpha Z}\end{pmatrix}\,, \qquad u_-(r) = r^{s_-}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k-s_-}{\alpha Z}\end{pmatrix}\,.$$

As duas soluções estão em $L_2(0,b)$ se, e somente se,

$$k^2 - \alpha^2 Z^2 < \frac{1}{4}, \text{ isto é, } \alpha^2 Z^2 > k^2 - \frac{1}{4}\,.$$

Agora precisamos analisar quando $k^2 = \alpha^2 Z^2$. Neste caso haverá uma solução constante e uma com um termo logaritmico. Note que o sistema (63) pode ser escrito como

$$u' = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} k & -\alpha Z \\ \alpha Z & -k \end{pmatrix} u\,.$$

A matriz desse sistema tem autovalor 0 com multiplicidade algébrica 2, logo sua forma de Jordan é $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Assim existe uma matriz regular 2x2 V tal que

$$V^{-1}\begin{pmatrix} k & -\alpha Z \\ \alpha Z & -k \end{pmatrix} V = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\,.$$

Chame $v = V^{-1}u$, temos o sistema

$$v' = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} v\,.$$

As soluções do sistema acima são da forma

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{pmatrix} \ln r \\ 1 \end{pmatrix}\,.$$

Como $u = Vv$ e V é regular temos que u tem uma solução constante e outra logaritmica, ambas estão em $L_2(0,b)$. $\square$

BIBLIOGRAFIA

[1] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson Prentice Hall, New York, (2005).

[2] D. M. Gitman, I.V. Tyutin, and B.L. Voronov. *Self-adjoint Extensions in Quantum Mechanics*, Birkhäuser, Boston (2012)

[3] F. Rellich, *Störungstheorie der Spektralzerlegung*, II, Math.Ann. 116 (1939) 555-570.

[4] T. Kato, *Fundamental properties of Hamiltonian operators of Schrödinger type*, Trans. Amer. Math. Soc. 70 (1951), 195-211.

[5] T. Kato, *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer, New York, 1966.

[6] B. Hellwig, *A criterion for self-adjointness of singular elliptic differential operators*, J.Math. Anal. Appl. 26, 1969.

[7] B. Simon, *Essential Self-Adjointness of Schrödinger-Operators with Singular Potentials: A Generalized Kalf-Walter-Schmincke Theorem*, Arch. Rational. Mech. Anal. 52 (1973), 44-48.

[8] W.D. Evans, *On the Unique Self-Adjoint Extension of the Dirac Operator and the Existence of the Green Matrix*, Proc.London.Math.Soc. 20(3) (1970), 537-557.

[9] F. Rellich, *Die zulässigen Randbedingungen bei den singulären Eigenwertproblemen der mathematischen Physik*. Math. Z. 49, 702-723 (1943/44).

[10] U. Schmincke, *Essential Selfadjointness of Dirac Operators with a Strongly Singular Potential*, Math.Z. 126 (1972), 71-81.

[11] Dirac, P. A. M., *"The Quantum Theory of the Electron"*, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character (1905-1934) 117, 778 (1928), pp. 610–624.

[12] Rose, M.E., *Relativistic Electron Theory* (John Wiley & Sons, Inc., 1961).

[13] Akhiezer, A. I. and Berestetskii, V. B., *Elements of quantum electrodynamics* (London: Oldbourne Press, 1962).

[14] Greiner, W. and Müller, B. and Rafelski, J., *Quantum Electrodynamics of Strong Fields* 2 (Springer, 1985).

[15] Perelomov AM, Popov VS. *"Fall to the center" in quantum mechanics*. Theor. Math. Phys. 1970;4(1):664–677.

[16] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol.II, Academic Press, London (1975).

[17] M.A. Naimark, *Linear Differential Operators*, PartII, Frederick Ungar Publishing CO., New York (1968).

[18] N.I. Akhiezer and I.M. Glazman, *Theory of Linear Operators in Hilbert Space*, Dover Publications Inc., New York (1993).

[19] Erwin Kreyszig, *Introductory Functional Analysis with Applications,* Wiley Classics Library, Estados Unidos da América (1989).

[20] A. I. Maltsev, *Fundamentos de Algebra Lineal*, Editorial Mir Moscu, URSS, 1972.

[21] M. Reed e B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. I, Academic Press, Londres.

[22] P. D. Hislop e I. M. Sigal, *Introduction to Spectral Theory With Applications to Schrödinger Operators*, Springer, New York.

[23] Jorge Hounie, *Teoria Elementar das Distribuições*, IMPA, Rio de Janeiro.

[24] F. G. Friedlander e M. Joshi, *Introduction to the Theory of Distributions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1999.

[25] W. O. Amren, J. M. Jauch e K. B. Sinha, *Scattering Theory in Quantum Mechanics*, W. A. Benjamin Inc., Massachusetts, 1977.

[26] A. S. Davydov, *Quantum Mechanics*, Pergamon Press, Londres, 1965.

[27] T. Kato, *Schrödinger Operators with Singular Potentials*, Israel J. Math. 13, 1973.

[28] James Glimm, Arthur Jaffe, *Quantum Physics: A Functional Integral Point of View*, Springer, 1987.

[29] Vladimir A. Fock, *Fundamentals of Quantum Mechanics*, Mir Publishers, 1978.

[30] Albert Messiah, *Quantum Mechanics*, Dover Publications, 1999.

[31] Eugen Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd ed., John Wiley & Sons, 1998.

[32] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, Plenum Press, 1994.

[33] Joachim Weidmann, *Spectral Theory of Ordinary Differential Operators*, Springer, 1987.

[34] Gitman et al., *Electronic structure of super heavy atoms revisited, Phys.Scripta **87**, 2013.*

[35] J. A. Sanchez-Monroy e C. J. Quimbay, *Dirac equation in low dimensions: The factorization method*, Elsevier, Annals of Physics 350, páginas 69–83, 2014.

[36] Hocine Bahlouli, Ahmed Jellal, Youness Zahidi, *Factorization of Dirac Equation in Two Space Dimensions*, International Journal of Geometric Methods in Modern Physics 11, 2014.

[37] Shi-Hai Dong e Zhong-Qi Ma, *Exact solutions to the Dirac equation with a Coulomb potential in 2 + 1 dimensions*, Physics Letters A 312, 78–83, 2003.