ESTUDO DE HAMILTONIANAS DE DIRAC POR MÉTODOS DE ANÁLISE FUNCIONAL

por

Ricardo Schwartz Schor

Tese submetida como requisito para obtenção do grau de

MESTRE EM CIÊNCIAS

(FÍSICA)

Belo Horizonte - M. G. - Agôsto de 1972.

O F E R E C I M E N T O

A

Heloíza Helena, minha mulher

e a meus familiares.

SUMÁRIO

Nêste trabalho, estudamos a hamiltoniana de Dirac para uma partícula livre e estabelecemos seu caráter auto-adjunto. Para uma partícula em um campo externo, apresentamos condições na energia potencial para que a hamiltoniana possa ser definida por uma forma quadrática em um espaço de Hilbert separável. Se o campo externo $V(\vec{r})$ fôr central, com $|V(\vec{r})|$ monótona decrescente, é necessário têrmos $|V(\vec{r})| \leqslant cr^{-1} + d$, para algum c,d não-negativos, ao passo que $c < (2/\pi)$ é condição suficiente para que a hamiltoniana possa ser definida da maneira mencionada acima.

Estudamos ainda o espectro da hamiltoniana para uma partícula em um campo externo, e mostramos que se $V(\vec{r})$ fôr central, com $|V(\vec{r})|$ monótona decrescente, é suficiente têrmos $|V(\vec{r})| \leqslant cr^{-1}$ com $c < 1/2$ para que o espectro tenha as mesmas características do encontrado experimentalmente.

Finalmente, estudamos condições para que a hamiltoniana para um sistema de N partículas em interação possa ser definida por uma forma quadrática. Se a energia potencial associada ao sistema fôr da forma $V = \sum_{i<j}^{N} V_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ onde cada $V_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ é central, com $|V_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)|$ monótona decrescente, é suficiente que se tenha $|V_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)| \leqslant$ $\leqslant c|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{-1} + d$, com $c < 4/\pi N(N-1)$.

A G R A D E C I M E N T O S

Ao Professor Michael Louis O' Carrol, pela firme orientação desta tese, bem como por seu interêsse em meu futuro.

Aos Professores Márcio Quintão Moreno e Ramayana Gazzinelli, pela amizade e incentivo, e a quem devo a possibilidade da realização dêste trabalho.

Ao Professor Francisco de Assis Magalhães Gomes, em reconhecimento por sua incansável luta em pról do desenvolvimento das Ciências Exatas em nossa Universidade.

Ao Professor Manoel Lopes Siqueira, por sua amizade e constante incentivo, e que despertou em mim o gôsto pela Mecânica Quântica.

A Dan Marchesin, por sua inestimável ajuda e interêsse em minha carreira científica, e cuja amizade muito me honra.

A Rosa Schwartz, pelo carinho com que me recebeu em sua casa, durante a elaboração dêste trabalho.

À Comissão Permanente de Tempo integral e Dedicação Exclusiva da UFMG - COPERTIDE - que, ao me conceder a oportunidade de trabalhar em regime de tempo integral e dedicação exclusiva, proporcionou as condições indispensáveis à realização desta tese.

Í N D I C E

C A P Í T U L O I

" HAMILTONIANA PARA UMA PARTÍCULA LIVRE "

A)Descrição de Sistemas Físicos em M.Q.

B)A Hamiltoniana de Dirac para uma partícula livre.

C)Caráter Auto-Adjunto de Ho.

D)Espectro de Ho .

E)Restrição à Parte positiva do Espectro. A nova Hamiltoniana Ho .

A) Descrição de Sistemas Físicos em Mecânica Quântica:

Em Mecânica Quântica, admite-se que o estado de um sistema é determinado por um raio em um espaço de Hilbert separável; dado o raio, podemos tomar qualquer vetôr sôbre êle, para representar o estado do sistema, sendo costume escolhê-lo com norma igual a 1. Mas mesmo assim, o vetôr não é univocamente determinado, pois ainda resta um fator de fase arbitrário.

Remarquemos entretanto, que a representação de estados descrita acima só é válida quando se trata dos chamados " estados puros". No caso geral, a especificação é feita através de um operador W, denominada "matriz densidade"; admite-se que tal operador seja auto-adjunto positivo, e perten ça a classe $\mathcal{T}$ ("Trace class"), com $Tr(W)=1_0$. Se além disso, W fôr uma projeção sôbre um subespaço de 1 dimensão W fica completamente determinado se conhecermos êste subespaço, isto é, êste raio no espaço de Hilbert. Nêste último caso dizemos que W representa um "estado puro", e vemos, portanto, que êstes podem ser caracterizados por raios. Para uma boa introdução à "matriz densidade" e sua relação com os estados de um sistema, consulte |1|, capítulo V.

Em física clássica, se conhecemos o estado de um sistema físico, podemos determinar, com infinita precisão todos os valores das grandezas físicas associadas ao sistema. Em Mecânica Quântica, o conhecimento do estado nos dá muito menos informações. De fato, só é possível conhecermos a distribuição de probabilidade para cada grandeza física associada ao sistema, de acôrdo com o seguinte esquema:

a) A cada grandeza física associamos um operador auto-adjunto A, com a decomposição espectral

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

b) Se o sistema se encontra em um estado puro $\Psi, \|\Psi\|=1$ a função característica da distribuição de probabilidade para a grandeza associada a A é dada por $f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda t} \, d\|E_\lambda \Psi\|^2$. Conhecida esta função, a distribuição é imediatamente determinada.

Quanto a evolução de um estado com o tempo ela é determinada por um grupo a um parâmetro de operadores unitários $U(t)$, que supomos contínuo na topologia forte: se $\Psi(0)$

representa o estado do sistema no instante t=0, $\psi(t) = U(t)\psi(0)$ nos dará o estado no instante t .

Definiremos a Hamiltoniana do sistema em têrmos do gerador do grupo acima; para isto, precisamos do teorema:

Teorema (de Stone) : Seja U(t) um grupo a um parâmetro contínuo na topologia forte.

Seja $\mathcal{D}_U = \{\psi$ t.q. $t^{-1}[U(t)-1]\psi$ possui um limite quando $t \to 0\}$. Seja H um operador definido em $\mathcal{D}_U$, por $H\psi = -i \lim_{t\to 0} t^{-1}[U(t)-1]\psi$. Então, H é auto-adjunto e $U(t) = e^{iHt}$ (para a definição de função de um operador, veja o Apêndice II).

Inversamente, seja H auto-adjunto. Então, $U(t) = e^{iHt}$ é um grupo a um parâmetro contínuo na topologia forte, e tem-se $\mathcal{D}_U = D(H) =$ = domínio do operador H.

Demonstração: Veja |2|, pgs. 380-388. ■

O operador H no teorema de Stone é chamado gerador do grupo U(t).

Podemos agora dar a seguinte

Definição: A Hamiltoniana de um sistema físico é o gerador com o sinal trocado do grupo das translações no tempo, para êste sistema.

Obs.: A definição acima é correta quando usamos o sistema de unidades tal que $\hbar = 1$, que passamos a adotar daqui para frente.

B) A Hamiltoniana de Dirac para uma partícula livre.

Nesta seção, procuraremos dar uma "derivação"- não rigorosa - da Hamiltoniana de Dirac para uma partícula livre. Para isto, seguimos de perto |3|, Capítulo 4.

Comecemos por determinar a equação de movimento para o vetor $U(t)\psi$, que descreve o estado do sistema no instante t. Para uma realização concreta do espaço de Hilbert tomaremos $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) = \{\psi : \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \longmapsto \psi(\vec{x}) \in \mathbb{C} \ \text{t.q.} \int |\psi(\vec{x})|^2 d^3x < \infty\}$.

A relação entre o operador evolução e a Hamiltoniana é $U(t)=e^{-iHt}$, e tem-se $\forall \psi \in D(H)$, $H\psi = i \lim_{t\to 0} t^{-1}[U(t)-1]\psi$. Como $U(t)$ e H comutam, $U(t)H \subset HU(t)$, vemos que se $\psi \in D(H)$ então $U(t)\psi \in D(H)$, e $HU(t) = U(t)H$. Portanto, se $\psi \in D(H)$, temos $HU(t)\psi = i \lim_{\Delta t\to 0} (\Delta t)^{-1}[U(t+\Delta t) - U(t)]\psi$, onde utilizamos a propriedade de grupo $U(\Delta t)U(t) = U(t+\Delta t)$. Observemos que o limite acima é o limite na norma, isto é,

$$\lim_{\Delta t\to 0} \| i(\Delta t)^{-1}[U(t+\Delta t)-U(t)]\psi - HU(t)\psi\| = 0$$

Portanto, temos

$$\lim_{\Delta t\to 0} \int |i(\Delta t)^{-1}[U(t+\Delta t)\psi - U(t)\psi](\vec{x}) - [HU(t)\psi](\vec{x})|^2 d^3x = 0$$

Admitindo que a função integranda tem um limite quando $\Delta t \to 0$, para cada $\vec{x}$, e usando o lema de Fatou, vem:

$\int \lim_{\Delta t\to 0} |i(\Delta t)^{-1}[U(t+\Delta t)\psi - U(t)\psi](\vec{x}) - [HU(t)\psi](\vec{x})|^2 d^3x = 0$. E como a integranda é positiva, concluímos que

$\lim_{\Delta t\to 0} |i(\Delta t)^{-1}[U(t+\Delta t)\psi - U(t)\psi](\vec{x}) - [HU(t)\psi](\vec{x})| = 0$, para quase todo $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$.

Introduzindo a notação $\psi(\vec{x},t) = [U(t)\psi](\vec{x})$, a relação acima se escreve, notando que $[HU(t)\psi](\vec{x}) = [U(t)H\psi](\vec{x}) = (H\psi)(\vec{x},t)$

$$\lim_{\Delta t \to 0} \left| i(\Delta t)^{-1}[\psi(\vec{x},t+\Delta t) - \psi(\vec{x})] - (H\psi)(\vec{x},t)\right| = 0$$

ou seja $$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi \qquad (1.)$$

Usaremos o seguinte processo para se obter a Hamiltoniana: procuramos uma equação da forma (1) que seja compatível com a relação energia-momentum, respeitando a correspondência $E \to i\partial/\partial t$ e $\vec{p} \to -i\vec{\nabla}$.

Apesar da equação (1) ter sido deduzida admitindo que $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$, é fácil verificar que sua forma fica inalterada se tomarmos

$$\mathcal{H} = (L^2(\mathbb{R}^3))^N = \left\{\psi : \vec{x}\in\mathbb{R}^3 \mapsto \psi(\vec{x})\in\mathbb{C}^N \text{ t.q. } \sum_{l=1}^{N}\int|\psi_l(\vec{x})|^2 d^3x < \infty, \text{onde } \psi_l(\vec{x})\right.$$

é a l-ésima componente de $\psi(\vec{x})$ }. Para efeito de generalidade, trabalharemos nêste espaço $\mathcal{H}$, e procuraremos determinar N. Encararemos $\psi(\vec{x})$ como um vetôr coluna, com N linhas.

Observemos que a equação (1) contém uma derivada de primeira ordem em relação ao tempo. Com base em considerações relativistas, podemos suspeitar que (1) deva conter também $\partial/\partial x^k$, $k=1,2,3$, pois as coordenadas espaciais e a coordenada temporal são tratadas com a mesma igualdade, em relatividade. Notando que a equação deve ser linear, podemos admitir que ela seja da forma

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \sum_{k=1}^{3}\alpha^k\frac{\partial\psi}{\partial x^k} + im\beta\psi = 0 \qquad (2)$$

pois essa é a forma mais geral de uma equação diferencial linear de primeira ordem. Não nos esqueçamos que ψ em (2) é úma coluna de ordem N. A derivada é interpretada como

$$(\partial\psi/\partial x^{\mu})_{\ell} = \frac{\partial\psi_{\ell}}{\partial x^{\mu}} \;,\; \mu = 0,1,2,3 \quad e \quad x^{0} = t .$$

α^{k} e β são matrizes $N\times N$, cujas propriedades serão determinadas; m é uma constante numérica que ressaltamos em (2) por conveniência; ela será identificada posteriormente com a massa da partícula.

Impomos agora a condição de que a densidade de probabilidade seja dada por $\rho = \sum_{\ell=1}^{n} \bar{\psi}_{\ell}\psi_{\ell} = \psi^{+}\psi$ em analogia com o caso não-relativista. Observe que ρ é definida positiva. Admitimos também que temos uma equação de continuidade $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0$. Vejamos então como estas suposições restringem as possíveis matrizes α^{k} e β . Tomando o conjugado hermitiano de (2), temos :

$$\frac{\partial\psi^{+}}{\partial t} + \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial\psi^{+}}{\partial x^{k}} (\alpha^{k})^{+} - im\psi^{+}\beta^{+} = 0 \tag{3}$$

Uma equação semelhante em forma à equação de continuidade acima pode ser obtida multiplicando-se (2) por ψ^{+} à esquerda e (3) por ψ à direita, e adicionando-se membro a membro. O resultado é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^{+}\psi) + \sum_{k=1}^{3}\left[\psi^{+}\alpha^{k}\frac{\partial\psi}{\partial x^{k}} + \frac{\partial\psi^{+}}{\partial x^{k}}(\alpha^{k})^{+}\psi\right] + im(\psi^{+}\beta\psi - \psi^{+}\beta^{+}\psi) = 0 \tag{4}$$

Para que (4) se assemelhe à equação de continuidade, o último têrmo do primeiro membro deve ser nulo, já que não contém derivadas. Isto é satisfeito se $\beta = \beta^{+}$, isto é, β deve ser Hermitiana. Para identificar o segundo têrmo de (4) com uma divergência, pomos $\alpha^{k} = (\alpha^{k})^{+}$ —— também as matrizes α^{k} são hermitianas. Observemos, de passagem, que as matrizes não devem depender das coordenadas $(t,\vec{x})$, devido a homogeneidade do espaço-tempo; elas são, portanto, constantes. Com os comentários acima, podemos escrever (4) na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^{+}\psi) + \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x^{k}}(\psi^{+}\alpha^{k}\psi) = 0 \qquad (5)$$

Com $\rho = \psi^{+}\psi$ como acima, e $j^{k} = \psi^{+}\alpha^{k}\psi$, a equação (5)nos dá a equação de continuidade que queríamos. Estas quantidades ' são realmente bem definidas, pois (ρ, j^{k}) se transforma como um quadrivetor.(apenas para transformações de Lorentz que não envolvam reversão no tempo), como é mostrado em |3|, pg.76-77.

Novas restrições nas matrizes β, α^{k} são obtidas quando impomos a condição da equação (2) ser compatível com a relação energia-momentum para uma partícula livre: $E^2 = p^2+m^2$. Com a correspondência $E \rightarrow i\partial/\partial t$ e $\vec{p} \rightarrow -i\vec{\nabla}$,esta relação nos conduz à equação

$$(\Box + m^2)\psi = 0 \quad , \text{onde } \Box = \partial^2/\partial t^2 - \nabla^2 \qquad (6)$$

Se tôda solução de (2) fôr também solução de (6), a compatibilidade referida no parágrafo anterior será realizada. Vejamos qual o efeito disto nas matrizes β, α^{k} . Aplicando o operador

$$\frac{\partial}{\partial t} - \sum_{k=1}^{3} \alpha^{k} \frac{\partial}{\partial x^{k}} - im\beta$$

em (2) vem, depois de

algumas manipulações:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \sum_{k=1}^{3}\sum_{l=1}^{3}\frac{1}{2}\left(\alpha^k\alpha^l+\alpha^l\alpha^k\right)\frac{\partial^2\psi}{\partial x^k\partial x^l} - m^2\beta^2\psi + im\sum_{k=1}^{3}\left(\alpha^k\beta+\beta\alpha^k\right)\frac{\partial\psi}{\partial x^k} \qquad (7)$$

onde simetrizamos o têrmo $\alpha^k\alpha^l$, o que é permissível, porque $\partial/\partial x^k$ e $\partial/\partial x^l$ comutam. Para que (7) seja equivalente a (6), seu segundo membro deve se reduzir a $\nabla^2\psi - m^2\psi$. Isto implica nas seguintes condições:

$$\frac{1}{2}\left(\alpha^k\alpha^l+\alpha^l\alpha^k\right)=\delta^{kl} \;;\; \alpha^k\beta+\beta\alpha^k=0 \;;\; (\alpha^k)^2=\beta^2=I \qquad (8)$$

Portanto, as matrizes β, α^k além de serem hermitianas, devem anti-comutar, e ter o quadrado igual a matriz unidade.

Procuremos agora determinar N. Da segunda relação em (8), tiramos:

$$\det(\alpha^k)\times\det(\beta) = \det(-I)\times\det(\beta)\times\det(\alpha^k) \qquad (9)$$

Da terceira relação em (8), podemos concluir que as matrizes β, α^k têm determinante diferente de zero. Então, (9) implica: $(-1)^N = 1$, donde N deve ser par. Isto exclui a possibilidade de β, α^k serem números complexos e ψ ser uma função com uma componente. Para determinarmos o valor preciso de N, é conveniente introduzirmos matrizes γ^μ , por

$$\gamma^0=\beta \;;\; \gamma^k=\beta\alpha^k, \; k=1,2,3 \qquad (10)$$

As relações inversas são $\beta=\gamma^0$, $\alpha^k=\gamma^0\gamma^k$, $k=1,2,3$.

Observe que γ^0 é hermitiana, ao passo que γ^k é anti-hermitiana ($k=1,2,3$). De (10) e (8), tiramos:

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} I \qquad (11)$$

onde $g^{00} = +1$; $g^{kk} = -1$, $k=1,2,3$ e $g^{\mu\nu} = 0$, $\mu \neq \nu$.

A razão de têrmos introduzido as matrizes acima, reside no fato delas formarem uma álgebra bem conhecida— a álgebra de Clifford(cuja característica são as relações (11)) . Uma álgebra de Clifford existe em qualquer espaço munido de uma métrica $g^{\mu\nu}$. Se n é a dimensão dêste espaço, a dimensão da álgebra é 2^n . Quando n é par, $n=2m$, apenas a identidade comuta com todos os elementos da álgebra, de forma que, a menos de equivalências, existe uma e apenas uma representação irredutível, realizada por meio de matrizes r x r , com $r= 2^m$. No nosso caso, temos n=4, m=2 e r=4.Logo, $\{\gamma^\mu\}$ podem ser identificados com matrizes 4 x 4 , e da mesma forma β, α^k serão 4 x 4 . Concluímos então que N = 4.

Para uma forma explícita de β, α^k , podemos tomar:

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix} \qquad (12)$$

onde I representa a matriz unidade 2 x 2 e σ^k são as matrizes de Pauli. A verificação de que (12) realmente satisfaz às condições deduzidas anteriormente é trivial.

Em resumo, vimos (comparando (2) e (1)que a hamiltoniana de Dirac para uma partícula livre é um operador a gindo em $(L^2(\mathbb{R}^3))^4$, e que formalmente pode ser escrita como:

$$H_0 = -i\sum_{k=1}^{3}\alpha^k \frac{\partial}{\partial x^k} + m\beta \equiv -i\vec{\alpha}.\vec{\nabla} + m\beta \qquad (13),$$

onde β, α^k são matrizes 4 x 4 de números complexos. A equação (2) é conhecida como equação de Dirac. Em muitas circunstâncias, esta equação fornece uma boa descrição para partículas com spin 1/2.

Nas próximas seções, procuraremos definir precisamente a hamiltoniana H_0 , bem como estudar suas propriedades.

C) Caráter Auto-Adjunto de H_0 .

Definimos a Hamiltoniana de Dirac H_0 para uma partícula livre como o máximo operador de multiplicação por $\vec{\alpha}.\vec{p} + m\beta$ no espaço dos momenta. Precisemos melhor esta definição.

Em primeiro lugar, tomamos como espaço de Hilbert no qual age H_0 , o espaço $\mathcal{H} = (L^2(\mathbb{R}^3))^4$, consistindo das aplicações (denominadas spinores)

$\psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}^4$ t.q. $\sum_{\ell=1}^{4}\int |\psi_\ell(\vec{x})|^2 d^3x < \infty$, onde $\psi_\ell(\vec{x})$ denota a l-ésima componente de $\psi(\vec{x})$, que será visto como um vetôr coluna. O produto escalar em $\mathcal{H}$ é:

$$(\psi,\phi) = \sum_{\ell=1}^{4}\int \overline{\psi_\ell(\vec{x})}\,\phi_\ell(\vec{x})\, d^3x = \int \psi(\vec{x})^+ \phi(\vec{x})\, d^3x$$

onde $\psi(\vec{x})^+$ denota o conjugado hermitiano de $\psi(\vec{x})$. A norma de ψ é dada por $\|\psi\|^2 = \int \psi(\vec{x})^+\psi(\vec{x})\, d^3x = \int |\psi(\vec{x})|^2 d^3x$

onde pusemos $|\psi(\vec{x})|^2 = \psi(\vec{x})^+ \psi(\vec{x})$.

Denotamos por U o operador de Fourier-Plancherel em $\mathcal{H}$: $U\psi = \hat{\psi}$ onde $\hat{\psi}_\ell(\vec{p}) = (2\pi)^{-3/2}\int e^{-i\vec{p}.\vec{x}}\,\psi_\ell(\vec{x})\,d^3x$, $\ell = 1,2,3,4$.

Esta integral deve ser entendida como o limite, na norma de $L^2(\mathbb{R}^3)$, de integrais sôbre bolas de raio n ,quando n $\longrightarrow \infty$. U é um operador unitário, como mostra |2|, pg. 294. É conveniente pensarmos em $U\mathcal{H}$ como um espaço distinto de $\mathcal{H}$,que denotaremos por $\hat{\mathcal{H}}$, e o chamaremos de espaço dos momenta(em contraposição, $\mathcal{H}$ será o espaço das posições). Por construção, $U: \mathcal{H} \longrightarrow \hat{\mathcal{H}}$ é unitário.

Definamos em $\hat{\mathcal{H}}$, o operador $\hat{H}_0$ por

$$(\hat{H}_0\hat{\psi})(\vec{p}) = (\vec{\alpha}.\vec{p} + m\beta)\hat{\psi}(\vec{p})$$

(produto de matrizes)

O domínio de $\hat{H}_0$, $D(\hat{H}_0)$, consiste de todos os spinores $\hat{\psi} \in \hat{\mathcal{H}}$ para os quais

$$\int \hat{\psi}(\vec{p})^+ (\vec{\alpha}.\vec{p} + m\beta)^+ (\vec{\alpha}.\vec{p} + m\beta)\hat{\psi}(\vec{p})\,d^3p < \infty$$

Observemos que $\beta, \vec{\alpha}$ sendo hermitianas, a matriz $(\vec{\alpha}.\vec{p} + m\beta)$ também será, para cada $\vec{p}$. Utilizando as relações (8) de 1.b, temos que

$$(\vec{\alpha}.\vec{p} + m\beta)^2 = \left(\sum_{i=1}^{3}\alpha_i p_i\right)\left(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j p_j\right) + \left(\sum_{i=1}^{3}\alpha_i p_i\right)(m\beta) + (m\beta)\left(\sum_{i=1}^{3}\alpha_i p_i\right) +$$
$$+ m^2\beta^2 = \sum_{i,j=1}^{3}\alpha_i\alpha_j p_i p_j + \sum_{i=1}^{3} m p_i(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i) + m^2 I = (p^2 + m^2)\, I$$

onde I é a matriz unidade 4 x 4. Logo, temos

$$D(\hat{H}_0) = \left\{\hat{\psi} \in \hat{\mathcal{H}} \text{ t.q. } \int (p^2 + m^2)|\hat{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p < \infty\right\}$$

Definiremos a hamiltoniana H_o em $\mathcal{H}$ por $H_o = U^{-1}\hat{H}_o U$ com $D(H_o) = U^{-1}D(\hat{H}_o)$. Queremos mostrar que H_o é auto-adjunto. Para isto, basta mostrarmos que $\hat{H}_o$ o é (veja Teor. A1.4)

Comecemos notando que $D(\hat{H}_o)$ é denso em $\hat{\mathcal{H}}$, pois êle inclui o conjunto $(C_o^\infty(\mathbb{R}^3))^4$, formado pelos spinores cujas quatro componentes são aplicações infinitamente diferenciáveis de suporte compacto. Sendo $C_o^\infty(\mathbb{R}^3)$ denso em $L^2(\mathbb{R}^3)$ (veja, p.ex., |4| pg. 13), decorre imediatamente que $(C_o^\infty(\mathbb{R}^3))^4$ é denso em $(L^2(\mathbb{R}^3))^4 = \hat{\mathcal{H}}$, donde $D(\hat{H}_o)$ também é denso em $\hat{\mathcal{H}}$.

$\hat{H}_o$ é um operador simétrico. De fato, $\forall\, \hat{\psi}, \hat{\phi} \in D(\hat{H}_o)$ temos:

$$(\hat{H}_o\hat{\psi}, \hat{\phi}) = \int [(\vec{\alpha}.\vec{p} + m\beta)\hat{\psi}(\vec{p})]^+ \hat{\phi}(\vec{p})\, d^3p = \int \hat{\psi}(\vec{p})^+ (\vec{\alpha}.\vec{p} + m\beta)^+ \hat{\phi}(\vec{p})\, d^3p =$$

$$= \int \hat{\psi}(\vec{p})^+ (\vec{\alpha}.\vec{p} + m\beta) \hat{\phi}(\vec{p})\, d^3p = (\hat{\psi}, \hat{H}_o\hat{\phi})$$

Mostremos agora que $\hat{H}_o$ é fechado. Seja $\{\hat{\psi}_n\} \subset D(\hat{H}_o)$ t.q. $\hat{\psi}_n \to \hat{\psi}$ e $\hat{H}_o\hat{\psi}_n \to \hat{\phi}$. Temos então

$$\int |\hat{\psi}_n(\vec{p}) - \hat{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p \to 0 \quad e \quad \int |(\vec{\alpha}.\vec{p} + m\beta)\hat{\psi}_n(\vec{p}) - \hat{\phi}(\vec{p})|^2 d^3p \to 0 \qquad (1)$$
$$n \to \infty$$

Para cada $\hat{\psi} \in \hat{\mathcal{H}}$, introduzamos o spinor $\hat{\psi}^k$, definido por

$$\hat{\psi}_\ell^k(\vec{p}) = \begin{cases} \hat{\psi}_\ell(\vec{p}) & se\ |\vec{p}| \leq k \\ 0 & se\ |\vec{p}| > k \end{cases} \qquad \ell = 1,2,3,4$$

As relações (1) acima implicam que

$$\hat{\psi}_n^k \to \hat{\psi}^k \quad e \quad \hat{H}_o\hat{\psi}_n^k \to \hat{\phi}^k, \quad n \to \infty .$$

Mas $\hat{H}_0 \hat{\psi}_n^k \longrightarrow \hat{H}_0 \hat{\psi}^k$, $n \longrightarrow \infty$. De fato $\hat{\psi}^k \in D(\hat{H}_0)$, como é fácil verificar, e temos:

$$\int |\hat{H}_0 \hat{\psi}_n^k(\vec{p}) - \hat{H}_0 \hat{\psi}^k(\vec{p})|^2 d^3p = \int |(\vec{\alpha}.\vec{p} + m\beta)(\hat{\psi}_n^k(\vec{p}) - \hat{\psi}^k(\vec{p}))|^2 d^3p =$$

$$= \int (p^2+m^2) |\hat{\psi}_n^k(\vec{p}) - \hat{\psi}^k(\vec{p})|^2 d^3p = \int_{|\vec{p}| \leq k} (p^2+m^2) |\hat{\psi}_n(\vec{p}) - \hat{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p \leq$$

$$\leq (k^2+m^2) \int |\hat{\psi}_n(\vec{p}) - \hat{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p \longrightarrow 0 \quad , n \longrightarrow \infty$$

Portanto, para cada k, temos $\hat{H}_0 \hat{\psi}^k = \hat{\phi}^k$, i.é, $(\hat{H}_0 \hat{\psi})(\vec{p}) = \hat{\phi}(\vec{p})$, desde que $|\vec{p}| \leq k$. Como k é arbitrário, concluímos que $\hat{H}_0 \hat{\psi} = \hat{\phi}$. Logo, $\hat{H}_0$ é fechado.

Para mostrarmos que $\hat{H}_0$ é auto-adjunto, basta verificarmos que $\hat{H}_0^* \hat{\psi} = \alpha \hat{\psi}$, $\mathrm{Im}\,\alpha \neq 0 \Longrightarrow \hat{\psi} = 0$, (veja Teor. Al. 3). Suponhamos então que $\hat{H}_0^* \hat{\psi} = \alpha \hat{\psi}$, $\mathrm{Im}\,\alpha \neq 0$. Então, $\forall \hat{\phi} \in D(\hat{H}_0)$, temos:

$$(\hat{\phi}, \hat{H}_0^* \hat{\psi}) = \alpha (\hat{\phi}, \hat{\psi}) = (\hat{H}_0 \hat{\phi}, \hat{\psi})$$

Em particular, considerando $\hat{\phi}^k$, temos

$$(\hat{H}_0 \hat{\phi}^k, \hat{\psi}) = \alpha (\hat{\phi}^k, \hat{\psi}) \, , \text{ logo } (\hat{H}_0 \hat{\phi}^k, \hat{\psi}^k) = \alpha (\hat{\phi}^k, \hat{\psi}^k)$$

Notando que $\hat{\psi}^k \in D(\hat{H}_0)$, temos:

$$(\hat{\phi}^k, (\hat{H}_0 - \alpha) \hat{\psi}^k) = 0$$

Como $D(\hat{H}_0)$ é denso em $(L^2(\mathbb{R}^3))^4$, o conjunto de tôdas as funções da forma $\hat{\phi}^k$, com $\hat{\phi} \in D(\hat{H}_0)$ forma um conjunto denso em $(L^2(B_k))^4$, onde $B_k = \{ \vec{p} \in \mathbb{R}^3 \text{ t.q. } |\vec{p}| \leq k \}$. Observando que $(\hat{H}_0 \hat{\psi}^k - \alpha \hat{\psi}^k) \in (L^2(B_k))^4$, a relação acima implica

$$\hat{H}_0 \hat{\psi}^k = \alpha \hat{\psi}^k \, ,$$

e como h é arbitrário, $\hat{H}_0\hat{\varphi} = \alpha\hat{\varphi}$. Portanto,

$$(\hat{\varphi}, \hat{H}_0\hat{\varphi}) = \alpha(\hat{\varphi}, \hat{\varphi}) \quad , \text{ e } \quad \overline{(\hat{\varphi}, \hat{H}_0\hat{\varphi})} = \bar{\alpha}\,(\hat{\varphi}, \hat{\varphi}) .$$

Mas como $\hat{H}_0$ é simétrico, $\overline{(\hat{\varphi}, \hat{H}_0\hat{\varphi})} = (\hat{H}_0\hat{\varphi}, \hat{\varphi}) = (\hat{\varphi}, \hat{H}_0\hat{\varphi})$. Donde

$(\alpha - \bar{\alpha})\|\hat{\varphi}\|^2 = 0 \Longrightarrow (\operatorname{Im}\alpha)\|\hat{\varphi}\|^2 = 0 \Longrightarrow \hat{\varphi} = 0$ por ser $\operatorname{Im}\alpha \neq 0$.

Concluímos então que $\hat{H}_0$ é auto-adjunto, e por consequência H_0 também é.

D) Espectro de H_0

Vamos investigar agora o espectro da hamiltoniana H_0, para uma partícula livre. Recordemos que o espectro $\sigma(T)$ de um operador fechado T é o complemento em $\mathbb{C}$ do conjunto do resolvente $P(T)$. $P(T)$ é definido como o conjunto de todos os números complexos z para os quais o resolvente $(T-z)^{-1} = R(z,T)$ exista como um operador limitado, definido em todo $\mathcal{H}$.

Se T é auto-adjunto, $\sigma(T)$ é um subconjunto de $\mathbb{R}$. De fato, pelo que foi mostrado no apêndice A1 , $(T-\alpha)^{-1}$ existe, com domínio $\mathcal{H}$ para qualquer α , com $\operatorname{Im}\alpha \neq 0$. Para ver que êste inverso é limitado, basta lembrar que

$\|(T-\alpha)\psi\| \geqslant (\operatorname{Im}\alpha)\|\psi\| \quad \forall \psi \in D(T)$ (veja Lema A1.2). Logo,

$$P(T) \supset \mathbb{C} - \mathbb{R} .$$

Um resultado útil que usaremos abaixo é o se guinte. Se dois operadores fechados são unitàriamente equivalentes, i.é, $S=U^{-1}TU$, com U unitária, então $\sigma(T)=\sigma(S)$. Realmente, se $\alpha\in P(T)$, então $(S-\alpha)^{-1}$ existe, como é fácil verificar. Ademais,

$$(S-\alpha)^{-1}=(U^{-1}TU-\alpha)^{-1}=[U^{-1}(T-\alpha)U]^{-1}=U^{-1}(T-\alpha)^{-1}U=U^{-1}R(\alpha,T)U$$

Como o membro direito é um operador limitado definido em todo $\mathcal{H}$, o mesmo acontece com $(S-\alpha)^{-1}$. Logo, $P(T)\subset P(S)$. Com um argumento simétrico, concluímos então que $P(T)=P(S)$.

Portanto, $\sigma(H_0)$ será determinado desde que conheçamos o espectro de qualquer operador que seja unitariamente equivalente a H_0. Êste fato é realmente útil, pois existe uma transformação unitária que torna H_0 um operador muito simples. Com efeito, como é mostrado em |3|, pgs.91-95, existe um operador unitário U_{FW} tal que $H_0'=U_{FW}^{-1}H_0U_{FW}$ age da seguinte maneira:

$(H_0'\psi)(\vec{p})=\beta(p^2+m^2)^{1/2}\psi(\vec{p})$, $\forall\psi\in D(H_0')=U_{FW}^{-1}D(H_0)$. O operador U_{FW} é conhecido como a transformação de Foldy - Wouthuysen.

Concentremos então em H_0'. Vamos mostrar que $\sigma(H_0')=(-\infty,-m]\cup[m,+\infty)$. Seja $\alpha\in(-m,m)$. Mostraremos que $\alpha\in P(H_0')$. De fato, se $(H_0'-\alpha)\psi=0$, temos $[\beta(p^2+m^2)^{1/2}-\alpha]\psi(\vec{p})=0$. Utilizando (12) 1.B, vem

$$[(p^2+m^2)^{1/2}-\alpha]\psi_\ell(\vec{p})=0,\ \ell=1,2 \quad e \quad [-(p^2+m^2)^{1/2}-\alpha]\psi_\ell(\vec{p})=0,\ \ell=3,4.$$

Isto implica $\psi_\ell(\vec{p})=0$, $\ell=1,2,3,4$, donde $\psi=0$. Portanto $(H_0'-\alpha)$ possui um inverso. Êste inverso é definido num conjunto denso em $\mathcal{H}$. Realmente, usando o lema A1.1 e o fato de $(H_0'-\alpha)$ ser auto-adjunto (porque H_0 o é), vemos que $[\mathrm{Ran}(H_0'-\alpha)]^{\perp} = \{0\}$. Para que $D[(H_0'-\alpha)^{-1}]$ seja $\mathcal{H}$, precisamos mostrar apenas que $\mathrm{Ran}(H_0'-\alpha)$ é fechado.

Seja então $\{\phi_n\} \subset \mathrm{Ran}(H_0'-\alpha)$ tal que $\phi_n \to \phi$. Existe $\{\psi_n\} \subset D(H_0')$ t. q. $(H_0'-\alpha)\psi_n = \phi_n$. Temos então:

$$[(p^2+m^2)^{1/2}-\alpha]\psi_{n\ell}(\vec{p}) \to \phi_{n\ell}(\vec{p}),\ \ell=1,2 \quad e \quad [-(p^2+m^2)^{1/2}-\alpha]\psi_{n\ell}(\vec{p}) \to \phi_{n\ell}(\vec{p}),\ \ell=3,4$$

onde as convergências são na norma de $L^2(\mathbb{R}^3)$. Notando que α pode ser escrito na forma $\alpha = m - c^2$, com $0<|c|<\sqrt{2m}$, temos:

$$\int [(p^2+m^2)^{1/2}-m+c^2]^2 \,|\psi_{n\ell}(\vec{p})-\psi_{k\ell}(\vec{p})|^2 d^3p \to 0,\ \ell=1,2\ ;\ n,k\to\infty$$

Mas $$\int c^4 \,|\psi_{n\ell}(\vec{p})-\psi_{k\ell}(\vec{p})|^2 d^3p \leq \int [(p^2+m^2)^{1/2}-m+c^2]^2 \,|\psi_{n\ell}(\vec{p})-\psi_{k\ell}(\vec{p})|^2 d^3p$$

Logo, como $c \neq 0$, temos que $\{\psi_n\}$ converge, $\ell=1,2$. Por outro lado, escrevendo $\alpha = d^2-m$, $0<|d|<\sqrt{2m}$ temos:

$$\int [(p^2+m^2)^{1/2}+d^2-m]^2 \,|\psi_{n\ell}(\vec{p})-\psi_{k\ell}(\vec{p})|^2 d^3p \to 0,\ \ell=3,4\ ;\ n,k\to\infty$$

Pelo mesmo argumento anterior, $\{\psi_{n\ell}\}$ converge, $\ell=3,4$. Portanto, $\{\psi_n\}$ converge. Seja $\psi_n \to \psi$. Como $(H_0'-\alpha)$ é fechado, vemos então que $\psi \in D(H_0')$ e $(H_0'-\alpha)\psi = \phi$. Logo, $\phi \in \mathrm{Ran}(H_0'-\alpha)$, e $\mathrm{Ran}(H_0'-\alpha)$ é fechado.

Em resumo, vimos que para $\alpha \in (-m,m)$, $(H_0'-\alpha)^{-1}$ existe e é definido em todo $\mathcal{H}$. Para que α pertença a $P(H_0')$ é ainda necessário têrmos $(H_0'-\alpha)^{-1}$ limitado. Isto, entretanto, já está assegurado, decorrendo do importante teorema do gráfico fechado (veja |6|, pp 166-167), juntamente com o fato de que $(H_0'-\alpha)^{-1}$ é auto-adjunto e portanto fechado (para uma demonstração disto, veja |2| pg. 312).

Temos então $P(H_0') \supset (-m, m) \cup (\mathbb{C}-\mathbb{R})$. Vamos mostrar agora que se $\alpha \in (-\infty, -m] \cup [m, +\infty)$, então $\alpha \notin P(H_0')$. Seguindo um argumento análogo ao feito acima, podemos mostrar que $(H_0'-\alpha)^{-1}$ existe e tem domínio denso em $\mathcal{H}$ (lembramos que em $L^2(\mathbb{R}^3)$, funções que difiram em um conjunto de medida nula são identificadas). Vamos mostrar, entretanto, que êste domínio não é $\mathcal{H}$. Precisamos exibir um elemento $\Psi \in \mathcal{H}$ para o qual não exista nenhum $\phi \in D(H_0')$ com $(H_0'-\alpha)\phi = \Psi$.

Se α fôr positivo, tomemos Ψ tal que

$$\Psi_\ell(\vec{p}) = 0 \,, \ \ell = 2,3,4 \,, \quad \text{e}$$

$$\Psi_1(\vec{p}) = \begin{cases} 1 \,, & 0 \leq |\vec{p}| \leq 2\alpha \\ 0 \,, & |\vec{p}| > 2\alpha \end{cases}$$

Claramente, $\Psi \in \mathcal{H}$. Se existir ϕ tal que $(H_0'-\alpha)\phi = \Psi$, devemos ter $\phi_\ell(\vec{p}) = 0$ q.t.p(quase todos os pontos) $\ell=2,3,4$, e

$$\phi_1(\vec{p}) = \begin{cases} [(p^2+m^2)^{1/2}-\alpha]^{-1} \,, & 0 \leq |\vec{p}| \leq 2\alpha \\ 0 & , |\vec{p}| > 2\alpha \end{cases}$$

Ora, $\phi_1(\vec{p})$ não é de quadrado integrável, como é facilmente verificado. Portanto, $\phi \notin \mathcal{H}$ donde $\phi \notin D(H_0')$. Se α fôr negativo, podemos tomar Ψ, com $\Psi_\ell(\vec{p}) = 0$, $\ell = 1,2,3$ e

$$\Psi_4(\vec{p}) = \begin{cases} 1 \,, & 0 \leq |\vec{p}| \leq 2\alpha \\ 0 \,, & |\vec{p}| > 2\alpha \end{cases}$$

Nêste caso, deveríamos ter $\phi_l(\vec{p}) = 0$ q.t.p. $l=1,2,3$ e

$$\phi_4(\vec{p}) = \begin{cases} [-(p^2+m^2)^{1/2}-\alpha]^{-1} & , 0 \le |\vec{p}| \le 2\alpha \\ 0 & , |\vec{p}| > 2\alpha \end{cases}$$

O mesmo argumento anterior se aplica.

Portanto, $P(H_0') = (-m,m) \cup (\mathbb{C} - \mathbb{R})$,donde $\sigma(H_0') = \sigma(H_0) = (-\infty,-m] \cup [m,+\infty)$.

E) Restrição à parte positiva do Espectro. A Nova Hamiltoniana H_0

Na seção anterior, estabelecemos que o espectro de H_0 consiste em $(-\infty,-m] \cup [m,+\infty)$. O fato de $\sigma(H_0)$ conter a região $(-\infty,-m]$ conduz a sérios problemas de interpretação. Por exemplo, se estudarmos o movimento de um "pacote de ondas" formado apenas de soluções com energias negativas da equação de Dirac para uma partícula livre, veremos que o centro dêste "pacote" move-se retilínea e uniformemente, mas com uma velocidade oposta ao momentum! (Veja |7|, pgs. 950-963.). Isto então implica que a partícula associada ao "pacote de ondas" comporte como se tivesse massa negativa. Como isto não faz sentido, concluímos que a hamiltoniana completa que construímos nas seções anteriores não serve para a descrição de uma partícula livre.

Entretanto, se ao invés de considerarmos a hamiltoniana completa, tomarmos esta restrita ao subespaço M_+ de $\mathcal{H}$,correspondente à parte positiva do espectro de H_0, não apa recerá nenhuma aberração do tipo mencionado acima. Esta solução do problema - à primeira vista óbvia - não é de maneira nenhuma trivial, só podendo ser satisfatòriamente justificada no contexto da Teoria Quântica de Campos. De fato, se quizermos nos manter com uma teoria de uma partícula, não podemos simplesmente ignorar o subespaço M_- de $\mathcal{H}$ correspondente às energias negativas de H_0, porque a equação de Dirac prediz uma probabilidade não nula de transição de M_+ para M_- ,quando a partícula interage com um campo externo. No processo de segunda quantização da equação de Dirac, vista como uma equação de campo (|3|,Cap.8), subespaços tais como M_- são ligados a antipartículas e M_+ com partículas. No final desta seção, mostraremos que H_0 restrita a M_+ coincide com a hamiltoniana proveniente da segunda quantização da equação de Dirac, quando impomos que o número de antipartículas é nulo e o de partículas igual a um.

Estudemos as propriedades de H_0 restrita a M_+ (notação: $H_0\upharpoonright M_+$).Notemos inicialmente que $M_+ = P_+\mathcal{H}$, onde P_+ é a projeção correspondente ao espectro positivo de H_0. Explicitamente, $P_+ = \int_m^{\infty} dE_\lambda$,onde $\{E_\lambda\}$ é a família espectral associada ao operador auto-adjunto $H_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \, dE_\lambda$. Tem-se, evidentemente, $D(H_0\upharpoonright M_+) = D(H_0)\cap M_+ = P_+ D(H_0)$ .Esta última igualdade torna-se clara depois de lembrarmos que $P_+H_0 \subset H_0P_+$. Vemos,portanto, que $D(H_0\upharpoonright M_+)$ é denso em M_+ , já que $D(H_0)$ é denso em $\mathcal{H}$, e que M_+ é invariante com relação a H_0 ,i.é, temos $H_0\upharpoonright M_+ : D(H_0\upharpoonright M_+)\subset M_+ \longrightarrow M_+$ (êste último fato decorre da comutação entre P_+ e H_0).

O operador $H_0\upharpoonright M_+$ é auto-adjunto. De fato, êle é simétrico e fechado, como é fácil verificar. Basta então mostrar que $\mathrm{Ran}(H_0 \restriction M_+ - \alpha) = M_+$, $\mathrm{Im}\,\alpha \neq 0$ (veja o Apêndice I, de onde isto pode ser deduzido). Seja $\Psi \in M_+$. Como H_0 é auto-adjunto, existe $\phi \in D(H_0)$ tal que $(H_0 - \alpha)\phi = \Psi$.

Seja $\phi_+ = P_+ \Psi$. Então, $\phi_+ \in D(H_0 \restriction M_+)$ e $H_0 \phi_+ = P_+ H_0 \phi$. Logo, $(H_0 - \alpha)\phi_+ = P_+ H_0 \phi - \alpha P_+ \phi = P_+ (H_0 - \alpha)\phi = P_+ \Psi = \Psi$. Ou seja, existe $\phi_+ \in D(H_0 \restriction M_+)$ tal que $(H_0 \restriction M_+ - \alpha)\phi_+ = \Psi$, donde concluímos.

Vamos procurar caracterizar o operador $H_0 \restriction M_+$. Inicialmente, observemos que se U é o operador de Fourier-Plancherel, então $H_0 \restriction M_+ = U^{-1}(\hat{H}_0 \restriction \hat{M}_+) U$, onde $\hat{M}_+ = U M_+$ é o subespaço de $\hat{\mathcal{H}}$ correspondente ao espectro positivo de $\hat{H}_0$. De fato, se $\{E_\lambda\}$ é a família espectral associada a H_0 , então $\{U E_\lambda U^{-1}\}$ é a correspondente associada a $\hat{H}_0$. Portanto se $\hat{P}_+$ denota a projeção sôbre $\hat{M}_+$, temos $\hat{P}_+ = U P_+ U^{-1}$. Então, se $\Psi \in M_+$, temos $\hat{P}_+ \hat{\Psi} = U P_+ U^{-1} U \Psi = U \Psi = \hat{\Psi}$, i.é, $\hat{\Psi} \in \hat{M}_+$ é vice-versa, mostrando que $\hat{M}_+ = U M_+$. A afirmativa então decorre imediatamente do fato de $H_0 = U^{-1} \hat{H}_0 U$.

Vamos mostrar que o operador $\hat{H}_0 \restriction \hat{M}_+$ é simplesmente o operador de multiplicação por $(p^2 + m^2)^{1/2}$. Isto é mais fácil de ver se passarmos para a representação de Foldy-Wouthuysen (F-W).

Como foi citado na seção anterior, a hamiltoniana H_{0FW} nesta representação é o operador de multiplicação por $\beta(p^2 + m^2)^{1/2}$. A transformação unitária que liga o espaço dos momenta com a representação de F-W é, explicitamente (|3|, pg. 93).

$$(U_{FW}\psi)(\vec p) = \left[\frac{2E(\vec p)}{E(\vec p)+m}\right]^{1/2}\frac{1}{2}\left(\frac{\vec\gamma\cdot\vec p+m}{E(\vec p)}+1\right)\psi(\vec p)$$

Onde $E(\vec p) = (p^2+m^2)^{1/2}$, e γ^k são dadas por(10),1.b.Observemos o fato importante de U_{FW} ser um operador de multiplicação.

Da mesma forma como foi feito acima, temos: $\hat H_0 \upharpoonright \hat M_+ = U_{FW}^{-1}(H_{0FW}\upharpoonright M_{+FW})\,U_{FW}$, onde M_{+FW} é o subespaço correspondente a parte positiva do espectro de $\beta(p^2+m^2)^{1/2}$. Basta então mostrarmos que $H_{0FW}\upharpoonright M_{+FW}$ é o operador $(p^2+m^2)^{1/2}$, devido a observação feita no parágrafo anterior. Para isto, vamos nos basear na seguinte

<u>Proposição</u> : Seja $\{F_\lambda\}$ a família espectral associada ao operador H_{0FW}. A aplicação $\lambda\mapsto F_\lambda$ é contínua(na topologia forte), e tem-se,explicitamente, para todo $\psi\in\mathcal H$:

a) Para $\lambda\leq -m$: $(F_\lambda\psi)_1(\vec p) = (F_\lambda\psi)_2(\vec p) = 0$

$$(F_\lambda\psi)_3(\vec p) = \begin{cases} 0 & \text{se } |\vec p| < (\lambda^2-m^2)^{1/2} \\ \psi_3(\vec p) & \text{se } |\vec p| \geq (\lambda^2-m^2)^{1/2}\end{cases} \;;\; (F_\lambda\psi)_4(\vec p) = \begin{cases} 0 & \text{se } |\vec p| < (\lambda^2-m^2)^{1/2} \\ \psi_4(\vec p) & \text{se } |\vec p| \geq (\lambda^2-m^2)^{1/2}\end{cases}$$

b) $\lambda\mapsto F_\lambda$ é constante em $[-m, m]$

c)Para $\lambda\geq m$: $(F_\lambda\psi)_1(\vec p) = \begin{cases} \psi_1(\vec p) & \text{se } |\vec p| \leq (\lambda^2-m^2)^{1/2} \\ 0 & \text{se } |\vec p| > (\lambda^2-m^2)^{1/2}\end{cases}$; $(F_\lambda\psi)_2(\vec p) = \begin{cases} \psi_2(\vec p) & \text{se } |\vec p| \leq (\lambda^2-m^2)^{1/2} \\ 0 & \text{se } |\vec p| > (\lambda^2-m^2)^{1/2}\end{cases}$

$$(F_\lambda\psi)_3(\vec p) = \psi_3(\vec p) \;;\; (F_\lambda\psi)_4(\vec p) = \psi_4(\vec p)$$

<u>Demonstração</u>: A continuidade da aplicação $\lambda\mapsto F_\lambda$ é consequência direta do fato de H_{0FW} não ter auto-valores. Podemos verificar sem dificuldade que a família de projeções especificada em a),b),c) é realmente uma família espectral. Para ver que $\{F_\lambda\}$ está associada a H_{0FW}, basta mostrarmos a igualdade

$$(\psi, H_{0FW}\phi) = \int_{-\infty}^{+\infty}\lambda\, d(\psi, E_\lambda\phi) \quad \forall\phi\in D(H_{0FW}),\ \psi\in\mathcal H.$$

Isto pode ser verificado por um cálculo direto, que não faremos aqui por ser um pouco longo. ▨

Podemos agora determinar imediatamente a projeção P_{+FW} sôbre M_{+FW}. Temos:

$$(P_{+FW}\psi)_1(\vec{p}) = [(I-F_m)\psi]_1(\vec{p}) = \psi_1(\vec{p}) - (F_m\psi)_1(\vec{p}) = \psi_1(\vec{p})$$
$$(P_{+FW}\psi)_2(\vec{p}) = [(I-F_m)\psi]_2(\vec{p}) = \psi_2(\vec{p}) - (F_m\psi)_2(\vec{p}) = \psi_2(\vec{p})$$
$$(P_{+FW}\psi)_3(\vec{p}) = [(I-F_m)\psi]_3(\vec{p}) = \psi_3(\vec{p}) - (F_m\psi)_3(\vec{p}) = 0$$
$$(P_{+FW}\psi)_4(\vec{p}) = [(I-F_m)\psi]_4(\vec{p}) = \psi_4(\vec{p}) - (F_m\psi)_4(\vec{p}) = 0$$

ou seja, $(P_{+FW}\psi)(\vec{p}) = (1/2)(1+\beta)\psi(\vec{p})$. Anàlogamente, $(P_{-FW}\psi)(\vec{p}) = (1/2)(1-\beta)\psi(\vec{p})$, onde P_{-FW} é a projeção sôbre o subespaço M_{-FW} das energias negativas. Vemos então que M_{+FW} é formado por todos os spinores ψ tais que $\psi_i = 0$ $(i=3,4)$, ao passo que M_{-FW} consiste dos spinores com $\psi_j = 0$ $(j=1,2)$, e evidentemente,

$$\mathcal{H} = M_{+FW} \oplus M_{-FW} .$$

Determinemos agora $H_{oFW} \upharpoonright M_{+FW}$. Se $\psi \in D(H_{oFW} \upharpoonright M_{+FW})$, Temos $\psi \in D(H_{oFW})$ e $\psi \in M_{+FW}$, logo $\psi = P_{+FW}\psi$. Então $(H_{oFW}\psi)(\vec{p}) =$

$$= (H_{oFW}P_{+FW}\psi)(\vec{p}) = \beta(p^2+m^2)^{1/2}(P_{+FW}\psi)(\vec{p}) = \beta(p^2+m^2)^{1/2}(1/2)(1+\beta)\psi(\vec{p}) = (p^2+m^2)^{1/2}(1/2)(\beta+1)\psi(\vec{p}) = (p^2+m^2)^{1/2}\psi(\vec{p}).$$

Portanto, $H_{oFW} \upharpoonright M_{+FW}$ é o operador de multiplicação por $(p^2+m^2)^{1/2}$, o mesmo acontecendo então com $\hat{H}_o \upharpoonright \hat{M}_+$. A partir disso, torna-se claro que o espectro de $H_o \upharpoonright M_+$ é o subconjunto de $\mathbb{R}$ $[m,+\infty)$.

Mostremos agora que a hamiltoniana $H_o \upharpoonright M_+$ é justamente a usada em Teoria Quântica de Campos, na situação em que temos uma partícula de spin 1/2 isolada. Usaremos a notação de Dirac, juntamente com alguns argumentos heurísticos co mumente empregados nos textos de Mecânica Quântica. Uma tal a nálise pode, entretanto, ser refinada, fornecendo os mesmos re sultados abaixo.

A expressão para a hamiltoniana do campo é dada por (|3|.pg.222):

$$H = \int d^3p \sum_{r=1}^{2} \left[N_r^{(+)}(\vec{p}) + N_r^{(-)}(-\vec{p}) \right] E_{\vec{p}} \qquad (1)$$

O espaço no qual H age é $\sum_{m,n=0}^{\infty} \oplus (\mathcal{H}_+^n \otimes \mathcal{H}_-^m)$, consistindo na soma direta dos espaços de Hilbert $\mathcal{H}_+^n \otimes \mathcal{H}_-^m = (\mathcal{H}_+ \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_+) \otimes (\mathcal{H}_- \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_-)$ (produtos tensoriais), onde temos n fatôres no primeiro parênteses e m no segundo. Um vetôr em $\mathcal{H}_+^n \otimes \mathcal{H}_-^m$ representa um estado de n partículas e m antipartículas. $\mathcal{H}_+$ e $\mathcal{H}_-$ serão especificados abaixo, e pomos $\mathcal{H}_+^0 = \mathcal{H}_-^0 = \mathbb{C}$.

Em (1), $E_{\vec{p}} = (p^2 + m^2)^{1/2}$, e $N_r^{(+)} = b_r^*(\vec{p})\, b_r(\vec{p})$, $r=1,2$; $N_r^{(-)}(\vec{p}) = d_r^*(\vec{p}) d_r(\vec{p})$, $r=1,2$ onde $b_r^*(\vec{p})$ e $b_r(\vec{p})$ são operadores de criação e destruição de partículas com momentum $\vec{p}$, e $d_r^*(\vec{p})$, $d_r(\vec{p})$ são os correspondentes para antipartículas. O fato de r possuir dois valores está ligado às duas orientações possíveis do spin.

As regras de comutação entre os diversos operadores envolvidos são (veja|3| pg. 224):

$$\left.\begin{aligned}
&[b_r(\vec{p}), b_s(\vec{p}\,')]_+ = [b_r^*(\vec{p}), b_s^*(\vec{p}\,')]_+ = 0 \\
&[b_r(\vec{p}), b_s^*(\vec{p}\,')]_+ = \delta_{rs}\, \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}\,') \\
&[N_r^{(+)}(\vec{p}), b_s(\vec{p}\,')] = -\delta_{rs}\, \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}\,')\, b_r(\vec{p}) \\
&[N_r^{(+)}(\vec{p}), b_s^*(\vec{p}\,')] = \delta_{rs}\, \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}\,')\, b_r^*(\vec{p}) \\
&[N_r^{(-)}(\vec{p}), b_s(\vec{p}\,')] = [N_r^{(-)}(\vec{p}), b_s^*(\vec{p}\,')] = 0
\end{aligned}\right\} \qquad (2)$$

e fórmulas semelhantes para os operadores $d_r(\vec{p})$, $d_r^*(\vec{p})$. Em

(2), o símbolo $[\ \ ]_+$ significa anticomutação. Qualquer $d_r(\vec{p}), d_r^*(\vec{p})$ comuta com qualquer $b_r(\vec{p}),\ b_r^*(\vec{p})$.

O estado de vácuo, $|\Psi_0\rangle$ é caracterizado por
$b_r(\vec{p})|\Psi_0\rangle = d_r(\vec{p})|\Psi_0\rangle = 0 \quad \forall \vec{p}$ e $r = 1,2$.

Temos então

$$N_r^{(+)}(\vec{p})|\Psi_0\rangle = N_r^{(-)}(\vec{p})|\Psi_0\rangle = 0 \quad \forall \vec{p} \text{ e } r = 1,2 \qquad (3)$$

Consideraremos $|\Psi_0\rangle$ normalizado: $\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle = 1$.

O vetôr $|\vec{p}\rangle_r = b_r^*(\vec{p})|\Psi_0\rangle$ representa uma partícula com momentum $\vec{p}$ e spin especificado por r ; $|\vec{p}\rangle_{r+2} = d_r^*(\vec{p})|\Psi_0\rangle$ descreve uma antipartícula com momentum $\vec{p}$ e spin dado por r. Os vetôres $|\vec{p}\rangle_r$ são ortonormalizados, no sentido de $_r\langle\vec{p}|\vec{p}'\rangle_s = \delta_{rs}\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}')$. Êles geram um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$. Os espaços $\mathcal{H}_+$ e $\mathcal{H}_-$ mencionados acima são os subespaços de $\mathcal{H}$ gerados por $\{|\vec{p}\rangle_1, |\vec{p}\rangle_2\}$ e $\{|\vec{p}\rangle_3, |\vec{p}\rangle_4\}$ respectivamente. Vemos então que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-$. Um vetôr arbitrário $|\Psi\rangle$ de $\mathcal{H}$ pode ser representado por uma matriz 4×1 ,onde cada elemento é a componente de $|\Psi\rangle$ em um dos vetôres base. Explicitamente:

$$|\Psi\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{p}) \\ \Psi_2(\vec{p}) \\ \Psi_3(\vec{p}) \\ \Psi_4(\vec{p}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} _1\langle\vec{p}|\Psi\rangle \\ _2\langle\vec{p}|\Psi\rangle \\ _3\langle\vec{p}|\Psi\rangle \\ _4\langle\vec{p}|\Psi\rangle \end{pmatrix} \qquad (4)$$

Se um vetôr $|\Psi\rangle$ representa uma partícula, $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_+$ e então $_3\langle\vec{p}|\Psi\rangle = {}_4\langle\vec{p}|\Psi\rangle = 0$, e da mesma forma, as antipartículas são representadas por vetôres tais que $_1\langle\vec{p}|\Psi\rangle = {}_2\langle\vec{p}|\Psi\rangle = 0$.

Comparando com a representação de F-W, vemos então que $\mathcal{H}_+$ corresponde justamente a $\mathcal{H}_{+FW}$ e $\mathcal{H}_-$ a $\mathcal{H}_{-FW}$, de forma que podemos encarar a correspondência em (4) como a associação entre o espaço abstrato $\mathcal{H}$ e a representação de F-W .

Vejamos então a ação de H sôbre um vetôr que representa o estado de uma partícula: $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_+$.

Temos:

$$(H\Psi)_1(\vec{p}) = {}_1\langle\vec{p}|H|\Psi\rangle = {}_1\langle\vec{p}|H\left(\int d^3p'\,|\vec{p}'\rangle_{1\,1}\langle\vec{p}'| + \int d^3p'\,|\vec{p}'\rangle_{2\,2}\langle\vec{p}'|\right)|\Psi\rangle =$$

$$= \int d^3p'\,{}_1\langle\vec{p}|H|\vec{p}'\rangle_1\,\Psi_1(\vec{p}') + \int d^3p'\,{}_1\langle\vec{p}|H|\vec{p}'\rangle_2\,\Psi_2(\vec{p}')$$

Precisamos então calcular os elementos de matriz ${}_1\langle\vec{p}|H|\vec{p}'\rangle_1$ e ${}_1\langle\vec{p}|H|\vec{p}'\rangle_2$. De (1), vem:

$${}_1\langle\vec{p}|H|\vec{p}'\rangle_1 = \int d^3q \sum_{r=1}^{2}\left[{}_1\langle\vec{p}|N_r^{(+)}(\vec{q})|\vec{p}'\rangle_1 + {}_1\langle\vec{p}|N_r^{(-)}(-\vec{q})|\vec{p}'\rangle_1\right]E_{\vec{q}}$$

Mas,

$${}_1\langle\vec{p}|N_r^{(+)}(\vec{q})|\vec{p}'\rangle_1 = \langle\Psi_0|b_1(\vec{p})N_r^{(+)}(\vec{q})b_1^*(\vec{p}')|\Psi_0\rangle = \delta_{r1}\delta^{(3)}(\vec{q}-\vec{p})\langle\Psi_0|b_1(\vec{p})b_1^*(\vec{p}')|\Psi_0\rangle = \delta_{r1}\delta^{(3)}(\vec{q}-\vec{p}')\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}')$$

onde usamos (2) e (3). Temos também ${}_1\langle\vec{p}|N_r^{(-)}(-\vec{q})|\vec{p}'\rangle_1 = \langle\Psi_0|b_1(\vec{p})N_r^{(-)}(-\vec{q})b_1^*(\vec{p}')|\Psi_0\rangle = 0$.

Então:

$${}_1\langle\vec{p}|H|\vec{p}'\rangle_1 = \int d^3q\,E_{\vec{q}}\,\delta^{(3)}(\vec{q}-\vec{p}')\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}') = E_{\vec{p}'}\,\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}')$$

Quanto a ${}_1\langle\vec{p}|H|\vec{p}'\rangle_2$, temos:

$${}_1\langle\vec{p}|H|\vec{p}'\rangle_2 = \int d^3q \sum_{r=1}^{2}\left[{}_1\langle\vec{p}|N_r^{(+)}(\vec{q})|\vec{p}'\rangle_2 + {}_1\langle\vec{p}|N_r^{(-)}(-\vec{q})|\vec{p}'\rangle_2\right]E_{\vec{q}}$$

Ora, ${}_1\langle\vec{p}|N_r^{(+)}(\vec{q})|\vec{p}'\rangle_2 = \langle\Psi_0|b_1(\vec{p})N_r^{(+)}(\vec{q})b_2^*(\vec{p}')|\Psi_0\rangle = 0$, e também ${}_1\langle\vec{p}|N_r^{(-)}(-\vec{q})|\vec{p}'\rangle_2 = 0$.

Logo, ${}_1\langle\vec{p}|H|\vec{p}'\rangle_2 = 0$ .Então temos:

$$(H\Psi)_1(\vec{p}) = \int d^3p'\,E_{\vec{p}'}\,\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}')\,\Psi_1(\vec{p}') = E_{\vec{p}}\,\Psi_1(\vec{p}) = (p^2+m^2)^{1/2}\Psi_1(\vec{p})$$

De maneira análoga, deduzimos:

$$(H\Psi)_2(\vec{p}) = (p^2+m^2)^{1/2}\Psi_2(\vec{p})\ ;\ (H\Psi)_3(\vec{p}) = (H\Psi)_4(\vec{p}) = 0\ .$$

Vemos, portanto, que a descrição de uma partícula em Teoria de Campos é equivalente a que consideramos no início desta seção.

Para efeito de simplificação, será conveniente mudarmos a notação até aqui adotada. Continuaremos a escrever $\mathcal{H}$ para o espaço de Hilbert que representa os estados fisicamente realizáveis de uma partícula (que, como foi visto acima, é o subespaço $\mathcal{H}_+$) e denotaremos ainda por H_0 a nova Hamiltoniana (i.é, a hamiltoniana $H_0 \upharpoonright \mathcal{H}_+$).

---x---

C A P Í T U L O II

" HAMILTONIANA PARA UMA PARTÍCULA EM UM CAMPO EXTERNO "

A) Definição em Têrmos de Formas Quadráticas

B) Determinação de uma Classe de Potenciais Permissíveis

C) Estrutura grossa do espectro

A) Definição em Têrmos de Formas Quadráticas.

Até agora, estudamos apenas a hamiltoniana H_0 que descreve uma partícula livre. Procuraremos ver, no decorrer desta seção, como podemos construir uma hamiltoniana H que descreva uma partícula numa energia potencial externa V.

A relação entre H, H_0 e V é, formalmente,

$$H = H_0 + V \qquad (1)$$

Isto pode ser visto, de maneira heurística, pela seguinte consideração. A equação que descreve o movimento de uma partícula de massa m e carga e num potencial (A,W) pode ser obtida da equação para a partícula livre, fazendo-se as substituições $i\partial/\partial t \longrightarrow i\partial/\partial t - eW$ e $-i\vec{\nabla} \longrightarrow -i\vec{\nabla} - e\vec{A}$. Levando na equação (2) de 1.B), temos:

$$\left(i\frac{\partial\psi}{\partial t} - eW\psi\right) + i\vec{\alpha}.(\vec{\nabla} - ie\vec{A})\psi - m\beta\psi = 0$$

ou seja

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\vec{\alpha}.(\vec{\nabla} - ie\vec{A})\psi + m\beta\psi + eW\psi = H\psi$$

donde $H\psi = -i\vec{\alpha}.\vec{\nabla}\psi + m\beta\psi + eW\psi - e\vec{\alpha}.\vec{A}\psi = H_0\psi + eW\psi - e\vec{\alpha}.\vec{A}\psi$. Sendo $V = eW$ e $\vec{A} = 0$, vem então que $H\psi = H_0\psi + V\psi$.

A maneira mais razoável - a primeira vista - de se definir H como um operador auto-adjunto é considerar a expressão formal (1) como a soma dos operadores H_0 e V, procurando então condições em V para as quais $H_0 + V$ seja realmente auto-adjunto. A primeira restrição que se deve impor a V refere-se ao seu domínio. Realmente, como D(H) deve ser denso, devemos ter $D(H_0) \cap D(V)$ denso em $\mathcal{H}$ .Isto,entretanto, pode não acontecer para uma larga classe de potenciais com interêsse físico.Para evitar êste tipo de problema ,procuraremos uma caracterização mais geral de H.

Observemos inicialmente que, de um ponto de vista físico, D(H) não deve ser muito fundamental.Para ver isto, precisamos da seguinte

Definição: Seja A um operador auto-adjunto, com a família espectral $\{E_\lambda\}$. Definimos Q(A) - o domínio de A como forma quadrática - por $Q(A) = \{\psi \in \mathcal{H} \text{ t.q. } \int_{-\infty}^{+\infty} |\lambda| \, d\|E_\lambda \psi\|^2 < \infty \}$.

Definimos ainda, em Q(A), uma forma quadrática - a forma associada ao operador A - por $a[\psi] = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \, d\|E_\lambda \psi\|^2$.

Notemos que esta forma quadrática determina , de maneira única, uma forma sesquilinear em Q(A), por

$$a[\psi,\phi] = \frac{1}{4}\left(a[\psi+\phi] - a[\psi-\phi] + i a[\psi+i\phi] - i a[\psi-i\phi]\right) \tag{2}$$

Com esta notação , $a[\psi,\psi] = a[\psi]$ .Observemos ainda que $D(A) \subset Q(A)$, porque $D(A) = \{\psi \in \mathcal{H} \text{ t.q. } \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 \, d\|E_\lambda \psi\|^2 < \infty\}$ e que se $\psi \in D(A)$, $a[\psi] = (\psi, A\psi)$.

Em Mecânica Quântica, o número $a[\psi]$ representa o valor esperado da grandeza α associada ao operador A quando fazemos uma medida de α , estando a partícula no estado(normalizado) ψ . Vemos,portanto, que Q(A) é o conjunto de todos os vetôres ψ (não necessàriamente normalizados) para os quais o valor esperado de α é finito.

Se A fôr um operador positivo, i.é, se $E_\lambda = 0, \lambda < 0$

podemos ver que $Q(A)=D(A^{1/2})$ e $a[\psi,\phi]=(A^{1/2}\psi, A^{1/2}\phi)$. De fato, sendo $A^{1/2}=\int_0^\infty \lambda^{1/2} dE_\lambda$, temos que $D(A^{1/2})=\{\psi \in \mathcal{H}$ t.q. $\int_0^\infty \lambda\, d\|E_\lambda \psi\|^2 < \infty \}$ e $\|A^{1/2}\psi\|^2=\int_0^\infty \lambda\, d\|E_\lambda \psi\|^2 = a[\psi]$. Logo, $(A^{1/2}\psi, A^{1/2}\phi)=a[\psi,\phi]$, porque o produto interno satisfaz a uma relação semelhante a (2), em têrmos das normas. Note, de passagem, que $A^{1/2}$ é auto-adjunto positivo, e que òbviamente $(A^{1/2})^2=A$.

Podemos agora ver porque D(H) não é tão fundamental. Realmente, êste conjunto consiste de todos os vetôres $\psi \in \mathcal{H}$ para os quais $(H\psi, H\psi) < \infty$. Observando o fato de $(H\psi,H\psi)=(|H|\psi, |H|\psi)$, onde $|H|=\int_{-\infty}^{+\infty}|\lambda|\, dE_\lambda$, bem como a igualdade $(H^2)^{1/2}=|H|$, vemos que $D(H)=D(|H|)=Q(H^2)$. Portanto, fìsicamente, D(H) consiste dos vetôres que representam estados de uma partícula para os quais o valor esperado do quadrado da energia é finito. O argumento é então concluído observando que o quadrado da energia não é uma grandeza muito fundamental, por exemplo, quando comparada com a energia.

A análise feita acima sugere, ao mesmo tempo, um subconjunto de $\mathcal{H}$ mais fundamental que D(H). Realmente, sendo a energia mais básica que seu quadrado, Q(H) deve ser considerado mais importante que D(H). Seguindo esta idéia, temos então uma outra maneira de encarar a expressão formal (1). Ao invés de considerá-la como soma de operadores, podemos vê-la como soma de formas quadráticas, i.é, H é determinado indiretamente por

$$h[\psi]=h_0[\psi]+v[\psi] \qquad (3)$$

onde h_0 e v são as formas quadráticas associadas dos operadores H_0 e V respectivamente. Precisamos então ver quais condi ções devem ser impostas a V para que a forma $\mathfrak{h}$ dada por (3) determine realmente um operador auto-adjunto H em $\mathcal{H}$. Da mesma maneira que para operadores, devemos ter $Q(H_o) \cap Q(V)$ denso em $\mathcal{H}$. Isto, entretanto, é uma restrição muito menos forte que a correspondente para operadores. De fato, veremos mais a frente que se supuzermos o potencial pequeno (num sentido a ser precisado) em relação à energia cinética, teremos uma condição suficiente para definirmos H por (3).

Usaremos o restante desta seção para estabelecermos a relação (3) de maneira precisa. Para isto, seguimos de perto o trabalho de Simon(|8| pgs. 38-43).

Vimos, na seção anterior, que o espectro de H_o é $[m,+\infty)$. Portanto, H_o é um operador positivo, de forma que $Q(h_o) = D(H_o^{1/2})$. $Q(H_o)$ é uma variedade linear densa em $\mathcal{H}$, porque $H_o^{1/2}$ é auto-adjunto.

Construamos em $Q(H_o)$ um novo produto interno, que denotaremos por $(\, , \,)_{+1}$ da seguinte maneira:

$$(\psi,\phi)_{+1} = (H_o^{1/2}\psi, H_o^{1/2}\phi) + (\psi,\phi) = \mathfrak{h}_o[\psi,\phi] + (\psi,\phi) = (\mathfrak{h}_o+1)[\psi,\phi] \tag{4}$$

onde $1[\psi,\phi] = (\psi,\phi)$ é a forma unidade. A verificação de que $(\, , \,)_{+1}$ é realmente um produto interno é trivial. Escreveremos $\| \; \|_{+1}$ para a norma derivada de $(\, , \,)_{+1}$, i.é, $\|\psi\|_{+1} = [(\psi,\psi)_{+1}]^{1/2}$; tem-se evidentemente $\|\psi\|_{+1} \geq \|\psi\|$. A razão de introduzirmos $(\, , \,)_{+1}$ é que, com êste nôvo produto interno, $Q(H_o)$ é um espaço de Hilbert. Realmente, se $\{\psi_n\} \subset Q(H_o)$ é uma sequência de Cauchy na norma $\| \; \|_{+1}$, então vemos que $\{\psi_n\}$ e $\{H_o^{1/2}\psi_n\}$

são sequências de Cauchy na norma $\| \ \|$. Logo, $\psi_n \xrightarrow{\| \ \|} \psi$ e $H_o^{1/2}\psi_n \xrightarrow{\| \ \|} \phi$. Sendo $H_o^{1/2}$ fechado, vem então que $\psi \in Q(H_o)$ e $H_o^{1/2}\psi = \phi$. Então, $\psi_n \xrightarrow{\| \ \|_{+1}} \psi$, mostrando que $Q(H_o)$ com a norma $\| \ \|_{+1}$ é completo. Denotaremos por $\mathcal{H}_{+1}$ êste nôvo espaço de Hilbert. Observe que $\mathcal{H}_{+1}$ e $Q(H_o)$ são idênticos como espaços vetoriais.

Chamemos de $\mathcal{H}_{-1}$ o espaço dos funcionais anti-lineares contínuos em $\mathcal{H}_{+1}$. Existe um isomorfismo natural entre $\mathcal{H}_{-1}$ e $\mathcal{H}_{+1}$ da~~n~~do pelo teorema da representação de Riesz : ao funcional antilinear contínuo F, está associado $\psi \in \mathcal{H}_{+1}$ tal que $F(\phi) = (\phi, \psi)_{+1}$ $\forall \phi \in \mathcal{H}_{+1}$. Em particular, se $\psi \in \mathcal{H}_{+1}$, a aplicação $\phi \longmapsto (\phi, \psi)$ pertence a $\mathcal{H}_{-1}$ (a continuidade na norma $\| \ \|_{+1}$ é verificada por $|(\phi,\psi)| \leq \|\phi\| \|\psi\| \leq \|\phi\|_{+1} \|\psi\|$). Existe então um elemento $\theta \in \mathcal{H}_{+1}$ para o qual $(\phi,\psi) = (\phi,\theta)_{+1}$ $\forall \phi \in \mathcal{H}_{+1}$. Vemos portanto que θ e ψ estão associados pelo isomorfismo mencionado acima.

É conveniente considerarmos uma outra aplicação linear de $\mathcal{H}_{+1}$ em $\mathcal{H}_{-1}$ para a qual a cada vetôr ψ de $\mathcal{H}_{+1}$ corresponda o funcional $\phi \longmapsto (\phi,\psi)$. Denotemos por U' tal aplicação. Como é fácil ver, ela é injetora, porque $Q(H_o)$ é denso em $\mathcal{H}$, não sendo entretanto sôbre, porque qualquer funcional $\phi \longmapsto (\phi,\psi)$ com $\psi \in \mathcal{H}$, $\psi \notin Q(H_o)$ não é a imagem por U' de nenhum vetôr de $\mathcal{H}_{+1}$. Chamaremos de U a extensão (natural) de U' para todo $\mathcal{H}$. Isto é, $U : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}_{+1}$ tal que $(U\psi)(\phi) = (\phi, \psi)$ $\forall \phi \in \mathcal{H}_{+1}$, $\psi \in \mathcal{H}$. Obviamente, U é linear e injetora. Escreveremos $\mathcal{H}_{+1}' = U'\mathcal{H}_{+1}$ e $\mathcal{H}' = U\mathcal{H}$. Temos então

$$\mathcal{H}_{+1}' \subset \mathcal{H}' \subset \mathcal{H}_{-1} \ .$$

Se $F \in \mathcal{H}_{-1}$, $(\phi, F)_p$ significará o valor de F no vetôr $\phi \in \mathcal{H}_{+1}$. Se $\psi \in \mathcal{H}$, temos então $(\phi, U\psi)_p = (\phi, \psi)$. Poremos ainda, por definição, $(F, \phi)_p = \overline{(\phi, F)_p}$, onde a barra denota o complexo conjugado.

Seja ψ um elemento de $\mathcal{H}$. Temos

$$\|U\psi\|_{-1} = \sup_{0 \neq \phi \in \mathcal{H}_{+1}} \frac{|(\phi, U\psi)_p|}{\|\phi\|_{+1}} = \sup_{0 \neq \phi \in \mathcal{H}_{+1}} \frac{|(\phi, \psi)|}{\|\phi\|_{+1}} \qquad (5)$$

onde $\| \ \|_{-1}$ é a norma em $\mathcal{H}_{-1}$. Sendo H_0 positivo, $(H_0 + 1)^{-1}$ é um operador limitado, definido em todo $\mathcal{H}$, e portanto, da mesma forma o é $(H_0 + 1)^{-1/2}$. O contradomínio $\mathrm{Ran}\,(H_0 + 1)^{-1/2}$ é precisamente o domínio de $(H_0 + 1)^{1/2}$, que é igual a $D(H_0)^{1/2}$. Portanto, podemos escrever (5) na forma

$$\|U\psi\|_{-1} = \sup_{0 \neq \Lambda \in \mathcal{H}} \frac{|((H_0+1)^{-1/2}\Lambda, \psi)|}{\|(H_0+1)^{-1/2}\Lambda\|_{+1}} \qquad (6)$$

Mas, por (4), $\|(H_0+1)^{-1/2}\Lambda\|_{+1}^2 = \|H_0^{1/2}(H_0+1)^{-1/2}\Lambda\|^2 + \|(H_0+1)^{-1/2}\Lambda\|^2 = \|(H_0+1)^{1/2}(H_0+1)^{-1/2}\Lambda\|^2 = \|\Lambda\|^2$,

onde a segunda igualdade é justificada por

$$\|(H_0+1)^{1/2}\psi\|^2 = \int_0^\infty (\lambda+1)\, d\|E_\lambda \psi\|^2 = \|H_0^{1/2}\psi\|^2 + \|\psi\|^2 \quad \forall \psi \in D(H_0)^{1/2}.$$

Portanto, (6) fica:

$$\|U\psi\|_{-1} = \sup_{0 \neq \Lambda \in \mathcal{H}} \frac{|((H_0+1)^{-1/2}\Lambda, \psi)|}{\|\Lambda\|} = \sup_{0 \neq \Lambda \in \mathcal{H}} \frac{|(\Lambda, (H_0+1)^{-1/2}\psi)|}{\|\Lambda\|} = \|(H_0+1)^{-1/2}\psi\| = \left[(\psi, (H_0+1)^{-1}\psi)\right]^{1/2} \qquad (7)$$

onde utilizamos o fato de que o inverso de um operador auto-adjunto também é auto-adjunto (veja |2|, pg. 312) e que a raiz quadrada de um operador auto-adjunto positivo tem esta mesma propriedade, como já foi mencionado acima (para uma demonstração disso, não baseada no teorema espectral, (veja |6| pg. 281)

A expressão (7) explica a notação $\mathcal{H}_{-1}$. Observemos, por (5), que

$$\|U\psi\|_{-1} \leqslant \|\psi\| \quad \forall \psi \in \mathcal{H} \qquad (8)$$

mostrando que a aplicação $U: \mathcal{H} \to \mathcal{H}_{-1}$ é contínua.

Também $U': \mathcal{H}_{+1} \longrightarrow \mathcal{H}_{-1}$ é contínua ($\mathcal{H}_{+1}$ com norma $\| \; \|_{+1}$!) visto que $\|\psi\| \leqslant \|\psi\|_{+1}$ $\forall \psi \in \mathcal{H}_{+1}$.

O resultado básico que precisamos para definir a hamiltoniana por (3) está contido no seguinte

<u>Lema</u>: Seja $A_0 : \mathcal{H}_{+1} \longrightarrow \mathcal{H}_{-1}$ uma aplicação linear tal que $A_0 + \lambda U'$ é uma bijeção para algum número real λ . Suponha que $(\psi, A_0\phi)_p = (A_0\psi, \phi)_p$ $\forall \psi, \phi \in \mathcal{H}_{+1}$. Então, existe um único operador auto-adjunto A (em $\mathcal{H}$) tal que $D(A) \subset Q(H_0)$ e $(\phi, A\psi) = (\phi, A_0\psi)_p$ $\forall \psi \in D(A)$ e $\phi \in \mathcal{H}_{+1}$.

<u>Demonstração</u>: Precisamos provar a existência apenas para o caso $\lambda = 0$, já que no caso geral, basta pôr $B_0 = A_0 + \lambda U'$ e $A = B - \lambda$ para têrmos o teorema provado.

Definamos $A = U^{-1}A_0$. Como $D(U^{-1}) = \mathcal{H}'$, vemos que $D(A) = \{\psi \in Q(H_0) \text{ t.q. } A_0\psi \in \mathcal{H}'\}$. Temos então $A: D(A) \subset Q(H_0) \longrightarrow \mathcal{H}$. Para ver que A é auto-adjunto, consideremos o operador $A^{-1} = A_0^{-1} U$ (A_0^{-1} existe, pois A_0 é uma bijeção por hipótese) . Observe que $A^{-1} : \mathcal{H} \longrightarrow D(A)$ é definida em todo $\mathcal{H}$. Mostraremos que A^{-1} tem a seguinte propriedade: $(\psi_1, A^{-1}\psi_2) = (A^{-1}\psi_1, \psi_2)$ $\forall \psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$. Realmente, ponhamos $\phi_i = A^{-1}\psi_i$ $(i=1,2)$, com $\phi_i \in D(A)$. Temos:

$$(\psi_1, A^{-1}\psi_2) = (A\phi_1, \phi_2) = (UA\phi_1, \phi_2)_p = (A_0\phi_1, \phi_2)_p = (\phi_1, A_0\phi_2)_p = (\phi_1, U^{-1}A_0\phi_2) = (A^{-1}\psi_1, A\phi_2) = (A^{-1}\psi_1, \psi_2)$$

Pelo teorema de Hellinger-Toeplitz (|2|, pg.296), vemos então que A^{-1} é limitado e auto-adjunto. Logo, A, como inverso de A^{-1}, é auto-adjunto.

Para mostrarmos a unicidade, seja $\tilde{A}$ um outro operador auto-adjunto, com $D(\tilde{A}) \subset Q(H_0)$ e $(\phi, \tilde{A}\psi) = (\phi, A_0\psi)_\rho$ $\forall \phi \in Q(H_0), \psi \in D(\tilde{A})$. Como $\tilde{A}\psi \in \mathcal{H}$, temos $(\phi, \tilde{A}\psi) = (\phi, U\tilde{A}\psi)_\rho$. Logo, $(\phi, U\tilde{A}\psi)_\rho = (\phi, A_0\psi)_\rho$ $\forall \phi \in Q(H_0)$, donde $U\tilde{A}\psi = A_0\psi$. Isto mostra que $A_0\psi \in \mathcal{H}'$, donde $\psi \in D(A)$, e ainda $U\tilde{A}\psi = UA\psi$. Vemos então que A é uma extensão de $\tilde{A}$. Mas como um operador auto-adjunto é máximo simétrico (|2|, pg. 312), temos que $A = \tilde{A}$.

Como aplicação temos o

<u>Teorema</u> : Seja v uma forma simétrica em $\mathcal{H}_{+1}$ (isto é, $v[\psi, \phi] = \overline{v[\phi, \psi]}$) com a seguinte propriedade. Existem dois números positivos a, b com $a < 1$ tais que

$$|v[\psi]| \leq a\, h_0[\psi] + b\|\psi\|^2 = (a h_0 + b)[\psi] \tag{9}$$

Existe então um único operador auto-adjunto H, com $D(H) \subset Q(H_0)$ e

$$(\phi, H\psi) = h_0[\phi, \psi] + v[\phi, \psi] \quad \forall \psi \in D(H) \text{ e } \phi \in \mathcal{H}_{+1}$$

Além disso, $Q(H) = Q(H_0)$, e $h[\psi] = h_0[\psi] + v[\psi] = (h_0 + v)[\psi]$ $\forall \psi \in Q(H)$.

<u>Demonstração</u>: Definamos $V': \mathcal{H}_{+1} \longrightarrow \mathcal{H}_{-1}$ por $(\psi, V'\phi)_\rho = v[\psi, \phi]$ $\forall \psi, \phi \in \mathcal{H}_{+1}$. Obviamente, $V'\phi$ é um funcional antilinear em $\mathcal{H}_{+1}$. Para ver que $V'\phi$ é contínuo, precisamos estender (9).

Pondo $C > \text{máx}(a,b)$, temos $|v[\psi]| \leq C\|\psi\|_{+1}^2$, $\psi \in \mathcal{H}_{+1}$. Seja $j[\psi, \phi] = (C h_0 + C - v)[\psi, \phi]$. Evidentemente, j é uma forma sesquilinear simétrica, e tem-se: $0 \leq j[\psi] \leq 2C\|\psi\|_{+1}^2$. Se $j[\psi] = 0$, $v[\psi] = C(h_0 + 1)[\psi] = C\|\psi\|_{+1}^2$.

Então, $C\mathfrak{K}_0[\psi]+C[\psi] \leqslant a\,\mathfrak{K}_0[\psi]+b[\psi]$; $(C-a)\mathfrak{K}_0[\psi]+(C-b)[\psi] \leqslant 0$.

Isto implica $(C-a)\mathfrak{K}_0[\psi]=0$ e $(C-b)[\psi]=0$ (relembre que $\mathfrak{K}_0[\psi]=\|H_0^{1/2}\psi\|^2 \geqslant 0$), e então $\psi=0$. Vemos, portanto, que j é um produto interno. Aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwartz, temos: $|j[\psi,\phi]|^2 \leqslant j[\psi]\,j[\phi] \leqslant 4C^2\|\psi\|_{+1}^2\|\phi\|_{+1}^2$. Logo,

$$|v[\psi,\phi]| = |(C(\mathfrak{K}_0+1)-j)[\psi,\phi]| \leqslant C|(\mathfrak{K}_0+1)[\psi,\phi]|+|j[\psi,\phi]| = C(\psi,\phi)_{+1}+|j[\psi,\phi]| \leqslant 3C\|\psi\|_{+1}\|\phi\|_{+1}.$$

Temos então $|(\psi,V'\phi)_p| \leqslant 3C\|\phi\|_{+1}\|\psi\|_{+1}$, mostrando que o funcional $V'\phi$ é contínuo. Observe que esta expressão também mostra que V' é uma aplicação contínua. De fato, como é fácil ver,

$$\|V'\phi\|_{-1} \leqslant 3C\|\phi\|_{+1} .$$

Definamos, de forma semelhante, $H_0': \mathcal{H}_{+1} \longrightarrow \mathcal{H}_{-1}$ por $(\psi,H_0'\phi)_p = \mathfrak{K}_0[\psi,\phi]$, $\forall \psi,\phi \in \mathcal{H}_{+1}$. A continuidade de $H_0'\phi$ é vista por $|(\psi,H_0'\phi)_p| = |(H_0^{1/2}\psi, H_0^{1/2}\phi)| \leqslant \|H_0^{1/2}\psi\|\,\|H_0^{1/2}\phi\| \leqslant \|\psi\|_{+1}\|\phi\|_{+1}$. Novamente H_0' é contínua, com $\|H_0'\phi\|_{-1} \leqslant \|\phi\|_{+1}$.

Consideremos a aplicação $H_0'+V': \mathcal{H}_{+1} \longrightarrow \mathcal{H}_{-1}$. Esta aplicação é linear, pois tanto V' como H_0' o são separadamente. Observemos também que $(\psi,(H_0'+V')\phi)_p = (\psi,H_0'\phi)_p + (\psi,V'\phi)_p = \mathfrak{K}_0[\psi,\phi] + v[\psi,\phi] = \overline{\mathfrak{K}_0[\phi,\psi]} + \overline{v[\phi,\psi]} = \overline{(\phi,H_0'\psi)_p} + \overline{(\phi,V'\psi)_p} = \overline{(\phi,(H_0'+V')\psi)_p} = ((H_0'+V')\psi,\phi)_p \quad \forall\psi,\phi \in \mathcal{H}_{+1}$.

Mostraremos que $H_0'+V'+(b+1)U'$ é uma bijeção entre $\mathcal{H}_{+1}$ e $\mathcal{H}_{-1}$. Realmente, por (9) vemos que

$$(\psi,(H_0'+V'+bU'+U')\psi)_p = \mathfrak{K}_0[\psi]+v[\psi]+(b+1)[\psi] \geqslant (1-a)\mathfrak{K}_0[\psi]+\|\psi\|^2 \geqslant (1-a)\|\psi\|_{+1}^2 \tag{10}$$

Logo, $H_0'+V'+(b+1)U'$ é injetora. (10) mostra também que $\mathrm{Ran}\,(H_0'+V'+bU'+U')$ é fechado. De fato, como $|(\psi,(H_0'+V'+bU'+U')\psi)_p| \leqslant \|(H_0'+V'+bU'+U')\psi\|_{-1}\|\psi\|_{+1}$, vemos que $(1-a)\|\psi\|_{+1}^2 \leqslant \|(H_0'+V'+bU'+U')\psi\|_{-1}\|\psi\|_{+1}$

ou seja, $(1-a)\|\psi\|_{+1} \leq \|(H_0'+V'+bU'+U')\psi\|_{-1}$. Se $\{\phi_n\} \subset Ran(H_0'+V'+bU'+U')$ e $\|\phi_n-\phi\|_{-1} \to 0,\ n\to\infty$, então pela última equação, $\|\psi_n-\psi_m\|_{+1} \to 0,\ n,m\to\infty$, onde $\phi_n=(H_0'+V'+bU'+U')\psi_n$. Como $\mathcal{H}_{+1}$ é completo, a sequência $\{\psi_n\}$ converge: $\|\psi_n-\psi\|_{+1}\to 0,\ n\to\infty$ para algum $\psi\in\mathcal{H}_{+1}$. Pela continuidade de $H_0'+V'+(b+1)U'$, vemos que $\phi=(H_0'+V'+bU'+U')\psi$, donde $\phi\in Ran(H_0'+V'+bU'+U')$.

Suponhamos que $Ran(H_0'+V'+bU'+U')$ não seja todo $\mathcal{H}_{-1}$. Existe então um elemento $0\neq F\in(\mathcal{H}_{-1})^*$ (espaço adjunto de $\mathcal{H}_{-1}$) tal que $((H_0'+V'+bU'+U')\psi, F)_p=0\quad \forall\psi\in\mathcal{H}_{+1}$, onde a notação usada significa o valor de F em $(H_0'+V'+bU'+U')\psi$. Como espaços de Hilbert são reflexivos e $\mathcal{H}_{-1}=(\mathcal{H}_{+1})^*$, $(\mathcal{H}_{-1})^*$ é isomorfo a $\mathcal{H}_{+1}$. Logo, existe um elemento $\phi\in\mathcal{H}_{+1}$ para o qual $(\phi,(H_0'+V'+bU'+U')\psi)_p=0\quad\forall\psi\in\mathcal{H}_{+1}$. Em particular, tomando $\psi=\phi$, a solução (10), implica $\phi=0$ e por conseguinte, $F=0$, contradição.

Concluímos então que $H_0'+V'+(b+1)U'$ é bijetora. Aplicando o lema anterior, vemos que existe um operador auto-adjunto H em $\mathcal{H}$ tal que $(\phi,H\psi)=(\phi,(H_0'+V')\psi)_p\quad\forall\psi\in D(H),\ \phi\in\mathcal{H}_{+1}$. Ou seja

$$(\phi,H\psi)=h_0[\phi,\psi]+v[\phi,\psi]\quad\forall\psi\in D(H),\ \phi\in\mathcal{H}_{+1}\tag{11}$$

Provemos agora que $Q(H)=Q(H_0)$. De (9) e (11) temos: $0\leq(1-a)h_0[\psi]\leq(\psi,(H+b)\psi)\leq(1+a)h_0[\psi]+2b\|\psi\|^2\quad\forall\psi\in D(H)$

Portanto, $H+b\geq 0$. Podemos então escrever:

$$\|H_0^{1/2}\psi\|^2\leq(1-a)^{-1}\|(H+b)^{1/2}\psi\|^2\quad\forall\psi\in D(H)\tag{12}$$

e

$$\|(H+b)^{1/2}\psi\|^2\leq(1+a)\|H_0^{1/2}\psi\|^2+2b\|\psi\|^2\quad\forall\psi\in D(H)\tag{13}$$

Seja $\phi \in Q(H) = Q(H+b) = D(H+b)^{1/2}$. Como D(H) = D(H+b) é um cerne para $(H + b)^{1/2}$ (veja |6| pg. 281; para a definição de um cerne e suas propriedades, consulte |6| pg. 166); temos que existe $\{\psi_n\} \subset D(H)$ tal que $\psi_n \to \phi$ e $(H+b)^{1/2}\psi_n \to (H+b)^{1/2}\phi$. De (12), vemos que $\{H_0^{1/2}\psi_n\}$ converge. Logo, como $H_0^{1/2}$ é fechado, $\phi \in D(H_0^{1/2}) = Q(H_0)$. Então, $Q(H) \subset Q(H_0)$.

Para provarmos que $Q(H_0) \subset Q(H)$, basta mostrarmos que D(H) é um cerne para a forma $(h_0 + v + b)$, pois, por (11) temos:

$$\|(H+b)^{1/2}\psi\|^2 = (h_0+v+b)[\psi] \quad \forall \psi \in D(H) \qquad (14)$$

Dado $\phi \in Q(H_0)$, $\exists \{\psi_n\} \subset D(H)$ t.q. $\psi_n \to \phi$, e $(h_0+v+b)[\psi_n - \phi] \to 0$; logo, $\|(H+b)^{1/2}(\psi_n - \psi_m)\| = (h_0+v+b)[\psi_n - \psi_m] \to 0$, mostrando que $\{(H+b)^{1/2}\psi_n\}$ converge. Portanto, $\phi \in D(H+b)^{1/2}$, porque $(H + b)^{1/2}$ é fechado, donde $\phi \in Q(H)$.

Antes de verificarmos a hipótese feita acima, notemos que a relação (14) se estende para todo $\phi \in Q(H) = Q(H_0)$. Realmente, considerando a sequência $\{\psi_n\} \subset D(H)$ construída, temos: $\|(H+b)^{1/2}\psi_n\| \to \|(H+b)^{1/2}\phi\|$, e $(h_0+v+b)[\psi_n] \to (h_0+v+b)[\phi]$. Esta última convergência é verificada por

$$|(h_0+v+b)[\phi] - (h_0+v+b)[\psi_n]| \leq |h_0[\phi] - h_0[\psi_n]| + |v[\phi] - v[\psi_n]| + b\,|\,\|\phi\|^2 - \|\psi_n\|^2| .$$

Por (12), vemos que $|h_0[\phi] - h_0[\psi_n]| \to 0$. O terceiro têrmo converge obviamente para zero. Quanto ao segundo têrmo, temos: $|v[\phi] - v[\psi_n]| \leq |v[\phi, \phi-\psi_n]| + |v[\psi_n, \phi-\psi_n]| + 2\,|\mathrm{Im}\, v[\phi, \psi_n]| \to 0$, usando a desigualdade $|v[\phi,\psi]| \leq 3C\|\phi\|_{+1}\|\psi\|_{+1}$ já estabelecida.

Observando que $\|(H+b)^{1/2}\psi\|^2 = h[\psi] + b[\psi]$, onde h é a forma quadrática associada a H, temos então:

$$h[\psi] = h_0[\psi] + v[\psi] \quad \forall \psi \in Q(H) = Q(H_0)$$

Vamos, finalmente, mostrar que D(H) é um cerne para $\mathfrak{h}_0+v+b$. Introduzamos em $Q(H_0)$ o seguinte produto interno:

$$(\psi,\phi)_2 = (\mathfrak{h}_0+v+b+1)[\psi,\phi] \qquad (15)$$

e denotemos por $\| \ \|_2$ a norma correspondente. $(\ , \ )_2$ define realmente um produto interno, já que $\mathfrak{h}_0+v+b$ é positivo, pois de (9),

$$0 \leq (1-a)\mathfrak{h}_0[\psi] \leq (\mathfrak{h}_0+v+b)[\psi] \leq (1+a)\mathfrak{h}_0[\psi] + 2b\cdot\|\psi\|^2 \qquad (16)$$

Observe que (16) mostra também que $Q(H_0)$ com a norma $\| \ \|_2$ é completo. Denotemos por $\mathcal{H}_2$ êste espaço de Hilbert. O fato importante que precisamos demonstrar é o seguinte D(H)é denso em $\mathcal{H}_2$. De fato, se $\phi\in\mathcal{H}_2$ é tal que $(\phi,\psi)_2=0$ $\forall\psi\in D(H)$, então $(\phi,(H+b+1)^{-1}\theta)_2=0$ $\forall\theta\in\mathcal{H}$,onde utilizamos o fato de que $H+b\geqslant 0$ e portanto, $(H+b+1)^{-1}$ existe como um operador limitado definido em todo $\mathcal{H}$. Por (15),temos $(\mathfrak{h}_0+v+b+1)[\phi,(H+b+1)^{-1}\theta]=0$. Isto implica (por (11)), $(\phi,(H+b+1)(H+b+1)^{-1}\theta)=0$, donde $(\phi,\theta)=0$ $\forall\theta\in\mathcal{H}$. Logo, $\phi=0$.

A condição provada acima é suficiente para o que queremos. De fato,se $\psi\in Q(H_0)$, $\exists\{\psi_n\}\subset D(H)$ t. q. $\|\psi_n-\psi\|_2\longrightarrow 0$. Daí, vemos que $\psi_n\longrightarrow\psi$ e $(\mathfrak{h}_0+v+b)[\psi_n-\psi]\longrightarrow 0$ (veja(15)).

■

Se, nêste último teorema, a forma simétrica v fôr originária de um operador $V: D(V)\subset\mathcal{H}_{+1}\longrightarrow\mathcal{H}$,podemos ver que H determinado acima é uma extensão de H_0+V em $D(H_0)\cap D(V)$. De fato, como pode ser visto pela demonstração do lema desta seção, $D(H)=\{\psi\in Q(H_0)$ t. q. $(H_0'+V')\psi\in\mathcal{H}'\}$. Se $\psi\in D(H_0)$, então $H_0\psi\in\mathcal{H}$ logo $H_0'\psi\in\mathcal{H}'$, porque $(\phi,H_0'\psi)_p=(\phi,H_0\psi)=(\phi,UH_0\psi)_p$, logo, $H_0'\psi = UH_0\psi \in \mathcal{H}'$. De forma semelhante, $\psi \in D(V) \Rightarrow V'\psi \in \mathcal{H}'$. Portanto, se $\psi \in D(H_0) \cap D(V)$, temos que $\psi \in D(H)$. O resultado então decorre de (11.) .

Observemos que os resultados desta seção não dependem da forma explícita de H_0. De fato , usamos apenas a condição de H_0 ser auto-adjunto positivo.

B) Determinação de uma classe de Potenciais Permissíveis

O teorema da seção anterior nos fornece uma condição suficiente para definirmos a hamiltoniana por uma forma quadrática. Procuraremos determinar agora uma classe de potenciais para os quais as formas quadráticas associadas obedeçam às condições do teorema citado. Veremos que esta classe engloba a maioria dos potenciais com interêsse físico.

Recordemos antes alguns fatos e definições.

Seja V o operador correspondente à energia potencial $V(\vec{r})$ (função real mensurável). V é o máximo operador de multiplicação por $V(\vec{r})$, isto é,

$$(V\psi)_i(\vec{r}) = V(\vec{r})\psi_i(\vec{r}),\ i=1,2,3,4 \quad \forall \psi \in D(V) = \{\phi \in \mathcal{H} \text{ t.q. } \int |V(\vec{r})|^2 |\phi(\vec{r})|^2 d^3r < \infty\},$$

onde lembramos que $|\phi(\vec{r})|^2 = \phi(\vec{r})^\dagger \phi(\vec{r})$ (produto de matrizes). A forma quadrática associada a V é definida por $v[\psi] = \int V(\vec{r})|\psi(\vec{r})|^2 d^3r$, com o domínio $Q(V) = \{\phi \in \mathcal{H} \text{ t.q. } \int |V(\vec{r})| |\phi(\vec{r})|^2 d^3r < \infty\}$. Tem-se a inclusão $D(V) \subset Q(V)$, como é fácil verificar usando a desigualdade de Cauchy-Schwartz. A forma sesquilinear associada a V é determinada por (2) 2.b . Sendo $v[\psi]$ real, $v[\psi, \phi]$ é simétrica .

Observe ainda que $Q(V) = D(|V|^{1/2})$, onde $|V|^{1/2}$ é o operador de multiplicação por $|V(\vec{r})|^{1/2}$, e $|v[\psi]| \leqslant \| |V|^{1/2}\psi \|^2$ $\forall \psi \in Q(V)$. Também $v[\psi, \phi] = (\psi, V\phi)$ $\forall \phi \in D(V)$ e $\psi \in Q(V)$, como é fácil verificar.

Um operador A é dito relativamente limitado com relação a T, ou T-limitado, se $D(A) \supset D(T)$ e $\|A\psi\| \leqslant a\|T\psi\| + b\|\psi\|$ $\forall \psi \in D(T)$ onde a e b são constantes não-negativas, ou equivalentemente, se $\|A\psi\|^2 \leqslant a'\|T\psi\|^2 + b'\|\psi\|^2$ $\forall \psi \in D(T)$ (veja |6|, pg. 287). O limite relativo de A, ou T-limite, é o ínfimo dos números a (a') para os quais a primeira (segunda) equação é válida. Se o T-limite de A fôr menor que 1, escreveremos $A < T$. Observe então que se A fôr relativamente limitado com relação a T existe λ tal que $\lambda A < T$. Notemos que se $|V|^{1/2} < H_0^{1/2}$, então $Q(V) \supset Q(H_0)$ e $|v[\psi]| \leqslant$ $\leqslant a h_0[\psi] + b\|\psi\|^2$ para algum $a < 1$. Se o T-limite de A fôr zero, escreveremos $A \ll T$.

Precisamos de mais um conceito antes de darmos a caracterização da classe de potenciais a que referimos. Uma função mensurável $f: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ pertence a L^p_w (espaço L^p fraco) se e sòmente se $m_f(t) \leqslant c\,t^{-p}$ para alguma constante c, onde $m_f(t) = \mu\{\vec{r} \in \mathbb{R}^3 \text{ t.q. } |f(\vec{r})| > t\}$, e μ é a medida de Lebesgue em $\mathbb{R}^3$ (evidentemente, L^p_w pode ser definido para funções num espaço medido (M, μ) arbitrário; para os nossos propósitos a definição acima é suficiente). Pode-se demonstrar que $L^p \subset L^p_w$ (|8| pag. 8), sendo a inclusão própria.

<u>Teorema</u>: Se a energia potencial $V: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ fôr central (i. é, $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$) e $|V(\vec{r})|$ fôr monótona decrescente, as seguintes afirmações são equivalentes:

(1) $D(|V|^{1/2}) \supset D(H_0^{1/2})$

(2) $V \in L^3_w + L^\infty$

(3) $|V(r)| \leqslant cr^{-1} + d$, onde $r = |\vec{r}|$, para algum c,d

não negativos

(4) $\lambda |V|^{1/2} < H_0^{1/2}$ para algum λ.

Demonstração: (1) $\rightarrow$ (2)

Suponhamos que (2) seja falsa. Então $V \notin L^3_w + L^\infty$, onde L^∞ é o conjunto das funções mensuráveis limitadas. Logo, $(\forall n)(\forall T)(\exists t \geqslant T)$ tal que

$$m_V(t) > [(4\pi/3)n^6]/t^3 \quad (1)$$

De fato, se existir n_0, T_0 tais que $\forall t \geqslant T_0$ se tenha

$$m_V(t) \leqslant [(4\pi/3)n_0^6]/t^3,$$

podemos separar $V(\vec{r})$ em duas partes: $V(\vec{r}) = V_1(\vec{r}) + V_2(\vec{r})$, onde :

$$V_1(\vec{r}) = \begin{cases} V(\vec{r}) & \text{se } |V(\vec{r})| \geqslant T_0 \\ 0 & \text{se } |V(\vec{r})| < T_0 \end{cases} \quad ; \quad V_2(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{se } |V(\vec{r})| \geqslant T_0 \\ V(\vec{r}) & \text{se } |V(\vec{r})| < T_0 \end{cases}$$

$V_1(\vec{r}) \in L^3_w$, já que se $t \geqslant T_0$, $m_{V_1}(t) = m_V(t)$, ao passo que se $t < T_0$, tem-se $m_{V_1}(t) = m_V(T_0) \leqslant [(4\pi/3)n_0^6]/T_0^3 \leqslant [(4\pi/3)n_0^6]/t^3$.
Também, como é evidente, $V_2 \in L^\infty$, e tem-se então uma contradição. Logo, (1) é verdadeira. Denotaremos por r_t o $\sup\{r \text{ t.q. } |V(r)| > t\}$.
Sendo $|V(r)|$ monótona decrescente, temos $m_V(t) = (4\pi/3)r_t^3$. (1) implica portanto $r_t > n^2/t$.

Fixemos T_0 e escolhamos, para cada n , $t_n > T_0$ tal que $r_{t_n} \equiv r_n > n^2/t_n$. Tomemos em $\mathcal{H}$ um spinor $\psi \in D(H_0)$ tal que $\psi_1(\vec{r}) \geqslant 0$, $\psi_1 \in C_0^\infty$ e $\psi_1(\vec{r}) = 1$ para $|\vec{r}| < 1$. Observe que não é de todo evidente que podemos escolher um spinor co mo êsse. Realmente, lembremos que o espaço de Hilbert que estamos trabalhando não é todo $(L^2(\mathbb{R}^3))^4$, mas uma parte dêste - o subespaço M_+ (veja Seção 1.E). Precisamos então mostrar que podemos escolher um elemento de M_+ com estas características.

Pelo que foi visto na seção 1.e , $\psi \in M_+$ se e somente se

$$(1/2)(1+\beta)U_{FW}U\psi = U_{FW}U\psi \qquad (2)$$

onde U é o operador de Fourier-Plancherel e U_{FW} é a transformação unitária que liga o espaço dos momenta com a representação de Foldy-Wouthuysen. Ora, (2) é satisfeita se e somente se $(U_{FW}U\psi)_j = 0$, j = 3 , 4. Levando em consideração a forma explícita de U_{FW} , temos então

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{4} (\vec{\gamma}.\vec{p})_{3i}\hat{\psi}_i + (m+E(\vec{p}))\hat{\psi}_3 = 0 & (3) \\ \sum_{i=1}^{4} (\vec{\gamma}.\vec{p})_{4i}\hat{\psi}_i + (m+E(\vec{p}))\hat{\psi}_4 = 0 & (4) \end{cases}$$

Portanto, quando $\psi \in M_+$, as suas componentes não são independentes uma da outra. Podemos determinar explìcitamente $\hat{\psi}_3$ e $\hat{\psi}_4$ dados $\hat{\psi}_1$ e $\hat{\psi}_2$. De fato, lembrando que (seção 1.B)

$$\vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

As equações (3) e (4) simplificam-se para

$$\begin{cases} (\vec{\gamma}.\vec{p})_{31}\hat{\psi}_1 + (\vec{\gamma}.\vec{p})_{32}\hat{\psi}_2 + (m+E(\vec{p}))\hat{\psi}_3 = 0 \\ (\vec{\gamma}.\vec{p})_{41}\hat{\psi}_1 + (\vec{\gamma}.\vec{p})_{42}\hat{\psi}_2 + (m+E(\vec{p}))\hat{\psi}_4 = 0 \end{cases}$$

donde

$$\hat{\psi}_3 = \frac{(\vec{\gamma}.\vec{p})_{31}}{m+E(\vec{p})}\hat{\psi}_1 + \frac{(\vec{\gamma}.\vec{p})_{32}}{m+E(\vec{p})}\hat{\psi}_2 \quad (5) \quad \text{e} \quad \hat{\psi}_4 = \frac{(\vec{\gamma}.\vec{p})_{41}}{m+E(\vec{p})}\hat{\psi}_1 + \frac{(\vec{\gamma}.\vec{p})_{42}}{m+E(\vec{p})}\hat{\psi}_2 \quad (6)$$

As relações (5) e (6) são necessárias e suficientes para que $\psi \in H_+$. Podemos então escolher arbitràriamente ψ_1 e ψ_2 em $L^2(\mathbb{R}^3)$ e determinar ψ_3 e ψ_4 pelas equações acima. Devido ao fato de que funções tais como $(\vec{\gamma}.\vec{p})_{ij}/[m+E(\vec{p})]$ serem contínuas e limitadas, ψ_3 e ψ_4 são elementos de $L^2(\mathbb{R}^3)$ se ψ_1 e ψ_2 o forem. Mais ainda (e pela mesma razão), se ψ_1 e ψ_2 forem tais que

$$\int (p^2+m^2)\,|\hat{\psi}_i(\vec{p})|^2 d^3p < \infty \quad , \; i=1,2 \qquad (7)$$

então ψ pertencerá a $D(H_0)$. Escolhendo então ψ tal que $\psi_1 \in C_0^\infty$, $\psi_1(\vec{r}) \geq 0$ e $\psi_1(\vec{r}) = 1$ para $|\vec{r}| \leq 1$ (isto obedece trivialmente (7)) , ψ_2 satisfanendo (7) e ψ_3, ψ_4 determinados por (5) e (6), construímos um spinor obedecendo às características impostas acima.

Depois dêste ligeiro comentário, voltemos a demonstração do teorema. Seja ψ_n o seguinte spinor: $\psi_{ni}(\vec{r}) = \psi_i(\vec{r}/r_n)$, $i=1,2$ e $\psi_{nj}(\vec{r})$ determinado por (5) e (6) para j=3,4 respectivamente.

Temos:

$$\|\psi_n\|^2 = \int |\psi_{n1}(\vec{r})|^2 d^3r + \int |\psi_{n2}(\vec{r})|^2 d^3r + \int |\psi_{n3}(\vec{r})|^2 d^3r + \int |\psi_{n4}(\vec{r})|^2 d^3r$$

Para i=1,2

$$\int |\psi_{ni}(\vec{r})|^2 d^3r = \int |\psi_i(\vec{r}/r_n)|^2 d^3r = \int |\psi_i(\vec{u})|^2 r_n^3 d^3u = r_n^3 C_i \; .$$

Para calcular as outras duas integrais, notemos que $\int |\psi_{nj}(\vec{r})|^2 d^3r = \int |\hat{\psi}_{nj}(\vec{p})|^2 d^3p$ e que $\hat{\psi}_{ni}(\vec{p}) = r_n^3 \hat{\psi}_i(r_n\vec{p})$, $i=1,2$ como é fácil verificar. Então temos, por (5)

$$\hat{\psi}_{n3}(\vec{p}) = \frac{(\vec{\gamma}.\vec{p})_{31}}{m+E(\vec{p})} r_n^3 \hat{\psi}_1(r_n\vec{p}) + \frac{(\vec{\gamma}.\vec{p})_{32}}{m+E(\vec{p})} r_n^3 \hat{\psi}_2(r_n\vec{p})$$

Por um cálculo direto, utilizando o fato de funções tais como

$(\vec{\gamma}\cdot\vec{p})_{31}/[m+E(\vec{p})]$ serem limitadas, temos $\int|\psi_{n3}(\vec{r})|^2 d^3r \leq c_3 r_n^3$ e uma relação semelhante para a quarta integral. Portanto

$$\|\psi_n\| \leq c_5 r_n^{3/2}$$

Determinemos agora $\|H_0^{1/2}\psi_n\|^2$: Temos:

$$\|H_0^{1/2}\psi_n\|^2 = \int(p^2+m^2)^{1/2}|\hat{\psi}_{n1}(\vec{p})|^2 d^3p + \int(p^2+m^2)^{1/2}|\hat{\psi}_{n2}(\vec{p})|^2 d^3p + \int(p^2+m^2)^{1/2}|\hat{\psi}_{n3}(\vec{p})|^2 d^3p + \int(p^2+m^2)^{1/2}|\hat{\psi}_{n4}(\vec{p})|^2 d^3p .$$

Para as duas primeiras integrais, podemos escrever (i = 1 , 2)

$$\int(p^2+m^2)^{1/2}|\hat{\psi}_{ni}(\vec{p})|^2 d^3p = \int(p^2+m^2)^{1/2}|r_n^3\hat{\psi}_i(r_n\vec{p})|^2 d^3p \leq \int(p+m)\, r_n^6\, |\hat{\psi}_i(r_n\vec{p})|^2 d^3p =$$

$$= \int p\, r_n^6 |\hat{\psi}_i(r_n\vec{p})|^2 d^3p + m\int r_n^6 |\hat{\psi}_i(r_n\vec{p})|^2 d^3p =$$

$$= \int (u/r_n)\, r_n^6 |\hat{\psi}_i(\vec{u})|^2 (d^3u/r_n^3) + m\int r_n^6 |\hat{\psi}_i(\vec{u})|^2 (d^3u/r_n^3) =$$

$= c_6 r_n^2 + c_7 r_n^3 = r_n^2(c_6 + c_7 r_n)$ (lembre que ψ_i satisfaz (7), logo, estas integrais convergem).

Quanto a terceira integral,

$$\int(p^2+m^2)^{1/2}|\hat{\psi}_{n3}(\vec{p})|^2 d^3p \leq \int p|\hat{\psi}_{n3}(\vec{p})|^2 d^3p + m\int|\hat{\psi}_{n3}(\vec{p})|^2 d^3p \quad ;$$

já estabelecemos que $m\int|\hat{\psi}_{n3}(\vec{p})|^2 d^3p \leq c_8 r_n^3$. Por um cálculo semelhante ao feito mais acima, podemos ver que $\int p|\hat{\psi}_{n3}(\vec{p})|^2 d^3p \leq c_9 r_n^2$. Logo, $\int(p^2+m^2)^{1/2}|\hat{\psi}_{n3}(\vec{p})|^2 d^3p \leq r_n^2(c_9 + c_8 r_n)$, e uma relação análoga para a quarta integral. Portanto, podemos escrever:

$$\|H_0^{1/2}\psi_n\| \leq r_n(c_{10} + c_{11} r_n)^{1/2}$$

Por outro lado, temos:

$$\int|V(r)||\psi_{n1}(\vec{r})|^2 d^3r = \int|V(r)||\psi_1(\vec{r}/r_n)|^2 d^3r \geq \int_{|\vec{r}|\leq r_n}|V(r)||\psi_1(\vec{r}/r_n)|^2 d^3r = \int_{|\vec{r}|\leq r_n}|V(r)|\,d^3r \geq t_n(4\pi/3)\, r_n^3 .$$

E como $t_n > n^2/r_n$, temos $\int|V(r)||\psi_{n1}(\vec{r})|^2 d^3r \geq c_{12} r_n^2 n^2$

Considere a soma formal $\phi = \sum_n r_n^{-1} n^{-3/2}\psi_n$. Observemos que $\sum_n r_n^{-1} n^{-3/2}\|\psi_n\| \leq \sum_n r_n^{-1} n^{-3/2} c_5 r_n^{3/2} = c_5\sum_n n^{-3/2} r_n^{1/2}$. Como $|V(r)|$ é monótona decrescente e $t_n > T_0$, temos que $r_n \leq$ $\leq r_0 (= r_{T_0})$. Logo, $r_n^{1/2} \leq r_0^{1/2}$ donde $\sum_n r_n^{-1} n^{-3/2}\|\psi_n\| \leq$ $\leq c_5 r_0^{1/2}\sum_n n^{-3/2} < \infty$.

Logo, $\phi \in \mathcal{H}$.

Notemos agora que

$$\sum_n r_n^{-1} n^{-3/2} \| H_0^{1/2} \psi_n \| \leq \sum_n r_n^{-1} n^{-3/2} r_n (c_{10} + c_{11} r_n)^{1/2} = \sum_n n^{-3/2} (c_{10} + c_{11} r_n)^{1/2} \leq \sum_n (c_{10} + c_{11} r_0)^{1/2} n^{-3/2} < \infty .$$

Sendo $\{\phi_m\}$ as somas parciais de ϕ , vemos que $\{H_0^{1/2}\phi_m\}$ converge. Sendo $H_0^{1/2}$ fechado. Temos que $\phi \in D(H_0^{1/2})$.

Por outro lado, temos

$$\int |V(r)| \, |\phi(\vec{r})|^2 d^3r \geq \int |V(r)| \, |\phi_1(\vec{r})|^2 d^3r \geq \int |V(r)| \, |\phi_{m1}(\vec{r})|^2 d^3r$$

para qualquer m (lembre que ψ_{n1} é não-negativo). Então

$$\int |V(r)| \, |\phi(\vec{r})|^2 d^3r \geq \sum_{n=1}^{m} \int |V(r)| \, r_n^{-2} n^{-3} |\psi_{n1}(\vec{r})|^2 d^3r =$$

$$= \sum_{n=1}^{m} r_n^{-2} n^{-3} \int |V(r)| \, |\psi_{n1}(\vec{r})|^2 d^3r \geq \sum_{n=1}^{m} r_n^{-2} n^{-3} c_{12} r_n^2 n^2 = c_{12} \sum_{n=1}^{m} n^{-1}$$

Logo, $\phi \notin D(|V|^{1/2})$, pois $\| |V|^{1/2} \phi \|$ pode tornar-se maior que qualquer número positivo.

Chegamos então a uma contradição. Portanto, (1) $\longrightarrow$ (2).

(2) $\longrightarrow$ (3)

Lembremos que, por hipótese, V é central e $|V(r)|$ é monótona decrescente. Temos então $m_V(t) = (4\pi/3) r_t^3$. Se $V \in L_w^3 + L^\infty$, $V = V_1 + V_2$, com $V_1 \in L_w^3$, $V_2 \in L^\infty$, isto é, existe d t.q. $|V_2(\vec{r})| \leq d$.

Temos $|V(r)| \leq |V_1(\vec{r})| + d$. Portanto se $\vec{r}$ é tal que $|V(r)| > t + d$, tem-se $|V_1(\vec{r})| > t$. Logo, $m_V(t+d) \leq m_{V_1}(t)$. Mas $V_1 \in L_w^3$ significa que existe uma constante c tal que $m_{V_1}(t) < [(4\pi/3)c^3]/t^3$. Logo, temos $(4\pi/3) r_{t+d}^3 < [(4\pi/3)c^3]/t^3$, ou seja $r_{t+d} < c/t$. Seja r arbitrário e ponhamos $t = c/r$.

Temos então $r > r_{t+d}$. Isto implica $|V(r)| \leq t + d$, donde

$$|V(r)| \leq c r^{-1} + d .$$

(3) $\longrightarrow$ (4)

Se $|V(r)| \leq c r^{-1} + d$, temos

$\int |V(r)| |\psi(\vec{r})|^2 d^3r \leq c \int r^{-1} |\psi(\vec{r})|^2 d^3r + d \int |\psi(\vec{r})|^2 d^3r$, desde que a primeira integral no segundo membro exista $(\psi \in \mathcal{H})$ .Utilizando a desigualdade(|6| pg. 307) $\int r^{-1} |\psi(\vec{r})|^2 d^3r \leq (\pi/2) \int p |\hat{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p$, vemos que se $\psi \in D(H_0^{1/2})$, então $\psi \in D(|V|^{1/2})$, e tem-se

$\int |V(r)| |\psi(\vec{r})|^2 d^3r \leq c' \int p |\hat{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p + d \int |\psi(\vec{r})|^2 d^3r \leq c' \int (p^2+m^2)^{1/2} |\hat{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p + d \|\psi\|^2$, ou seja, $\| |V|^{1/2} \psi \|^2 \leq c' \| H_0^{1/2} \psi \|^2 + d \|\psi\|^2$. Portanto, existe λ tal que $\lambda |V|^{1/2} < H_0^{1/2}$.

(4) $\longrightarrow$ (1)

Imediato, da definição. ▨

Para que V defina uma forma quqdrática que obedeça às condições do teorema da seção anterior, precisamos ter $c' < 1$ (veja a parte (3) $\longrightarrow$ (4) do teorema acima).Como $c' = c(\pi/2)$, devemos ter $c < (2/\pi)$. Se $V(r)$ é um potencial Coulombiano , $|V(r)| = Z e^2 / r$, devemos então ter $Z e^2 < (2/\pi)$, ou seja $Z < 2/(\pi e^2)$. No sistema de unidades em que estamos trabalhando ($\hbar = c = 1$), $e^2 = 1/137$, de forma que $Z < (274/\pi) \simeq 87$. Esta condição engloba a maioria dos potenciais com interêsse físico. Observe de passagem que o potencial de Yukawa $(c\, e^{-\mu r}/r)$ obedece à condição (3) (com $c < (2/\pi)$).

O teorema demonstrado nesta seção supôs em sua hipótese a condição de $V(\vec{r})$ ser central e $|V(\vec{r})|$ monótona decrescente. Isto, entretanto, não é muito fundamental. Realmente, existe uma classe mais geral de potenciais,não necessàriamente centrais e $|V(\vec{r})|$ não necessàriamente monótona decrescente para a qual a tese dêste teorema permanece essencialmente a mesma. Para detalhes a respeito desta classe, consulte |8| pg. 6.

Queremos observar, por fim, que o teorema desta seção é uma generalização de um resultado obtido por Simon (|8|, pg. 36) para o caso relativista. É de interêsse notar que para o caso não-relativista, a singularidade permitida para o potencial é maior que para o caso relativista. Realmente se V satisfaz as condições que impuzemos acima (ou se V pertencer à classe mais geral já mencionada), para que a forma quadrática associada seja tal que a hamiltoniana possa ser definida por uma forma sesquilinear, é suficiente se ter

$$|V(r)| \leqslant c r^{-2} + \alpha ,$$

com $c < (8m)^{-1}$ (m = massa da partícula).

C) Estrutura grossa do Espectro

Quando se analisa experimentalmente o espectro da energia de uma partícula em um campo externo, constata -se que êle consiste em geral de duas partes: uma parte "discreta" e outra "contínua" (a definição precisa de espectro discreto e contínuo de um operador é dada no Apêndice II).

Nesta seção, procuraremos mostrar que isto é realmente o que acontece ao espectro do operador H, se fizermos mais algumas restrições no potencial V. No final da seção, mostraremos que mesmo com estas restrições, a classe de potenciais para a qual o espectro de H tem a propriedade mencionada acima ainda é su ficientemente grande para abranger a maioria dos casos com interêsse físico.

A primeira restrição em V é a seguinte: $V < H_o$. Explìcitamente, suporemos que $D(V) \supset D(H_0)$, e

$$\|V\psi\| \leq a\|H_o\psi\| + b\|\psi\| \quad \forall \psi \in D(H_o),\ a<1 \quad (1).$$

Esta condição implica que

$$\|V(H_o-E)^{-1}\| < 1 \qquad (2)$$

para E suficientemente negativo. De fato, $\forall \psi \in \mathcal{H}$, tem-se por (1) $\|V(H_o-E)^{-1}\psi\| \leq a\|H_o(H_o-E)^{-1}\psi\| + b\|(H_o-E)^{-1}\psi\|$, para qualquer $E < m$ (condição para que $(H_0 - E)^{-1}$ exista). Mas

$$\|(H_o-E)^{-1}\psi\|^2 =$$

$$= \int_m^\infty (\lambda-E)^{-2} d\|E_\lambda\psi\|^2 \leq (m-E)^{-2}\|\psi\|^2 \quad \text{e} \quad \|H_o(H_o-E)^{-1}\psi\|^2 = \int_m^\infty [\lambda/(\lambda-E)]^2 d\|E_\lambda\psi\|^2 \leq$$

$\leq \|\psi\|^2$, se $E<0$. Logo, se $E<0$, vem

$$\|V(H_o-E)^{-1}\psi\| \leq a\|\psi\| + b(m-E)^{-1}\|\psi\| = [a + b(m-E)^{-1}]\|\psi\|.$$

Concluímos então que $V(H_o-E)^{-1}$ é um operador limitado definido em todo $\mathcal{H}$, e $\|V(H_o-E)^{-1}\| \leq [a+b(m-E)^{-1}]$. Portanto, escolhendo E suficientemente negativo, vemos que $\|V(H_o-E)^{-1}\| < 1$.

A relação (1) conduz ainda a um outro fato, êste bastante importante por permitir uma boa simplificação nos argumentos que se seguem abaixo. Com efeito, com base no teorema de Kato-Rellich (|6|, pg. 287 - para um enunciado, veja Apêndice II, no decorrer da demonstração do teorema A II. 2), (1) é uma condição suficiente para que $H_0 + V$ seja auto-adjunto em $D(H_0) \cap D(V) = D(H_0)$. Mas, como foi indicado no final da seção 2.a, a hamiltoniana H (definida por uma forma quadrática) é uma extensão de $H_0 + V$ em $D(H_0) \cap D(V)$. Como operadores auto-adjuntos são máximos simétricos (i.é, se um operador simétrico é uma extensão de um operador auto-adjunto, êles são iguais - demonstração imediata) temos que $H = H_0 + V$, com $D(H) = D(H_0)$.

Com esta observação, torna-se fácil estabelecer o seguinte

<u>Teorema</u> : Se $V < H_0$, tem-se para E suficientemente negativo

$$(H-E)^{-1} = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} U_n$$

onde $U_n = (H_0-E)^{-1} V (H_0-E)^{-1} V \dots V (H_0-E)^{-1}$ ($n-1$ V's) e $H = H_0 + V$.

<u>Demonstração</u>: Notemos primeiramente que

$$\|U_n\| \leq \|(H_0-E)^{-1} V (H_0-E)^{-1}\| \, \|V(H_0-E)^{-1}\|^{n-2} .$$

Tomando E suficientemente negativo, $\|V(H_0-E)^{-1}\| < 1$, de forma que a série acima converge (na norma). Para provar a igualdade, estabeleçamos a seguinte relação:

$$\sum_{n=1}^{N} (-1)^{n+1} U_n = (H-E)^{-1} + (-1)^{N+1} (H-E)^{-1} (H_0-E) U_{N+1} \qquad (3)$$

Para N=1, a relação é $(H_0-E)^{-1} = (H-E)^{-1} + (H-E)^{-1} V (H_0-E)^{-1}$. Isto é verdadeiro, pois de $(H-E) = (H_0-E) + V$, multiplicando à esquerda por $(H-E)^{-1}$ vem $I_{D(H_0)} = (H-E)^{-1}(H_0-E) + (H-E)^{-1} V$, onde $I_{D(H_0)}$ é a identidade em $D(H_0)$. A existência de $(H-E)^{-1}$ para E suficientemente negativo é assegurada pelo fato de H ser um operador limitado inferiormente (veja |6|, pg. 281). Multiplicando ambos os membros desta última relação por $(H_0-E)^{-1}$ à direita, temos $(H_0-E)^{-1} = (H-E)^{-1} + (H-E)^{-1} V (H_0-E)^{-1}$.

Suponhamos (3) verdadeira para $N = p$:

$$\sum_{n=1}^{p} (-1)^{n+1} U_n = (H-E)^{-1} + (-1)^{p+1}(H-E)^{-1}(H_0-E)U_{p+1} \qquad (4)$$

Multiplicando ambos os membros de (4) por $V(H_0-E)^{-1}$ à direita vem:

$$\sum_{n=1}^{p} (-1)^{n+1} U_{n+1} = (H-E)^{-1}V(H_0-E)^{-1} + (-1)^{p+1}(H-E)^{-1}(H_0-E)U_{p+2}$$

Mas $(H-E)^{-1}V(H_0-E)^{-1} = (H-E)^{-1}(V \restriction D(H_0))(H_0-E)^{-1} = (H-E)^{-1}(H-H_0)(H_0-E)^{-1} =$

$= (H-E)^{-1}[(H-E)-(H_0-E)](H_0-E)^{-1} = (H_0-E)^{-1} - (H-E)^{-1}.$

Logo,

$$\sum_{n=1}^{p} (-1)^{n+1} U_{n+1} = U_1 - (H-E)^{-1} + (-1)^{p+1}(H-E)^{-1}(H_0-E)U_{p+1} \quad , \quad \text{ou seja,}$$

$$U_1 + \sum_{k=2}^{p+1} (-1)^{k+1} U_k = (H-E)^{-1} + (-1)^{p+2}(H-E)^{-1}(H_0-E)U_{p+1} \quad , \text{ donde}$$

$$\sum_{k=1}^{p+1} (-1)^{k+1} U_k = (H-E)^{-1} + (-1)^{p+2}(H-E)^{-1}(H_0-E)U_{p+1} .$$

Vemos então que (3) vale para $N = p + 1$. Portanto, (3) é válida para N arbitrário. Tomando o limite quando $N \longrightarrow$, temos então

$$\sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} U_k = (H-E)^{-1} \qquad (5)$$

Aqui, utilizamos o fato de que $(H-E)^{-1}(H_0-E)U_{N+1} \longrightarrow 0$, $N \longrightarrow \infty$. Isto é fácil de ver, pois $\|(H-E)^{-1}(H_0-E)U_{N+1}\| \leq \|(H-E)^{-1}\| \, \|V(H_0-E)^{-1}\|^N$.

De (5), tiramos:

$$(H-E)^{-1} - (H_0-E)^{-1} = \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^{n+1} U_n \qquad (6)$$

Esta equação vai nos sugerir uma outra restrição no potencial V. De fato, se a série no segundo membro de (6) fôr um operador compacto, os espectros essenciais de H e H_0 serão os mesmos (veja Apêndice II). Como $\sigma_{ess}(H_0) = [m, +\infty)$ (porque H_0 tem um espectro puramente contínuo - como é fácil verificar pe la forma explícita da família espectral, dada em 1.e - e portanto $\sigma_{ess}(H_0)=\sigma(H_0)$), isto significa que a parte do espectro de H não contida em $[m,+\infty)$ consiste apenas de auto-valores isolados com multiplicidade finita. E mais, se êstes auto-valores acumularem em um ponto, êste ponto é necessàriamente o número m. Teremos então um espectro de H com as mesmas características que o encontrado experimentalmente.

O próximo passo, portanto, é ver qual restrição a V precisamos impor para que a série em (6) seja um operador compacto.

Em primeiro lugar, notemos que $\sum_{n=2}^{\infty}(-1)^{n+1}U_n$ será compacto se cada U_n o fôr.

De fato, basta lembrarmos que o conjunto dos operadores compactos forma um subespaço (i.é, uma variedade linear fechada) do espaço dos operadores limitados (|6|, pg. 158). Agora, para que U_n seja compacto, basta que $(H_0-E)^{-1}V(H_0-E)^{-1}$ o seja, pois o produto de um operador compacto por um limitado é compacto (|6|, pg. 158).

Vejamos agora como todas estas restrições afetam as possíveis funções $V(\vec{r})$. Vamos nos restringir a potenciais centrais, para os quais $|V(r)|$ é monótona decrescente .

Bàsicamente, impuzemos (no total) três condições:

(1) $|V|^{1/2} < H_0^{1/2}$

(2) $V < H_0$

(3) $(H_0-E)^{-1}V(H_0-E)^{-1}$ compacto (para E suficiente-

mente negativo, tal que (6) é válida).

A condição (1) nos possibilita definir H por uma forma quadrática; (2) e (3) asseguram que o espectro de H tem o comportamento "correto". Além disso, de (2) deduz-se que $H = H_0 + V$.

Vimos na seção anterior, que se $|V(r)| \leq cr^{-1} + d$, com $c < (2/\pi)$, (1) é satisfeita. Na verdade, esta é a maior classe de potenciais (centrais com $|V(r)|$ monótono decrescente) para os quais podemos definir H por uma forma quadrática (a menos de um possível aumento no conjunto das constantes c's). Agora, para esta classe, a restrição (2) não é muito forte. De fato, mostraremos que se $c < 1/2$, (2) é satisfeita. Isto decorre da desigualdade (|6|, pgs. 307 e 350)

$$\int r^{-2} |\psi(\vec{r})|^2 d^3r \leq 4 \int p^2 |\hat{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p$$

Temos:

$$\|(V-d)\psi\|^2 = \int |V(r)-d|^2 |\psi(\vec{r})|^2 d^3r \leq c^2 \int r^{-2} |\psi(\vec{r})|^2 d^3r \leq 4c^2 \int p^2 |\hat{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p \leq$$

$$\leq 4c^2 \int (p^2+m^2) |\hat{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p = 4c^2 \|H_0\psi\|^2 .$$ Logo, $\|V\psi\| \leq \|(V-d)\psi\| + d\|\psi\| \leq 2c\|H_0\psi\| + d\|\psi\|$.

Estudemos, finalmente, a condição (3). Vamos mostrar que ela é satisfeita para os potenciais tais que $|V(r)| \leq c/r$, para qualquer c e qualquer $E < m$. O fato de têrmos $d = 0$ aqui é fìsicamente claro, pois para têrmos a fronteira entre o espectro "discreto" e o espectro "contínuo" no ponto m, intuitivamente o potencial deve tender para zero, quando $r \to \infty$.

Dado $V(r)$ obedecendo a condição acima, ponhamos

$$V_n(r) = \begin{cases} V(r) & , r \leq n \\ 0 & , r > n \end{cases}$$

Observe que $V_n(x) \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Se V_n é o operador de multiplicação por $V_n(x)$ ($D(V_n) \supset D(V)$, evidentemente) mostraremos que $(H_0-E)^{-1} V_n (H_0-E)^{-1}$ é um operador de Hilbert-Schmidt, para $E< m$ (esta classe de operadores está contida na dos operadores compactos - veja, p.ex., |8| apêndice).No espaço dos momenta, êste operador tem o kernel $[(p^2+m^2)^{1/2}-E]^{-1} \hat{V}_n(\vec{p}-\vec{q}) [(q^2+m^2)^{1/2}-E]^{-1}$, onde $\hat{V}_n$ é a transformada de Fourier de V_n (e portanto, $\hat{V}_n \in L^2(\mathbb{R}^3)$), como pode ser verificado diretamente. A condição para que $(H_0-E)^{-1} V_n (H_0-E)^{-1}$ seja Hilbert-Schmidt é equivalente ao kernel acima ser de quadrado integrável (|8|, pg.221) i.é,

$$I = \iint \frac{|\hat{V}_n(\vec{p}-\vec{q})|^2}{[(p^2+m^2)^{1/2}-E]^2\,[(q^2+m^2)^{1/2}-E]^2}\, d^3p\, d^3q < \infty$$

Mostraremos que isto de fato acontece. Ponhamos $f(p)=[(p^2+m^2)^{1/2}-E]^{-2}$ e $g(\vec{p}-\vec{q}) = |\hat{V}_n(\vec{p}-\vec{q})|^2$. Então $I = \iint f(p)\, g(\vec{p}-\vec{q}) f(q)\, d^3p\, d^3q = \int f(p)\, h(\vec{p})\, d^3p$, onde $h(\vec{p}) = \int g(\vec{p}-\vec{q}) f(q)\, d^3q$.

A função f pertence a $L^2(\mathbb{R}^3)$, como é fácil verificar. Portanto, I será finita se h também fôr de $L^2(\mathbb{R}^3)$ (por Cauchy-Schwartz). Mas isto realmente é verdade, pois como $g \in L^1$ e $f \in L^2$, $h \in L^2$. Aqui, utilizamos uma consequência de um teorema de interpolação (o teorema de Riesz-Thorin) que afirma ser $L^p * L^q \subset L^s$ se $p^{-1}+q^{-1} = 1+s^{-1}$, onde $L^p * L^q = \left\{ \int g(\vec{p}-\vec{q})\, f(\vec{q})\, d^3q \right.$, com $\left. g \in L^p \text{ e } f \in L^q \right\}$. Para uma discussão geral sôbre fórmulas de interpolação, veja |9|

Para concluirmos, vamos mostrar agora que $(H_0 - E)^{-1} V (H_0 - E)^{-1}$ é o limite (na norma) de $(H_0-E)^{-1} V_n (H_0-E)^{-1}$ e, portanto é compacto. Temos

Calculemos $\|(V-V_n)(H_0-E)^{-1}\|$. Seja $\psi \in \mathcal{H}$ arbitrário e ponhamos $\phi = (H_0-E)^{-1}\psi$. Temos:

$$\|(V-V_n)(H_0-E)^{-1}\psi\|^2 = \|(V-V_n)\phi\|^2 = \int |V(\vec{r})-V_n(\vec{r})|^2 |\phi(\vec{r})|^2 d^3r = \int_{r>n} |V(\vec{r})|^2 |\phi(\vec{r})|^2 d^3r \leq$$

$$\leq c^2 \int_{r>n} r^{-2} |\phi(\vec{r})|^2 d^3r \leq c^2 n^{-2} \int |\phi(\vec{r})|^2 d^3r = c^2 n^{-2} \|(H_0-E)^{-1}\psi\|^2 .$$

Logo, $\|(V-V_n)(H_0-E)^{-1}\psi\| \leq c n^{-1} \|(H_0-E)^{-1}\| \, \|\psi\|$, donde $\|(V-V_n)(H_0-E)^{-1}\| \leq c n^{-1} \|(H_0-E)^{-1}\|$.

Portanto, $\|(H_0-E)^{-1}V(H_0-E)^{-1} - (H_0-E)^{-1}V_n(H_0-E)^{-1}\| \leq c n^{-1} \|(H_0-E)^{-1}\|^2 \longrightarrow 0$, $n \to \infty$.

Em conclusão, os potenciais que obedecem $|V(r)| \leq c/r$, com $c < 1/2$ dão origem a um espectro de H concordante com a experiência. Isto é particularmente verdadeiro para o potencial de Yukawa ($c e^{-\mu r}/r$, desde que $c < 1/2$) e para o de Coulomb, desde que $Z < 137/2 = 68,5$. Isto cobre uma boa parte dos potenciais com interêsse físico.

---X---

C A P Í T U L O III

" HAMILTONIANA PARA UM SISTEMA DE N PARTÍCULAS "

Até agora, restringimo-nos ao tratamento de uma partícula em um campo externo. Nêste capítulo, mostraremos que podemos definir uma Hamiltoniana (por uma forma quadrática) para um sistema de N partículas, admitindo que a interação entre a partícula i e j possa ser descrita por uma energia potencial $V_{ij} = V_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$, tal que $|V_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)|$ seja uma função monótona decrescente, sujeita a uma restrição análoga à encontrada na seção 2.B.

Observemos que o espaço de Hilbert agora é o produto tensorial $H_+ \otimes H_+ \otimes \cdots \otimes H_+$ (N fatôres)dos espaços introduzidos em 1.E. Um spinor dêste espaço será representado por uma coluna $4^N \times 1$, onde a j-ésima componente é um elemento de $L^2(\mathbb{R}^{3N})$. As 4^N componentes dêste spinor não são independentes. A relação entre elas pode ser deduzida da análise feita em 2.B.

A Hamiltoniana H_0 é definida, no espaço dos momenta, por $\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} (p_i^2 + m_i^2)^{1/2}$. Utilizando um processo semelhante ao desenvolvido em 1.C., podemos mostrar que H_0 é auto-adjunto positivo (a cota inferior agora é $\sum_{i=1}^{N} m_i$,ao invés de m, como no caso de uma partícula).

Temos o

<u>Teorema</u>: Seja H_0 tal que $\hat{H}_0 = \sum_{j=1}^{N} (p_i^2 + m_i^2)^{1/2}$ e $V = \sum_{i<j}^{1,N} V_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ onde $|V_{ij}(u)|$ é monótona decrescente. Se

$|V_{ij}(u)| \leqslant cu^{-1} + d$, onde $c < [4/\pi N(N-1)]$, existe um único operador auto-adjunto em $\mathcal{H}$, com $Q(H) = Q(H_0)$ e $h[\psi] = h_0[\psi] + v[\psi]$ $\forall \psi \in Q(H_0)$(Notação das seções 2.A e 2.B)

Demonstração: pelo teorema da seção 2.A, basta mostrar que com as condições da hipótese, $|V|^{1/2} < H_0^{1/2}$. Seja

$$I = \int |V_{ij}(|\vec{\pi}_i - \vec{\pi}_j|)| \, |\psi(\vec{\pi}_1, \dots, \vec{\pi}_N)|^2 d^3\pi_1 \dots d^3\pi_N$$

Façamos a substituição $\vec{u}_k = \vec{\pi}_k$, $k \neq i$ e $\vec{u}_i = \vec{\pi}_i - \vec{\pi}_j$. O Jacobino desta transformação é igual a um, de forma que

$$I = \int |V_{ij}(u_i)| \, |\psi(\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_i + \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_N)|^2 d^3u_1 \dots d^3u_N$$

ou

$$I = \int d^3u_1 \dots d^3u_{i-1} d^3u_{i+1} \dots d^3u_N \int |V_{ij}(u_i)| \, |\psi(\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_i + \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_N)|^2 d^3u_i \leqslant$$

$$\leqslant c \int d^3u_1 \dots d^3u_{i-1} d^3u_{i+1} \dots d^3u_N \int u_i^{-1} |\psi(\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_i + \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_N)|^2 d^3u_i + d\|\psi\|^2 .$$

Seja

$$J = c \int d^3u_1 \dots d^3u_{i-1} d^3u_{i+1} \dots d^3u_N \int u_i^{-1} |\psi(\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_i + \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_N)|^2 d^3u_i$$

Utilizando a desigualdade já usada na demonstração do teorema da seção 2.B, temos :

$$\int u_i^{-1} |\psi(\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_i + \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_N)|^2 d^3u_i \leqslant (\pi/2) \int p_i |\hat{\psi}_0(\vec{u}_1, \dots, \vec{p}_i, \dots, \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_N)|^2 d^3p_i$$

onde

$$\hat{\psi}_0(\vec{u}_1, \dots, \vec{p}_i, \dots, \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_N) = (2\pi)^{-3/2} \int e^{-i\vec{p}_i \cdot \vec{u}_i} \psi(\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_i + \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_N) d^3u_i =$$

$$= (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{p}_i \cdot \vec{u}_j} \int e^{-i\vec{p}_i \cdot \vec{v}_i} \psi(\vec{u}_1, \dots, \vec{v}_i, \dots, \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_N) d^3v_i = e^{i\vec{p}_i \cdot \vec{u}_j} \hat{\psi}'(\vec{u}_1, \dots, \vec{p}_i, \dots, \vec{u}_N)$$

Portanto,

$$\int u_i^{-1} |\psi(\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_i + \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_j, \dots, \vec{u}_N)|^2 d^3u_i \leqslant (\pi/2) \int p_i |\hat{\psi}'(\vec{u}_1, \dots, \vec{p}_i, \dots, \vec{u}_N)|^2 d^3p_i$$

Então,

$$J \leqslant (c\pi/2) \int d^3u_1 \dots d^3u_{i-1} d^3u_{i+1} \dots d^3u_N \int p_i |\hat{\psi}'(\vec{u}_1, \dots, \vec{p}_i, \dots, \vec{u}_N)|^2 d^3p_i =$$

$$= (c\pi/2) \int d^3p_1 \dots d^3p_N \; p_i |\hat{\psi}(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)|^2 ,$$

onde $\hat{\psi}$ é a transformada de Fourier de ψ . Temos então

$$J \leqslant (c\pi/2)\int \sum_{i=1}^{N} (p_i^2+m_i^2)^{1/2} |\hat{\psi}(\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_N)|^2 d^3p_1 \dots d^3p_N = (c\pi/2)\, \| H_0^{1/2}\psi \|^2 .$$

Logo, $\displaystyle\int |V_{ij}(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)|\,|\psi(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N)|^2 d^3r_1 \dots d^3r_N \leqslant (c\pi/2)\, \| H_0^{1/2}\psi\|^2 + d\,\|\psi\|^2$,donde

$$\| |V|^{1/2}\psi\|^2 \leqslant \int \sum_{i<j}^{1,N} |V_{ij}(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)|\,|\psi(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N)|^2 d^3r_1 \dots d^3r_N \leqslant \left[\frac{c\pi}{2}\,\frac{N(N-1)}{2}\right] \|H_0\psi\|^2 + \frac{dN(N-1)}{2}\,\|\psi\|^2 .$$

Portanto, se $c < \dfrac{4}{\pi N(N-1)}$, $|V|^{1/2} < H_0^{1/2}$. $\blacksquare$

Vemos então que a situação para N partículas, no que se refere à energia potencial, é mais severa que para o caso de uma partícula. Por exemplo, se a interação fôr Coulombiana, e as cargas das partículas forem iguais a e(carga do elétron), devemos nos restringir a $N < 14$.

---X---

A P Ê N D I C E   I

" OPERADORES SIMÉTRICOS E AUTO - ADJUNTOS "

Nêste apêndice, recordamos as definições de operadores simétricos e auto-adjuntos, bem como algumas de suas propriedades. Culminaremos com a demonstração de um critério importante para estabelecer a auto-adjunticidade de operadores simétricos fechados, utilizado na seção 1.C em conexão com a hamiltoniana de Dirac para uma partícula livre.

Um operador T no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é uma aplicação linear $T:D(T)\to\mathcal{H}$, definida numa variedade linear D(T) (o domínio de T) e tomando valores em $\mathcal{H}$. T é limitado, se existir $M \geq 0$ tal que $\|T\psi\| \leq M\|\psi\|$ $\forall \psi \in D(T)$. A menor destas constantes é chamada norma de T, denotada por $\|T\|$. Um tal operador pode ser estendido para todo $\mathcal{H}$, sem modificar a cota M , como é fácil verificar.
Por esta razão, sempre que tratarmos de operadores limitados, consideraremos que estão definidos no espaço todo.

Seja $T: D(T)\to\mathcal{H}$ tal que D(T) é denso em $\mathcal{H}$. Definimos o operador T' - o adjunto de T - da seguinte maneira. $D(T')$ consiste de todos os vetôres $\psi\in\mathcal{H}$ para o qual exista $\phi\in\mathcal{H}$ e se tenha $(T\theta,\psi)=(\theta,\phi)$ $\forall\theta\in D(T)$. Pomos então $T'\psi=\phi$.
É fácil ver que $D(T')$ é uma variedade linear e que $T': D(T')\to\mathcal{H}$ é linear.

Observe que $D(T')$ pode muito bem consistir apenas do vetôr nulo. Entretanto, se T fôr limitado, $D(T')$ será $\mathcal{H}$. Isto decorre imediatamente do teorema da representação de Riesz, |5| pgs. 31-32. Nêste caso, temos também $\|T'\| = \|T\|$.

Qualquer que seja $D(T^*)$, o operador adjunto tem a seguinte importante propriedade: Se $\{\psi_n\} \subset D(T^*)$ é tal que $\psi_n \to \psi$ e $T^*\psi_n \to \phi$, então $\psi \in D(T^*)$ e $T^*\psi = \phi$. De fato, pela continuidade do produto escalar, temos,

$\forall\, \theta \in D(T)$, $(T\theta, \psi) = \lim_n (T\theta, \psi_n) = \lim_n (\theta, T^*\psi_n) = (\theta, \phi)$, mostrando.

Exprimimos esta propriedade, dizendo que T^* é um operador fechado.

Mais geralmente, um operador $T: D(T) \to \mathcal{H}$ é dito fechado, se para tôda sequência $\{\psi_n\} \subset D(T)$ tal que $\psi_n \to \psi$ e $T\psi_n \to \phi$, se tenha $\psi \in D(T)$ e $T\psi = \phi$. Evidentemente , todo operador limitado (com domínio igual a $\mathcal{H}$, ou, pelo menos, fechado) é fechado.

Dizemos que o operador $S: D(S) \to \mathcal{H}$ é uma extensão de $T: D(T) \to \mathcal{H}$ (e T uma restrição de S)se $D(T) \subset D(S)$ e $T\psi = S\psi$ $\forall \psi \in D(T)$. Nêste caso, escreveremos $T \subset S$. Dados $T_1: D(T_1) \to \mathcal{H}$ e $T_2: D(T_2) \to \mathcal{H}$, definimos $T = T_1 + T_2 : D(T) \to \mathcal{H}$ da seguinte maneira: $D(T) = D(T_1) \cap D(T_2)$ e $T\psi = T_1\psi + T_2\psi$ $\forall \psi \in D(T)$. De forma semelhante, definimos $S = T_1 T_2$, com $D(S) = \{\psi \in D(T_2)$ t.q. $T_2\psi \in D(T_1)\}$ e $S\psi = T_1(T_2\psi)$ $\forall \psi \in D(S)$.

Seja $T: D(T) \to \mathcal{H}$ tal que D(T) seja denso em $\mathcal{H}$. O operador T é dito simétrico se $T \subset T^*$. Equivalentemente, T é simétrico se D(T) fôr denso em $\mathcal{H}$ e

$$(T\psi, \phi) = (\psi, T\phi) \quad \forall \psi, \phi \in D(T)$$

Dizemos que T é auto-adjunto se $T = T^*$.

Para demonstrarmos o critério mencionado no início dêste Apêndice, precisamos de dois lemas:

Lema Al.1: Se $N(T)=\{\psi\in D(T)$ t.q. $T\psi=0\}$ e $Ran(T)=\{T\psi,\ \psi\in D(T)\}$, então $N(T^*)=[Ran(T)]^{\perp}$.

Demonstração: De fato, se $\psi\in N(T^*)$, temos $T^*\psi=0$. Logo,

$$\forall\phi\in D(T),\quad (T\phi,\psi)=(\phi,T^*\psi)=0,$$

logo $\psi\in[Ran(T)]^{\perp}$. Inversamente, se $\psi\in[Ran(T)]^{\perp}$, tem-se $(T\phi,\psi)=0$ $\forall\phi\in D(T)$. Isto mostra que $\psi\in D(T^*)$, e $T^*\psi=0$. Logo $\psi\in N(T^*)$.

∎

Lema Al.2: Se T é simétrico e fechado, $Ran(T-\alpha)$, $\mathrm{Im}\,\alpha\neq 0$ é fechado em $\mathcal{H}$ (logo, é um subespaço).

Demonstração: Realmente, temos:

$$\|(T-\alpha)\psi\|^2=\|(T-\mathrm{Re}\,\alpha)\psi\|^2+(\mathrm{Im}\,\alpha)^2\|\psi\|^2\quad\forall\psi\in D(T),$$

porque se T é simétrico, $T-\mathrm{Re}\,\alpha$ também é. Daí, $\|(T-\alpha)\psi\|\geq(\mathrm{Im}\,\alpha)\|\psi\|$. Seja $\{\phi_n\}\subset Ran(T-\alpha)$, com $\phi_n\longrightarrow\phi$. Existe $\{\psi_n\}\subset D(T)$ tal que $\phi_n=(T-\alpha)\psi_n$. Da última relação acima, vemos que se $\mathrm{Im}\,\alpha\neq 0$, $\{\psi_n\}$ converge. Seja $\psi_n\longrightarrow\psi$. Como $(T-\alpha)\psi_n\to\phi$, temos $T\psi_n\longrightarrow\phi+\alpha\psi$. Sendo T fechado, $\psi\in D(T)$ e $T\psi=\phi+\alpha\psi$. Logo, $\phi\in Ran(T-\alpha)$.

∎

Teorema Al.3: Seja T simétrico e fechado. T é auto-adjunto se e só se $T^*\psi=\alpha\psi,\ \mathrm{Im}\,\alpha\neq 0\implies\psi=0$.

Demonstração: Se T é auto-adjunto e $T^*\psi=\alpha\psi$, $\mathrm{Im}\,\alpha\neq 0$, então, $T\psi=\alpha\psi$. Logo, $(T\psi,\psi)=\bar{\alpha}(\psi,\psi)$ e $\overline{(T\psi,\psi)}=\alpha(\psi,\psi)$. Como T é simétrico, $\overline{(T\psi,\psi)}=(\psi,T\psi)=(T\psi,\psi)$, e portanto $(\alpha-\bar{\alpha})\|\psi\|^2=0$. Isto implica $(\mathrm{Im}\,\alpha)\|\psi\|^2=0$, donde $\psi=0$. Se $T^*\psi=\alpha\psi,\ \mathrm{Im}\,\alpha\neq 0\implies\psi=0$, temos que $N(T^*-\alpha)=\{0\}$. Pelo Lema Al.1 vem então que $[Ran(T-\bar{\alpha})]^{\perp}=\{0\}$, já que o adjunto de

$(T-\bar{\alpha})$ é $(T'-\alpha)$, como é fácil verificar. Logo, $Ran(T-\bar{\alpha})$ é denso em $\mathcal{H}$, e como é fechado (Lema A1.2) vem que $Ran(T-\bar{\alpha})=\mathcal{H}$.

Seja agora $\phi \in D(T')$. Pelo argumento anterior, existe $\psi \in D(T)$ tal que $(T-\bar{\alpha})\psi = (T'-\bar{\alpha})\phi$. Mas como T é simétrico, $(T-\bar{\alpha})\psi = (T'-\bar{\alpha})\psi$. Portanto, temos $(T'-\bar{\alpha})(\psi-\phi)=0$. Isto implica $\psi=\phi$ pela hipótese. Logo, $\phi \in D(T)$. Concluímos então que $D(T^*) \subset D(T)$, e isto é suficiente para ver que T é auto-adjunto, porque, como assumimos, $T \subset T^*$.

∎

Uma outra caracterização de operadores auto-adjuntos, usada também na seção 1.C, pode agora ser demonstrada.

Teorema A1.4: Seja T um operador auto-adjunto e U uma transformação unitária. Se $S=U^{-1}TU$, então S também é auto-adjunto.

Demonstração: Sendo D(T) denso e D(S) = U^{-1} D(T), D(S) também é denso, por ser U unitária.

Temos: $S' = (U^{-1}TU)' = (TU)'(U^{-1})' = (TU)'U \supset U'T'U = U^{-1}TU = S$, logo, S é simétrica. Para a justificativa das relações intermediárias, veja |2|, pg.300.

S é fechado. Pois se $\{\phi_n\} \subset D(S)$ é tal que $\phi_n \longrightarrow \phi$ e $S\phi_n \longrightarrow \psi$, temos $U\phi_n \longrightarrow U\phi$ e $U^{-1}TU\phi_n \longrightarrow \psi$. Logo, $U\phi_n \longrightarrow U\phi$ e $TU\phi_n \longrightarrow U\psi$. Como T é fechado, $U\phi \in D(T)$ e $TU\phi = U\psi$. Donde $U^{-1}U\phi = \phi \in D(S)$ e $S\phi = U^{-1}TU\phi = \psi$.

Suponhamos $S'\psi = \alpha\psi$, $\mathrm{Im}\,\alpha \neq 0$. Então $\forall \phi \in D(S)$, tem-se $(\phi, S'\psi) = \alpha(\phi,\psi)$.

Logo $(S\phi,\psi)=\alpha(\phi,\psi)$ ou seja $(U^{-1}TU\phi,\psi)=\alpha(\phi,\psi)$;

$$(TU\phi,U\psi)=\alpha(U\phi,U\psi) \Longrightarrow ((TU\phi-\bar{\alpha}U\phi),U\psi)=0 .$$

Portanto, $U\psi \in [\mathrm{Ran}(T-\bar{\alpha})]^{\perp} = N(T-\alpha)$ (Lema A1.1). Mas pelo teorema anterior, sabemos que $N(T-\alpha) = \{0\}$ .Daí, $U\psi=0 \Rightarrow \psi=0$. Logo, S é auto-adjunto pelo mesmo teorema.

∎

---X---

A P Ê N D I C E   II

"DECOMPOSIÇÃO DO ESPECTRO DE UM OPERADOR AUTO-ADJUNTO"

Nêste apêndice, estudaremos duas decomposições possíveis do espectro de um operador auto-adjunto. O conceito de espectro essencial será introduzido e caracterizado devidamente. A importância dêste ficará evidenciada nos teoremas de estabilidade, apresentados no final do Apêndice.

Seja A um operador auto-adjunto, com a decomposição $A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \, dE_\lambda$. Seja $f: \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ uma função mensurável, definida em quase todos os pontos, com relação à família $\{E_\lambda\}$ (I.é, com relação às medidas determinadas por $\|E_\lambda \psi\|^2 \; \forall \psi \in \mathcal{H}$). Podemos definir um operador, denotado por $f(A)$, para o qual

$(\psi, f(A)\phi) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\lambda) \, d(\psi, E_\lambda \phi) \quad \forall \phi \in D(f(A))$ e $\psi \in \mathcal{H}$, onde

$$D(f(A)) = \left\{ \phi \in \mathcal{H} \text{ t.q. } \int_{-\infty}^{+\infty} |f(\lambda)|^2 \, d\|E_\lambda \psi\|^2 < \infty \right\}.$$

Para a demonstração disto, bemo como as propriedades imediatamente abaixo, veja |2| seções 127-128. Tem-se:

$$[f(A)]^* = \bar{f}(A) \quad \text{se} \quad \bar{f}(\lambda) = \overline{f(\lambda)}$$

$$f(A) \supset f_1(A) f_2(A) \quad \text{se} \quad f(\lambda) = f_1(\lambda) f_2(\lambda)$$

$$f(A) \supset \alpha_1 f_1(A) + \alpha_2 f_2(A) \quad \text{se} \quad f(\lambda) = \alpha_1 f_1(\lambda) + \alpha_2 f_2(\lambda)$$

$f(A)$ é limitada se e somente se $f(\lambda)$ fôr limitada em quase todos os pontos, com relação à família $\{E_\lambda\}$. Mostra-se ainda que $[f(A)]^{-1} = f^{-1}(A)$, no sentido da existência de um membro implicar na existência do outro, e na igualdade. Em particular, se $f(\lambda) = (\lambda - z)$, temos:

$$(A - z)^{-1} = \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda - z)^{-1} \, dE_\lambda \qquad (1)$$

No apêndice I, definimos o espectro $\sigma(A)$ de A como o complemento em $\mathbb{C}$ do conjunto $P(A)$ de todos os números complexos para os quais o resolvente $R(z,A)=(A-z)^{-1}$ existe como um operador limitado definido em todo $\mathcal{H}$. Mas,de (1) e por uma propriedade mencionada acima, podemos ver que $z\in P(A)$ se e sòmente se a função $f(z)=(\lambda-z)^{-1}$ fôr limitada em quase todos os pontos, com relação à família $\{E_\lambda\}$. Em particular, isto acontece para todo z não-real (como já sabemos).Se z fôr real, é fácil vermos que $z\in P(A)$ se e somente se z estiver contido em um intervalo no qual E_λ é constante como função de λ. Isto, incidentalmente,prova que $P(A)$ é um subconjunto aberto de $\mathbb{C}$. Portanto, o espectro do operador auto-adjunto A é um subconjunto fechado de $\mathbb{R}$, consistindo dos pontos para os quais E_λ é uma função estritamente crescente de λ.

Se E_λ tiver um salto no ponto μ, i.é, se existir ψ tal que $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}(E_\mu-E_{\mu-\varepsilon})\psi\neq 0$, então μ é um auto-valor de A.Realmente, pondo $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}(E_\mu-E_{\mu-\varepsilon})\psi=\phi$, temos, $\forall\theta\in\mathcal{H}$, $(\theta,A\phi)=\int_{-\infty}^{+\infty}\lambda\, d(\theta,E_\lambda\phi)$. Mas, se $\lambda<\mu$,

$$E_\lambda\phi=E_\lambda\lim_{\varepsilon\to 0}(E_\mu-E_{\mu-\varepsilon})\psi=\lim_{\varepsilon\to 0}(E_\lambda-E_\lambda E_{\mu-\varepsilon})\psi=0,$$ e para $\lambda\geq\mu$, $E_\lambda\phi=\phi$. Logo, $(\theta,A\phi)=\mu(\theta,\phi)$, ou seja, $A\phi=\mu\phi$. Inversamente, se μ fôr um auto-valor de A (e ϕ um correspondente auto-vetôr) então E_λ tem um salto em μ.Pois $A\phi=\mu\phi$ implica $\forall\theta\in\mathcal{H}$, $\int_{-\infty}^{+\infty}(\lambda-\mu)\,d(\theta,E_\lambda\phi)=0$. Logo, $(\theta,E_\lambda\phi)$ tem de ser constante, a não ser, possivelmente, no ponto $\lambda=\mu$. Mas

$$\lim_{\lambda\to-\infty}(\theta,E_\lambda\phi)=0 \quad e \quad \lim_{\lambda\to+\infty}(\theta,E_\lambda\phi)=(\theta,\phi).$$

Portanto, devemos ter $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}(\theta,(E_\mu-E_{\mu-\varepsilon})\phi)=(\theta,\phi)\ \forall\theta\in\mathcal{H}$, logo $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}(E_\mu-E_{\mu-\varepsilon})\phi=\phi$.

O operador definido por $E(\mu)\psi = \lim_{\delta\to 0}(E_\mu - E_{\mu-\delta})\psi \quad \forall\psi\in\mathcal{H}$ (notação : $E(\mu) = s\text{-}\lim_{\delta\to 0}(E_\mu - E_{\mu-\delta})$) é claramente a projeção sôbre o subespaço M_μ de $\mathcal{H}$, consistindo de todos os auto-vetôres de A correspondentes ao auto-valor μ (mais o vetôr nulo, evidentemente). Para a existência do limite definindo $E(\mu)$, consulte |2| pg.263.

O conjunto de todos os auto-valores de A forma por definição, o espectro pontual de A. Os subespaços M_μ e M_ν correspondentes a dois auto-valores distintos são ortogonais, como é fácil verificar. Observemos também que, sendo $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert separável, o espectro pontual é no máximo contável.

Pode acontecer que o operador A não tenha nenhum auto-valor. Nêste caso, dizemos que A tem um espectro puramente contínuo. O caso oposto a êste acontece quando os auto-vetôres de A formam um conjunto completo em $\mathcal{H}$ e, nêste caso, diremos que A tem um espectro puramente pontual(o espectro, então, consistindo dos auto-valores e de seus pontos de acumulação).

O caso geral pode ser descrito por uma superposição dos dois casos extremos mencionados acima. Se $\{\mu_i\}$ são os auto-valores diferentes de A e $\{E(\mu_i)\}$ as correspondentes projeções sôbre os subespaços M_{μ_i}, formemos a projeção $E = \sum_i E(\mu_i)$, e consideremos os subespaços $\mathcal{H}_p = E\mathcal{H}$, $\mathcal{H}_c = (1-E)\mathcal{H}$. Como E comuta com $E_\lambda \; \forall\lambda$, E comuta com A, donde os subespaços $\mathcal{H}_p$ e $\mathcal{H}_c$ são invariantes por A. Seja $A_p = A \upharpoonright \mathcal{H}_p$ e $A_c = A \upharpoonright \mathcal{H}_c$. É fácil mostrar que A_p e A_c são auto-adjuntos (veja |2|,pg.362). Por construção, $\mathcal{H}_p$ é a soma direta dos subespaços M_{μ_i} e não há nenhum auto-vetor de A em $\mathcal{H}_c$. Portanto, o espectro de A_p é puramente pontual, e o de A_c puramente contínuo. O espectro de A é $\sigma(A) = \sigma(A_p) \cup \sigma(A_c)$, como pode ser verificado diretamente. Observe que $\sigma(A_p) \cap \sigma(A_c)$ não é necessàriamente vazia. $\sigma(A_c)$ é denominado o espectro contínuo de A; $\sigma(A_p)$, com exclusão de seus pontos de acumulação, forma o espectro pontual (também chamado discreto) de A.

O espectro essencial de A, $\sigma_{en}(A)$ é, por definição, a união do espectro contínuo com os pontos de acumulação do espectro pontual e com os auto-valores de multiplicidade infinita. O ponto ∞ $(-\infty)$ é incluído quando o espectro não é limitado superiormente (inferiormente). Então, se $\mu \notin \sigma_{en}(A)$, ou $\mu \notin \sigma(A)$ ou μ é um auto-valor isolado de multiplicidade finita. Logo, existe um intervalo $\delta = (a,b)$ contendo μ em seu interior para o qual $E(\delta) = E_b - E_a$ é de pôsto finito. Inversamente, se existe um intervalo $\delta = (a,b)$ contendo μ e tal que $E(\delta)$ é de pôsto finito, então $\mu \notin \sigma_{en}(A)$. Porque E_λ em δ só pode variar em um número finito de pontos, e mesmo assim por "saltos finitos" (i.é $s\text{-}\lim_{\delta \to 0}(E_\lambda - E_{\lambda-\delta})$ é de pôsto finito), como é fácil verificar; logo, $\mu \notin \sigma_{en}(A)$.

Temos então a seguinte caracterização: O ponto finito $\mu \in \sigma_{en}(A)$ se e somente se $\forall \delta = (a,b) \ni \mu$, $E(\delta)$ é de pôsto infinito.

Uma outra caracterização, não envolvendo a família $\{E_\lambda\}$ diretamente, pode ser obtida como se segue.

<u>Teorema AII.1</u>: Se μ é finito,

$$\mu \in \sigma_{en}(A) \Leftrightarrow \exists \{\psi_n\} \text{ t.q. } \|\psi_n\| = 1,\ \psi_n \rightharpoonup 0 \text{ e } \|(A-\mu)\psi_n\| \to 0 .$$

Observação: O símbolo $\psi_n \rightharpoonup 0$ significa $(\phi, \psi_n) \to 0 \quad \forall \phi \in \mathcal{H}$ .Diz-se então que $\{\psi_n\}$ converge fracamente para zero. Para diferenciar, a convergência $\psi_n \to 0$ é chamada convergência forte. Nos espaços de dimensão finita, êstes dois conceitos são equivalentes.

Demonstração: Suponhamos $\mu \in \sigma_{em}(A)$, finito. Seja $\{\delta_n\}$ uma sequência de intervalos, $\delta_n \subset \delta_m$, $n > m$, que contêm o ponto μ e tal que $|\delta_n| \to 0$, onde $|\delta_n|$ = medida do intervalo δ_n. Seja $\mathcal{H}_n = P(\delta_n)\mathcal{H}$. Tem-se $\mathcal{H}_n \subset \mathcal{H}_m , n > m$ e cada $\mathcal{H}_n$ é de dimensão infinita. Portanto, podemos escolher uma sequência ortonormal $\{\psi_n\}$, com $\psi_n \in \mathcal{H}_n$. Para esta sequência, temos:

$$\|(A-\mu)\psi_n\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda-\mu)^2 d\|E_\lambda E(\delta_n)\psi_n\|^2 = \int_{\delta_n} (\lambda-\mu)^2 d\|E_\lambda \psi_n\|^2 \leq |\delta_n|^2 \|\psi_n\|^2 = |\delta_n|^2 \to 0 , \; n \to \infty .$$

Também, $\psi_n \rightharpoonup 0$, como consequência da desigualdade de Bessel (veja |2|, pg. 66)

Inversamente, suponhamos que exista uma sequência $\{\psi_n\}$ tal que $\|\psi_n\| = 1$, $\psi_n \rightharpoonup 0$ e $(A-\mu)\psi_n \to 0$ onde μ é finito. Seja $\delta = (a,b)$ um intervalo arbitrário contendo μ . Temos:

$$\|(A-\mu)\psi_n\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda-\mu)^2 d\|E_\lambda \psi_n\|^2 \geq \int_{-\infty}^{a} (\lambda-\mu)^2 d\|E_\lambda \psi_n\|^2 + \int_{b}^{\infty} (\lambda-\mu)^2 d\|E_\lambda \psi_n\|^2 \geq (a-\mu)^2 \|E_a \psi_n\|^2 + (b-\mu)^2 \|(1-E_b)\psi_n\|^2 .$$

Portanto, $E_a\psi_n \to 0$ e $(1-E_b)\psi_n \to 0$, donde $[1-E(\delta)]\psi_n \to 0$. Logo, $\|E(\delta)\psi_n\| \to 1$. Seja $\mathcal{H}' = E(\delta)\mathcal{H}$. A sequência $\{E(\delta)\psi_n\}$ está contida em $\mathcal{H}'$. Como $\psi_n \rightharpoonup 0$, temos $\forall \phi \in \mathcal{H}, (\phi, E(\delta)\psi_n) = (E(\delta)\phi, \psi_n) \to 0 , n \to \infty$. Logo, $E(\delta)\psi_n \rightharpoonup 0$. Se $\mathcal{H}'$ é de dimensão finita, isto implica $\|E(\delta)\psi_n\| \to 0$, que é uma contradição. Logo, $E(\delta)$ tem pôsto infinito.

A importância do conceito de espectro essencial é evidenciada pelo

Teorema A II.2: Seja A um operador auto-adjunto e B um operador simétrico compacto. Então, $\sigma_{en}(A) = \sigma_{en}(A+B)$.

Demonstração: Em primeiro lugar, devemos observar que A + + B é um operador auto-adjunto. Isto decorre do teorema de Kato-Rellich (|6|, pg.287), que afirma ser A + B auto-adjunto desde que B seja A-limitado, com A-limite menor que 1 (onde A é auto-adjunto e B é simétrico).

Se B é um operador compacto e $\varphi_n \rightharpoonup 0$, então $B\varphi_n \to 0$ (isto pode ser tomado como a definição de um operador compacto em um espaço de Hilbert separável - veja |2| pg.206).
Se μ é finito e $\mu \in \sigma_{en}(A)$, $\exists \{\varphi_n\}$ t.q. $\|\varphi_n\| = 1$, $\varphi_n \rightharpoonup 0$ e $(A-\mu)\varphi_n \to 0$.
Logo, $[(A+B)-\mu]\varphi_n \to 0$, donde $\mu \in \sigma_{en}(A+B)$. Se A não é limitado superiormente (inferiormente) então A + B tem estas mesmas propriedades. Portanto, se $\infty(-\infty) \in \sigma_{en}(A)$, então $\infty(-\infty) \in \sigma_{en}(A+B)$. Logo, $\sigma_{en}(A) \subset \sigma_{en}(A+B)$.
Por um argumento simétrico, vemos que $\sigma_{en}(A) = \sigma_{en}(A+B)$.

∎

Uma aplicação importante (usada na seção 2.C) do teorema acima é o

Teorema A II.3: Sejam A e B dois operadores auto-adjuntos. Se existe um número real $\xi \in \rho(A) \cap \rho(B)$ para o qual $(A-\xi)^{-1} - (B-\xi)^{-1}$ é compacto, então $\sigma_{en}(A) = \sigma_{en}(B)$.

Demonstração: Se ξ é real e $\xi \in \rho(A) \cap \rho(B)$, os operadores

$(A-\xi)^{-1}$ e $(B-\xi)^{-1}$ são auto-adjuntos, de forma que pelo Teorema A II.2, $\sigma_{ess}[(A-\xi)^{-1}] = \sigma_{ess}[(B-\xi)^{-1}]$.

Para completar a demonstração , precisaremos do importante resultado, conhecido como o "teorema do mapeamento espectral", que afirma que $\sigma[f(A)] = f\sigma(A) = \{f(z) \text{ t.q. } z \in \sigma(A)\}$. Para uma demonstração disso, consulte |2|,pgs 432-433.

Se $f(\lambda) = (\lambda-\xi)^{-1}$,temos então $\sigma[(A-\xi)^{-1}] = \{(\lambda-\xi)^{-1} \text{ t.q. } \lambda \in \sigma(A)\}$. Esta relação permanece verdadeira para o espectro essencial: $\sigma_{ess}[(A-\xi)^{-1}] = \{(\lambda-\xi)^{-1} \text{ t.q. } \lambda \in \sigma_{ess}(A)\}$ como pode ser demonstrado usando o Teorema A II.1. Então ficamos com $\{(\lambda-\xi)^{-1} \text{ t.q. } \lambda \in \sigma_{ess}(A)\} = \{(\lambda-\xi)^{-1} \text{ t.q. } \lambda \in \sigma_{ess}(B)\}$.
Portanto, $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B)$.

∎

BIBLIOGRAFIA

Para uma descrição geral sôbre os fundamentos da Mecânica Quântica, veja

Von Neumann, J.: "Mathematical Foundations of Quantum Mechanics ". Princeton University Press, 1955

Jauch, J.M.: "Foundations of Quantum Mechanics".Addison-Wesley Publishing Company, 1968.

|1| Jordan, T.F.: "Linear Operators for Quantum Mechanics ". John Wiley and Sons, Inc., 1969

|2| Riesz, F. and Sz-Nagy, B.: "Functional Analysis". Ungar, 1955.

|3| Schweber, S.S.: "An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory ". Row, Peterson and Co., 1961.

|4| Sobolev, S.L.: "Applications of Functional Analysis in Mathematical Physics". Translations of Mathematical Monographs, Vol.7. Providence:Am. Math. Soc., 1963.

|5| Halmos, P.R.: "Introduction to Hilbert Space and The Theory of Spectral Multiplicity". Chelsea, 1951.

|6| Kato, T: "Perturbation Theory for Linear Operators".Springer-Verlag, 1966.

|7| Messiah, A.: "Quantum Mechanics " Vol.II. North-Holland Publishing Co., 1966.

|8| Simon, B.: "Quantum Mechanics for Hamiltonians Defined as Quadratic Forms". Princeton University Press, 1971.

|9| Edwards, R.E.: "Fourier Series, a Modern Interpretation" Vols.I e II. Holt, Rinehart and Winston, Inc., 1967.

---X---