

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Construção do Espaço de Hilbert Equipado
na Mecânica Quântica: O Poço Quadrado
Unidimensional**

por

Guilherme Ferreira Monteiro

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Leonardo Fernandes Guidi
Orientador

Prof. Dr. Fábio Souto Azevedo
Co-orientador

Porto Alegre, Fevereiro de 2013.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Monteiro, Guilherme Ferreira

Construção do Espaço de Hilbert Equipado na Mecânica Quântica: O Poço Quadrado Unidimensional / Guilherme Ferreira Monteiro.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2013.

64 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2013.

Orientador: Guidi, Leonardo Fernandes; Co-orientador: Azevedo, Fábio Souto

Dissertação: Matemática Aplicada
Kets de Dirac, Sturm-Liouville, Funções de Green, Teorema de Weyl-Kodaira, Teorema de Titchmarsh-Kodaira, Espectro, Diagonalização, Expansão, Espaço de Hilbert Equipado

Construção do Espaço de Hilbert Equipado na Mecânica Quântica: O Poço Quadrado Unidimensional

por

Guilherme Ferreira Monteiro

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Dinâmica dos Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Leonardo Fernandes Guidi

Co-orientador: Prof. Dr. Fábio Souto Azevedo

Banca examinadora:

Dr. Carlos Felipe Lardizabal Rodrigues
DMPA-UFRGS

Dr. José Afonso Barrionuevo
DMPA-UFRGS

Dr. Silas Luiz de Carvalho
ICT-UNIFESP

Dissertação apresentada e aprovada em
28/02/2013.

Prof^a Dr^a Maria Cristina Varrialle
Coordenadora

Sumário

AGRADECIMENTOS	vi
LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE SIMBOLOS	viii
RESUMO	x
ABSTRACT	xi
1 INTRODUÇÃO	1
2 PRELIMINARES	3
2.1 Algumas Características da Mecânica Quântica	3
2.2 Operadores Auto-adjuntos	6
2.3 Operadores de Sturm-Liouville	14
2.3.1 Valores de Fronteira de Operadores Diferenciais e seus Resolventes	20
2.3.2 Diagonalização do operador: O teorema de Weyl-Kodaira	33
3 POTENCIAL POÇO QUADRADO	36
3.1 Diagonalização e Expansão em Auto-Funções	45
4 A NECESSIDADE DO EHE	48
5 CONSTRUÇÃO DO ESPAÇO DE HILBERT EQUIPADO	51

5.1	Expansão de Dirac em Vetores da Base	53
5.2	Representação da Energia no EHE	54
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	56
	APÊNDICE A	58
A.1	Construção do EHE	58
A.2	Expansão de Dirac em Vetores da Base	61
A.3	Representação da Energia do EHE	62
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	63

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais Sergio R. dos Santos Monteiro e Saionara Ferreira Monteiro pelo amor, incentivo e apoio.

Ao meu irmão Gustavo Ferreira Monteiro pelo amor e carinho.

A todos meus amigos e colegas que estiveram comigo nesses dois últimos dois anos, especialmente à Bruna, Fernandinho, Alê e Matheus que me ajudaram muito em minha formação.

Ao professor Leonardo Fernandes Guidi pela orientação, paciência, incentivo e apoio no desenvolvimento deste trabalho.

Ao PPGMAP pela infra-estrutura oferecida e à CAPES pelo suporte financeiro.

Lista de Figuras

Figura 3.1	Solução gráfica das equações (3.44)	44
Figura 3.2	Os valores E_i^* correspondem à energia associada aos pólos, referentes à equação (3.45). Os círculos representam esses pólos.	44

LISTA DE SIMBOLOS

- h é o operador diferencial formal hamiltoniano do sistema, H é o operador auto-adjunto associado.
- l é o operador de Sturm-Liouville.
- $|E\rangle$ é um Ket que é um autovetor do hamiltoniano.
- $Sp(H)$ é o espectro do hamiltoniano.
- \mathcal{H} é o espaço de Hilbert.
- H^\times é uma extensão unicamente definida de H sobre Φ^\times .
- Φ é o espaço de funções de onda.
- Φ^\times é o dual topológico de Φ .
- $\mathcal{D}(H)$ é o domínio no qual o hamiltoniano é auto-adjunto.
- $\mathcal{C}(I)$ e $\mathcal{C}^n(I)$: respectivamente, classe das funções contínuas e classe das funções n vezes continuamente diferenciáveis em um intervalo I da reta real.
- $L^p(X, d\mu)$: o espaço de Lebesgue L^p , $1 \leq p \leq \infty$. Dado um espaço de medida (X, Σ, μ) , uma função f pertence à $L^p(X, d\mu)$ se $\|f\|_p = (\int_X |f|^p d\mu)^{1/p} < \infty$. A indicação da medida é omitida quando for a medida de Lebesgue usual.
- L^p_{loc} : o espaço localmente L^p . Uma função f pertence a $L^p_{loc}(X)$ se $f \in L^p(K)$ para qualquer subconjunto compacto $K \subset X$.
- $AC_0 = \{ f \in \mathcal{C}(I) \mid f(x) = f(c) + \int_c^x g(y) dy, c \in I, g \in L^1(I), \text{supp}(f) = K \subset I, K \text{ compacto} \}$

- AC_{loc}^n : o espaço das funções absolutamente contínuas. Para algum intervalo $I \subseteq \mathbb{R}$, $AC_{loc}^n(I) = \{f \in \mathcal{C}(I) \mid f^{(n-1)}(x) = f^{(n-1)}(c) + \int_c^x g(y)dy, c \in I, g \in L_{loc}^1(I)\}$.
- \mathcal{F} denota a transformada de Fourier generalizada.
- U é o operador unitário que transforma a representação da posição em representação da energia.
- U^{-1} é o operador que transforma a representação da energia em representação da posição.

RESUMO

Os Espaços de Hilbert Equipados (EHE) são uma construção desenvolvida por Israel Gelfand e colaboradores que envolve a teoria das distribuições de Laurent Schwartz e os espaços de Hilbert. A construção é realizada a partir de um espaço de Hilbert \mathcal{H} e de um subespaço denso $\Phi \subset \mathcal{H}$, no qual a estrutura de espaço vetorial topológico é definida de modo que a inclusão seja contínua. A inclusão contínua é responsável pela inclusão contínua do dual $\mathcal{H}' \subset \Phi'$ e, a partir da identidade $\mathcal{H} = \mathcal{H}'$, pela cadeia de inclusões $\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi'$ denominada tripla de Gelfand. Quando Φ é também um espaço nuclear, a construção de Gelfand nos permite uma generalização do teorema espectral para operadores auto-adjuntos os quais tratam o espectro contínuo e discreto nas mesmas condições. Nessa dissertação, a construção explícita do EHE para a Mecânica Quântica do poço potencial quadrado será revista, bem como a natureza de seus objetos no formalismo de Dirac (bras e kets). Este potencial foi escolhido como o caso mais simples no qual um tratamento igual dos espectros contínuo e discreto é obtido através da teoria.

ABSTRACT

The Rigged Hilbert Spaces (RHS) are a mathematical construction developed by Israel Gelfand and collaborators which involves Laurent Schwartz's Theory of Distributions and Hilbert spaces. This construction is accomplished by the choice of a dense subset Φ of a Hilbert Space \mathcal{H} , $\Phi \subset \mathcal{H}$, on which the structure of a topological vector space is defined, such this embedding is continuous. This embedding is responsible for the continuous embedding of the dual space $\mathcal{H}' \subset \Phi'$ and, by the identity $\mathcal{H}' = \mathcal{H}$, for the chain of continuous embeddings $\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi'$, known as Gelfand's triple. When Φ is also a nuclear space, Gelfand's construction allows a generalization of the spectral theorem for self-adjoint operators which treats the continuous and discrete spectra on the same footing. On this dissertation, the explicit construction of RHS for quantum mechanics' finite square well potential will be reviewed as well as the nature of its Dirac's formalism objects (bras and kets). This potential was chosen as the most simple case where an equal treatment of continuous and discrete spectra is achieved by the theory.

1 INTRODUÇÃO

No presente trabalho estudaremos o problema do Poço Potencial, o qual nos fornecerá um importante exemplo do espaço de Hilbert Equipado gerado por um hamiltoniano de Schrödinger. Para tanto, alguns importantes conceitos serão apresentados, baseando-se no que é apresentado em [1] e [2], a fim de preparar o leitor para o que segue. Algumas das demonstrações dos teoremas são omitidas, mas as mesmas encontram-se nas referências dadas acima. Espera-se um pouco de paciência por parte do leitor, pois o desenvolvimento do capítulo 2 é mais geral do que o necessário para o caso estudado, porém o investimento retorna na forma de uma maior compreensão de como atacar outros problemas.

Será analisada a equação de Schrödinger que governa o comportamento de um sistema quântico em qualquer tempo. Essa equação é dada por:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) = H\varphi(t), \quad (1.1)$$

com H sendo o hamiltoniano do sistema e $\varphi(t)$ denota o valor da função de onda φ no tempo t .

O objetivo do trabalho é mostrar que o espaço de Hilbert Equipado (EHE) é a estrutura que suporta todas as manipulações matemáticas necessárias no estudo de nosso problema. Será mostrado que os kets $|E\rangle_i$, $i = 1, 2$, podem ser vistos como funcionais anti-lineares contínuos sobre o espaço de funções de onda Φ , isto é, $|E\rangle_i \in \Phi^\times$, $i = 1, 2$.

O Teorema Nuclear Espectral [3, 4] apenas assegura a existência dos autovetores generalizados $|E\rangle$, mas não nos diz como construí-los ou como construir o espaço Φ , o qual é antecipadamente dado. Neste trabalho, forneceremos um exemplo de um hamiltoniano com espectro discreto e contínuo nas quais essas quantidades

são explicitamente construídas. Faremos uso da Teoria de Sturm-Liouville (Teoria de Weyl) [2] para achar o EHE do nosso problema.

Aplicando à teoria de Sturm-Liouville à equação de Schrödinger do poço potencial, obteremos um domínio $\mathcal{D}(H)$ no qual o hamiltoniano é auto-adjunto. As funções de Green, o espectro e a transformação unitária que diagonaliza nosso operador também serão calculados. A diagonalização do hamiltoniano nos permitirá obter uma representação (espectral) da energia e uma decomposição integral direta do espaço de Hilbert induzida pelo nosso hamiltoniano. Veremos porque esta decomposição integral direta não é suficiente para os propósitos da Mecânica Quântica e porque o EHE é necessário. Em seguida, vamos construir o espaço Φ . O EHE

$$\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^\times \tag{1.2}$$

do poço potencial seguirá. Kets de Dirac serão interpretados como elementos de Φ^\times e o funcional Delta-Schwartz aparecerá na representação (espectral) da energia da tripla (1.2). A exposição é semelhante em alguns pontos à proposta dada por de la Madrid [5].

2 PRELIMINARES

2.1 Algumas Características da Mecânica Quântica

Em mecânica quântica, uma partícula no \mathbb{R}^n tem seu comportamento descrito pela função de onda

$$\psi(x, t) \in \mathbb{C} \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \quad (2.1)$$

com x correspondendo a um ponto no espaço e t o tempo. A quantidade $\rho_t(x) = |\psi(x, t)|^2$ é interpretada como a densidade de probabilidade da partícula no tempo t . Em particular, ψ deve ser normalizada, como segue

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(x, t)|^2 d^n x = 1, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (2.2)$$

A localização da partícula x é uma quantidade que pode ser observada (i.e, medida) e por essa razão é denominada observável. Devido à interpretação probabilística, ela também é uma variável aleatória, cujo valor esperado é dado por

$$\mathbb{E}_\psi(x) = \int_{\mathbb{R}^n} x |\psi(x, t)|^2 d^n x. \quad (2.3)$$

Na prática, em situações experimentais não é possível medir x diretamente, no entanto é possível medir algumas funções de x . Por exemplo, é possível checar se a partícula está dentro de uma certa área Ω do espaço. Nesse caso observável é a função característica $\chi_\Omega(x)$ desse conjunto. Em particular o número

$$\mathbb{E}_\psi(\chi_\Omega) = \int_{\mathbb{R}^n} \chi_\Omega(x) |\psi(x, t)|^2 d^n x = \int_{\Omega} |\psi(x, t)|^2 d^n x \quad (2.4)$$

corresponde à probabilidade de achar a partícula dentro de $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$. Ressaltamos que, em contraste à mecânica clássica, a partícula não é mais localizada em um certo ponto. Em particular, a variância $\Delta_\psi(x)^2 = \mathbb{E}_\psi(x^2) - \mathbb{E}_\psi(x)^2$ é sempre diferente de zero.

Em geral, o espaço das configurações possíveis de um sistema quântico (também habitualmente denominado "espaço de fase de um sistema quântico") é um espaço de Hilbert \mathcal{H} , e os possíveis estados do sistema são representados pelos elementos ψ com norma um, $\|\psi\| = 1$. Um observável a corresponde a um operador linear T no espaço de Hilbert e seu valor esperado, se o sistema está no estado ψ , é dado pelo número real

$$\mathbb{E}_\psi(T) = \langle \psi, T\psi \rangle = \langle T\psi, \psi \rangle, \quad (2.5)$$

com $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denotando o produto escalar de \mathcal{H} . Analogamente, a variância é dada por

$$\Delta_\psi(T)^2 = \mathbb{E}_\psi(T^2) - \mathbb{E}_\psi(T)^2 = \|(T - \mathbb{E}_\psi(T))\psi\|^2. \quad (2.6)$$

Note que $\Delta_\psi(T)$ vai a zero se, e só se, ψ for uma auto-função correspondendo ao auto-valor $\mathbb{E}_\psi(T)$, isto é, $T\psi = \mathbb{E}_\psi(T)\psi$.

Do ponto de vista físico, a equação (2.5) deveria fazer sentido para qualquer $\psi \in \mathcal{H}$. Entretanto, não é isso o que ocorre. Como exemplo podemos considerar o caso de uma função de onda da forma $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1+x^2}}$ no espaço de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$, $\|\psi\|_2^2 = 1$. A ação do operador posição sobre essa função de onda corresponde a função $\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{x}{\sqrt{1+x^2}}$ que claramente não é de quadrado integrável (entretanto o observável representado pela função característica χ_Ω como em (2.4) estará definido para qualquer compacto $\Omega \subset \mathbb{R}$). O principal motivo para este problema é que $\mathbb{E}_\psi(x)$ pode alcançar valores arbitrariamente grandes se a partícula não estiver confinada em um domínio finito, o que nos remete a operadores não limitados. Mas operadores não limitados não podem ser definidos em todo o espaço de Hilbert de maneira natural pelo teorema do gráfico fechado. Portanto, T só estará definido em um subconjunto $\mathcal{D}(T) \subseteq \mathcal{H}$ chamado de domínio de T . Como queremos que T seja denso pelo menos na maioria dos estados, $\mathcal{D}(T)$ deve ser denso. Entretanto, não há uma prescrição geral de como encontrar o operador correspondente de um observável dado.

Agora voltando à evolução temporal de um sistema quântico. Dado um estado inicial $\psi(\cdot, 0)$ do sistema, deveria haver uma única $\psi(\cdot, t)$ representando o estado do sistema no tempo $t \in \mathbb{R}$. Vamos escrever

$$\psi(\cdot, t) = U(t)\psi(\cdot, 0) \quad (2.7)$$

Além disso, segue de experimentos físicos que a superposição de estados é preservada: ou seja, $U(t)(\alpha_1\psi_1(\cdot, 0) - \alpha_2\psi_2(\cdot, 0)) = \alpha_1\psi_1(\cdot, t) - \alpha_2\psi_2(\cdot, t)$ ($|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$). Em outras palavras, $U(t)$ deveria ser um operador linear. Uma vez que $\psi(\cdot, t)$ é uma função de onda para um sistema quântico (ou seja, $\|\psi(\cdot, t)\| = 1$), U deve satisfazer

$$\|U(t)\psi\| = \|\psi\|. \quad (2.8)$$

Operadores que satisfazem (2.8) são denominados operadores unitários. Assumindo a unicidade de soluções para o problema de valor inicial, o operador U ainda deve satisfazer as seguintes propriedades

$$U(0) = \mathbb{I}, \quad U(t+s) = U(t)U(s). \quad (2.9)$$

Uma família de operadores unitários $U(t)$ que satisfazem essas propriedades é denominado grupo unitário a parâmetro. Além disso, é natural assumir que esse grupo é fortemente contínuo, ou seja,

$$\lim_{t \rightarrow t_0} U(t)\psi = U(t_0)\psi, \quad \psi \in \mathcal{H}. \quad (2.10)$$

Grupos que satisfazem essa propriedade possuem um "gerador infinitesimal" que é o operador definido como

$$H\psi = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{i}{t}(U(t)\psi - \psi), \quad \mathcal{D}(H) = \{\psi \in \mathcal{H} : \lim_{t \rightarrow 0} \frac{i}{t}(U(t)\psi - \psi) \text{ existe}\}. \quad (2.11)$$

Esse operador é denominado operador hamiltoniano e corresponde à energia do sistema. Se $\psi(\cdot, 0) \in \mathcal{D}(H)$, então $\psi(\cdot, 0)$ é uma solução da equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi(\cdot, t) = H\psi(\cdot, t), \quad (2.12)$$

onde $\hbar \approx 1.05457 \times 10^{-34}$ Js. De acordo com Teschl [1], a exposição apresentada até aqui permite estabelecer os seguintes axiomas para a mecânica quântica:

Axioma 1. O espaço de configuração de um sistema quântico é um espaço de Hilbert complexo separável \mathcal{H} e os possíveis estados do sistema são representados pelos elementos de \mathcal{H} com norma um.

Axioma 2. Cada observável a corresponde a um operador maximal T definido em um subconjunto denso $\mathcal{D}(T)$. O operador correspondendo ao polinômio $P_n(a) = \sum_{j=0}^n \alpha_j a^j, \alpha_j \in \mathbb{R}$ é $P_n(T) = \sum_{j=0}^n \alpha_j T^j, \mathcal{D}(P_n(T)) = \mathcal{D}(T^n) = \{\psi \in \mathcal{D}(T) | T\psi \in \mathcal{D}(T^{n-1})\}$ e $T^0 = \mathbb{I}$

Axioma 3. Os valores esperados de uma medição de T , quando o sistema está no estado $\psi \in \mathcal{D}(T)$, é dado por (2.5), o qual deve ser real para toda $\psi \in \mathcal{D}(T)$.

Axioma 4. A evolução do tempo é dada por um grupo unitário a parâmetro fortemente contínuo $U(t)$. O gerador desse grupo corresponde à energia do sistema.

Os Axiomas 2 e 3 implicam que os observáveis correspondem à operadores auto-adjuntos, pois estes operadores são maximais, isto é, não possuem extensões simétricas. Assim, esses operadores são de grande importância na mecânica quântica por essa razão descreveremos algumas de suas propriedades básicas na subseção seguinte.

2.2 Operadores Auto-adjuntos

Seja \mathcal{H} um espaço de Hilbert. Um operador linear é um mapeamento linear

$$T : \mathcal{D}(T) \mapsto \mathcal{H}, \tag{2.13}$$

onde $\mathcal{D}(T)$ é um subespaço linear de \mathcal{H} , chamado domínio de T . O operador é chamado limitado se a norma do operador

$$\|T\| \doteq \sup_{\|\psi\|=1} \|T\psi\| = \sup_{\|\varphi\|=\|\psi\|=1} |\langle \psi, T\varphi \rangle| \quad (2.14)$$

for finita.

Observação 1. *A segunda igualdade é obtida a partir da desigualdade $|\langle \psi, T\varphi \rangle| \leq \|\psi\| \|T\varphi\|$ na situação em que $T\varphi = z\psi$ para algum $z \in \mathbb{C}$.*

Se T é limitado, não há restrições em assumir que $\mathcal{D}(T) = \mathcal{H}$, nesse caso o produto de operadores é definidos naturalmente; ou seja, $T_1 T_2 \psi = T_1 (T_2 \psi)$ para $\psi \in \mathcal{D}(T_1 T_2) = \{\psi \in \mathcal{D}(T_2) | T_2 \psi \in \mathcal{D}(T_1)\}$.

Um operador linear T densamente definido é chamado simétrico (ou hermitiano) se

$$\langle \varphi, T\psi \rangle = \langle T\varphi, \psi \rangle, \quad \psi, \varphi \in \mathcal{D}(T). \quad (2.15)$$

A justificativa para esta definição vem do seguinte lema.

Lema 2.2.1. *Um operador T densamente definido é simétrico se e somente se a forma quadrática $\langle \psi, T\psi \rangle$, $\psi \in \mathcal{D}(T)$ for real.*

Demonstração Seja $q_T(\psi) = \langle \psi, T\psi \rangle$, $\psi \in \mathcal{D}(T)$. A equação (2.15) implica que $Im(q_T(\psi)) = 0$. Inversamente, tomando a parte imaginária da identidade

$$q_T(\psi + i\varphi) = q_T(\psi) + q_T(\varphi) + i(\langle \psi, T\varphi \rangle - \langle \varphi, T\psi \rangle) \quad (2.16)$$

mostra que $Re\langle T\varphi, \psi \rangle = Re\langle \varphi, T\psi \rangle$. Substituindo φ por $i\varphi$ na última equação mostra que $Im\langle T\varphi, \psi \rangle = Im\langle \varphi, T\psi \rangle$ e conclui a demonstração. ■

Em outras palavras, um operador T densamente definido é simétrico se e somente se

$$\langle \psi, T\psi \rangle = \langle T\psi, \psi \rangle, \quad \psi \in \mathcal{D}(T). \quad (2.17)$$

Isto já reduz a classe de operadores admissíveis para a classe de operadores simétricos pelo Axioma 3.

Pelo Axioma 2, T deve ser maximal; ou seja, se \tilde{T} é um outro operador simétrico tal que $T \subseteq \tilde{T}$, então $T = \tilde{T}$. Aqui escrevemos $T \subseteq \tilde{T}$ se $\mathcal{D}(T) \subseteq \mathcal{D}(\tilde{T})$ e $T\psi = \tilde{T}\psi$ para todo $\psi \in \mathcal{D}(T)$. O operador \tilde{T} é chamado uma **extensão** de T nesse caso. Além disso, escrevemos $T = \tilde{T}$ se as relações $\tilde{T} \subseteq T$ e $T \subseteq \tilde{T}$ forem satisfeitas simultaneamente.

O **operador adjunto** T' de um operador linear T definido densamente é definido por

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(T') &= \{\psi \in \mathcal{H} \mid \exists \tilde{\psi} \in \mathcal{H} : \langle \tilde{\psi}, T\varphi \rangle = \langle \psi, \varphi \rangle, \forall \varphi \in \mathcal{D}(T)\}, \\ T'\psi &= \tilde{\psi}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

O requisito de que $\mathcal{D}(T)$ seja denso implica que T' é bem definido. Entretanto, note que $\mathcal{D}(T')$ pode não ser denso em geral.

Claramente temos $(\alpha T)' = \bar{\alpha} T'$ para $\alpha \in \mathbb{C}$ e $(T_1 + T_2)' \supseteq T_1' + T_2'$ com a condição que $\mathcal{D}(T_1 + T_2) = \mathcal{D}(T_1) \cap \mathcal{D}(T_2)$ seja denso. Entretanto, a igualdade não se manterá em geral a menos de um operador limitado.

Para operadores simétricos temos $T \subseteq T'$. Se, além disso, $T = T'$, então T é chamado **auto-adjunto**.

A existência e construção de operadores auto-adjuntos para operadores não limitados definidos em subespaços de um espaço de Hilbert \mathcal{H} envolvem a análise dos "subespaços de deficiência" e a imposição de condições de contorno. No restante desta subseção essas questões serão tratadas.

Definição 2.2.1. *Seja T um operador com domínio denso em \mathcal{H} e T' , com domínio $\mathcal{D}(T')$, o seu adjunto. Os espaços de deficiência positivos e negativos de T são definidos respectivamente por*

$$\mathcal{D}_+ = \{f \in \mathcal{D}(T') \mid T'f = if\} \quad e \quad \mathcal{D}_- = \{f \in \mathcal{D}(T') \mid T'f = -if\} \quad (2.19)$$

e suas dimensões (finitas ou infinitas) são simbolizadas por n_+ e n_- , denominados índices de deficiência positiva e negativa respectivamente.

Uma característica importante dos espaços \mathcal{D}_+ e \mathcal{D}_- é o fato de serem subespaços fechados de $\mathcal{D}(T')$, de fato ([2, lema XII.4.10]) $\mathcal{D}(T') = \mathcal{D}(\bar{T}) \oplus \mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-$, sendo \bar{T} o fecho de T , definido como a menor extensão simétrica fechada de T . Por sua vez, \bar{T} é também a restrição de T' ao fecho de $\mathcal{D}(T)$ no espaço de Hilbert formado por $\mathcal{D}(T')$ com produto interno dado por $(x, y)' = (x, y) + (Tx, Ty)$ (ver [2, lema XII.4.8]).

Essa decomposição permite identificar a seguinte situação: se $n_+ = n_- = 0$ (ou seja $\mathcal{D}_+ = \mathcal{D}_- = \emptyset$) então a única extensão auto-adjunta de T é $\bar{T} = T'$.

Nas demais situações a existência de extensões auto-adjuntas depende da necessidade de que os índices de deficiência sejam iguais $n_+ = n_-$ e da imposição da condição de contorno sobre $\mathcal{D}(T')$.

Definição 2.2.2. *Um "valor de fronteira" para o operador T é um funcional linear contínuo no espaço de Hilbert $\mathcal{D}(T')$ (munido do produto interno definido anteriormente) que se anula quando aplicado em elementos de $\mathcal{D}(T)$*

Lema 2.2.2. *Seja T um operador simétrico com índices de deficiência n_+, n_- finitos. O espaço dos funcionais valor de fronteira para T é um espaço de Hilbert de dimensão $n_+ + n_-$. Um conjunto A_1, A_2, \dots, A_k de valores de fronteira é linearmente independentes se, e só se, existirem elementos $\varphi_1, \dots, \varphi_k \in \mathcal{D}(T')$ tais que $\det(A_i(\varphi_j)) \neq 0$ ou se, e só se, para qualquer conjunto de k complexos $\alpha_1, \dots, \alpha_k$, existir um $x \in \mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-$ tal que $A_i(x) = \alpha_i, i = 1, \dots, k$.*

Demonstração: A demonstração segue das propriedades usuais de espaços vetoriais de dimensões finitas e da decomposição do espaço de Hilbert associado ao domínio $\mathcal{D}(T')$ (com produto interno $(x, y)^* = (x, y) + (T'x, T'y)$) com a soma direta $\mathcal{D}(T') = \mathcal{D}(\bar{T}) \oplus \mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-$, onde \mathcal{D}_+ e \mathcal{D}_- são os espaços de deficiência de T .

O fecho do operador T , \overline{T} é definido com a menor extensão fechada de um operador simétrico T com domínio denso, ele também pode ser estendido como a restrição de T' caracterizada pelo fecho de $\mathcal{D}(T)$ no espaço de Hilbert $\mathcal{D}(T')$, ou seja $\mathcal{D}(\overline{T})$ é um subespaço linear fechado de $\mathcal{D}(T')$.

Quanto aos subespaços \mathcal{D}_+ e \mathcal{D}_- , suponha que $\{x_n\}$ é uma sequência de elementos de \mathcal{D}_+ que converge para um $x \in \mathcal{D}(T')$, então a sequência de pares $\{[x_n, T'x_n]\} = \{[x_n, ix_n]\} \in \mathcal{D}(T')$ (gráfico do operador T') converge para $[x, ix] = [x, T'x]$, pois T' é um operador fechado. Assim, $T'x = ix$, ou seja, $x \in \mathcal{D}_+$ e portanto \mathcal{D}_+ é fechado. O mesmo ocorre com \mathcal{D}_- .

Falta provar que $\mathcal{D}(\overline{T})$, \mathcal{D}_+ e \mathcal{D}_- são mutuamente ortogonais e que sua união é igual a $\mathcal{D}(T')$. Sejam $g \in \mathcal{D}(\overline{T})$, $y_+ \in \mathcal{D}_+$, $y_- \in \mathcal{D}_-$,

$$\begin{aligned}
(y, y_+)^* &= (y, y_+) + (T'y, T'y_+) \\
&= (y, y_+) + (\overline{T}y, iy_+) \quad \text{por } T' \supseteq \overline{T} \\
&= (y, y_+) + (y, i\overline{T}'y_+) \\
&= (y, y_+) + (y, iT'y_+) \\
&= (y, y_+) + (y, i^2y_+) = 0.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

O mesmo ocorre com o produto $(y, y_-)^*$.

Por fim,

$$\begin{aligned}
(y_+, y_-)^* &= (y_+, y_-) + (T'y_+, T'y_-) \\
&= (y_+, y_-) + (iy_+, -iy_-) = 0
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Isto confirma a ortogonalidade mútua e que $\mathcal{D}(\overline{T}) \oplus \mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_- \subseteq \mathcal{D}(T')$. O final da prova consiste em verificar que o elemento nulo é o único ortogonal aos três subespaços.

Suponha que ξ é ortogonal a $\mathcal{D}(\overline{T})$, \mathcal{D}_+ e \mathcal{D}_- . Então para todo $y \in \mathcal{D}(\overline{T})$, $(y, \xi)^* = (y, \xi) + (T'y, T'\xi) = 0$, ou seja, $(y, \xi) = -((T'y, T'\xi))$. Uma vez que (\cdot, ξ) é um funcional linear contínuo definido em subespaço denso de um espaço de Hilbert, segue que $T'T'\xi = -\xi$.

Segue que $(I + T'T)\xi = (I + iT')(I - iT')\xi = 0$. Expandindo os termos do lado direito temos que

$$(I - iT')\xi + iT'(I - iT')\xi = 0 \quad (2.22)$$

$$T'(I - iT')\xi = i(I - iT')\xi, \quad (2.23)$$

e conclui-se que $(I - iT')\xi \in \mathcal{D}_+$. Além disso, se $y_+ \in \mathcal{D}_+$, então

$$\begin{aligned} 0 = (\xi, y_+)^* &= (\xi, y_+) + (T'\xi, T'y_+) \\ &= (\xi, y_+) + (T'\xi, iy_+) \\ &= (\xi, y_+) - i(T'\xi, y_+) \\ &= ((I - iT')\xi, y_+) \end{aligned}$$

Como $(I - iT')\xi \in \mathcal{D}_+$, a última igualdade na expressão anterior implica $(I - iT')\xi = 0$. Segue que $T'\xi = -i\xi$, ou seja $\xi \in \mathcal{D}_-$, mas por hipótese ξ é ortogonal a \mathcal{D}_- , portanto $\xi = 0$ e consequentemente $\mathcal{D}(T') = \mathcal{D}(\overline{T}) \oplus \mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-$. ■

Definição 2.2.3. (i) Se A é um valor de fronteira para T , então a equação $A(x) = 0$, $x \in \mathcal{D}(T')$, é denominada "condição de contorno".

(ii) Um conjunto de condições de contorno $A_i(x) = 0$, $i = 1, 2, \dots, k$ é denominado linearmente independente se os valores de fronteira $\{A_i\}_{i=1}^k$ o forem.

(iii) Um conjunto de condições de contorno $A_i(x) = 0$, $i = 1, 2, \dots, k$ é denominado simétrico se as equações $A_i(x) = A_i(y) = 0$, $x, y \in \mathcal{D}(T')$ implicarem $(T'x, y) - (x, T'y) = 0$.

Lema 2.2.3. Seja T um operador simétrico cujos índices de deficiências n_+ e n_- são finitos. O espaço de valores de fronteira para T é um espaço de Hilbert de dimensão

$n_+ + n_-$. Um conjunto A_1, \dots, A_k de valores de fronteira é linearmente independentes se, e só se, existem elementos ψ_1, \dots, ψ_k em $\mathcal{D}(T')$ tais que $\det(A_i(\psi_i)) \neq 0$; ou, se, e só se, para qualquer conjunto de números complexos $\alpha_1, \dots, \alpha_k$, existe um $x \in \mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-$ tal que $A_i(x) = \alpha_i, i = 1, \dots, k$; ou, se, e só se, a matriz $(A_i(\psi_i))$ é de ordem k , onde ψ_1, \dots, ψ_k é qualquer base para $\mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-$.

Demonstração: Seja A um funcional valor de fronteira qualquer para o operador diferencial formal l . Uma vez que l é real, $\mathcal{D}(L'_0)$ é fechado pela operação de conjugação, de modo que o funcional \bar{A} , definido por $\bar{A}(f) = \overline{A(f)}$ é também um funcional valor de fronteira pra l . Assim, o funcional A pode ser escrito como combinação linear

$$A = \left(\frac{A + \bar{A}}{2} \right) + i \left(\frac{A - \bar{A}}{2i} \right) \quad (2.24)$$

e l admite um conjunto completo A_1, \dots, A_p de valores de fronteira reais e linearmente independentes.

De acordo com o lema ([2, XII.4.23]) a forma bilinear $\langle lf, g \rangle - \langle f, lg \rangle$ pode ser escrita unicamente como

$$(lf, g) - (f, lg) = \sum_{i,j=1}^p c_{ij} A_i(f) \overline{A_j(g)}, \quad f, g \in \mathcal{D}(L'_0) \quad (2.25)$$

onde $c_{ij} = -\overline{c_{ji}}$. Como os valores de fronteira A_i são reais e as constantes c_{ij} são únicas, segue que c_{ij} são também reais, o que implica $c_{ij} = -c_{ij}$ e $c_{ii} = 0$.

No caso, (iv) não há funcionais valor de fronteira para l , de modo que fica evidente de (2.25) que $(lf, g) = (f, lg), f, g \in \mathcal{D}(L'_0)$.

Nos casos (ii) e (iii) há dois funcionais valor de fronteira e um dos extremos e de (2.25) segue pela inclusão de termos multiplicativos

$$(lf, g) - (f, lg) = A_1(f) \overline{A_2(g)} - A_2(f) \overline{A_1(g)} \quad (2.26)$$

No caso (i), segue que é possível escolher um conjunto completo de funcionais valor de fronteira reais $\{A_1, A_2, A_3, A_4\} = \{C_1, C_2, D_1, D_2\}$, linearmente

independentes, onde C_1 e C_2 são valores de fronteira em a , D_1 e D_2 em b . Reescrevendo (2.25) em termos desses funcionais vê-se que existem termos da forma $T_{ij} \left(C_i(f) \overline{D_j(g)} - \overline{C_i(g)} D_j(f) \right)$. No entanto esses termos se anulam. Como exemplo, pode-se supor que $T_{11} \neq 0$. É possível determinar uma função $f \in \mathcal{D}(L'_0)$ tal que $C_1(f) = 1, C_2(f) = 0$ e tal que f se anula em uma vizinhança de b . De maneira análoga, existe uma função $g \in \mathcal{D}(L'_0)$ tal que $D_1(g) = 1, D_2(g) = 0$ e g se anula em uma vizinhança de a . De acordo com a fórmula de Green, para essas funções tem-se que $(lf, g) - (f, lg) = 0$. Por outro lado, a partir de (2.25) $(lf, g) - (f, lg) = T_{11} \neq 0$, uma contradição. Esse argumento é válido para os demais índices i, j .

Portanto, segue que após a inclusão de termos multiplicativos é possível escrever

$$(lf, g) - (f, lg) = C_1(f) \overline{C_2(g)} - C_2(f) \overline{C_1(g)} + D_1(f) \overline{D_2(g)} - D_2(f) \overline{D_1(g)}.$$

■

Lema 2.2.4. *Seja T um operador simétrico com índices de deficiência n_+ e n_- finitos. Seja A_1, \dots, A_p um conjunto completo de valores de fronteira para T . Então a forma bilinear $\{x, y\} = -i\{(Tx, y) - (x, Ty)\}$ pode ser expressa de forma única como*

$$\{x, y\} = \sum_{i,j=1}^p \alpha_{ij} A_i(x) \overline{A_j(y)}, \quad x, y \in \mathcal{D}(T'), \quad (2.27)$$

de maneira que os coeficientes satisfazem a equação $\alpha_{ji} = \overline{\alpha_{ij}}$.

Demonstração: Utilizando o lema 2.2.3, sejam ψ_1, \dots, ψ_ν elementos de $\mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-$ tais que $A_i(\psi_j) = \delta_{ij}$, onde $\delta_{ij} = 1$ se $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$. Segue que ψ_i são linearmente independentes e formam uma base para $\mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-$. Seja $\alpha_{ij} = \{\psi_i, \psi_j\}$, então, desde que $\{x, y\} = \overline{\{y, x\}}$, segue que $\alpha_{ij} = \overline{\alpha_{ji}}$. A equação (2.27) é satisfeita toda vez que x e y são escolhidos dentre os elementos ψ_1, \dots, ψ_ν . Assim (2.27) se mantém para todos x e y em $\mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-$, desde que ambos os lados

de (2.27) são bilineares. Mas da definição 2.2.2 e de $\{x, y\} = -i\{(T'x, y) - (x, T'y)\}$ temos que os dois lados de (2.27) vão a zero se x ou y está em $\mathcal{D}(T)$, o resultado segue em vista da decomposição de $\mathcal{D}(T') = \mathcal{D}(\bar{T}) \oplus \mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-$ que foi demonstrada no lema anterior. \blacksquare

A partir dessas definições, a forma mais geral para uma extensão auto-adjunta para o operador T é dada por ([2, teorema XII.4.31]).

Teorema 2.2.1. *Seja T um operador simétrico com índices de deficiências finitos dados por $n_+ = n_- = n$. Seja $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ uma base ortonormal para \mathcal{D}_+ , e seja ψ_1, \dots, ψ_n uma base ortonormal para \mathcal{D}_- . Seja $B_i(x) = (x, \varphi_i)'$ e $C_i(x) = (x, \psi_i)'$ para x em $\mathcal{D}(T')$ e $1 \leq i \leq n$. Então qualquer extensão auto-adjunta de T é a restrição de T' para o subespaço de $\mathcal{D}(T')$ determinado pelas condições de contorno*

$$B_i(x) - \sum_{j=1}^n \theta_{ij} C_j(x) = 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.28)$$

onde (θ_{ij}) é qualquer matriz que satisfaça $\sum_{j=1}^n \theta_{ij} \bar{\theta}_{kj} = \delta_{ik}$. Além disso, qualquer restrição de T' com essa estrutura é uma extensão auto-adjunta de T .

A demonstração deste teorema não nos interessa neste momento, porém é importante notar que no capítulo seguinte, a forma que este teorema assume no caso dos operadores diferenciais serão, no nosso caso particular, os operadores de Schrödinger.

2.3 Operadores de Sturm-Liouville

Nesta seção ilustraremos alguns resultados obtidos de um exemplo particular: o operador diferencial formal de Sturm-Liouville

$$lf(x) = \left(-\frac{d}{dx} p(x) \frac{d}{dx} f(x) + V(x)f(x) \right), \quad f, pf' \in AC_{loc}(I), \quad (2.29)$$

onde $I \subseteq \mathbb{R}$ é um intervalo com extremidades a e b . O caso $p = 1$ pode ser visto como o modelo de uma partícula em uma dimensão sujeita ao potencial V (em unidades físicas convenientes).

O adequado espaço de Hilbert é

$$L^2((a, b), dx), \quad \langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)^* g(x) dx. \quad (2.30)$$

De acordo com a demonstração do teorema 2.3.1 será necessário exigir

$$p^{-1} \in L^1_{loc}(I) \text{ seja positivo e } q \in L^1_{loc}(I) \text{ seja real.} \quad (2.31)$$

Se a é finito e se $p^{-1}, q \in L^1((a, c))(c \in I)$, então a equação de Sturm-Liouville (2.29) é chamada regular em a . Analogamente para b . E se esta equação é regular em a e b , ela é chamada regular.

O domínio maximal de definição para l no $L^2(I, dx)$ é dado por

$$\mathcal{D}(L) = \{f \in L^2(I, dx) | f, pf' \in AC_{loc}(I), lf \in L^2(I, dx)\}. \quad (2.32)$$

Não é claro que $\mathcal{D}(L)$ é denso, essa questão será tratada mais adiante.

Como estamos interessados em extensões auto-adjuntas para o operador diferencial formal (2.29), faremos alguns cálculos. Usando a integração por partes (duas vezes), obtemos a **identidade de Lagrange** ($a < c < d < b$)

$$\int_c^d \bar{g}(lf) dy = W_c(\bar{g}, f) - W_d(\bar{g}, f) + \int_c^d (\bar{l}g)f dy, \quad (2.33)$$

para $f, g, pf' \in AC_{loc}(I)$, sendo

$$W_x(f_1, f_2) = (p(f_1 f_2' - f_1' f_2))(x) \quad (2.34)$$

chamado de Wronskiano modificado.

A equação (2.33) também mostra que o Wronskiano de duas soluções u_1, u_2 de $lu = zu$ $z \in \mathbb{C}$ é constante, além disso o Wronskiano é não-nulo se, e só se, u_1 e u_2 forem linearmente independentes.

Se tomarmos $f, g \in \mathcal{D}(L)$ em (2.33), então podemos tomar os limites $c \rightarrow a$ e $d \rightarrow b$, resultando em

$$\langle g, Lf \rangle = W_b(\bar{g}, f) - W_a(\bar{g}, f) + \langle Lg, f \rangle, \quad f, g \in \mathcal{D}(L) \quad (2.35)$$

Observação 2. Na expressão (2.35) $W_{a,b}(\bar{g}, f)$ deve ser entendido como um limite.

Agora recordamos um importante resultado sobre equações diferenciais ordinárias.

Teorema 2.3.1. *Suponha $g \in L^1_{loc}(I)$. Então existe uma única solução $f, pf' \in AC_{loc}(I)$ da equação diferencial*

$$(l - z)f = g, \quad z \in \mathbb{C}, \quad (2.36)$$

satisfazendo a condição inicial

$$f(c) = \alpha, \quad (pf')(c) = \beta, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \quad c \in I. \quad (2.37)$$

Além disso, f é inteiro com respeito a z .

Demonstração: Introduzindo

$$u = \begin{pmatrix} f \\ pf' \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} 0 \\ g \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

podemos escrever (2.36) como um sistema linear de primeira ordem

$$u' - Au = v, \quad A(x) = \begin{pmatrix} 0 & p^{-1}(x) \\ V(x) - z & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Integrando com respeito a x , vemos que este sistema é equivalente a equação integral de Volterra

$$u - Ku = w, \quad (Ku)(x) = \int_c^x A(y)u(y)dy, \quad w(x) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \int_c^x v(y)dy. \quad (2.40)$$

Vamos tomar $d \in (c, b)$ e considerar o operador integral K no espaço de Banach $C([c, d])$. Então para qualquer $h \in C([c, d])$ e $x \in [c, d]$ temos a estimativa

$$|K^n(h)(x)| \leq \frac{a_1(x)^n}{n!} \|h\|, \quad a_1(x) = \int_c^x a(y) dy, \quad a(x) = \|A(x)\|, \quad (2.41)$$

que segue por indução

$$|K^{n+1}(h)(x)| = \left| \int_c^x A(y) K^n(h)(y) dy \right| \leq \int_c^x a(y) |K^n(h)(y)| dy \quad (2.42)$$

$$\leq \|h\| \int_c^x a(y) \frac{a_1(y)^n}{n!} dy = \frac{a_1(x)^{n+1}}{(n+1)!} \|h\|. \quad (2.43)$$

Portanto a única solução de nossa equação integral é dada pela série de Neumann

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} K^n(w)(x). \quad (2.44)$$

Para ver que a solução $u(x)$ é inteira com respeito a z , notemos que as somas parciais são inteiras em z e portanto é limite de uma convergência uniforme com respeito a z em conjuntos compactos. Um argumento similar para $d \in (a, c)$ completa a prova. ■

Agora queremos obter um operador simétrico e, portanto escolhemos

$$L_0 f = l f, \quad \mathcal{D}(L_0) = \mathcal{D}(L) \cap AC_0(I), \quad (2.45)$$

Esta definição garante que o Wronskiano se anule na fronteira e conseqüentemente que L_0 seja simétrico devido a (2.35). O seguinte lema trata do fecho de L_0 e seu adjunto

Lema 2.3.1. *O operador L_0 é densamente definido e seu fecho é dado por*

$$\overline{L_0} f = l f, \quad \mathcal{D}(\overline{L_0}) = \{f \in \mathcal{D}(L) | W_a(f, g) = W_b(f, g) = 0, \forall g \in \mathcal{D}(L)\}. \quad (2.46)$$

Sua adjunta é dada por

$$L_0' f = l f, \quad \mathcal{D}(L_0') = \mathcal{D}(L). \quad (2.47)$$

A demonstração do lema 2.3.1 depende da seguinte propriedade satisfeita pelos funcionais lineares.

Lema 2.3.2. *Seja V um espaço vetorial e A, A_1, A_2, \dots, A_n um conjunto de funcionais lineares definidos sobre todos os elementos de V com a propriedade $\bigcap_{j=1}^n \mathcal{N}(A_j) \subseteq \mathcal{N}(A)$, então existem constantes complexas $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ tais que $A = \sum_{j=1}^n \alpha_j A_j$.*

Demonstração: Não há perda de generalidade em considerar que os funcionais indexados A_j são linearmente independentes. Então, o mapa $\mathfrak{A} : V \rightarrow \mathbb{C}^n$, $v \mapsto (A_1(v), \dots, A_n(v))$ é sobrejetor, caso contrário existiriam vetores não nulos $\xi \in \mathcal{I}(\Lambda)^\perp$ e assim $\sum_{j=1}^n \xi_j A_j(v) = 0$ para todo $v \in V$ (ou seja A_j não seriam l. i.). Como \mathfrak{A} é sobrejetor, existem vetores $\zeta_k \in V$ tais que $A_j(\zeta_k) = \delta_{j,k}$. A partir desses vetores ζ_k é possível construir vetores que pertencem simultaneamente aos núcleos de todos os funcionais A_j , $v - \sum_{j=1}^n A_j(v)\zeta_j \in \bigcap_{j=1}^n \mathcal{N}(A_j)$. Por hipótese, esse vetor também pertence ao núcleo do funcional A , portanto $A(v) - \sum_{j=1}^n A_j(v)A(\zeta_j) = 0$. A escolha $\alpha_j = A(\zeta_j)$ conclui a demonstração. ■

Demonstração do lema 2.3.1: Suponha inicialmente que $\mathcal{D}(A_0)$ é denso. De acordo com (2.35), $\mathcal{D}(L) \subseteq \mathcal{D}(L'_0)$, portanto resta verificar que $\mathcal{D}(L'_0) \subseteq \mathcal{D}(L)$.

Se $h \in \mathcal{D}(L'_0)$ então para algum $k \in L^2(I)$

$$\langle h, L_0 f \rangle = \langle k, f \rangle, \quad \forall f \in \mathcal{D}(L_0). \quad (2.48)$$

Seja \tilde{h} uma solução de $L\tilde{h} = k$, então a integração por partes de $\langle t\tilde{h}, f \rangle$, $f \in \mathcal{D}(L_0)$ implica

$$\int_a^b \overline{(h(x) - \tilde{h}(x))} Lf(x) dx = 0, \quad \forall f \in \mathcal{D}(L_0). \quad (2.49)$$

A demonstração de que $h - \tilde{h}$ é uma solução de $Lu = 0$ utiliza a lema (2.3.2) e o fato de que se u_1 e u_2 são duas soluções de $Lu = 0$ que satisfazem $W_x(u_1, u_2) = 1$, então qualquer solução de $Lf = g \in L^1_{loc}(I)$ é da forma

$$f(x) = u_1(x) \left(\alpha + \int_a^x u_2(y)g(y)dy \right) + u_2(x) \left(\beta + \int_x^b u_1(y)g(y)dy \right), \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}. \quad (2.50)$$

Com esse objetivo, considera-se os funcionais lineares

$$A(g) \doteq \int_a^b \overline{(h(x) - \tilde{h}(x))} g(x) dx \quad \text{e} \quad A_j(g) \doteq \int_a^b \overline{u_j(x)} g(x) dx, \quad j = 1, 2.$$

definidos sobre $L_c^2(I)$ (L^2 com suporte compacto em I), onde u_1 e u_2 são soluções linearmente independentes de $Lu = 0$. A partir de (2.50), segue que se $g \in \mathcal{N}(A_1) \cap \mathcal{N}(A_2)$ então $f \in \mathcal{D}(L_0)$ (basta notar o comportamento nas extremidades do intervalo) e, devido a (2.49), $g = Lf \in \mathcal{N}(A)$. Uma vez garantidas as condições do lema (2.3.2), então existem constantes complexas α_1 e α_2 tais que

$$\int_a^b \overline{\left(h(x) - \tilde{h}(x) - \alpha_1 u_1(x) - \alpha_2 u_2(x) \right)} g(x) dx = 0, \quad \forall g \in L_c^2(I),$$

e conseqüentemente $h = \tilde{h} + \alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2 \in \mathcal{D}(L)$.

Por outro lado, se $\mathcal{D}(L_0)$ não fosse denso, então existiria alguma liberdade na escolha de k , pois nesse caso há a possibilidade de se adicionar qualquer componente que pertença a $\mathcal{D}(L_0)^\perp$. Considerando duas escolhas distintas k_1 e k_2 , segue do desenvolvimento anterior que existem duas funções correspondentes \tilde{h}_1 e \tilde{h}_2 tais que $h = \tilde{h}_1 + \alpha_{1,1}u_1 + \alpha_{1,2}u_2 = \tilde{h}_2 + \alpha_{2,1}u_1 + \alpha_{2,2}u_2$. Como $\tilde{h}_1 - \tilde{h}_2$ pertence ao núcleo de L , então $k_1 = L\tilde{h}_1 = L\tilde{h}_2 = k_2$, uma contradição.

Quanto ao fecho de L_0 : seja

$$\mathcal{D} = \{f \in \mathcal{D}(L) \mid W_a(f, g) = W_b(f, g) = 0, \forall g \in \mathcal{D}(L)\}, \quad (2.51)$$

Por outro lado $\mathcal{D}(L) = \mathcal{D}(L_0)$, segue desse fato e de (2.33) que $\mathcal{D} \subseteq \mathcal{D}((L'_0)') = \mathcal{D}(\overline{L_0})$. De maneira recíproca, uma vez que $\overline{L_0} \subseteq L'_0$, a expressão (2.33) permite concluir que

$$W_a(f, h) + W_b(f, h) = 0, \quad f \in \mathcal{D}(\overline{L_0}), h \in \mathcal{D}(L'_0).$$

Agora, pela substituição de h por um $h = \tilde{h} \in \mathcal{D}(L'_0)$ que coincide com h em alguma vizinhança de a e se anula em uma vizinhança de b , conclui-se que $W_a(f, h) = W_a(f, \tilde{h}) + W_b(f, \tilde{h}) = 0$. Por fim, $W_b(f, h) = -W_a(f, h) = 0$ garante que $f \in \mathcal{D}$. ■

Este resultado possui a virtude de ilustrar dois fatos:

- (i) qualquer extensão auto-adjunta para L_0 localiza-se entre $\overline{L_0}$ e L'_0 .

(ii) o Wronskiano das funções na extremidades dos intervalo de definição das equações constitui a forma concreta dos funcionais valor de fronteira.

2.3.1 Valores de Fronteira de Operadores Diferenciais e seus Resolventes

Nesta subsecção serão apresentados alguns resultados sobre os valores de fronteira e resolventes dos operadores de Sturm-Liouville. Porém, antes de tratá-los é necessário rever algumas propriedades dos operadores diferenciais em geral e seus espaços de deficiência.

Dado um operador diferencial formal de ordem n , τ ,

$$\tau = \sum_{i=0}^n a_i(t) \left(\frac{d}{dt} \right)^i \quad (2.52)$$

onde os a_i 's são funções que assumem valores complexos e pertencem a $C^\infty(I)$, definem-se os operadores diferenciais $T_0(\tau)$ e $T(\tau)$:

$$\begin{aligned} T_0(\tau)f &= \tau f, f \in \mathcal{D}(T_0(\tau)) = \mathcal{H}_0^n(I) \\ T(\tau)f &= \tau f, f \in \mathcal{D}(T(\tau)) = \mathcal{H}_\tau^n(I) \end{aligned} \quad (2.53)$$

onde $\mathcal{H}_0^n(I) = \{f \in AC_{loc}^n(I) | f, f^{(n)} \in L_2(I)\}$, de maneira que o suporte de f é algum subconjunto compacto do interior de I e $\mathcal{H}_\tau^n(I) = \{f \in AC_{loc}^n(I) | f, \tau f \in L^2(I)\}$.

Dado um operador diferencial (2.52), denomina-se o operador adjunto formal de τ , τ^* , o operador

$$\tau^* = \sum_{i=0}^n b_i(t) \left(\frac{d}{dt} \right)^i,$$

onde

$$b_i(t) = \sum_{j=1}^n (-1)^j \binom{j}{i} \left(\frac{d}{dt} \right)^{j-i} \overline{a_j(t)}. \quad (2.54)$$

Se $\tau = \tau^*$, τ é denominado formalmente auto-adjunto.

Teorema 2.3.2. *Seja τ um operador diferencial formal definido no intervalo I . Então $T(\tau) = (T_0(\tau^*))'$.*

Demonstração: A demonstração é semelhante à demonstração do teorema (2.3.1), basta utilizar a fórmula de Green:

$$\int_a^b (\tau f)(t) \overline{g(t)} dt = \int_a^b g(t) \overline{\tau^* g(t)} dt + F_b(f, g) - F_a(f, g), \quad (2.55)$$

$f, g \in \mathcal{H}_\tau^n(I)$, onde $F_t^{lj}(f, g) = \sum_{j,l=0}^{n-1} F_t^{lj}(\tau) f^{(l)}(t) \overline{g^{(j)}(t)}$ e

$$F_t^{lj}(\tau) = \sum_{i=j}^{n-l-1} (-1)^i \binom{i}{j} \left(\frac{d}{dt} \right)^{i-j} a_{l+i+1}(t) \quad (2.56)$$

se $j + l \leq n - 1$ e $F_t^{lj}(\tau) = 0$, caso contrário. ■

Lema 2.3.3. *Se o operador diferencial formal τ for formalmente auto-adjunto então o operador $T_0(\tau)$ é simétrico.*

Demonstração: A partir da definição, $T_0(\tau) \subseteq T(\tau)$. Finalmente, a fórmula de Green e o teorema anterior implicam $T_0(\tau) \subseteq (T_0(\tau))'$. ■

Corolário 2.3.1. *Se τ é formalmente auto-adjunto, os espaços de deficiência de $T_0(\tau)$,*

$$\mathcal{D}_+ = \{f \in \mathcal{D}(T(\tau)) \mid (T(\tau) - i)f = 0\}$$

e

$$\mathcal{D}_- = \{f \in \mathcal{D}(T(\tau)) \mid (T(\tau) + i)f = 0\}$$

são formados respectivamente pelas soluções das equações diferenciais $(\tau - i)f = 0$ e $(\tau + i)f = 0$ que pertencem a $L_2(I)$.

Corolário 2.3.2. *Se τ é um operador diferencial formal de ordem n , ambos espaços de deficiência de $T_0(\tau)$ possuem dimensão menor ou igual a n .*

De acordo com a análise apresentada na seção 2.2, o operador $T_0(\tau)$ possuirá extensões auto-adjuntos se e somente se \mathcal{D}_+ e \mathcal{D}_- possuírem a mesma dimensão. A informação sobre o valor dessas dimensões, os índices de deficiência, depende da natureza do intervalo I , se é fechado, aberto ou semi-aberto. Porém existe informação que independe da natureza do intervalo.

Corolário 2.3.3. *Se os coeficientes a_i do operador diferencial (2.52) forem reais, então o operador simétrico $T_0(\tau)$ possui índices de deficiência iguais e toda extensão simétrica maximal é auto-adjunta.*

Demonstração: Basta notar que sob as hipóteses consideradas, as situações de $(\tau - i)f = 0$ e $(\tau + i)f = 0$ são complexas conjugadas. ■

Se I for um intervalo finito e fechado, então qualquer solução de $(\tau + i)f = 0$ ou $(\tau - i)f = 0$ pertence a C^∞ e portanto a $L_2(I)$, Assim temos o seguinte resultado:

Corolário 2.3.4. *Se I for um intervalo finito fechado e τ um operador diferencial de ordem n , os índices de deficiência são iguais a n .*

Agora a atenção será direcionada aos funcionais valor de fronteira para operadores diferenciais.

Definição 2.3.1. (i) *Um valor de fronteira para τ é um funcional linear contínuo B definido sobre $\mathcal{D}(T_0(\tau))$.*

(ii) *Se $B(f) = 0$ para toda função em $\mathcal{D}(T(\tau))$ que se anula em alguma vizinhança de a , B será denominado valor de fronteira em a . Para a fronteira b a definição é similar.*

(iii) *Uma equação da forma $B(f) = 0$ onde B é um valor de fronteira para τ é denominada condição de contorno para τ .*

(iv) Um conjunto de condições de contorno $\{B_i(f) = 0\}_{i=1}^k$ possui a qualidade de ser mais forte do que o conjunto $\{C_j(f) = 0\}_{j=1}^l$ se cada C_j for uma continuação linear dos B_i .

(v) Um conjunto completo de valores de fronteira é um conjunto maximal de valores de fronteira linearmente independentes. De maneira similar é definido um conjunto completo de valores de fronteira em a .

Lema 2.3.4. *Se τ é formalmente auto-adjunto então a definição de valor de fronteira para τ coincide com a definição de valor de fronteira para $T_0(\tau)$.*

Demonstração: De acordo com o teorema (2.3.2), $T(\tau)$ é o adjunto de $T_0(\tau)$. Isto é suficiente para identificar os funcionais. ■

Os dois próximos teoremas e os corolários que os seguem fornecem informações sobre as propriedades dos valores de fronteira. As provas serão omitidas ([2, seção XIII.2]).

Teorema 2.3.3. *O espaço dos valores de fronteira para τ é formado pela soma direta dos espaços valores de fronteira em a e os valores de fronteira em b .*

Teorema 2.3.4. *Seja τ um operador diferencial formal definido sobre o intervalo I com extremos em a e b . Seja $c \in (a, b)$ e $\tilde{\tau}$ uma restrição de τ ao intervalo $\tilde{I} = I \cap [a, c]$. Então existe uma bijeção entre o espaço dos valores de fronteira para τ em a e o espaço dos valores de fronteira para $\tilde{\tau}$ em a .*

Corolário 2.3.5. *Sob as mesmas hipóteses do teorema anterior, τ e $\tilde{\tau}$ possuem o mesmo número de condições de contorno em a linearmente independentes.*

Corolário 2.3.6. *Seja τ um operador diferencial formal de ordem n definido sob um intervalo I com extremos a e b . Então τ possui no máximo n valores de fronteira em a linearmente independentes.*

Corolário 2.3.7. *Seja τ um operador diferencial formalmente auto-adjunto de ordem n definido sobre um intervalo I . Se ao menos uma das extremidades pertencer*

ao intervalo, então a soma dos índices de deficiência negativo e positivo de τ é maior ou igual a n .

A forma concreta de um funcional valor de fronteira para o operador diferencial formal de ordem n , τ é dada pelo seguinte teorema.

Teorema 2.3.5. *Seja τ um operador diferencial formal definido em um intervalo $I = (a, b)$. Seja $\omega_i, i = 0, 1, \dots, n - 1$. um conjunto de funções tais que*

$$B(f) = \lim_{t \rightarrow a} \sum_{i=0}^{n-1} \omega_i(t) f^{(i)}(t) \quad (2.57)$$

existe $\forall f \in \mathcal{D} = \{f \in L_2(I) | f^{(n-1)} \in AC_{loc}(I) \text{ e } \tau f \in L_2(I)\}$. Então B é um valor de fronteira para τ em a . Reciprocamente, todo valor de fronteira de τ em a é dessa forma. Temos que ω_i são funções de classe $C^\infty(I)$.

Demonstração: O primeiro passo consiste em verificar que

$$B_t(f) \doteq \sum_{i=0}^{n-1} \omega_i(t) f^{(i)}(t) \quad (2.58)$$

É um funcional linear contínuo definido sobre o espaço de Hilbert $\mathcal{D}(T(\tau))$ se t for um ponto interior de I .

Considere um subintervalo compacto $\tilde{I} \subset I$, o espaço $\mathcal{H}^n(\tilde{I})$ é compacto na norma

$$\|f\|_{n, \tilde{I}} \doteq \sum_{i=0}^{n-1} \max_{t \in \tilde{I}} |f^{(i)}(t)| + \left(\int_{\tilde{I}} |f^{(n)}(s)|^2 ds \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.59)$$

De fato, se f_m for uma sequência de Cauchy em $\mathcal{H}^n(\tilde{I})$, então dado um $\epsilon > 0$, existe um inteiro positivo N tal que para $p, q > N$, $\|f_p - f_q\|_{n, \tilde{I}} < \epsilon$, ou seja

$$\sum_{i=0}^{n-1} \max_{t \in \tilde{I}} |f_p^{(i)}(t) - f_q^{(i)}(t)| + \left(\int_{\tilde{I}} |f_p^{(n)}(s) - f_q^{(n)}(s)|^2 ds \right)^{\frac{1}{2}} < \epsilon \quad (2.60)$$

e portanto

$$\max_{t \in \tilde{I}} |f_p^{(i)}(t) - f_q^{(i)}(t)| < \epsilon, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (2.61)$$

e

$$\left(\int_{\tilde{I}} |f_p^{(n)}(s) - f_q^{(n)}(s)|^2 ds \right)^{\frac{1}{2}} < \epsilon. \quad (2.62)$$

Isto garante que existem funções f_0 e g_0 tais que

$$\lim_{m \rightarrow \infty} f_m^{(i)}(t) = f_0^{(i)}(t), \quad i = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (2.63)$$

uniformemente em \tilde{I} e que $f^{(n)} \rightarrow g_0$ em $L_2(\tilde{I})$. Assim, para $c, t \in \tilde{I}$,

$$f_0^{(n-1)}(t) - f_0^{(n-1)}(c) = \lim_{m \rightarrow \infty} \int_{\tilde{I}} f_m^{(n)}(s) ds = \int_{\tilde{I}} g_0(s) ds$$

o que garante que $f_0^{(n)} = g_0$ e $f_0 \in \mathcal{H}^n(\tilde{I})$. ■

Agora considere as duas normas

$$\begin{aligned} \|f\|_\alpha &= \left(\int_I |f(t)|^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\int_I |\tau f(t)|^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \|f\|_2 + \|T(t)f\|_2 \end{aligned} \quad (2.64)$$

e

$$\|f\|_\beta = \|f\|_\alpha + \sum_{i=0}^{n-1} \max_{t \in \tilde{I}} |f^{(i)}(t)| + \left(\int_{\tilde{I}} |f^{(n)}(s)|^2 ds \right)^{\frac{1}{2}}$$

para o espaço $\mathcal{D}(T(\tau))$. A norma α é a norma do par $(f, T(\tau)f)$ como elemento do gráfico de $T(\tau)$. Como $T(\tau)$ é um operador adjunto (de acordo com o teorema (2.3.2)) segue que $\mathcal{D}(T(\tau))$ é completo nessa norma. Os dois termos adicionais da norma $\|f\|_\beta$ são a norma de f como elemento de $\mathcal{H}^n(\tilde{I})$ e segue $\mathcal{D}(T(\tau))$ é também completo nessa norma. Como $\|f\|_\alpha \leq \|f\|_\beta$, segue qualquer sequencia $\{f_m\}$ para a qual $\|f_m\|_\beta \rightarrow 0$ implica que $\|f_m\|_\alpha \rightarrow 0$, a convergência de sequencias

$\{f_m\} \in \mathcal{D}(T(\tau))$ na norma β implica a convergência na norma α e vice-versa. Consequentemente as normas são equivalentes, logo

$$\frac{|B_t(f)|}{\|f\|_\alpha} \leq K \frac{|B_t(f)|}{\|f\|_\beta} \leq K \frac{B_t(f)}{\sum_{i=0}^{n-1} \max_{t \in \tilde{I}} |f^{(i)}(t)|} \leq K \frac{\sum_{i=0}^{n-1} \max_{t \in \tilde{I}} |\omega_i(t)| \sum_{i=0}^{n-1} \max_{t \in \tilde{I}} |f^{(i)}(t)|}{\sum_{i=0}^{n-1} \max_{t \in \tilde{I}} |f^{(i)}(t)|}$$

uniformemente em $\mathcal{D}(T(\tau))$. Portanto $B_t(\cdot)$ é um funcional linear contínuo sobre o espaço de Hilbert $\mathcal{D}(T(\tau))$.

Por hipótese o limite $\lim_{t \rightarrow a} B_t(f)$ existe para todo f em $\mathcal{D}(T(\tau))$ então B é um funcional linear contínuo sobre $\mathcal{D}(T(\tau))$ (de acordo com ([2, teorema II.1.17])).

Além disso, $B(f) = 0$ se f for nula em alguma vizinhança de a . Portanto, B é um funcional valor de fronteira para τ em a .

Agora o caminho inverso. Seja B um funcional valor de fronteira para τ em a . Tome uma função $h \in C^\infty(I)$ que é igual a unidade em alguma vizinhança de a e se anula em alguma vizinhança de b . Nesse caso, fh permanece em $\mathcal{D}(T(\tau))$ se f pertencer a esse espaço. Além disso, fh e f assumem os mesmos valores em alguma vizinhança de a , por essa razão $B(fh) = B(f)$ para qualquer $f \in \mathcal{D}(T(\tau))$. Como B é um funcional linear sobre o espaço de Hilbert $\mathcal{D}(T(\tau))$, o teorema de Riesz para a representação garante a existência de um elemento g no complemento ortogonal do espaço de Hilbert $\mathcal{D}(T_0(\tau))$ tal que para todo $f \in \mathcal{D}(T(\tau))$

$$B(f) = (f, g)^*.$$

Se $f \in \mathcal{D}(T_0(\tau))$ então

$$0 = (f, g)^* = (f, g) + (T_0(\tau)f, T(\tau)g),$$

como $(\tau^*)^* = \tau$ (o que segue da fórmula de Green) o teorema (2.3.2) garante que $(T_0(\tau)f, T(\tau)g) = (f, T(\tau^*)T(\tau)g)$ então

$$\begin{aligned} 0 &= (f, g) + (T_0(\tau)f, T(\tau)g) \\ &= (f, g) + (f, T(\tau^*)T(\tau)g). \end{aligned} \tag{2.65}$$

Segue que g é solução de $\tau^*\tau g + g = 0$ e portanto é infinitamente diferenciável. Seja $v = -\tau g$, então

$$B(f) = (f, \tau^*v) - (\tau f, v);$$

Como $B(fh) = B(f)$, então de acordo com o a fórmula de Green

$$\begin{aligned} B(f) &= (f, \tau^*v) - (\tau f, v) \\ &= \lim_{\substack{\alpha \rightarrow a \\ \beta \rightarrow b}} - \int_{\alpha}^{\beta} [(\tau h f)(t)\overline{v(t)} - fh(t)\overline{(\tau^*v)(t)}] dt \\ &= \lim_{\substack{\alpha \rightarrow a \\ \beta \rightarrow b}} F_{\alpha}(hf, v) - F_{\beta}(hf, v) \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow a} F_{\alpha}(hf, v) \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow a} F_{\alpha}(f, v), \end{aligned} \tag{2.66}$$

onde a passagem da penúltima para a última linha deve-se ao fato de que h se anula em alguma vizinhança de b . Por fim, a forma de F_{α} dada pela fórmula de Green conclui a demonstração. ■

De volta aos operadores de Sturm-Liouville l , dado um c interno ao intervalo de definição I com extremos a e b , o corolário (2.3.3) garante que os índices de deficiência positivo e negativo, \tilde{d}_+ e \tilde{d}_- da restrição \tilde{l} de l ao intervalo $I \cap [c, b]$ são iguais e pelo corolário (2.3.7) a soma desses índices é maior ou a 2. Isto permite concluir que $\tilde{d}_+ = \tilde{d}_- \geq 1$. Por outro lado, a soma dos índices é igual ao número de funcionais valor de fronteira de \tilde{l} linearmente independentes, ou seja, $\tilde{d}_+ + \tilde{d}_- \leq 4$. Segue portanto que $\tilde{d}_+ = \tilde{d}_- = 1$ ou $\tilde{d}_+ + \tilde{d}_- = 2$. Se $\tilde{d}_+ = 1$, então \tilde{l} não possui funcional valor de fronteira em b e consequentemente o mesmo ocorre com \tilde{l} . Se $\tilde{d}_+ = 2$, então \tilde{l} possui dois funcionais valor de fronteira em b e o mesmo ocorre com l . No extremo a a discussão é similar.

De [2], a tabela que segue dá o número de soluções linearmente independentes de $(l-\lambda)\sigma = 0$ quadrado integráveis em a ou b quando $Im(\lambda) \neq 0$. Temos quatro possibilidades.

Número de soluções linearmente independentes de quadrado integrável:

	Em a	Em b
(i)	2	2
(ii)	1	2
(iii)	2	1
(iv)	1	1

A próxima tabela dá o número de valores de fronteira para l em cada um dos casos (i)-(iv) acima.

Número de valores de fronteira linearmente independentes para l :

	Em a	Em b
(i)	2	2
(ii)	0	2
(iii)	2	0
(iv)	0	0

Na terminologia de H. Weyl dizemos que um ponto final a é do tipo *limit point* em relação ao operador de segunda ordem l se ele não possui valores de fronteira em a , e do tipo *limit circle* se l tem dois valores de fronteira em a .

O próximo teorema dá uma importante forma normal para valores de fronteira de um operador diferencial de segunda ordem real formalmente auto-

adjunto. No caso de operadores construídos de operadores diferenciais formais l definidos em um intervalo (a, b) , os funcionais valor de fronteira nos extremos a e b assumem a forma

$$A(f) = \lim_{x \rightarrow a} (g_1(x)f(x) + g_2(x)f'(x)) \quad f \in \mathcal{D}(L) \quad (2.67)$$

$$B(f) = \lim_{x \rightarrow b} (h_1(x)f(x) + h_2(x)f'(x)) \quad f \in \mathcal{D}(L), \quad (2.68)$$

sendo g_1, g_2, h_1 e h_2 quaisquer funções para as quais os limites acima existem para todos os elementos de $\mathcal{D}(L)$.

Teorema 2.3.6. *Seja o operador diferencial formal de segunda ordem l definido em (2.29). Então, no caso (iv) acima temos $\langle lf, g \rangle = \langle f, lg \rangle$ para $f, g \in \mathcal{D}(L)$. Nos casos (iii) e (ii) acima há um conjunto completo de valores de fronteira para L consistindo em dois valores reais linearmente independentes A_1 e A_2 tal que*

$$\langle lf, g \rangle - \langle f, lg \rangle = A_1(f)\overline{A_2(g)} - A_2(f)\overline{A_1(g)}, \quad f, g \in \mathcal{D}(L). \quad (2.69)$$

No caso (i) existe um conjunto completo de valores de fronteira linearmente independentes para l consistindo de quatro valores de fronteira reais linearmente independentes C_1, C_2, D_1, D_2 na qual C_1, C_2 são valores de fronteira em a e D_1, D_2 são valores de fronteira em b , tal que

$$\begin{aligned} \langle lf, g \rangle - \langle f, lg \rangle &= C_1(f)\overline{C_2(g)} - C_2(f)\overline{C_1(g)} \\ &+ D_1(f)\overline{D_2(g)} - D_2(f)\overline{D_1(g)}, \quad f, g \in \mathcal{D}(L). \end{aligned} \quad (2.70)$$

Corolário 2.3.8. *Seja a hipótese do teorema anterior satisfeita e seja L uma extensão auto-adjunta de L_0 . Considere $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$.*

Nos casos (ii) e (iii) acima, o conjunto de valores de fronteira pode ser escrito na forma

$$\alpha A_1(f) + \beta A_2(f) = 0, \quad \alpha^2 + \beta^2 \neq 0, \quad (2.71)$$

nas quais A_1 e A_2 são valores de fronteira reais que ambos estão em b no caso (ii) e ambos estão em a no caso (iii).

No caso (i), se o conjunto de condições de fronteira está separado, ele pode ser escrito na forma

$$\alpha_1 C_1(f) + \alpha_2 C_2(f) = 0, \quad \alpha_1^2 + \alpha_2^2 \neq 0, \quad (2.72)$$

$$\beta_1 D_1(f) + \beta_2 D_2(f) = 0, \quad \beta_1^2 + \beta_2^2 \neq 0, \quad (2.73)$$

nas quais C_i e D_i , $i = 1, 2$, são valores de fronteira reais em a e b respectivamente.

Demonstração: Nos casos (ii) e (iii), a equação diferencial $(l - \lambda)\sigma = 0$, com $\text{Im}(\lambda) \neq 0$ admite duas soluções linearmente independentes, uma das quais, não é de quadrado integrável em um dos extremos do intervalo. Nesse extremo não há funcional valor de fronteira enquanto que no outro extremo há dois funcionais valor de fronteira linearmente independentes. Segue do teorema 2.3.6 que a condição de contorno responsável pela extensão auto-adjunta L é da forma

$$\alpha A_1(f) + \beta A_2 = 0, \quad \alpha^2 + \beta^2 \neq 0, \alpha, \beta \in \mathbb{R} \quad (2.74)$$

onde A_1 e A_2 são funcionais valor de fronteira em a no caso (iii) e b no caso (ii).

No caso (i), se a condição de contorno envolver os extremos de forma separada, ela será construída por duas condições, uma no extremo a e outra no extremo b . De acordo com o teorema anterior, as condições assumem a forma

$$\alpha_1 C_1(f) + \alpha_2 C_2(f) = 0, \quad \alpha_1^2 + \alpha_2^2 \neq 0, \alpha_i \in \mathbb{R} \quad (2.75)$$

$$\beta_1 D_1(f) + \beta_2 D_2(f) = 0, \quad \beta_1^2 + \beta_2^2 \neq 0, \beta \in \mathbb{R},$$

onde c_1 e c_2 são funcionais valor de fronteira em a e d_1 e d_2 em b . ■

Exemplo:(Operador de Schrödinger com simetria radial) O operador de Laplace em dimensão d em coordenadas esféricas é da forma

$$\Delta\psi = \frac{1}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{d-1}\psi) + \frac{1}{r^2} \Delta_{S^{d-1}}\psi,$$

onde $\Delta_{S^{d-1}}$ é o operador de Laplace-Beltrami na $(d-1)$ -esfera: $\Delta_{S^{d-1}}g = \Delta(g(x/|x|))$ e $g(x/|x|)$ é a extensão homogênea de grau zero de f para $\mathbb{R}^d \setminus \{0\}$.

Assim, se f é uma função com simetria esférica $\Delta f = \frac{1}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{d-1} \frac{\partial f}{\partial r})$ é a equação de Schrödinger para a componente radial de uma partícula com momento angular nulo e sujeita a um componente central

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{d-1} \frac{\partial}{\partial r} \rho) + V(r)\rho = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho.$$

A equação de autovalores

$$l\rho = \frac{1}{r^{d-1}} \left(-\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\hbar^2}{2m} r^{d-1} \frac{\partial}{\partial r} \rho \right) + r^{d-1} V(r) \rho \right) = E\rho \quad (2.76)$$

é da forma Sturm-Liouville com $p(r) = \frac{\hbar^2}{2m} r^{d-1}$, $q(r) = r^{d-1} V(r)$ em um espaço de Hilbert $L^2(I, r^{d-1} dr)$, $I = (0, \infty)$.

Um conjunto completo de valores de fronteira para l em 0 é

$$B_1(\rho) = \lim_{r \rightarrow 0^+} \rho(r) \text{ e } B_2(\rho) = \lim_{r \rightarrow 0^+} \rho'(r). \quad (2.77)$$

Dadas $f, g \in \mathcal{D}(L')$, temos que

$$\begin{aligned} -i((L'f, g) - (f, L'g)) & \quad (2.78) \\ &= -i \int_0^\infty [(pf')'\bar{g} - f(\overline{pg'})] dx \\ &= i \left(\lim_{r \rightarrow 0^+} F_r(f, g) - \lim_{r \rightarrow \infty} F_r(f, g) \right). \end{aligned}$$

Como l não possui valores de fronteira em $+\infty$, segue do teorema ([2, XIII.4.27]) que $\lim_{r \rightarrow \infty} F_r(f, g) = 0$. Assim

$$-i((L'f, g) - (f, L'g)) = -i \lim_{r \rightarrow 0^+} p(r) [f'(r)\overline{g(r)} - f(r)\overline{g'(r)}].$$

De acordo com o teorema ([2, XII.4.30]), a forma mais geral para uma extensão auto-adjunta de L_0 é a restrição de L'_0 ao subdomínio de $\mathcal{D}(L'_0)$ determinado por uma única condição de contorno simétrica em $r = 0$. A forma mais geral dessa condição é

$$\lim_{r \rightarrow 0^+} (\alpha f(r) + \beta p(r) f'(r)) = 0 \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}. \quad (2.79)$$

Uma escolha muito comum é a condição de Dirichlet, $\beta = 0$. Outra igualmente popular é a condição de Neumann, $\alpha = 0$.

Se a é um ponto final fixo de I e o operador l não possui valores de fronteira em b , um conjunto completo de valores de fronteira para l é $B_1(f) = f(a)$, $B_2(f) = f'(a)$. Mas para $f, g \in \mathcal{D}(L)$ temos

$$\langle Lf, g \rangle - \langle f, Lg \rangle = W_a(f, g) - \lim_{x \rightarrow b} W_x(f, g). \quad (2.80)$$

Uma vez que l não tenha valores de fronteira em b , o teorema 2.3.5 implica $\lim_{x \rightarrow b} W_x(f, g) = 0$. Assim

$$\langle Lf, g \rangle - \langle f, Lg \rangle = W_a(f, g). \quad (2.81)$$

A partir do teorema 2.3.6, a extensão auto-adjunta mais geral de L_0 é a restrição de l para o subdomínio de $\mathcal{D}(L)$ determinado por uma única condição de fronteira simétrica, que necessariamente é uma condição de fronteira em a . Pode-se ver da equação precedente que a condição de fronteira simétrica mais geral é da forma $\alpha f'(a) + \beta f(a) = 0$ com α e β reais. Deste modo, no caso de um ponto final ser livre, ou seja o extremo não pertence a I e não haver valores de fronteira na outra extremidade, temos uma forma explícita simples para a extensão auto-adjunta mais geral de L_0 .

O próximo teorema dá uma importante propriedade dos operadores de segunda ordem.

Teorema 2.3.7. *Seja l na forma (2.29) $lf = (pf')' + qf$, na qual p e q são reais, e seja L um operador auto-adjunto obtido de l pela imposição de um conjunto simétrico separado de condições de fronteira. Seja $\text{Im} \lambda \neq 0$. Então as condições de fronteira são reais, e existe exatamente uma solução $\varphi(t, \lambda)$ de $(l - \lambda)\varphi = 0$ que é de quadrado integrável em a e satisfaz as condições de fronteira em a , e exatamente uma solução $\psi(t, \lambda)$ de $(l - \lambda)\psi = 0$ que é de quadrado integrável em b e satisfaz as condições de fronteira em b .*

Por fim, a forma do operador resolvente de L é dada pelo seguinte lema:

Lema 2.3.5. *Suponha z no conjunto resolvente de L . Então existe uma solução $u_a(z, x)$ de $(l - z)u = g$ em $L^2((a, c), dx)$ e que satisfaz a condição de fronteira em a se l é limit circle em a . Similarmente, existe uma solução $u_b(z, x)$ com propriedade análogas próxima a b .*

O resolvente de L é dado por

$$(L - z)^{-1}g(x) = \int_a^b G(z, x, y)g(y)dy, \quad (2.82)$$

Na qual

$$G(z, x, y) = \frac{1}{W(u_b(z), u_a(z))} \begin{cases} u_b(z, x)u_a(z, y), & x \geq y, \\ u_a(z, x)u_b(z, y), & x \leq y. \end{cases} \quad (2.83)$$

2.3.2 Diagonalização do operador: O teorema de Weyl-Kodaira

Definição 2.3.2. *Seja Λ um intervalo aberto da reta real e seja $\{\varrho_{i,j}\}$, $1 \leq i, j \leq n$ uma família de funções à valores complexos definidas em uma família de subconjuntos borelianos de Λ cujos fechos são compactos e contidos em Λ . A família $\{\varrho_{i,j}\}$ é denominada “matriz positiva de medidas $n \times n$ sobre Λ ” se*

1. a matriz de componentes $\varrho_{i,j}(e)$ é hermitiana e positiva semidefinida para cada subconjunto boreliano de Λ , e, cujo fecho é compacto e contido em Λ ;

2.

$$\varrho_{i,j} \left(\bigcup_{m=1}^{\infty} e_m \right) = \sum_{m=1}^{\infty} \varrho_{i,j}(e_m)$$

para cada sequência de subconjuntos borelianos disjuntos de Λ cuja união possui fecho compacto contido em Λ .

Uma vez definidas as matrizes positivas de medida, considera-se a família de n -uplas $F = (f_1, f_2, \dots, f_n)$ de funções Borel mensuráveis definidas sobre Λ para as quais

$$\|F\|^2 = \int_{\Lambda} \sum_{i,j=1}^n \overline{f_i(\lambda)} f_j(\lambda) \varrho_{i,j}(d\lambda) < \infty,$$

reunidas no espaço simbolizado por $\mathcal{L}^2(\Lambda, \{\varrho_{i,j}\})$. Um elemento F desse espaço é denominado “função $\{\varrho_{i,j}\}$ -nula” se $\|F\| = 0$. Seja $N = \{F \in \mathcal{L}^2(\Lambda, \{\varrho_{i,j}\}) \mid \|F\| = 0\}$ um subespaço linear de $\mathcal{L}^2(\Lambda, \{\varrho_{i,j}\})$ e o espaço quociente $L^2(\Lambda, \{\varrho_{i,j}\}) = \mathcal{L}^2(\Lambda, \{\varrho_{i,j}\})/N$, ou seja, o conjunto de todas as classes de equivalência dos elementos de $\mathcal{L}^2(\Lambda, \{\varrho_{i,j}\})$ módulo funções $\{\varrho_{i,j}\}$ -nulas é simbolizado por $L^2(\Lambda, \{\varrho_{i,j}\})$. É possível demonstrar que $L^2(\Lambda, \{\varrho_{i,j}\})$ é um espaço de Hilbert [2, seção XIII.5] com produto interno

$$\langle F, G \rangle = \int_{\Lambda} \sum_{i,j=1}^n \overline{f_i(\lambda)} g_j(\lambda) \varrho_{i,j}(d\lambda).$$

Agora, enunciaremos o teorema de Weyl-Kodaira o qual será utilizado posteriormente na seção 3.1. Este teorema nos fornecerá um operador U que diagonalizará nosso hamiltoniano.

Teorema 2.3.8. (Weyl-Kodaira): *Seja o operador diferencial formalmente auto-adjunto l definido em (2.29). Seja L o operador auto-adjunto correspondente. Seja Λ um intervalo aberto no eixo real e suponha que existe um conjunto de funções $\{\sigma_1(x; \lambda), \sigma_2(x; \lambda)\}$ contínuas em $\mathbb{R} \times \Lambda$ tal que para cada λ fixo em Λ , $\{\sigma_1(x; \lambda), \sigma_2(x; \lambda)\}$ forma uma base para o espaço de soluções da equação $l\sigma = \lambda\sigma$. Então existe uma matriz de medidas $\{\varrho_{i,j}\}$ definida em Λ , tal que o limite*

$$(Uf)_i(\lambda) \doteq \lim_{c \rightarrow -\infty} \lim_{d \rightarrow \infty} \int_c^d f(x) \overline{\sigma_i(x; \lambda)} dx$$

existe na topologia de $L^2(\mathbb{R})$ para cada $f \in L^2(\mathbb{R})$ e define um isomorfismo isométrico U de $E(\Lambda)L^2(\mathbb{R})$ sobre $L^2(\Lambda, \{\varrho_{i,j}\})$, onde $E(\Lambda)$ é a projeção espectral associada a Λ .

Sejam λ_0 e λ_1 as extremidades do intervalo Λ . Então, a inversa de U é dada pela fórmula

$$(U^{-1}F)(x) \doteq \lim_{\lambda_- \rightarrow \lambda_0} \lim_{\lambda_+ \rightarrow \lambda_1} \int_{\lambda_-}^{\lambda_+} \sum_{i,j=1}^2 F_i(\lambda) \sigma_j(x; \lambda) \varrho_{i,j}(d\lambda),$$

onde $F = (F_1, F_2) \in L^2(\Lambda, \{\varrho_{i,j}\})$ e o limite existe na topologia do espaço $L^2(\mathbb{R})$.

Agora, segue o teorema que nos possibilitará computar as funções de Green e as medidas espectrais do nosso problema.

Teorema 2.3.9. (*Titchmarsh-Kodaira*): *Seja Λ um intervalo aberto da reta real e $\Omega \supset \Lambda$ um aberto no plano complexo. Seja $\rho(L)$ o conjunto resolvente do operador L . Seja $\{\sigma_1(x; \lambda), \sigma_2(x; \lambda)\}$ um conjunto de funções que forma uma base para as soluções da equação $l\sigma = \lambda\sigma$, com $\lambda \in \Omega$, as quais são contínuas em $\mathbb{R} \times \Omega$ e analíticas na variável λ . Suponha que o núcleo $G(\lambda, x, y)$ do operador resolvente $(\lambda - L)^{-1}$ possua a representação*

$$G(\lambda, x, y) = \begin{cases} \sum_{i,j=1}^2 \theta_{i,j}^-(\lambda) \sigma_i(x; \lambda) \overline{\sigma_j(y; \bar{\lambda})}, & x < y, \\ \sum_{i,j=1}^2 \theta_{i,j}^+(\lambda) \sigma_i(x; \lambda) \overline{\sigma_j(y; \bar{\lambda})}, & x > y, \end{cases}$$

para todo $\lambda \in \rho(L) \cap \Omega$ e que $\{\varrho_{i,j}\}$ é uma matriz positiva de medidas sobre Λ associada a L de acordo com o teorema (*Weyl-Kodaira*). Então as funções $\theta_{i,j}^+$ e $\theta_{i,j}^-$ são analíticas em $\rho(L) \cap \Omega$ e dado qualquer intervalo aberto $(\lambda_0, \lambda_1) \subset \Lambda$ tem-se que para $1 \leq i, j \leq 2$,

$$\begin{aligned} \varrho_{i,j}((\lambda_0, \lambda_1)) &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda_0 + \delta}^{\lambda_1 - \delta} (\theta_{i,j}^+(\lambda - i\varepsilon) - \theta_{i,j}^+(\lambda + i\varepsilon)) d\lambda, \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda_0 + \delta}^{\lambda_1 - \delta} (\theta_{i,j}^-(\lambda - i\varepsilon) - \theta_{i,j}^-(\lambda + i\varepsilon)) d\lambda. \end{aligned}$$

No que segue será aplicada a teoria desenvolvida acima para resolvermos detalhadamente o problema do poço potencial e mostrar que o EHE é a estrutura matemática que estamos procurando.

3 POTENCIAL POÇO QUADRADO

No presente capítulo, vamos resolver explicitamente o problema de autovalor dado em (3.2) usando as condições de contorno impostas e calcular o espectro de h e então construir um operador unitário U que transforma a representação da posição em representação da energia. Faremos isso pois, na seção seguinte, diagonalizaremos nosso hamiltoniano e construiremos a expansão em funções de onda em termos das auto-funções do operador diferencial h .

Vamos assumir que $\mathcal{D}(H)$ é o maior domínio no qual h é auto-adjunto, ou seja,

$$\mathcal{D}(H) = \{f, f' \in AC_{loc}(\mathbb{R}) : hf \in L^2(\mathbb{R})\}. \quad (3.1)$$

Grande parte da literatura ao tratar o problema do poço potencial considera a energia como sendo um número real, mas para que possamos usar os teoremas de Weyl-Kodaira e Titchmarsh-Kodaira devemos considerar que E é um número complexo.

Consideremos um potencial com uma descontinuidade no ponto a . A equação de Schrödinger deste problema tem a forma

$$h\varphi(x, E) = E\varphi(x, E) \quad (3.2)$$

com

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ -V_0 & |x| \leq a \\ 0 & x > a \end{cases} \quad (3.3)$$

sendo o poço potencial e

$$h \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (3.4)$$

o nosso hamiltoniano.

A equação (3.2) pode ser escrita como

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\varphi(x). \quad (3.5)$$

Agora, suponhamos que $\varphi(x)$ ou $\varphi'(x)$ são descontínuas em a . Então, o comportamento $\varphi(x) \sim V(x)$ teria como consequência que $\varphi''(x) \sim \delta(x)$, e similarmemente o comportamento $\varphi'(x) \sim V(x)$ implicaria que $\varphi(x) \sim \delta(x)$. Entretanto, pelo lado direito de (3.5) $\varphi''(x)$ pode fazer, no máximo, um salto finito em a , ou seja, nossa suposição nos leva a uma contradição. Consequentemente, $\varphi(x)$ e $\varphi'(x)$ devem ser contínuas mesmo se o potencial $V(x)$ é meramente contínuo por partes.

Temos que a equação (3.5) possui as seguintes soluções fundamentais:

$$S_l(x, E) = \begin{cases} e^{ikx} + R(k)e^{-ikx} & x < -a \\ A(q)e^{iqx} + B(q)e^{-iqx} & |x| \leq a \\ T(k)e^{ikx} & x > a \end{cases} \quad (3.6)$$

e

$$S_r(x, E) = \begin{cases} T(k)e^{-ikx} & x < -a \\ A(q)e^{-iqx} + B(q)e^{iqx} & |x| \leq a \\ R(k)e^{ikx} + e^{-ikx} & x > a \end{cases} \quad (3.7)$$

sendo $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ e $q = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$ e os coeficientes $A(q)$, $B(q)$, $R(k)$, $T(k)$ são encontrados usando o fato de que a solução e a sua derivada são contínuas em $x = \pm a$. Os subscritos l e r identificam que as funções de onda $S_{r,l}$ são quadrado integráveis em $x = \pm\infty$, respectivamente.

Para obtermos soluções explícitas para as soluções fundamentais S_l e S_r em todo o plano complexo, devemos dividi-lo em pedaços, nos primeiro e quarto quadrantes e no caso que $Re(E) < 0$.

1° Caso: Estados livres: $Re(E) > 0$.

Primeiro Quadrante: $Im(E) \geq 0$. As soluções fundamentais podem ser escritas como

$$S_l(x, E) = \begin{cases} e^{ikx} + R(k)e^{-ikx} & x < -a \\ A(q)e^{iqx} + B(q)e^{-iqx} & |x| \leq a \\ T(k)e^{ikx} & x > a \end{cases} \quad (3.8)$$

e

$$S_r(x, E) = \begin{cases} T(k)e^{-ikx} & x < -a \\ A(q)e^{-iqx} + B(q)e^{iqx} & |x| \leq a \\ R(k)e^{ikx} + e^{-ikx} & x > a. \end{cases} \quad (3.9)$$

Quarto quadrante: $Im(E) \leq 0$. Notemos que essa região é o complexo conjugado do primeiro quadrante. Sendo assim, devemos tomar o conjugado nas soluções fundamentais (3.8) e (3.9).

$$S_l(x, E) = \begin{cases} e^{-ikx} + \overline{R(k)}e^{ikx} & x < -a \\ \overline{A(q)}e^{-iqx} + \overline{B(q)}e^{iqx} & |x| \leq a \\ \overline{T(k)}e^{-ikx} & x > a \end{cases} \quad (3.10)$$

e

$$S_r(x, E) = \begin{cases} \overline{T(k)}e^{ikx} & x < -a \\ \overline{A(q)}e^{iqx} + \overline{B(q)}e^{-iqx} & |x| \leq a \\ \overline{R(k)}e^{-ikx} + e^{ikx} & x > a. \end{cases} \quad (3.11)$$

2° Caso: Estados ligados: $Re(E) < 0$. Nesse caso, fazemos a transformação $k \rightarrow iK$, com $K = \sqrt{-2mE}/\hbar$, nas equações (3.8) e (3.9). Ou seja, para valores reais de $E < 0$, tomamos uma continuação analítica da variável k . As

soluções fundamentais ficam da seguinte maneira:

$$S_l(x, E) = \begin{cases} e^{-Kx} + R(iK)e^{Kx} & x < -a \\ A(q)e^{iqx} + B(q)e^{-iqx} & |x| \leq a \\ T(iK)e^{-Kx} & x > a \end{cases} \quad (3.12)$$

e

$$S_r(x, E) = \begin{cases} T(iK)e^{Kx} & x < -a \\ A(q)e^{-iqx} + B(q)e^{iqx} & |x| \leq a \\ R(iK)e^{-Kx} + e^{Kx} & x > a. \end{cases} \quad (3.13)$$

Usando as condições impostas em $x = \pm a$ podemos encontrar as constantes. Essas condições podem ser escritas como

$$S_l(-a - 0; E) = S_r(-a + 0; E)$$

$$S'_l(-a - 0; E) = S'_r(-a + 0; E)$$

$$S_l(a - 0; E) = S_r(a + 0; E)$$

$$S'_l(a - 0; E) = S'_r(a + 0; E)$$

Fazendo os cálculos, chegamos aos seguintes resultados:

$$T(k) = \frac{-4e^{2ia(q-k)}kq}{e^{4iaq}(k-q)^2 - (k+q)^2} \quad (3.14)$$

$$R(k) = \frac{e^{-2iak}((-1 + e^{4iaq})(k^2 - q^2))}{e^{4iaq}(k-q)^2 - (k+q)^2} \quad (3.15)$$

$$A(q) = \frac{-2e^{ia(q-k)}k(k+q)}{e^{4iaq}(k-q)^2 - (k+q)^2} \quad (3.16)$$

$$B(q) = \frac{2e^{ia(3q-k)}(k-q)k}{e^{4iaq}(k-q)^2 - (k+q)^2}. \quad (3.17)$$

Temos que $|R(k)|^2 = R(k) \cdot \overline{R(k)}$ é dado por:

$$|R(k)|^2 = \frac{2(1 - \cos(4aq))(k^2 - q^2)^2}{(2k^4 + 12k^2q^2 + 2q^4) - (k^2 - q^2)^2(2 \cos(4aq))} \quad (3.18)$$

e

$$|T(k)|^2 = \frac{16k^2q^2}{(2k^4 + 12k^2q^2 + 2q^4) - (k^2 - q^2)^2(2 \cos(4aq))}. \quad (3.19)$$

Como um teste de consistência, podemos notar que os coeficientes de transmissão e reflexão satisfazem a igualdade

$$|R(k)|^2 + |T(k)|^2 = 1$$

o que garante a conservação da probabilidade do nosso problema.

Também podemos observar que $S_r(x, l)$ é a reflexão de $S_l(x, l)$ em $x = 0$, isto é, $S_r(x, l) = S_l(-x, l)$. O Wronskiano $W(S_r, S_l) = 2ikT(k)$ e, se identificarmos as soluções do primeiro quadrante e quarto quadrante com o subscrito '+-' e '--', respectivamente, temos as seguintes relações

$$\overline{S_l^+(x, \bar{l})} = S_l^-(x, l) \quad (3.20)$$

e

$$\overline{S_r^+(x, \bar{l})} = S_r^-(x, l) \quad (3.21)$$

que serão usadas posteriormente.

Utilizaremos agora as técnicas apresentadas anteriormente a fim de obtermos a completeza das nossas auto-funções generalizadas. Para calcularmos a medida espectral de nosso problema usaremos a função de Green. Temos que

$$G(x, x'; E) = \frac{2m/\hbar^2}{W(S_r, S_l)} \begin{cases} S_r(x, E)S_l(x', E) & x < x' \\ S_r(x', E)S_l(x, E) & x > x' \end{cases} \quad (3.22)$$

e sejam

$$\sigma_1(x, E) = S_l^+(x, E) \quad \text{e} \quad \sigma_2(x, E) = S_r^+(x, E) \quad (3.23)$$

soluções fundamentais.

Usando as equações (3.20) e (3.21) temos que

$$\overline{TS_l^+(x', \bar{E})} - \frac{T\bar{R}}{\bar{T}}\overline{S_r^+(x', \bar{E})} = TS_l^-(x', E) - \frac{T\bar{R}}{\bar{T}}S_r^-(x', E) \quad (3.24)$$

e concluimos as seguintes identidades

$$T\overline{S_l^+(x', \overline{E})} - \frac{T\overline{R}}{\overline{T}}\overline{S_r^+(x', \overline{E})} = S_r^+(x', E), \quad (3.25)$$

$$-\frac{\overline{T}R}{T}\sigma_1(x, E) + \overline{T}\sigma_2(x, E) = S_l^-(x, E). \quad (3.26)$$

Usando esses resultados podemos computar a função de Green usando a equação (3.22). Fazendo as devidas substituições obtemos

$$G(x, x' : E) = \frac{mi}{\hbar^2 k} \left[-\sigma_1(x, E)\overline{\sigma_1(x', \overline{E})} + \frac{\overline{R}}{\overline{T}}\sigma_1(x, E)\overline{\sigma_2(x', \overline{E})} \right] \quad (3.27)$$

para $Re(E) > 0$, $Im(E) > 0$, $x > x'$ e

$$G(x, x' : E) = \frac{mi}{\hbar^2 k} \left[-\frac{R}{T}\sigma_1(x, E)\overline{\sigma_2(x', \overline{E})} + \sigma_2(x, E)\overline{\sigma_2(x', \overline{E})} \right] \quad (3.28)$$

para $Re(E) > 0$, $Im(E) < 0$, $x > x'$.

A função de Green $G(x, x' : E)$ é dada pela expressão

$$G(x, x'; E) = \begin{cases} \sum_{ij} \theta_{ij}^-(E) \sigma_i(x, E) \overline{\sigma_j(x', \overline{E})} & x < x' \\ \sum_{ij} \theta_{ij}^+(E) \sigma_i(x, E) \overline{\sigma_j(x', \overline{E})} & x > x'. \end{cases} \quad (3.29)$$

Comparando as equações (3.27) e (3.28) com esta última expressão, obtemos (para $Re(E) > 0$)

$$\theta_{i,j}^+(E) = \begin{pmatrix} -\frac{mi}{\hbar^2 k} & \frac{mi\overline{R}}{\hbar^2 k \overline{T}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad Im(E) > 0 \quad (3.30)$$

$$\theta_{i,j}^-(E) = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{miR}{\hbar^2 k T} \\ 0 & \frac{mi}{\hbar^2 k} \end{pmatrix} \quad Im(E) < 0. \quad (3.31)$$

Feito isso, agora podemos calcular o espectro de H . Como H é auto-adjunto, temos que seu espectro é real. Esse espectro é o subconjunto da linha real onde a função de Green falha em ser analítica. Esta não-analiticidade de $G(x, x'; E)$ será construída nas funções θ_{ij}^+ . Analisando as expressões (3.30) e (3.31) acima, concluimos que as essas funções são analíticas se $Re(E) > 0$, mas devido ao salto

da função θ_{ij}^+ ao atravessar a reta real temos que o intervalo $[0, \infty)$ está no espectro do operador H .

Usamos o fato de que os elementos da matriz de medidas $\rho_{ij}(E)$ são dados pela integral

$$\rho_{ij}([E_1, E_2]) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int_{E_1+\delta}^{E_2-\delta} dE [\theta_{ij}^+(E - i\epsilon) - \theta_{ij}^+(E + i\epsilon)] \quad (3.32)$$

Segue de (3.30) e (3.31) que $\rho_{21} = 0$, enquanto que para ρ_{12} temos

$$\rho_{12}([E_1, E_2]) = \frac{-1}{2\pi i} \frac{mi}{\hbar^2} \int_{E_1}^{E_2} dE \frac{1}{k} \left(\frac{R}{T} + \overline{\frac{R}{T}} \right) = 0 \quad (3.33)$$

Para as outras medidas, obtemos o seguinte

$$\rho_{11}([E_1, E_2]) = \frac{1}{2\pi i} \int_{E_1}^{E_2} - \left(-\frac{mi}{\hbar^2 k} \right) dE = \frac{(k_2 - k_1)}{2\pi} \quad (3.34)$$

$$\rho_{22}([E_1, E_2]) = \frac{1}{2\pi i} \int_{E_1}^{E_2} \left(\frac{mi}{\hbar^2 k} \right) dE = \frac{(k_2 - k_1)}{2\pi} \quad (3.35)$$

sendo $k_j = \frac{\sqrt{2mE_j}}{\hbar}, j = 1, 2$

Por outro lado, para o segundo e terceiro quadrantes ($Re(E) < 0$) procedemos de maneira análoga. Tomamos as seguintes soluções fundamentais

$$\sigma_1(x, E) = \frac{S_l(x, E)}{T(k)} \quad \sigma_2(x, E) = \frac{S_r(x, E)}{T(k)}, \quad (3.36)$$

em (3.27) e (3.28). Nesse caso obtemos as relações

$$\overline{S_l(x, \overline{E})} = S_l(x, E) \quad (3.37)$$

$$\overline{S_r(x, \overline{E})} = S_r(x, E) \quad (3.38)$$

Usando as soluções fundamentais dadas em (3.36) temos que

$$G(x, x'; E) = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{T}{2K} \right) \sigma_2(x, E) \overline{\sigma_1(x', \overline{E})} \quad x < x', \quad (3.39)$$

o qual nos dá a matriz, (ver equação (3.29))

$$\theta_{ij}^-(E) = \frac{-mT}{\hbar^2 K} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad Re(E) < 0. \quad (3.40)$$

Assim temos que o único elemento não-trivial da matriz de medidas é dado por,

$$\rho_{21}([E_1, E_2]) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int_{E_1+\delta}^{E_2-\delta} dE [\theta_{21}^-(E - i\epsilon) - \theta_{21}^-(E + i\epsilon)] \quad (3.41)$$

Para calcular este elemento, deve-se dividir a região em que $Re(E) < 0$ em duas partes. Primeiro, consideramos a parte em que $Re(E) \in (-\infty, -V_0)$. Nesta região θ_{21}^- é analítica na variável E . Segue que ρ_{21} vai para zero nessa parte do plano.

Se $Re(E) \in [-V_0, 0)$, os pólos do coeficiente de transmissão $T(k)$ são encontrados fazendo a transformação $k = iK$. Eles são dados pelos zeros da equação

$$\cot qa - \tan qa = i(q/k + k/q), \quad (3.42)$$

ou de maneira equivalente, correspondem aos zeros das equações

$$\tan qa = -ik/q \quad \text{e} \quad \cot qa = ik/q \quad (3.43)$$

Para $Re(E) < -V_0$ não há solução para a equação acima, pois nesse caso k e q são imaginários, no limite $Im(E) = 0$, e assim não há solução. Porém, no intervalo $-V_0 < E < 0$, k é imaginário puro, mas q é real. Neste caso, a equação (3.43) nos leva a

$$\tan qa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}/q \quad \cot qa = -\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}/q, \quad (3.44)$$

sendo que estamos usando que $k = i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. A equação (3.44) corresponde às condições de existências para estados ligados associados com os auto-estados pares e ímpares do poço potencial [6]. O gráfico que representa estas soluções é dado na figura (3.1).

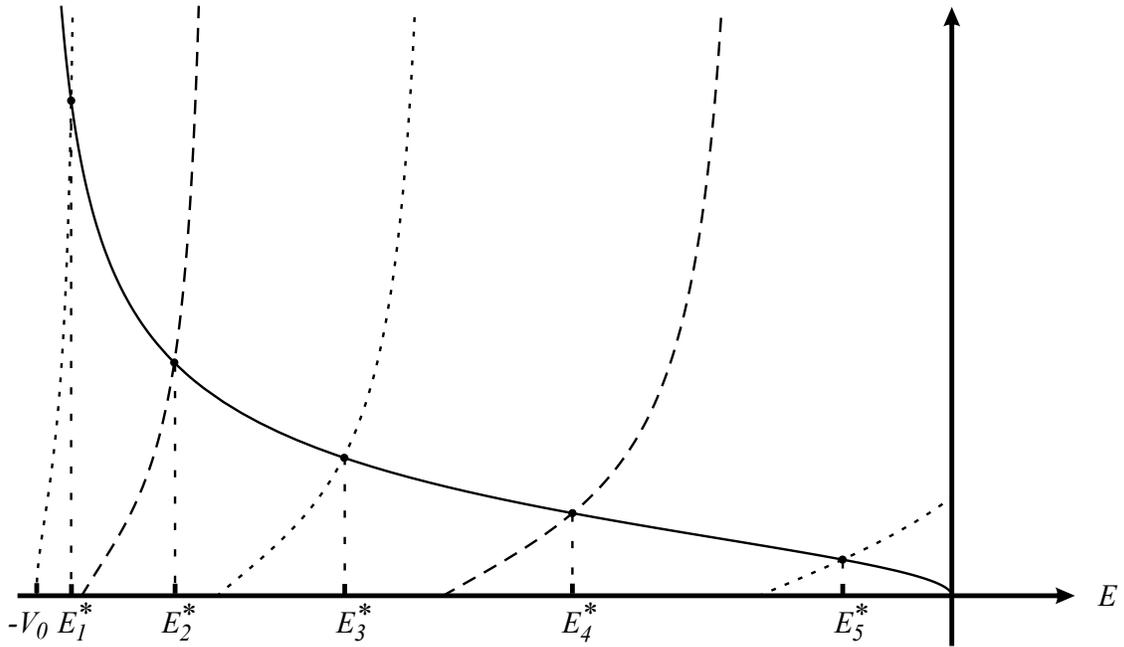


Figura 3.1: Solução gráfica das equações (3.44)

A análise feita faz com que tenhamos que usar o Teorema dos Resíduos, a fim de computar corretamente ρ_{21} dada em (3.41). Consideremos o contorno $C(\epsilon, \delta)$ da figura (3.2).

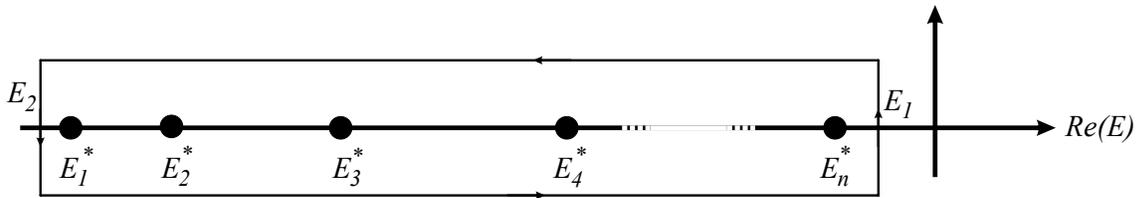


Figura 3.2: Os valores E_i^* correspondem à energia associada aos pólos, referentes à equação (3.45). Os círculos representam esses pólos.

Aplicando o Teorema dos Resíduos temos

$$\int_{C(\epsilon, \delta)} dz [\theta_{21}^-(z)] = 2\pi i \sum_{j=1}^N \text{Res}\{\theta_{21}^-(z), z_j\} \quad (3.45)$$

no qual estamos assumindo que $\theta_{21}^-(z)$ tem N pólos z_j , $j = 1, \dots, N$, cujas soluções são dadas em (3.44), que estão em $[E_2, E_1] \subseteq [-V_0, 0]$. Por outro lado temos que,

$$\int_{C(\epsilon, \delta)} dz [\theta_{21}^-(z)] = \int_{C_1(\epsilon, \delta) \cup C_2(\epsilon, \delta)} dz [\theta_{21}^-(z)] + \int_{L_1 \cup L_2} dz [\theta_{21}^-(z)]$$

nas quais $C_1(\epsilon, \delta)$ e $C_2(\epsilon, \delta)$ denotam as partes superior e inferior da curva $C(\epsilon, \delta)$ e L_1 e L_2 denotam os segmentos laterais. Agora, a integral sobre $L_1 \cup L_2$, vai a zero quando ϵ e δ vão a zero, e assim temos

$$(2\pi i)\rho_{21}([E_1, E_2]) = -\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{C_1(\epsilon, \delta) \cup C_2(\epsilon, \delta)} dz [\theta_{21}^-(z)] \quad (3.46)$$

$$= -\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{C(\epsilon, \delta)} dz [\theta_{21}^-(z)]. \quad (3.47)$$

Comparando esta última igualdade com (3.45) concluímos que

$$\rho_{21}([E_1, E_2]) = \sum_j \text{Res}\{\theta_{21}^-, z_j\}, \quad (3.48)$$

nos quais os valores para z_j são dados em (3.44). Nesse caso, temos que a função θ_{21}^- não é analítica nos pontos z_j , assim esses pontos estão incluídos no espectro de H . Logo o conjunto resolvente $R(H) = \{E \in \mathbb{C} - ([0, \infty) \cup \{z_j\}_{j=1}^N)\}$.

3.1 Diagonalização e Expansão em Auto-Funções

Agora podemos diagonalizar o hamiltoniano. Há um mapeamento unitário U (ver teorema 2.3.8) definido por

$$U : L^2(\mathbb{R}) \mapsto L^2(\Lambda, \{\rho_{ij}\}) \quad (3.49)$$

$$f(x) \mapsto \tilde{f}(E) = \left(\tilde{f}_1(E), \tilde{f}_2(E) \right), \quad (3.50)$$

onde

$$\tilde{f}_i(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \overline{\sigma_i(x, E)}, \quad (3.51)$$

que leva $\mathcal{D}(H)$ no espaço

$$\mathcal{D}(E) = \{g(E) \in L^2(\Lambda, \{\rho_{ij}\}) \mid \int_{\Lambda} \sum_{i,j=1}^2 g_i(E) \overline{g_j(E)} \rho_{ij}(dE) < \infty\}. \quad (3.52)$$

Esse operador transforma a representação da posição em representação da energia.

A inversa do operador U é dado por (ver teorema 2.3.8)

$$f(x) = (U^{-1}\tilde{f})(x) = \int_{\Lambda} \sum_{i,j=1}^2 \tilde{f}_i \sigma_j(E) \rho_{ij}(dE), \quad \tilde{f}(E) \in L^2(\Lambda, \{\rho_{ij}\}). \quad (3.53)$$

O operador U^{-1} transforma a representação da energia em representação da posição.

Observação 3. Nas expressões 3.51 e 3.53, σ_i é a função definida pela equação (3.23) no caso $Re(E) \geq 0$ ou pela equação (3.36) no caso $Re(E) < 0$.

A expressão (3.53) nos fornece a expansão em auto-funções de qualquer função de quadrado integrável em termos das auto-soluções $\sigma_{1,2}(x; E)$ de h .

O operador U pode ser visto como uma espécie de transformada de Fourier generalizada: a transformada de Fourier conecta a representação da posição e momentum. U conecta a representação da posição e da energia. O papel desempenhado pelas ondas planas e^{-ipx} (as quais são auto-funções generalizadas do operador $-id/dx$) é aqui desempenhado por $\sigma_{1,2}(x; E)$ (as quais são auto-funções generalizadas de H). Portanto, $\sigma_{1,2}(x; E) \equiv \langle x|E \rangle_{1,2}$ podem ser vistas como "elementos de transição" entre as representações da posição e da energia.

A representação f das funções na representação da posição é diferente da representação \tilde{f} das funções na representação da energia, pois elas tem diferentes

dependências funcionais. O mesmo se aplica ao hamiltoniano h , domínios, etc. Esta não é a prática usualmente adotada na literatura, nas quais diferentes representações são normalmente identificadas e representadas com o mesmo símbolo [7, 8, 9, 10].

Note que o operador U que diagonaliza H não é único. Na verdade, diferentes auto-kets, isto é, diferentes condições impostas em (3.2), nos levam a diferentes operadores U .

4 A NECESSIDADE DO EHE

A teoria de Sturm-Liouville nos fornece um domínio $\mathcal{D}(H)$ no qual o hamiltoniano H é auto-adjunto e um operador unitário U que diagonaliza H . Este operador unitário induz uma decomposição do espaço de Hilbert (ver [4,5]).

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\mapsto U\mathcal{H} \equiv \tilde{\mathcal{H}} = \oplus \int_{Sp(H)} \mathcal{H}(E) dE \\ f &\mapsto Uf \equiv \{\tilde{f}(E)\}, \quad \tilde{f}(E) \in \mathcal{H}(E) \end{aligned} \quad (4.1)$$

com \mathcal{H} sendo dado por $L^2(\mathbb{R})$ e $\tilde{\mathcal{H}}$ é dado por $L^2(\Lambda, \{\rho_{ij}\})$. O espaço de Hilbert $\mathcal{H}(E)$ associado a cada auto-valor da energia do $Sp(H)$ é dado pelo espaço de Hilbert dos números complexos \mathbb{C} . Em $\tilde{\mathcal{H}}$, o operador H age como o operador multiplicação,

$$Hf \mapsto UHf \equiv \{E\tilde{f}(E)\}, \quad f \in \mathcal{D}(H) \quad (4.2)$$

O produto escalar em $\tilde{\mathcal{H}}$ pode ser escrito como

$$\langle \tilde{f}, \tilde{g} \rangle_{\tilde{\mathcal{H}}} = \int_{Sp(H)} \sum_{i,j=1}^2 f_i(E) g_j(E) \rho_{ij}(dE). \quad (4.3)$$

Como veremos a seguir, a decomposição integral direta não contém alguns básicos requisitos da Mecânica Quântica. Esses requisitos podem ser abrigados pelo EHE.

Um dos mais importantes princípios da Mecânica Quântica é que a quantidade $(\varphi, H\varphi)$ deveria ajustar o valor experimental esperado do observável H no estado φ . Entretanto, $(\varphi, H\varphi)$ não é definido para todo elemento em \mathcal{H} , mas só para aquelas funções de onda quadrado normalizadas que também estão em $\mathcal{D}(H)$. Portanto, nem toda função quadrado normalizada pode representar uma "função de onda física", mas só aquelas que estão (pelo menos) em $\mathcal{D}(H)$. Outro importante conceito da Mecânica Quântica é a quantidade

$$\text{disp}_{\varphi} H = (\varphi, H^2\varphi) - (\varphi, H\varphi)^2 \quad (4.4)$$

que representa a dispersão do observável H no estado φ , e a quantidade

$$\Delta_\varphi H \equiv \sqrt{\text{disp}_\varphi H} \quad (4.5)$$

representa a incerteza do observável H no estado φ . Desde que (4.4) e (4.5) só estão definidos quando φ é um elemento de $\mathcal{D}(H^2) \subset \mathcal{D}(H)$, nem todo elemento de $\mathcal{D}(H)$ pode ser designado como uma "função de onda física", mas só aquelas funções que estão (pelo menos) em $\mathcal{D}(H^2)$. Portanto, gostaríamos de achar um subdomínio de Φ incluído no $\mathcal{D}(H)$ nos quais os valores esperados

$$\langle \varphi, H^n \varphi \rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad \varphi \in \phi \quad (4.6)$$

são bem definidos.

Outra importante exigência da Mecânica Quântica é que as operações algébricas de soma e multiplicação de dois operadores seja bem definida. No formalismo do espaço de Hilbert essas operações algébricas não são sempre bem definidas pois os domínios onde esses operadores são auto-adjuntos, em geral, não permanece estável sob suas ações. Na verdade, o maior problema do formalismo do espaço de Hilbert vem de questões de domínio. No nosso caso, o domínio $\mathcal{D}(H)$ em (3.1) não permanece estável sob a ação de H . Assim, gostaríamos de achar um subdomínio Φ incluído no $\mathcal{D}(H)$ que permanecesse estável sob a ação de H e todas as suas potências,

$$H^n : \Phi \mapsto \Phi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.7)$$

Podemos ver que se a equação (4.7) se mantém, então os valores esperados em (4.6) são bem definidos para cada $\phi \in \Phi$, isto é, se o domínio Φ se mantém estável sob a ação de H , então os valores esperados de H em qualquer estado $\phi \in \Phi$ são bem definidos.

Em Mecânica Quântica, assume-se que para cada $E \in Sp(H)$ há um ket de Dirac tal que,

$$H^\times |E\rangle = E|E\rangle \quad (4.8)$$

Notemos que em (4.8) estamos denotando a ação do hamiltoniano no ket $|E\rangle$ por H^\times . Será usada esta notação para enfatizar o fato que o hamiltoniano está agindo em vetores que estão fora do espaço de Hilbert. A equação (4.8) não possui solução no espaço de Hilbert quando E pertence ao espectro contínuo do hamiltoniano. Na verdade, a equação (4.8) deve ser relacionada com a equação

$$\langle x|H^\times|E\rangle = E\langle x|E\rangle \quad (4.9)$$

a qual pode ser lida como

$$H\sigma_i(x; E) = E\sigma_i(x; E), \quad i = 1, 2 \quad (4.10)$$

sendo H o operador diferencial (3.4) e $\sigma_i(x; E)$ são as auto-funções generalizadas. Desde que $\sigma_i(x; E) \equiv \langle x|E\rangle_i$ está fora de $L^2(\mathbb{R})$, isto é,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\sigma_i(x; E)|^2 = \infty, \quad i = 1, 2 \quad (4.11)$$

o correspondente auto-ket $|E\rangle_i$, que é dado por

$$\begin{aligned} |E\rangle_i : \Phi &\mapsto \mathbb{C} \\ \varphi &\mapsto \langle \varphi|E\rangle_i := \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(x)} \sigma_i(x; E) dx, \quad i = 1, 2 \end{aligned} \quad (4.12)$$

também deveria estar fora do espaço de Hilbert. Na verdade, $|E\rangle_i$ é um elemento de Φ^\times que é o espaço dos funcionais anti-lineares contínuos sobre o espaço de funções de onda Φ .

Em resumo, precisamos de:

a) um domínio invariante denso nas quais, todas as potências de H e todos os valores esperados (4.6) estejam bem definidos,

b) funções de onda suaves de maneira que (4.8) se mantenha,

c) uma expansão de Dirac em vetores da base.

No formalismo da decomposição integral direta, não há espaço para essas três exigências. Por isso introduzimos o EHE.

5 CONSTRUÇÃO DO ESPAÇO DE HILBERT EQUIPADO

Primeiramente vamos fazer com que todas as potências do hamiltoniano sejam bem definidas. Para isso, construímos o subespaço maximal invariante \mathcal{D} do operador H ,

$$\mathcal{D} := \bigcap_{n=0}^{\infty} \mathcal{D}(H^n). \quad (5.1)$$

O espaço \mathcal{D} é o maior subespaço de $\mathcal{D}(H)$ que permanece estável sob a ação do hamiltoniano H e todas as suas potências. Podemos notar que

$$\mathcal{D} = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R}) \mid H^n \varphi(x) \in L^2(\mathbb{R}), \varphi^{(n)}(-a) = \varphi^{(n)}(a) = 0, \\ n = 0, 1, 2, \dots; \varphi(x) \in C_0^\infty(\mathbb{R})\}. \quad (5.2)$$

As condições $\varphi^{(n)}(-a) = \varphi^{(n)}(a) = 0$ em (5.2) provém da descontinuidade do potencial $V(x)$ em $r = -a$ e $r = a$ (ver [11]).

Agora vamos encontrar um subespaço Φ nos quais os auto-kets de H são bem definidos como funcionais anti-lineares. Para cada $E \in Sp(H)$, associamos um ket $|E\rangle$ às auto-funções generalizadas $\sigma_{1,2}(x; E)$ por

$$|E\rangle_i : \Phi \mapsto \mathbb{C} \\ \varphi \mapsto \langle \varphi | E \rangle_i := \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(x)} \sigma_i(x; E) dx = \overline{(U\varphi)_i(E)}, \quad i = 1, 2 \quad (5.3)$$

O cálculo acima mostra que o ket $|E\rangle$ em (5.3) é um auto-funcional generalizado de H se Φ está no subespaço maximal invariante de H ,

$$\Phi \subset \mathcal{D}. \quad (5.4)$$

Como as auto-funções $\sigma_{1,2}(x; E)$ não são em geral de quadrado integráveis, precisamos impor mais restrições aos elementos de \mathcal{D} de maneira a fazer o

auto-funcional $|E\rangle$ em (5.3) contínuo,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |(x+1)^n (H+1)^m \varphi(x)|^2 < \infty, n, m = 0, 1, 2, \dots \quad (5.5)$$

A imposição das condições (5.5) sobre o espaço \mathcal{D} nos levam ao espaço de funções teste do poço potencial,

$$\Phi = \{\varphi \in \mathcal{D} \mid \int_{-\infty}^{\infty} dx |(x+1)^n (H+1)^m \varphi(x)|^2 < \infty, n, m = 0, 1, 2, \dots\}. \quad (5.6)$$

Em Φ , definimos a seguinte família de normas

$$\|\varphi\|_{n,m} := \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} dx |(x+1)^n (H+1)^m \varphi(x)|^2}, n, m = 0, 1, 2, \dots \quad (5.7)$$

As quantidades em (5.7) satisfazem as condições de norma (ver Proposição A.1.1 do Apêndice A) e podem ser usadas para definir uma topologia normada contável τ_Φ em Φ (ver [3, 4]),

$$\varphi_\alpha \xrightarrow[\alpha \rightarrow \infty]{\tau_\Phi} \varphi \text{ se, e só se, } \|\varphi_\alpha - \varphi\|_{n,m} \xrightarrow[\alpha \rightarrow \infty]{} 0, \quad (5.8)$$

Podemos ver que o espaço Φ é estável sob a ação de H e que H é τ_Φ -contínuo (ver Proposição A.1.2 do Apêndice A), dessa forma podemos aplicar qualquer potência do hamiltoniano e ainda permaneceremos nesse espaço.

Uma vez construído o espaço Φ , podemos construir seu dual topológico Φ^\times como o espaço de funcionais anti-lineares τ_Φ -contínuos em Φ (ver [3, 4]) e com isso o EHE do poço potencial

$$\Phi \subset L^2(\mathbb{R}) \subset \Phi^\times. \quad (5.9)$$

Os kets $|E\rangle_i$ na equação (5.3) são um funcionais anti-lineares bem definidos em Φ , isto é, $|E\rangle \in \Phi^\times$ (ver proposição A.1.3 do apêndice A). Eles também podem ser interpretados como autovetores generalizados do hamiltoniano H (ver proposição A.1.3 do apêndice A),

$$H^\times |E\rangle_i = E |E\rangle_i, \quad (5.10)$$

isto é,

$$\langle \varphi | H^\times | E \rangle_i = \langle H \varphi | E \rangle_i = E \langle \varphi | E \rangle_i, \quad \forall \varphi \in \Phi \quad (5.11)$$

No espaço Φ , todos os valores esperados do hamiltoniano e todas as operações algébricas envolvendo H são bem definidas e a equação de autovalor generalizada (5.11) se mantém. Mostraremos que as funções φ de Φ podem ser expandidas em uma expansão de Dirac em vetores da base.

5.1 Expansão de Dirac em Vetores da Base

Denotando $\langle x | \varphi \rangle \equiv \varphi(x)$ e ${}_i \langle E | x \rangle \equiv \overline{\sigma_i(x; E)}$, e se definirmos a ação do bra à esquerda ${}_i \langle E |$ em $\varphi \in \Phi$ como ${}_i \langle E | \varphi \rangle := \tilde{\varphi}_i(E)$, então a equação (3.51) se torna

$${}_i \langle E | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx {}_i \langle E | x \rangle \langle x | \varphi \rangle, \quad \varphi \in \Phi. \quad (5.12)$$

Se colocarmos ${}_i \langle E | \varphi \rangle \equiv \tilde{\varphi}_i(E)$, $i = 1, 2$ e $\langle x | E \rangle_j \equiv \sigma_j(x; E)$, $j = 1, 2$, então a equação (3.53) se torna

$$\langle x | \varphi \rangle = \int_{\Lambda} \sum_{i,j=1}^2 \langle x | E \rangle_j {}_i \langle E | \varphi \rangle \rho_{ij}(dE), \quad \varphi \in \Phi. \quad (5.13)$$

Esta equação é a expansão de Dirac em vetores da base do poço potencial.

Na equação (5.13), a função de onda $\langle x | \varphi \rangle$ é gerada em uma espécie de "expansão de Fourier" pelas auto-funções $\langle x | E \rangle_j$. Nesta expansão, cada auto-função $\langle x | E \rangle_j$ é avaliada por ${}_i \langle E | \varphi \rangle = \tilde{\varphi}_i(E)$, a qual é o valor da função de onda na representação da energia no ponto E . Dessa maneira qualquer função $\varphi(x) = \langle x | \varphi \rangle$ de Φ pode ser escrita como uma superposição linear das auto-funções $\sigma_j(x; E) = \langle x | E \rangle_j$.

Embora as expansões de Weyl-Kodaira (3.51) e (3.53) sejam válidas para qualquer elemento do espaço de Hilbert, as expansões de Dirac em vetores da

base (5.12) e (5.13) são somente válidas para funções $\varphi \in \Phi$ pois só elas satisfazem as seguintes condições:

$$\overline{\tilde{\varphi}_i(E)} = \langle \varphi | E \rangle_i \quad (5.14)$$

e

$$\langle \varphi | H^\times | E \rangle_i = \langle H\varphi | E \rangle_i = E \langle \varphi | E \rangle_i. \quad (5.15)$$

Uma outra forma de reformular a expansão de Dirac em vetores da base é usando o Teorema Nuclear Espectral (Gelfand-Maurin). Ao invés de usarmos a afirmação geral apresentada em (ver [3, 4]), provamos esse teorema usando a teoria de Sturm-Liouville (ver proposição A.2.1 do apêndice A). O Teorema Nuclear Espectral nos permite escrever o produto escalar de quaisquer duas funções φ, ψ de Φ em termos da ação dos kets $|E\rangle$ sobre φ, ψ :

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i,j=1}^2 \langle \varphi | E \rangle_i \langle E | \psi \rangle_j \rho_{ij}(dE), \quad \forall \varphi, \psi \in \Phi. \quad (5.16)$$

Isso nos permite escrever a matriz dos elementos do hamiltoniano e de todas as suas potências entre dois elementos φ, ψ de Φ em termos da ação dos kets $|E\rangle$ sobre φ, ψ :

$$\langle \varphi, H^n \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i,j=1}^2 E^n \langle \varphi | E \rangle_i \langle E | \psi \rangle_j \rho_{ij}(dE), \quad \forall \varphi, \psi \in \Phi, n = 1, 2, \dots \quad (5.17)$$

5.2 Representação da Energia no EHE

Nosso operador unitário U transforma a representação da posição em representação da energia. A ação de U sobre o EHE nos fornece uma representação da energia do EHE. Mostramos que na representação da energia o hamiltoniano H age como o operador multiplicação \tilde{E} . A representação da energia do espaço Φ é definida como

$$\tilde{\Phi} := U\Phi \quad (5.18)$$

Temos que $\tilde{\Phi}$ é um subespaço linear de $L^2(\Lambda, \{\rho_{ij}\})$. Para dotarmos $\tilde{\Phi}$ com a topologia $\tau_{\tilde{\Phi}}$, carregamos a topologia em Φ sobre $\tilde{\Phi}$,

$$\tau_{\tilde{\Phi}} := U\tau_{\Phi}. \quad (5.19)$$

Com esta topologia, o espaço $\tilde{\Phi}$ é um espaço topológico linear. Denotando o espaço dual de $\tilde{\Phi}$ por $\tilde{\Phi}^\times$, temos que

$$U^\times\Phi^\times = (U\Phi)^\times = \tilde{\Phi}^\times \quad (5.20)$$

Se denotarmos $|\tilde{E}\rangle_i \equiv U^\times|E\rangle_i$, então podemos provar que $|\tilde{E}\rangle_i$ é um funcional anti-linear Delta-Schwartz, ou seja, $|\tilde{E}\rangle_i$ é o funcional anti-linear que associa a cada função $\tilde{\varphi}$ o complexo conjugado do seu valor no ponto E (ver proposição A.3.1 do apêndice A),

$$|\tilde{E}\rangle_i : \tilde{\Phi} \mapsto \mathbb{C} \quad (5.21)$$

$$\tilde{\varphi} \mapsto \langle \tilde{\varphi} | \tilde{E} \rangle_i := \overline{\tilde{\varphi}_i(E)}. \quad (5.22)$$

Portanto, o funcional Delta-Schwartz aparece na representação da energia (espectral) do EHE associado ao hamiltoniano. Se escrevermos a ação do funcional Delta-Schwartz como um operador integral, então a função Delta de Dirac aparece no integrando desse operador integral.

Podemos resumir as diferentes realizações no EHE através do seguinte diagrama:

$$\begin{array}{ccccccc} H; & \varphi(x) & \Phi & \subset & L^2(\mathbb{R}) & \subset & \Phi^\times & |E\rangle & \text{representação da posição} \\ & & \downarrow U & & \downarrow U & & \downarrow U^\times & & (5.23) \\ \tilde{E}; & \tilde{\varphi}(E) & \tilde{\Phi} & \subset & L^2(\Lambda, \{\rho_{ij}\}) & \subset & \tilde{\Phi}^\times & |\tilde{E}\rangle & \text{representação da energia} \end{array}$$

Na primeira linha do diagrama (5.23), temos o EHE, o hamiltoniano, as funções de onda e os kets de Dirac na representação da posição. Na linha de baixo, temos os seus homólogos na representação da energia.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, construímos o espaço de Hilbert Equipado do poço potencial

$$\Phi \subset L^2(\mathbb{R}) \subset \Phi^\times \quad (6.1)$$

e sua representação da energia

$$\tilde{\Phi} \subset L^2(\Lambda, \{\rho_{ij}\}) \subset \tilde{\Phi}^\times. \quad (6.2)$$

O espectro do nosso hamiltoniano consiste no conjunto $([0, \infty) \cup \{z_j\}_{j=1}^N)$. Para cada valor de E no espectro de H , construímos um Ket de Dirac que é um auto-funcional generalizado de H cujo correspondente auto-valor generalizado é E . Na representação da energia, $|E\rangle_i$ age como um funcional anti-linear Delta-Schwartz. No espaço Φ , todas as operações algébricas envolvendo H estão bem definidas. Qualquer elemento de Φ pode ser expandido em termos dos auto-kets $|E\rangle_i$ através de uma expansão de Dirac em vetores da base. Dessa maneira, concluímos que uma função de onda fisicamente aceitável não é qualquer elemento do espaço de Hilbert, mas antes ela deve ser um elemento do subespaço Φ .

Durante a procura do EHE do poço potencial, encontramos um método para construir o EHE de uma série de outros problemas semelhantes ao estudado. Para isso devemos ter:

1. Uma expressão para o operador diferencial.
2. Um espaço de Hilbert \mathcal{H} de funções quadrado-integráveis no qual o operador diferencial age.
3. Um domínio $\mathcal{D}(H)$ do espaço de Hilbert no qual o operador diferencial é auto-adjunto.
4. As funções de Green (e o resolvente) deste operador auto-adjunto.
5. A diagonalização do operador auto-adjunto, a expansão em auto-funções dos

elementos de \mathcal{H} em termos as auto-soluções do operador diferencial formal e uma decomposição direta de \mathcal{H} induzida pelo operador auto-adjunto.

6. Um subespaço Φ de $\mathcal{D}(H)$ no qual todos os valores esperados de H são bem definidos e no qual os kets de Dirac agem como funcionais anti-lineares.

7. O espaço de Hilbert equipado $\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^\times$.

Apêndice A

A.1 Construção do EHE

Proposição A.1.1. *As quantidades*

$$\|\varphi\|_{n,m} := \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} dx |(x+1)^n (H+1)^m \varphi(x)|^2}, n, m = 0, 1, 2, \dots, \varphi \in \Phi \quad (\text{A.1})$$

são normas.

Demonstração: Mostraremos que as quantidades (A.1) satisfazem às condições para ser norma. Temos que,

$$\|\varphi + \psi\|_{n,m} \leq \|\varphi\|_{n,m} + \|\psi\|_{n,m}, \quad (\text{A.2})$$

$$\|\alpha\varphi\|_{n,m} = |\alpha| \|\varphi\|_{n,m}, \quad (\text{A.3})$$

$$\|\varphi\|_{n,m} \geq 0, \quad (\text{A.4})$$

$$\text{Se } \|\varphi\|_{n,m} = 0, \text{ então } \varphi = 0. \quad (\text{A.5})$$

Todas as condições são provadas de forma direta. A condição (A.5) é a única em que isso não ocorre. Se $\|\varphi\|_{n,m} = 0$, então

$$(1+x)^n (H+1)^m \varphi(x) = 0 \Leftrightarrow (H+1)^m \varphi(x) = 0. \quad (\text{A.6})$$

Se $m = 0$, então a equação (A.6) implica que $\varphi(x) = 0$. Se $m = 1$ então a equação (A.6) implica que -1 é um auto-valor de H cujo correspondente autovetor é φ . Desde que -1 não é um autovalor de H , φ deve ser o vetor zero. Se $m > 1$, a prova é análoga. ■

Proposição A.1.2. *O espaço Φ se mantém estável sob a ação de H e H é τ_Φ -contínuo.*

Demonstração: Para provarmos que H é τ_Φ -contínuo, basta notarmos que

$$\begin{aligned} \|H\varphi\|_{n,m} &= \|(H+I)\varphi - \varphi\|_{n,m} \\ &\leq \|(H+I)\varphi\|_{n,m} + \|\varphi\|_{n,m} \\ &= \|\varphi\|_{n,m+1} + \|\varphi\|_{n,m} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Provemos agora que Φ é estável sob a ação de H . Seja $\varphi \in \Phi$. Dizer que $\varphi \in \Phi$ é equivalente a dizer que $\varphi \in \mathcal{D}$ e que as normas $\|\varphi\|_{n,m}$ são finitas para cada $n, m = 0, 1, 2, \dots$. Desde que $H\varphi$ também está em \mathcal{D} , e desde que as normas $\|H\varphi\|_{n,m}$ são também finitas (ver equação (A.7)), o vetor $H\varphi$ também está em Φ . ■

Proposição A.1.3. *A função*

$$\begin{aligned} |E\rangle_i &: \Phi \mapsto \mathbb{C} \\ \varphi &\mapsto \langle \varphi | E \rangle_i := \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(x)} \sigma_i(x, E) dx = \overline{(U\varphi)_i(E)}, \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

é um funcional anti-linear em Φ que é um autovetor generalizado de H .

Demonstração: Da definição (A.8), podemos ver que $|E\rangle_i$ é um funcional anti-linear. A fim de mostrar que $|E\rangle_i$ é contínuo, definimos

$$\mathcal{M}(E) := \sup_{x \in \mathbb{R}} |\sigma_i(x; E)|, \quad i = 1, 2. \quad (\text{A.9})$$

Notemos que (A.9) pode não existir. Desde que

$$\begin{aligned}
|\langle \varphi | E \rangle_i| &= |\overline{(U\varphi(E))}_i| \\
&= \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx \overline{\varphi(x)} \sigma_i(x; E) \right|, \quad i = 1, 2 \\
&\leq \int_{-\infty}^{\infty} dx |\overline{\varphi(x)}| |\sigma_i(x; E)|, \quad i = 1, 2 \\
&\leq \mathcal{M}(E) \int_{-\infty}^{\infty} dx |\overline{\varphi(x)}| \\
&= \mathcal{M}(E) \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{1+x} (1+x) |\varphi(x)| \\
&\leq \mathcal{M}(E) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{(1+x)^2} \right)^{1/2} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx |(1+x)\varphi(x)|^2 \right)^{1/2} \\
&= \mathcal{M}(E) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{(1+x)^2} \right)^{1/2} \|\varphi\|_{1,0} \\
&= \mathcal{M}(E) \|\varphi\|_{1,0}, \tag{A.10}
\end{aligned}$$

o funcional $|E\rangle_i$ é contínuo quando Φ é dotado com a topologia τ_Φ . Para mostrar que $|E\rangle_i$ é um autovetor generalizado de H , usamos o fato de que as condições (5.2) e (5.5) são satisfeitas pelos elementos de Φ ,

$$\begin{aligned}
\langle \varphi | H^\times | E \rangle_i &= \langle H\varphi | E \rangle_i \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \overline{\varphi(x)} \sigma_i(x; E) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d\overline{\varphi(x)}}{dx} \sigma_i(x; E) \right]_0^\infty + \frac{\hbar^2}{2m} \left[\overline{\varphi(x)} \frac{d\sigma_i(x; E)}{dx} \right]_{-\infty}^\infty \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty} dx \overline{\varphi(x)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \sigma_i(x; E) \\
&= E \langle \varphi | E \rangle_i. \tag{A.11}
\end{aligned}$$

Analogamente, podemos provar que

$$\langle \varphi | (H^\times)^n | E \rangle_i = E^n \langle \varphi | E \rangle_i. \tag{A.12}$$

■

A.2 Expansão de Dirac em Vetores da Base

Proposição A.2.1. (*Teorema Nuclear Espectral*) *Seja*

$$\Phi \subset L^2(\mathbb{R}) \subset \Phi^\times \quad (\text{A.13})$$

o EHE do hamiltoniano H do poço potencial tal que, Φ permanece invariante sob a ação de H e H é um operador τ_Φ -contínuo em Φ . Então, para cada E no espectro de H , há um autovetor generalizado $|E\rangle_i$ tal que

$$H^\times |E\rangle_i = E |E\rangle_i \quad (\text{A.14})$$

e tal que

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \int_{Sp(H)} \sum_{i,j=1}^2 \langle \varphi | E \rangle_i \langle E | \psi \rangle \rho_{ij}(dE), \quad \forall \varphi, \psi \in \Phi \quad (\text{A.15})$$

e

$$\langle \varphi, H^n \psi \rangle = \int_{Sp(H)} \sum_{i,j=1}^2 E^n \langle \varphi | E \rangle_i \langle E | \psi \rangle \rho_{ij}(dE), \quad \forall \varphi, \psi \in \Phi, n = 1, 2, \dots \quad (\text{A.16})$$

Demonstração: Seja φ e ψ em Φ . Desde que U é unitário,

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \langle U\varphi, U\psi \rangle = \langle \tilde{\varphi}, \tilde{\psi} \rangle. \quad (\text{A.17})$$

As funções de onda $\tilde{\varphi}$ e $\tilde{\psi}$ são elementos de $L^2(\Lambda, \{\rho_{ij}\})$. Portanto seu produto escalar é bem definido,

$$\langle \tilde{\varphi}, \tilde{\psi} \rangle = \int_{Sp(H)} \sum_{i,j=1}^2 \overline{\tilde{\varphi}_i(E)} \tilde{\psi}_j(E) \rho_{ij}(dE). \quad (\text{A.18})$$

Desde que φ e ψ pertencem a Φ , a ação de cada auto-ket $|E\rangle_i$ sobre eles é bem definida,

$$\langle \varphi | E \rangle_i = \overline{\tilde{\varphi}_i(E)}, \quad (\text{A.19})$$

$${}_i \langle E | \psi \rangle = \tilde{\psi}_i(E). \quad (\text{A.20})$$

Substituindo as equações (A.19) e (A.20) em (A.18) e a equação (A.18) em (A.17) obtemos a equação (A.15). A prova de (A.16) é similar:

$$\begin{aligned}
\langle \varphi, H^n \psi \rangle &= \langle U \varphi, U H^n U^{-1} U \psi \rangle \\
&= \langle \tilde{\varphi}, \tilde{E}^n \tilde{\psi} \rangle \\
&= \int_{Sp(H)} \sum_{i,j=1}^2 \overline{\tilde{\varphi}_i(E)} (\tilde{E}^n \tilde{\psi}_j)(E) \rho_{ij}(dE) \\
&= \int_{Sp(H)} \sum_{i,j=1}^2 E^n \overline{\tilde{\varphi}_i(E)} \tilde{\psi}_j(E) \rho_{ij}(dE) \\
&= \int_{Sp(H)} \sum_{i,j=1}^2 E^n \langle \varphi | E \rangle_i \langle E | \psi \rangle_j \rho_{ij}(dE). \tag{A.21}
\end{aligned}$$

■

A.3 Representação da Energia do EHE

Proposição A.3.1. *A representação da energia $|\tilde{E}\rangle_i$ do auto-ket $|E\rangle_i$ é um funcional Delta-Schwartz.*

Demonstração: Desde que

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{\varphi} | U^\times | E \rangle_i &= \langle U^{-1} \tilde{\varphi} | E \rangle_i \\
&= \langle \varphi | E \rangle_i \\
&= \int_0^\infty \overline{\varphi(x)} \sigma_i(x; E) dx \quad i = 1, 2 \\
&= \overline{\tilde{\varphi}_i(E)}, \tag{A.22}
\end{aligned}$$

o funcional $U^\times | E \rangle_i = |\tilde{E}\rangle_i$ é o funcional Delta-Schwartz. ■

Referências Bibliográficas

- [1] G. Teschl. *Mathematical Methods in Quantum Mechanics*. RI:American Mathematical Society, Providence, 2006.
- [2] N. Dunford and J. Schwartz. *Linear Operators*, volume II. Interscience Publishers, New York, 1963.
- [3] I. M. Gelfand and N. Y. Vilenkin. *Generalized Functions*, volume IV. Academic Press, New York, 1964.
- [4] K. Maurin. *Generalized Eigenfunction Expansions and Unitary Representations of Topological Groups*. Polish Scientific Publishers, Warsaw, 1968.
- [5] R. de la Madrid. *Quantum Mechanics in Rigged Hilbert Space Language*. PhD thesis, Universidad de Valladolid, May 2001.
- [6] F. Schwabl. *Quantum Mechanics*. Springer, Berlin, 2007.
- [7] A. Bohm. *Quantum Mechanics: Foundations and Applications*. Springer-Verlag, New York, 1994.
- [8] B. Diu C. Cohen-Tannoudji and F.Laloë. *Quantum Mechanics*. Wiley, New York, 1977.
- [9] R. G. Newton. *Scattering Theory of Waves and Particles*. McGraw-Hill, New York, 1966.
- [10] J. R. Taylor. *Scattering Theory*. John Wiley and Sons, Inc., New York, 1972.
- [11] J. E. Roberts. The Dirac bra and ket formalism. *J. Math. Phys*, 7:1097, 1966.

- [12] H. Prado G. Palma and E. G. Reyes. Completeness in Quantum Mechanics and the Weyl-Titchmarsh-Kodaira theorem. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 43(25), 2010.