

LÁZARO SOUZA LIMA

**INTERAÇÃO ATRATIVA DO TIPO K_0 ENTRE DOIS ELÉTRONS
EM DUAS DIMENSÕES ESPACIAIS: UMA POSSÍVEL
APLICAÇÃO PARA A SUPERCONDUTIVIDADE
DE ALTAS TEMPERATURAS CRÍTICAS**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2019

**Ficha catalográfica preparada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Câmpus Viçosa**

T

L732i
2019
Lima, Lázaro Souza, 1994-
Interação atrativa do tipo K0 entre dois elétrons em duas
dimensões espaciais : uma possível aplicação para a
supercondutividade de altas temperaturas críticas / Lázaro Souza
Lima. – Viçosa, MG, 2019.
vi, 52 f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Orientador: Daniel Heber Theodoro Franco.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.
Referências bibliográficas: f. 50-52.

1. Supercondutividade. 2. Estados ligados (Mecânica
quântica). 3. Hilbert, Espaço de. 4. Operadores auto-adjuntos.
I. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Física.
Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada. II. Título.

CDD 22. ed. 537.623

LÁZARO SOUZA LIMA

**INTERAÇÃO ATRATIVA DO TIPO K_0 ENTRE DOIS ELÉTRONS EM DUAS
DIMENSÕES ESPACIAIS: UMA POSSÍVEL APLICAÇÃO PARA A
SUPERCONDUTIVIDADE DE ALTAS TEMPERATURAS CRÍTICAS**

Dissertação apresentada à
Universidade Federal de Viçosa, como
parte das exigências do Programa de
Pós-Graduação em Física, para
obtenção do título de *Magister
Scientiae*.

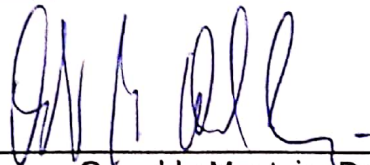
APROVADA: 07 de fevereiro de 2019.



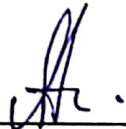
Bruno Carvalho Neves



Olivier Piguet



Oswaldo Monteiro Del Cima
(Coorientador)



Daniel Heber Theodoro Franco
(Orientador)

Dedico este trabalho ao meu avô Luís, in memoriam.

AGRADECIMENTOS

- Agradeço primeiramente a Deus, por permitir a realização deste trabalho e a Ele dedico todos os méritos obtidos;
- Agradeço a minha família, em especial a meus pais e meu irmão, por sempre me apoiarem incondicionalmente, por me darem forças e me incentivarem a melhorar cada vez mais;
- Agradeço a minha namorada, Paula, por ter sempre me incentivado a realizar este trabalho, tendo compreensão e companheirismo comigo e por ter sido além de namorada, uma grande amiga;
- Agradeço ao meu orientador, o professor Daniel, com quem tive o prazer de trabalhar, pela orientação que me foi dada, pelas dicas e sugestões sem as quais dificilmente este trabalho teria sido realizado;
- Agradeço ao meu coorientador, professor Oswaldo, por suas contribuições para este trabalho, por ter me apoiado, principalmente nos congressos em que fomos juntos, e pelas dicas e sugestões bastante valiosas;
- Agradeço aos meus colegas de curso, com quem tive a oportunidade de muito aprender;
- Agradeço a CAPES pelo financiamento do projeto de pesquisa;
- Agradeço a todos os que contribuíram, direta ou indiretamente, para a minha formação.

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

SUMÁRIO

Resumo	v
Abstract	vi
1 Introdução	1
1.1 Algumas características de supercondutores	2
1.1.1. Efeito Meissner	2
1.1.2. Comprimento de penetração: as equações de London	4
1.2 A Teoria BCS: um importante passo para a compreensão da su- percondutividade	5
1.3 Supercondutores de altas temperaturas críticas	6
1.4 Aplicações dos supercondutores	8
1.5 O potencial de interação	9
2 Alguns resultados matemáticos	12
2.1 Elementos de Análise Funcional	12
2.1.1. Espaços de Banach e espaços de Hilbert	12
2.1.2. Os espaços L_p e L_p^{loc}	18
2.1.3. Operadores lineares e auto-adjunção	19
2.1.4. Propriedades espectrais de operadores auto-adjuntos	23
2.2 A equação de Schrödinger em duas dimensões espaciais para duas partículas	25
2.3 Estados ligados e estados espalhados	28
3 Resultados e discussões	30
3.1 Estudo da auto-adjunção do hamiltoniano do modelo	30
3.2 Momento angular crítico	34
3.3 Condição suficiente para a existência de estados ligados	37
3.4 Limite no número de estados ligados para momento angular zero .	42
4 Conclusões e perspectivas	48
5 Referências	49

RESUMO

LIMA, Lázaro Souza, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2019. **Interação atrativa do tipo K_0 entre dois elétrons em duas dimensões espaciais: uma possível aplicação para a supercondutividade de altas temperaturas críticas.** Orientador: Daniel Heber Theodoro Franco. Coorientador: Oswaldo Monteiro Del Cima

Neste trabalho, pretendemos estudar uma dinâmica planar de um par de elétrons interagindo por meio de um potencial atrativo do tipo K_0 , em três dimensões espaço-temporais, onde K_0 é uma função de Bessel modificada de segunda espécie. Este potencial surge da aproximação não relativística do potencial obtido quando se estuda o espalhamento Møller para um modelo na QED_3 , com preservação de paridade e quebra espontânea de simetria $U(1)$, e possivelmente tem aplicação em teorias que buscam explicar a supercondutividade de altas temperaturas críticas. Pretendemos estudar a auto-adjunção do hamiltoniano com o potencial do tipo K_0 em duas dimensões espaciais, bem como estabelecer condições necessárias e suficientes para a existência de estados ligados elétron-elétron, e, para o caso de momento angular zero, calcular o número máximo destes estados.

ABSTRACT

LIMA, Lázaro Souza, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2019. **K_0 -type attractive interaction of two electrons in two space dimensions: a possible application for high temperature superconductivity.** Advisor: Daniel Heber Theodoro Franco. Co-Advisor: Oswaldo Monteiro Del Cima

In this present work, we intend to study a planar dynamics of an electron pair interacting through an attractive K_0 -potential type, in three space-time dimensions, where K_0 is a modified Bessel function of second kind. This potential arises from the non-relativistic approximation of the potential gotten by the study of Møller scattering for a QED_3 model, with parity preservation and spontaneous break of symmetry $U(1)$, and possibly it has application in theories that intend to explain the high critical temperature superconductivity. We intend to study the self-adjointness of the Hamiltonian operator with an K_0 -potential type in two space dimensions and establish necessary and sufficient conditions to the existence of electron-electron bound states as well. For the case of zero angular momentum, we intend to estimate the maximum number of bound states.

Capítulo 1:

Introdução

Há pouco mais de 100 anos, em 1908, o físico neerlandês Heike Kamerlingh Onnes (1853–1926) conseguiu a obtenção de hélio líquido, utilizando o processo de Hampson–Linde [1]. Isto permitiu que vários metais fossem resfriados a temperaturas bem baixas, abaixo de 4K. Na época, havia uma dúvida quanto ao que ocorreria com os materiais condutores caso fossem resfriados a temperaturas cada vez mais baixas: a resistividade iria diminuir continuamente até zero no zero absoluto, ou a resistividade deveria crescer indefinidamente devido à diminuição da mobilidade dos elétrons no interior do material [2]? Motivado por essas questões, o próprio Onnes começou a utilizar o hélio líquido para resfriar alguns metais a temperaturas que não haviam sido atingidas até aquele momento. A curva para a resistividade obtida com experimentos com mercúrio o surpreendeu, como se mostra no gráfico abaixo.

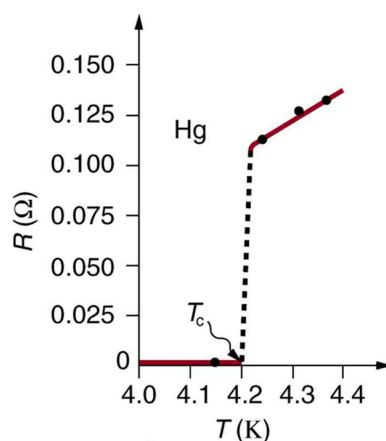


Figura 1.1: Curva da resistência do mercúrio em função da temperatura.
Fonte: <https://infofavour.blogspot.com/2016/01/short-note-on- superconductivity-and.html>

O mercúrio foi um dos materiais que foram escolhidos por ser obtido com um grande grau de pureza e, ao ser resfriado a uma temperatura em torno de 4,2K, verificou-se que o comportamento da resistência contrariava as duas hipóteses em que se acreditavam na época: houve uma diminuição abrupta da resistividade, que caiu a zero. A temperatura de 4,2K para o mercúrio foi definida como

temperatura crítica. Este fenômeno só foi observado pela primeira vez em 1911. Além do mercúrio, outros materiais também foram submetidos ao resfriamento, porém, tiveram uma resistividade residual, cuja causa Onnes atribuiu a impurezas contidas neles. Estas foram as primeiras observações do fenômeno que hoje é conhecido como supercondutividade. A queda abrupta da resistência elétrica nesses materiais não é o único fato intrigante que acontece. Há também alguns efeitos, como o comportamento do campo magnético no interior destes materiais, como veremos a seguir.

1.1. Algumas características de supercondutores

1.1.1. Efeito Meissner

Até 1933, não havia ocorrido um avanço significativo nos estudos sobre o fenômeno da supercondutividade. Até esse período, acreditava-se que as previsões feitas para o comportamento magnético dos condutores também se aplicariam aos materiais supercondutores. Mas isso não foi o que se observou de fato, quando Walther Meissner (1882-1984) e Robert Ochsenfeld (1901-1993) descobriram que o campo magnético no interior dos supercondutores conhecidos até então era zero [1]. Isso sugeriu que um material supercondutor não se caracterizava apenas por ser um condutor de resistência nula: a supercondutividade era um novo estado da matéria. O fato de o campo magnético ser zero no interior dos supercondutores conhecidos até aquela época ficou conhecido como efeito Meissner. Este efeito, porém, não aparece para qualquer valor de campo externo aplicado, uma vez que a partir do magnético crítico, ocorre a perda do estado supercondutor. Os materiais que obedeciam perfeitamente ao efeito Meissner e apresentavam uma queda brusca na resistência elétrica ao serem resfriados abaixo da temperatura crítica ficaram conhecidos como supercondutores do tipo I, classe esta na qual se encaixam praticamente todos os metais. A Figura 1.2 mostra as linhas de campo no interior de um supercondutor do tipo I, para temperaturas acima e abaixo da temperatura crítica.

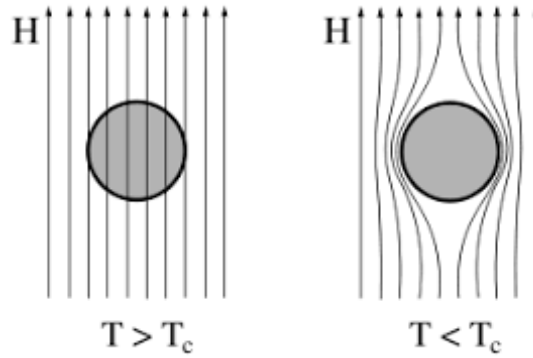


Figura 1.2: Linhas de campo no interior de um supercondutor do tipo I, para temperaturas acima e abaixo da temperatura crítica
 Fonte: [3]

Um pouco mais tarde, descobriu-se alguns materiais, que ficaram conhecidos como supercondutores do tipo II, que não seguiam o efeito Meissner perfeitamente [4] abaixo da temperatura crítica. De fato, para determinados valores de campo magnético aplicado, o campo no interior do supercondutor poderia ser zero ou diferente de zero, mantendo ainda o estado supercondutor, diferentemente do que ocorria para os supercondutores do tipo I. De fato, há três valores de campos críticos que são relevantes para os supercondutores do tipo II [1]:

- i) H_{C_1} , campo abaixo do qual o supercondutor do tipo II se comporta como o supercondutor do tipo I, estado a que podemos chamar de estado Meissner;
- ii) H_{C_2} , campo maior que H_{C_1} e, para campos aplicados que estejam entre esses dois valores, o supercondutor está num estado misto, havendo presença de campo magnético em seu interior;
- iii) H_{C_3} , campo maior que H_{C_2} , e, para campos aplicados que estejam entre esses dois campos, o material apresenta supercondutividade superficial e, para campos aplicados maiores que H_{C_3} , ocorre a perda do estado supercondutor.

A Figura 1.3 resume bem as características do supercondutor tipo II em relação ao comportamento magnético em função do campo magnético externo aplicado e mostra as diferenças do comportamento dos supercondutores do tipo II em relação aos do tipo I.

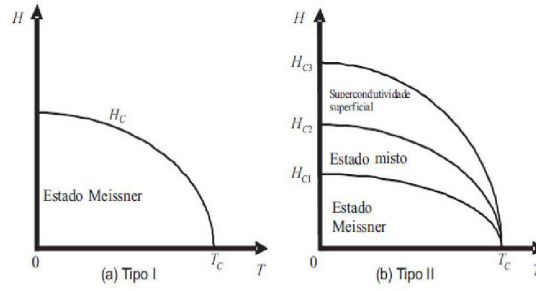


Figura 1.3: Diferenças dos comportamentos dos supercondutores tipos I e II em relação aos campos magnéticos aplicados.
Fonte: [1]

Além das características mencionadas para o comportamento dos supercondutores do tipo II, temos uma diferença a mais em relação aos do tipo I quanto à resistência elétrica. Os do tipo II não apresentam queda brusca da resistência para zero, mas uma queda suave, diferentemente dos do tipo I.

1.1.2. Comprimento de penetração: as equações de London

O campo magnético no interior do supercondutor tem a tendência de se anular, como já explicado pelo efeito Meissner. Isso não ocorre, porém, nas superfícies destes materiais, isto é, o campo magnético consegue penetrar um pouco pela superfície dos supercondutores. Uma das primeiras teorias que conseguiu explicar este resultado foi a teoria dos irmãos London [1], que obtiveram as equações que carregam seus nomes em sua homenagem, partindo de observações puramente fenomenológicas, conseguindo oferecer uma boa descrição para o fenômeno da supercondutividade, sem, contudo, explicar sua origem. Um parâmetro importante para as equações de London, explicitadas abaixo, é um fator λ , que permite verificar a penetração do campo no interior do material no estado supercondutor. Segue abaixo estas equações.

$$\frac{d}{dt} \mathbf{J} = \frac{1}{\mu_0 \lambda^2} \mathbf{E}, \quad (1.1.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{J} = -\frac{1}{\mu_0 \lambda^2} \mathbf{B}, \quad (1.1.2)$$

onde \mathbf{J} é a densidade de supercorrente, \mathbf{E} e \mathbf{B} são respectivamente o campo elétrico e magnético e $\lambda = \sqrt{\frac{m_*}{\mu_0 n_s e_*^2}}$, com m_* e e_* respectivamente a massa e a carga dos portadores de carga responsáveis pelo estado supercondutor, os quais eram chamados de "superelétrons" e o parâmetro n_s é a densidade de tais portadores de carga.

Utilizando as equações de London, é possível demonstrar que o campo magnético decai exponencialmente no interior do supercondutor, permitindo obter assim, através do parâmetro λ , a penetração característica do campo no supercondutor, que fica basicamente restrita à superfície. Além disso, devido ao decaimento exponencial, o campo se torna praticamente nulo no interior do material no estado supercondutor, o que é a previsão do efeito Meissner obtida através das equações de London.

1.2. A Teoria BCS: um importante passo para a compreensão da supercondutividade

Uma das teorias que teve maior êxito em explicar o fenômeno da supercondutividade foi a desenvolvida em 1957 pelos físicos John Bardeen, Leon Cooper e Robert Schrieffer, que ficou conhecida como Teoria BCS, em homenagem a seus criadores. Ela teve êxito ao mostrar que os portadores de carga responsáveis pelo fenômeno da supercondutividade eram na verdade pares de elétrons, que ficaram conhecidos como pares de Cooper [2] e a formação dos pares saía como consequência da teoria, isto é, não era uma hipótese da qual se partia.

A Teoria BCS mostrou que dois elétrons, mediados por um fônon da rede cristalina, podem interagir por meio de um potencial atrativo que supera a repulsão Coulombiana, quando estes elétrons tem energias próximas às energias da superfície de Fermi [5]. Deve-se notar que atração entre elétrons, mediada por fônons da rede, foi primeiramente proposta pelo alemão Herbert Fröhlich e que a diferença entre a atração e a repulsão Coulombiana era a responsável pela criação de um gap de energia, responsável pela possibilidade da existência da condensação do par de elétrons [1].

A Teoria BCS consegue prever um Gap de energia para os supercondutores,

à temperatura zero, dado por [1]:

$$2\Delta = 3,52K_B T_c, \quad (1.2.1)$$

com K_B sendo a constante de Boltzmann e T_c é a temperatura crítica para a transição do material para o estado supercondutor. Quebrar o par de Cooper significa fornecer uma energia com o valor do Gap para o par e este valor depende da temperatura. O Gap de energia é maior à temperatura zero, quando não há vibrações da rede [1], e tende a diminuir à medida que a temperatura aumenta.

A Teoria BCS, além de conseguir dar uma explicação satisfatória do fenômeno da supercondutividade, conseguiu obter como previsão o efeito Meissner, bem como descrever o comportamento de vários supercondutores conhecidos até aquele momento, ganhando rápida aceitação no meio científico. Esta teoria foi além, estipulando qual deveria ser a temperatura crítica máxima que um supercondutor poderia ter, afirmando que o fenômeno da supercondutividade não deveria ser observado à temperaturas maiores do que 30K [5]. Hoje, sabemos que esta teoria se aplica muito bem aos supercondutores do tipo I.

1.3. Supercondutores de altas temperaturas críticas

A Teoria BCS foi satisfatória para explicar a supercondutividade por vários anos, por obter ótimas concordâncias com os dados experimentais, além de dar explicações satisfatórias para vários efeitos que apareciam juntamente com a queda da resistência a zero nos supercondutores, como por exemplo o efeito Meissner. Mas em 1986, foi descoberto o primeiro supercondutor de altas temperaturas críticas, o que permitiu que a Teoria BCS tivesse sua validade questionada, e levantou dúvidas sobre até que ponto ela seria satisfatória para explicar o fenômeno da supercondutividade [1]. De fato, George Bednorz e Alex Müller descobriram o primeiro material que se tornava supercondutor a temperaturas acima dos 30K previstos pela Teoria BCS, e o fato mais interessante era que o material era uma cerâmica que era isolante em temperaturas normais [2].

Também em 1986, foi descoberto um outro material que apresentava o estado supercondutor a temperaturas bem mais altas que os supercondutores convencionais conhecidos até o momento. Os físicos Paul Chu, Mang-Kang Wu descobriram que o composto $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ apresentava o estado supercondutor na temperatura de 93 K, temperatura mais alta que a do Nitrogênio líquido, que é de 77 K. Estas descobertas, além de mostrarem que o mecanismo da supercondutividade não estava completamente compreendido, abriram um caminho para que ela fosse produzida em condições mais fáceis. Além disso, violando-se o limite na temperatura crítica que a Teoria BCS havia imposto, estas descobertas abriram caminho para que se procurasse a supercondutividade em temperatura ambiente, o que proporcionaria avanços tecnológicos bastante significativos. Vale ressaltar que todos os supercondutores de altas temperaturas críticas conhecidos pertencem à categoria de supercondutores do tipo II.

É de se notar que, ainda que a Teoria BCS não explique corretamente a supercondutividade de altas temperaturas críticas, a condensação de pares é fundamental para se compreender a supercondutividade a qualquer temperatura. Mesmo que o mecanismo proposto por Cooper para a condensação dos pares não seja válido para altas temperaturas críticas, ainda assim deve haver condensação de pares de elétrons, para que haja a supercondutividade [5].

Alguns dos supercondutores de alta temperatura crítica conhecidos tem uma estrutura de planos de cobre-oxigênio separados por planos de outros óxidos e terras raras, o que nos sugere uma dinâmica planar [6]. Por isso, neste trabalho, utilizaremos resultados obtidos a partir de uma eletrodinâmica quântica planar (QED_3), e, uma vez que são os pares de elétrons os responsáveis pela supercondutividade, buscaremos condições necessárias e suficientes para a existência de estados ligados elétron-elétron, bem como o limite do número de estados ligados. O estudo da possibilidade de existência de estados ligados será feito no regime não relativístico, utilizando a versão de duas dimensões espaciais da equação de Schrödinger, uma vez que esperamos obter energias da ordem de meV, compatíveis com os dados experimentais de supercondutores de alta temperatura crítica conhecidos, para que possamos aplicar nosso modelo a esse fenômeno.

1.4. Aplicações dos supercondutores

Uma das aplicações mais óbvias que se pode pensar para a supercondutividade é a transmissão de energia elétrica sem perdas, uma vez que a resistência neste estado é zero. Isto, infelizmente, ainda não está economicamente viável, uma vez que resfriar vários quilômetros de materiais supercondutores não é barato. Esta aplicação torna-se mais interessante à medida que novos supercondutores, com maiores temperaturas críticas, são descobertos. Claro que supercondutores a temperatura ambiente, caso sejam descobertos, permitirão a aplicação ideal para a transmissão de energia elétrica.

Outra aplicação, mais factível para os supercondutores atualmente conhecidos, é a geração de energia elétrica, utilizando estes materiais para a confecção de geradores mais leves, menores e com maior eficiência do que os que se tem atualmente. A empresa estadunidense de engenharia elétrica *GE Power Conversion* vem trabalhando para a confecção destes geradores. [2, 7].

Os supercondutores também podem ser utilizados na levitação magnética de trens, uma vez que correntes altas podem ser obtidas. Hoje já se usa magnetos convencionais, mas utilizá-los apresenta algumas desvantagens em relação a utilização dos supercondutores, uma vez que os magnetos convencionais precisam ser bem maiores e desperdiçam uma grande parte da energia elétrica utilizada na forma de calor, o que torna a utilização de supercondutores, neste caso, bem interessante [2].

Aqui, foram mostradas apenas algumas breves aplicações de supercondutores, onde eles já são usados e onde espera-se que possam ser utilizados num futuro próximo. Fica evidente que o fenômeno da supercondutividade não é motivado apenas pelo interesse de se desvendar os mecanismos pelos quais ela ocorre, por pura curiosidade. Entender como se dá o fenômeno da supercondutividade, bem como a descoberta de materiais que apresentem-na a temperaturas críticas cada vez mais altas, até chegar quem sabe, na tão sonhada supercondutividade a temperatura ambiente, é algo fundamental para avanços tecnológicos e científicos.

1.5. O potencial de interação

A Teoria BCS foi um grande avanço para a compreensão deste fenômeno, mas ainda faltam explicações satisfatórias para a supercondutividade de altas temperaturas críticas e, para isso, algumas teorias já foram desenvolvidas. Como já mencionado em [8], alguns autores propuseram alguns modelos, como foi o caso de Anderson [9], que propôs que o estado de camada ressonante de valência nos óxidos supercondutores ou o estado quântico líquido de spin de Mott poderiam ser levados a um estado supercondutor por um processo de dopagem. Mas esta proposta se mostrou eficaz apenas à temperatura zero.

Também na tentativa de explicar a supercondutividade de altas temperaturas críticas, foram desenvolvidos modelos baseados na QED_3 , uma vez que estes supercondutores apresentavam estruturas praticamente planares. Foram usadas abordagens que se baseavam nos modelos de Maxwell-Chern-Simons, para gerar massa para o fóton, contornando o surgimento de um potencial confinante para a interação e levando a um potencial de ligação [8]. Estes modelos previram a existência de estados ligados elétron-elétron, a princípio satisfatórios, mas depois algumas controvérsias surgiram.

A fim de evitarmos todas as dificuldades que podem surgir dos tratamentos mencionados acima, seguiremos o que foi proposto em [8], onde se considera um modelo de preservação de paridade com quebra espontânea de simetria-U(1) com um potencial de sexta potência. O mecanismo de quebra da simetria-U(1) local dá origem a um bóson do tipo de Higgs e dá origem a um fóton massivo, o que evita o aparecimento de um potencial confinante do tipo logaritmo.

Usando a aproximação não relativística do potencial que surge quando estudamos o espalhamento Møller, cujos detalhes podem ser encontrados em [10, p. 276], obtemos um potencial atrativo em duas dimensões espaciais para a interação entre os elétrons, representado por uma função do tipo K_0 , que é uma função de Bessel modificada de segunda espécie. De fato, podemos dizer que o potencial V de interação é dado por

$$V(r) = -\alpha K_0(\beta r), \quad (1.5.1)$$

onde r é a distância entre os elétrons, α é uma constante positiva, com dimensão

de energia, que mede a "força" da interação, e β é uma constante positiva com dimensão de inverso de comprimento, e está relacionada com a massa do mediador da interação.

Segue abaixo um gráfico da função $-K_0$, onde fazemos as constantes α e β com valor igual a 1.

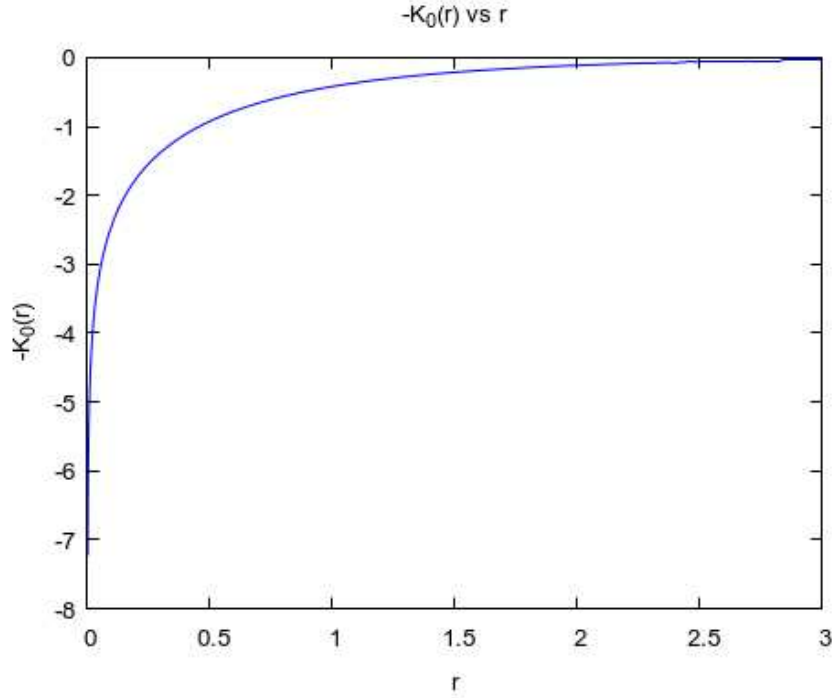


Figura 1.4: O potencial de interação, quando fazemos $\alpha = 1$ e $\beta = 1$.

De acordo com [11], a função K_0 pode ser dada por uma série da forma

$$K_0(z) = - \left\{ \ln \left(\frac{z}{2} \right) + \gamma \right\} I_0(z) + \frac{\frac{1}{4}z^2}{(1!)^2} + \left(1 + \frac{1}{2} \right) \frac{(\frac{1}{4}z^2)^2}{(2!)^2} + \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} \right) \frac{(\frac{1}{4}z^2)^3}{(3!)^2} + \dots \quad (1.5.2)$$

onde

$$I_0 = 1 + \frac{\frac{1}{4}z^2}{(1!)^2} + \frac{(\frac{1}{4}z^2)^2}{(2!)^2} + \frac{(\frac{1}{4}z^2)^3}{(3!)^2}, \quad (1.5.3)$$

e γ é uma constante cujo valor é 0, 5772156649... [11]. Além disso, em [11, p. 378], podemos ver que o comportamento assintótico da função $K_0(z)$ quando $z \rightarrow \infty$ é dado por

$$K_0(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \left\{ 1 - \frac{1}{8z} + \frac{9}{2!(8z)^2} - \frac{9 \times 25}{3!(8z)^3} + \dots \right\}, \quad (1.5.4)$$

Ainda, podemos ver que

$$\frac{d}{dx}K_0(x) = -K_1(x), \quad (1.5.5)$$

onde $K_1(x)$ é a função modificada de Bessel de segunda espécie de ordem 1, cujos detalhes podem ser encontrados em [11]. É de se notar que, como comportamento geral, o potencial dado por (1.5.1) tende ao infinito para r tendendo a zero, de acordo com (1.5.2). Além disso, pode-se notar que este potencial tende a zero para r tendendo ao infinito, de acordo com (1.5.4).

É evidente a dificuldade de se trabalhar analiticamente com um potencial do tipo K_0 , como se pode ver pela complexidade das expressões (1.5.2) e (1.5.3). Mas em muitos casos, como alguns que serão considerados neste trabalho, no momento em que estudarmos a auto-adjunção do hamiltoniano, por exemplo, poderemos utilizar apenas o comportamento assintótico, para pequenos ou grandes valores dos argumentos de tais funções.

Capítulo 2:

Alguns resultados matemáticos

2.1. Elementos de Análise Funcional

2.1.1. Espaços de Banach e espaços de Hilbert

A mecânica quântica está apoiada em conceitos e resultados da Análise Funcional. Um dos espaços mais importantes que utilizamos, por exemplo, é o espaço L_2 , que é um espaço de Hilbert, frequentemente chamado de espaço das funções que são quadrado-integráveis. Outros conceitos bastante utilizados são os de operadores hermitianos e operadores auto-adjuntos, conceitos estes que faremos distinção nesta seção, onde daremos alguns elementos de Análise Funcional, com definições formais e alguns exemplos.

Definição 2.1.1. *Um espaço vetorial sobre um corpo K é um conjunto não vazio X de elementos x, y, z, \dots com algumas operações chamadas de adição vetorial e multiplicação de um vetor por escalares α, β , que são elementos de K , de modo que:*

- i) $x + y = y + x$;*
- ii) $x + (y + z) = (x + y) + z$;*
- iii) existe um vetor nulo, 0 , tal que $x + 0 = x$ e $x + (-x) = 0$;*
- iv) $\alpha(\beta x) = (\alpha\beta)x$;*
- v) existe um elemento identidade $1 \in K$, tal que $1 \cdot x = x$;*
- vi) $\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y$;*
- vii) $(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x$.*

Definição 2.1.2. Um espaço normado $(X, \|\cdot\|)$ é um espaço vetorial em que se pode definir uma função chamada norma $(\|\bullet\|)$, que associa a cada elemento $x, y \in X$ um número real, obedecendo às seguintes propriedades¹

- i) $\|x\| \geq 0$;
- ii) $\|x\| = 0 \iff x = 0$;
- iii) $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$;
- iv) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (Desigualdade triangular).

Por simplicidade, utilizaremos X como representante do espaço normado, em vez de $(X, \|\cdot\|)$.

Definição 2.1.3. Seja \mathbb{C} o conjunto dos complexos². Um espaço com produto interno X definido sobre os complexos, também chamado de espaço pré-Hilbert complexo, é um espaço vetorial em que se pode definir uma função $\langle \cdot, \cdot \rangle : X \times X \rightarrow \mathbb{C}$ chamada de produto interno, que associa a cada $(x, y) \in X \times X$ um escalar, obedecendo às seguintes propriedades:

- i) $\langle x + y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle$;
- ii) $\langle x, \alpha y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle$;
- iii) $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$;
- iv) $\langle x, x \rangle \geq 0$ e $\langle x, x \rangle = 0 \iff x = 0$.

É fácil verificar que uma norma pode ser derivada do produto interno, se fizermos $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$, bastando observar que $\sqrt{\langle x, x \rangle}$ satisfaz às quatro propriedades de norma. Isto nos permite concluir que todo espaço com produto interno também é um espaço normado. Além disso, todo espaço normado e todo espaço com produto interno também são espaços métricos, uma vez que com a norma é possível definir uma métrica, cujo conceito pode ser encontrado no Capítulo 1 de [12]. O conceito de norma nos permite ainda fazer a definição de uma bola aberta.

¹Separámos aqui as propriedades i) e ii) para destacar a importância da propriedade ii). De fato, uma seminorma não precisa satisfazer a propriedade ii).

²Em vez de \mathbb{C} , podemos usar também o conjunto \mathbb{R} e, nesse caso, o espaço pré-Hilbert é dito real.

Definição 2.1.4 (Bola aberta). *Seja um ponto x_0 de um espaço vetorial normado X . Dizemos que a bola aberta centrada em x_0 e raio r é o conjunto $B(x_0, r)$ dado por*

$$B(x_0, r) = \{x \in X : \|x - x_0\| < r\}.$$

Com a definição de bola aberta, podemos fazer a seguinte

Definição 2.1.5. *Seja $X \subset M$, com M um espaço normado e seja $x \in M$. Dizemos que x é um ponto aderente de X se qualquer bola centrada em x contiver pelo menos um ponto de X .*

Nota. Caso ocorra que qualquer bola centrada em um $x \in M$ contenha pelo menos um elemento $x_0 \in X$ diferente de x , dizemos que x é um ponto de acumulação de X . Com isto, vemos que todo ponto de acumulação é também um ponto aderente, mas nem todo ponto aderente é um ponto de acumulação. Por exemplo, se consideramos $X = \{0\}$, segue que 0 é um ponto aderente de X , mas não é um ponto de acumulação de X . Para maiores detalhes, consulte [13, p. 53]. Além disso, podemos ver que qualquer elemento de X é um ponto aderente do próprio X .

Definição 2.1.6. *Sejam X, M espaços normados e seja $X \subset M$. Seja \bar{X} o conjunto dos pontos aderentes de X . Dizemos que X é denso em M se $\bar{X} = M$. Dizemos que M é um espaço separável se existe um subconjunto denso de M que é contável³.*

Exemplo 2.1.1. Considere o conjunto dos reais \mathbb{R} com norma definida por $\|x\| = |x|$, para $x \in \mathbb{R}$. Considere também o conjunto dos racionais \mathbb{Q} . Cada bola centrada em um número irracional contém um número racional. Isto nos permite concluir que todos irracionais (além dos próprios racionais), são pontos de acumulação de \mathbb{Q} . Além disso, a união dos racionais com os irracionais nos dá os reais, o que nos permite concluir que \mathbb{Q} é denso em \mathbb{R} . Ainda, como \mathbb{Q} é contável, segue que \mathbb{R} é separável.

Definição 2.1.7.⁴ *Seja X um espaço normado. Uma sequência de elementos de X é uma função $x : \mathbb{N} \rightarrow X$, que associa a cada natural n um elemento*

³Dizemos que um conjunto S é contável quando podemos estabelecer uma função f injetora $f : S \rightarrow \mathbb{N}$.

⁴As definições de sequência aqui dadas foram adaptadas de [13, p. 23]

$x_n \in X$. Denotamos a sequência por (x_n) . Dizemos que uma sequência em X é convergente se existe um $x \in X$ tal que dado um $\epsilon > 0$, existe um $N_0 \in \mathbb{N}$ tal que $n > N_0 \Rightarrow \|x_n - x\| < \epsilon$. Em outras palavras, uma sequência em X é dita convergente se possui um limite em X .

Até o momento, ainda não falamos de espaços de Banach ou espaços de Hilbert, porque ainda precisamos da seguinte

Definição 2.1.8. Uma sequência (x_n) num espaço normado X é dita uma sequência de Cauchy se, para todo $\epsilon > 0$ existe um N tal que, para quaisquer $m, n > N$,

$$\|x_n - x_m\| < \epsilon . \quad (2.1.1)$$

Um espaço normado X é dito completo se toda sequência de Cauchy é convergente nesse espaço, isto é, se (x_n) é uma sequência de Cauchy em X , então se existe um $x \in X$ tal que $x_n \rightarrow x$ quando $n \rightarrow \infty$, dizemos que X é um espaço completo.

Definição 2.1.9. Um espaço de Hilbert é um espaço com produto interno que é completo. Um espaço de Banach é um espaço normado que é completo. Disto, decorre que todo espaço de Hilbert também é um espaço de Banach.

Exemplo 2.1.2. O espaço formado pelo conjunto dos reais munido da operação $\langle x, y \rangle = xy$ é um espaço com produto interno e, portanto, um espaço normado, cuja função norma pode ser definida por $\|x\| = |x|$. Além disso, é um espaço completo, o que o faz ser um espaço de Hilbert e, como consequência, um espaço de Banach. Se consideramos agora o conjunto $\mathbb{R} \setminus \mathbb{N}$, que é o conjunto dos reais, com exceção dos naturais, temos um espaço que não é completo. De fato, a sequência $x_n = \frac{1}{n}$ é de Cauchy, pois, tomando $N = 2/\epsilon$, temos que, se $m, n > N$,

$$\left\| \frac{1}{n} - \frac{1}{m} \right\| \leq \left| \frac{1}{n} \right| + \left| \frac{1}{m} \right| < \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} = \epsilon,$$

mas o limite da sequência $x_n = \frac{1}{n}$ é zero quando $n \rightarrow \infty$. De fato, tomando $N_2 = 1/\epsilon$, temos

$$\left\| \frac{1}{n} - 0 \right\| = \frac{1}{n} < \epsilon.$$

Disto, concluímos que $\mathbb{R} \setminus \mathbb{N}$ não é completo, como já era esperado, obviamente. Entretanto, ainda que esse espaço não seja completo, ele pode ser completado, acrescentando novamente os naturais. Este fato vale para qualquer espaço normado, isto é, qualquer espaço normado pode se tornar um espaço de Banach, como se pode ver em [12, Teorema 2.3-2]. Além disso, todo espaço pré-Hilbert pode se tornar um espaço de Hilbert, como é explicitado na referência [12, Teorema 3.2-3]. ■

O espaço L_2 , que é o mais importante para a mecânica quântica, será mostrado no seguinte exemplo, que pode ser encontrado com mais detalhes em [12].

Exemplo 2.1.3. Considere o espaço das funções contínuas reais no intervalo real $[0, 1]$, denotado por $C[0, 1]$, com produto interno

$$\langle x(t), y(t) \rangle = \int_0^1 x(t)y(t)dt.$$

A norma derivada deste produto interno é

$$\|x\| = \int_0^1 x(t)^2 dt.$$

Vamos mostrar que este espaço não é completo. De fato, considere uma sequência de funções

$$f_n(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 \leq t \leq 1/2, \\ 2nt - n, & \text{se } 1/2 < t \leq 1/2 + 1/2n \\ 1, & \text{se } 1/2 + 1/2n < t \leq 1 \end{cases}$$

A próxima figura nos dá uma ideia do comportamento geral da função f_n . É de se notar que, para qualquer n , temos que $f_n \in C[0, 1]$.

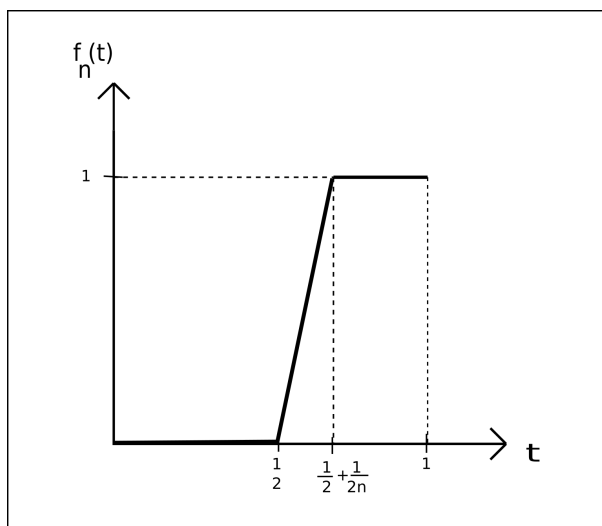


Figura 2.1: Comportamento geral da função $f_n(t)$.

Não é difícil ver que a sequência de funções (f_n) é de Cauchy. Para isto, basta calcular o limite de $\langle f_n - f_m, f_n - f_m \rangle$ quando $n, m \rightarrow \infty$. De fato, supondo, sem perda de generalidade, que $n > m$,

$$\langle f_n - f_m, f_n - f_m \rangle = \int_{1/2}^{\frac{1}{2} + \frac{1}{2n}} (2n - 2m)^2 \left(t - \frac{1}{2} \right)^2 dt + \int_{\frac{1}{2} + \frac{1}{2n}}^{\frac{1}{2} + \frac{1}{2m}} (1 - 2mt + m)^2 dt. \quad (2.1.2)$$

Estas integrais podem ser resolvidas trivialmente fazendo a mudança de variáveis $z = t - \frac{1}{2}$ e não é difícil ver que o limite de (2.1.2) é zero, quando n e m tendem ao infinito. Isto nos mostra que a sequência de funções (f_n) é uma sequência de Cauchy. Intuitivamente, esta sequência de funções não pode convergir para uma função contínua. Esperamos que, quando n tenda para o infinito, a função tenha uma descontinuidade no ponto $t = \frac{1}{2}$. Vamos mostrar que esta sequência não pode convergir para uma função contínua. Com efeito, se a sequência converge para uma função contínua f , devemos ter que $\|f_n - f\| \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$. Temos que

$$\|f_n - f\|^2 = \int_0^{\frac{1}{2}} f^2 dt + \int_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2} + \frac{1}{2n}} ((2nt - n) - f)^2 dt + \int_{\frac{1}{2} + \frac{1}{2n}}^1 (1 - f)^2 dt.$$

e, quando n tende ao infinito, a integral do meio se anula, uma vez que será uma função limitada integrada em intervalos cada vez menores. Além disso, o intervalo de integração da terceira integral tende para o intervalo $[\frac{1}{2}, 1]$. Logo, a função f ,

contínua à priori, deve ser zero quando $0 \leq t < \frac{1}{2}$ e deve ser 1 quando $\frac{1}{2} < t \leq 1$. Evidentemente, a função f não é contínua e isso nos permite concluir que o espaço das funções contínuas $C[0, 1]$, munido do produto interno aqui definido, não é completo. Isto pode ser generalizado facilmente para o espaço $C[a, b]$, podendo a e b serem infinito. Mas os espaços $C[a, b]$ podem ser completados [12], e com este produto interno, geram o espaço $L_2[a, b]$, que, sendo completo e com um produto interno, se torna um espaço de Hilbert. É este espaço onde estão as funções de onda da mecânica quântica, que devem ser quadrado integráveis. ■

2.1.2. Os espaços L_p e L_p^{loc}

O Exemplo 2.1.3 nos mostrou o espaço onde vivem as funções de onda da mecânica quântica. O espaço L_2 pertence a uma classe mais geral de espaços, os quais chamamos de espaços L_p , que são espaços de Banach. O espaço L_2 tem uma característica especial em relação aos outros espaços L_p : ele é o único destes espaços que é um espaço de Hilbert. A definição dos espaços L_p segue abaixo.

Definição 2.1.10. Chamamos de espaços $L_p(S)$, $S \subset \mathbb{R}^n$, para qualquer $1 \leq p < \infty$ real, os espaços de Banach das funções $f : S \rightarrow \mathbb{C}$ cuja integral

$$\left(\int_S |f(t)|^p dt \right) < \infty.$$

A norma de tais funções é definida da forma

$$\|f\|_p = \left(\int_S |f(t)|^p dt \right)^{1/p}. \quad (2.1.3)$$

Se consideramos $p = \infty$, temos o espaço das funções essencialmente limitadas, isto é, funções que são limitadas, exceto possivelmente em um conjunto de medida zero ⁵ (à Lebesgue), ou seja, $f \in L_\infty$ se existir uma constante M tal que

$$f(x) < M, \quad (2.1.4)$$

exceto num conjunto de medida zero. A norma no espaço L_∞ é dada pelo menor

⁵Não mencionamos nada sobre medida, ou conjuntos mensuráveis, por fugir do escopo deste trabalho. Para maiores detalhes, consulte [14]

valor dos M que respeita (2.1.3).

Exemplo 2.1.4. Considere a função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$f(x) = \begin{cases} x, & \text{se } x \in \mathbb{Q}; \\ 1, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Evidentemente, esta função não é limitada. Mas, como o conjunto dos racionais tem medida zero (à Lebesgue), esta função é essencialmente limitada e pertence ao espaço $L_\infty(\mathbb{R})$ e sua norma é dada por $\|f\|_\infty = 1$. ■

Exemplo 2.1.5. A função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f(t) = 1$ não pertence ao espaço $L_1(\mathbb{R})$. De fato, esta função não pertence a nenhum espaço $L_p(\mathbb{R})$, com exceção do espaço $L_\infty(\mathbb{R})$, uma vez que a integração dela em toda a reta resulta em infinito para qualquer $1 \leq p < \infty$. ■

O exemplo anterior nos mostrou o exemplo de uma função que não pertence aos espaços L_p , com exceção do L_∞ . Mas pode haver situações que não precisamos de uma exigência tão forte. A próxima definição nos mostra uma condição mais fraca, o conceito de uma função que é L_p^{loc} , isto é, uma função que é localmente L_p .

Definição 2.1.11. Dizemos que a função $f : D(f) \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ é localmente L_p se, para qualquer conjunto compacto⁶ $\mathbb{K} \subset D(f)$ tivermos

$$\int_{\mathbb{K}} |f(x)|^p dx < \infty.$$

Neste caso, dizemos que f pertence ao conjunto espaço $L_p^{loc}(D(f))$.

Exemplo 2.1.6. No Exemplo 2.1.5, vimos que a função lá definida não podia ser $L_p(\mathbb{R})$. Mas, evidentemente, a função lá definida é $L_p^{loc}(\mathbb{R})$, para qualquer valor de $p \geq 1$. ■

2.1.3. Operadores lineares e auto-adjunção

Os operadores que lidamos comumente na mecânica quântica são lineares, como por exemplo o operador hamiltoniano, o operador potencial, ou o operador de evo-

⁶No \mathbb{R}^n , um conjunto compacto é o mesmo que um conjunto fechado e limitado.

lução temporal. Por isso, vale à pena darmos uma breve introdução formal aqui, para que possamos depois estabelecer uma distinção entre um operador hermitiano de um operador auto-adjunto. Em muitos textos de mecânica quântica, como em [15], é comum vermos afirmações de que os observáveis na mecânica quântica são operadores hermitianos, mas isso não é verdade. Como veremos posteriormente, operadores, para representarem observáveis, devem ser auto-adjuntos. A hermiticidade é apenas uma condição necessária.

Definição 2.1.12. *Sejam X, Y dois espaços vetoriais. Um operador linear $T : X \rightarrow Y$ é uma aplicação que, dados $x, y \in X$ e um escalar α , obedece às seguintes propriedades:*

$$i) T(x + y) = Tx + Ty;$$

$$ii) \alpha Tx = T(\alpha x).$$

Dizemos que X é o domínio de T , e frequentemente denotamos por $D(T)$. Dizemos que Y é o contradomínio de T . Denotamos por $R(T)$ o conjunto imagem de T , sendo este último o conjunto de todos os vetores z em Y para os quais existe um $x \in D(T)$ tal que $z = Tx$.

Definição 2.1.13 (Operadores limitados). *Seja $T : X \rightarrow Y$ um operador linear, com X, Y espaços normados. Se para qualquer $x \in X$ e para algum $M > 0$ tivermos*

$$\|Tx\|_Y \leq M\|x\|_X, \tag{2.1.5}$$

dizemos que T é limitado. Definimos como a norma de T por

$$\|T\| = \inf\{\mathbb{R} \ni M > 0 : \|Tx\|_Y \leq M\|x\|_X\}. \tag{2.1.6}$$

Caso não exista nenhum M que satisfaça a desigualdade dada por (2.1.5), dizemos que T é um operador ilimitado.

Exemplo 2.1.7. O operador derivada segunda no espaço $L_2[0, \pi]$, com domínio definido pelas funções que são duas vezes diferenciáveis no intervalo $[0, \pi]$ é ilimitado. De fato, considere a sequência de funções $f_n(x) = \cos(nx)$. Temos que

$$\left\| \frac{d^2 f_n}{dx^2} \right\| = \|-n^2 \cos(nx)\| = n^2 \|\cos(nx)\| = n^2 \|f_n\|,$$

e, como o valor de n pode ser arbitrariamente grande, concluímos que o operador derivada segunda neste espaço é ilimitado. ■

Definição 2.1.14. Dizemos que um operador S é uma extensão de um operador T se $D(T) \subset D(S)$ e, para todo $x \in D(T)$, temos $Tx = Sx$. Em contrapartida, dizemos que T é uma restrição de S .

Definição 2.1.15. Sejam $T : X_1 \rightarrow X_2$ e $S : X_2 \rightarrow X_1$ dois operadores lineares, onde X_1 e X_2 são espaços de Hilbert. Dizemos que S é um operador formalmente adjunto de T se

$$\langle Tx, y \rangle_{X_2} = \langle x, Sy \rangle_{X_1}$$

para quaisquer $x \in D(T)$ e $y \in D(S)$.

Definição 2.1.16. Dizemos que o operador T^* é o operador adjunto de T , densamente⁷ definido em um espaço de Hilbert X , se T^* é um operador formalmente adjunto de T e além disso, para qualquer operador S , formalmente adjunto de T , verificarmos que $D(S) \subset D(T^*)$. Em outras palavras, o domínio do adjunto deve conter o domínio de todos os outros operadores formalmente adjuntos.

Definição 2.1.17. Um operador T é dito hermitiano se para todos $x, y \in D(T) \subset X$ temos

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle. \quad (2.1.7)$$

Um operador é simétrico se é hermitiano e se seu domínio de definição é denso em X .

Podemos ver que um operador hermitiano é, por definição, um operador formalmente adjunto de si próprio, mas note que não é necessariamente o seu próprio adjunto, devido ao seu domínio de definição. Além disso, deve-se tomar um certo cuidado de se avaliar o domínio de definição de um operador que satisfaz à (2.1.7). De fato, se algum operador é ilimitado e satisfaz a esta expressão, ele não pode ser definido em todo o espaço de Hilbert, como nos mostra o seguinte Teorema, cuja prova pode ser encontrada em [12].

⁷Para que um operador admita a existência do adjunto, ele deve ser densamente definido no espaço de Hilbert X . Ser densamente definido significa que $D(T)$ é denso em X . Para mais detalhes, consulte o Capítulo 10 de [12].

Teorema 2.1.1 (Hellinger-Toeplitz). *Se um operador linear T é definido em todo o espaço de Hilbert X e satisfaz (2.1.7), então T é limitado.*

De posse de todas as definições anteriores, podemos dar a definição mais importante desta seção.

Definição 2.1.18. *Dizemos que um operador é auto-adjunto se ele é o adjunto de si próprio, isto é, T é auto adjunto se $T = T^*$.⁸ Dizemos que T é essencialmente autoadjunto se T possui uma única extensão auto-adjunta.*

É necessário que fique clara a distinção entre um operador hermitiano, apenas, e um operador auto-adjunto. Como dissemos, um operador hermitiano não necessariamente é o adjunto de si próprio e é preciso que se olhe cuidadosamente para o domínio de tais operadores. De fato, podemos afirmar que todo operador auto-adjunto é hermitiano, mas nem todo operador hermitiano é auto-adjunto. Note, porém, que esta distinção só se faz necessária em espaços de dimensão infinita, uma vez que em espaços de dimensão finita, ser hermitiano implica em ser auto-adjunto e vice-versa. O próximo exemplo nos mostra a aplicação de algumas das mais importantes definições que foram dadas nessa seção.

Exemplo 2.1.8 (Gieres, [16]). Considere o espaço de Hilbert $L_2[-a, a]$ definido sobre os reais. Considere o operador $T = \frac{d^2}{dx^2}$, cujo domínio é dado por⁹

$$D(T) = \left\{ \psi \in AC[-a, a] : \frac{d^2\psi}{dx^2} \in AC[-a, a] \text{ e } \psi(-a) = \psi(a) = 0 \right\}.$$

Vamos mostrar que T é auto-adjunto neste domínio. De fato, temos que

$$\begin{aligned} \langle \eta, T\phi \rangle &= \int_{-a}^a \eta \frac{d^2\phi}{dx^2} dx \\ &= \int_{-a}^a \frac{d^2\eta}{dx^2} \phi dx + \left[\eta(a) \frac{d\phi}{dx}(a) - \eta(-a) \frac{d\phi}{dx}(-a) \right] \\ &= \langle T^*\eta, \phi \rangle + \left[\eta(a) \frac{d\phi}{dx}(a) - \eta(-a) \frac{d\phi}{dx}(-a) \right], \end{aligned}$$

e, como temos $\langle T^*\eta, \phi \rangle = \langle \eta, T\phi \rangle$, e como na definição do domínio de T não fizemos nenhuma restrição sobre a derivada das funções que pertencem $D(T)$,

⁸Com $T = T^*$, queremos dizer que $D(T) = D(T^*)$ e que para todo $x \in D(T)$, $Tx = T^*x$.

⁹Usamos o espaço das funções absolutamente contínuas, AC , porque este espaço é denso no espaço L_2 e além disso, em AC a integração por partes está bem definida (veja Cap. 3 de [17]).

segue que $\eta(a) = \eta(-a) = 0$. Isto nos mostra que $D(T^*) = D(T)$. Além disso, T e T^* definem a mesma regra, isto é, $T\phi = T^*\phi$. Logo, T é auto-adjunto no domínio definido. Notemos que se tivéssemos definido o operador T com o domínio

$$D_2(T) = \left\{ \psi \in AC[-a, a] : \frac{d^2\psi}{dx^2} \in AC[-a, a], \psi(\pm a) = \psi'(\pm a) = 0 \right\},$$

não teríamos um operador auto-adjunto, uma vez que o domínio não conteria o domínio de todos os outros operadores formalmente adjuntos. Evidentemente, nesta situação, o operador T seria apenas hermitiano. ■

Gostaríamos de frisar a importância de se observar o domínio de aplicação dos operadores, pois a falta de rigor pode nos levar a alguns paradoxos, como discutidos em [16, 18, 19].

2.1.4. Propriedades espectrais de operadores auto-adjuntos

Frequentemente faz-se a afirmação de que o espectro dos operadores hermitianos é real. Isto é verdade apenas para uma parte de seu espectro, a qual chamamos de espectro discreto, os conhecidos auto-valores dos operadores. De fato, como veremos adiante, o espectro dos operadores auto-adjuntos está inteiramente contido nos reais, enquanto o espectro dos operadores apenas hermitianos pode ter uma parte que é imaginária, quando trabalhamos com espaços de Hilbert definidos sobre os complexos, que é o caso da mecânica quântica. Temos uma diferença importante entre estes dois tipos de operadores, uma vez que, de acordo com um dos postulados da mecânica quântica, os resultados que podem ser mensurados experimentalmente para a grandeza que um operador representa devem ser um dos valores do espectro de tal operador. Obviamente, o que vai ser mensurado deve ser real. Isto traz uma importância a mais para olharmos o domínio em que vamos definir nossos operadores. A próxima definição, como pode ser vista em [12], nos mostra o que queremos dizer quando falamos de espectro de um operador.

Definição 2.1.19. *Seja X um espaço normado não vazio definido sobre os complexos e seja $T : D(T) \subset X \rightarrow X$ um operador linear. Considere o operador*

$T_\lambda = T - \lambda I$, com I o operador identidade e λ um complexo. Chamamos λ de um valor regular de T se $(T_\lambda)^{-1}$ existe, é limitado e é definido em um conjunto que é denso em X e chamamos o conjunto de todos os λ que são valores regulares de T de conjunto resolvente de T , denotado por $\rho(T)$. O conjunto $\sigma(T) = \mathbb{C} \setminus \rho(T)$ é chamado de espectro de T . O conjunto $\sigma(T)$ ainda pode ser dividido em três conjuntos disjuntos, sendo eles:

- $\sigma(T)_p$, o espectro discreto de T , sendo o conjunto dos λ para os quais $(T_\lambda)^{-1}$ não existe. λ nesse caso é chamado de auto-valor de T ;
- $\sigma_c(T)$, o espectro contínuo de T , sendo o conjunto dos λ para os quais $(T_\lambda)^{-1}$ existe, mas não é limitado;
- $\sigma_r(T)$, o espectro residual de T , sendo o conjunto dos λ para os quais $(T_\lambda)^{-1}$ existe, podendo ser limitado ou não, mas $D((T_\lambda)^{-1})$ não é denso em X .

Nota. Podemos encontrar algumas vezes a divisão do espectro em dois conjuntos disjuntos, sendo o primeiro o conjunto de todos os auto-valores de T com multiplicidade finita, que nesse caso é chamado de espectro discreto, e um outro conjunto, denotado por $\sigma_{ess}(T)$, chamado de espectro essencial de T , formado pelos auto-valores de multiplicidade infinita, juntamente com os pontos de acumulação de $\sigma(A)$.

Como vimos, o espectro não é formado apenas pelos auto-valores do operador. Por mais que os operadores puramente hermitianos possam ter auto-valores reais, o seu espectro residual pode ser complexo. Este problema não existe para os operadores auto-adjuntos, como se mostra no seguinte

Teorema 2.1.2. *O espectro $\sigma(T)$ de um operador linear auto-adjunto T é real e fechado.*

A demonstração do Teorema anterior pode ser apreciada no Capítulo 10 de [12]. Além de tudo o que se expôs sobre o espectro, há um outro fato que nos motiva a utilizarmos operadores auto-adjuntos na mecânica quântica. De fato, como consequência do Teorema de Stone para grupos unitários uni-paramétricos fortemente contínuos [20, 21], a dinâmica quântica existe se, e somente se, o operador hamiltoniano for auto-adjunto. Para maiores detalhes, consulte as referências [19, 22, 23]. Por isso, uma de nossas motivações neste trabalho é provar a

auto-adjunção do operador hamiltoniano com o potencial do tipo K_0 dado por (1.5.1).

2.2. A equação de Schrödinger em duas dimensões espaciais para duas partículas

Desenvolveremos nesta seção alguns resultados sobre a equação de Schrödinger em duas dimensões espaciais. Apesar de ser um procedimento que pode ser encontrado em muitos livros, ou na referência [6], vale a pena refazê-lo, uma vez que os resultados aqui obtidos serão constantemente usados e referenciados ao longo do texto. Além disso, gostaríamos de ressaltar que a definição dos domínios onde os operadores atuam não será uma preocupação nesta seção, onde suporemos que as funções consideradas atendem todos os requisitos.

A equação de Schrödinger tem a forma geral

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (2.2.1)$$

onde H é o operador hamiltoniano, que deve ser auto-adjunto. Além disso, esse operador é relacionado com a energia do sistema e, para um sistema de duas partículas com massas iguais m_e , é dado por

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(r), \quad (2.2.2)$$

onde P é o momento linear do centro de massa sistema, p é o momento relativo ao centro de massa, M é a massa total do sistema, cujo valor é $2m_e$, enquanto que μ é a massa reduzida e vale $\frac{m_e}{2}$ e V é o potencial de interação a que as partículas estão submetidas, que neste caso, consideramos apenas dependente da distância entre elas. Este hamiltoniano surge quando consideramos que as coordenadas independentes a serem utilizadas são a posição do centro de massa, representada por \vec{R} e a coordenada \vec{r} , que marca a posição relativa entre as duas partículas.

A função de onda, à priori, deve depender das coordenadas \vec{R} , \vec{r} e do tempo t . Para resolver a equação de Schrödinger dada pela Equação (2.2.1), podemos usar o método de separação de variáveis e dizer que $\Psi(\vec{R}, \vec{r}, t) = \phi(\vec{R})\psi(\vec{r})\eta(t)$.

Além disso, sabemos que os operadores P^2 e p^2 são dados, respectivamente, por $-\hbar^2 \nabla_{\vec{R}}^2$ e $-\hbar^2 \nabla_{\vec{r}}^2$. Isso nos permite escrever a Equação (2.2.1) da forma

$$i\hbar\phi\psi\frac{d\eta}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2M}\psi\eta\nabla_{\vec{R}}^2\phi - \frac{\hbar^2}{2\mu}\phi\eta\nabla_{\vec{r}}^2\psi + \phi\psi\eta V(r), \quad (2.2.3)$$

onde suprimimos os argumentos das funções ϕ , ψ , η , por simplicidade. Podemos dividir ambos os membros de (2.2.3), de modo a obter

$$i\hbar\frac{1}{\eta}\frac{d\eta}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\phi}\nabla_{\vec{R}}^2\phi - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi}\nabla_{\vec{r}}^2\psi + V(r). \quad (2.2.4)$$

A expressão em (2.2.4) só pode ser verdadeira caso ambos os membros sejam iguais a uma constante. Chamaremos esta constante de E_T , a qual relacionamos à energia total do sistema. Isto nos mostra que as funções η dependem dessa constante E_T e são dadas por

$$\eta = Ae^{-\frac{iE_T}{\hbar}t},$$

onde A é uma constante. De (2.2.4), temos

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\phi}\nabla_{\vec{R}}^2\phi - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi}\nabla_{\vec{r}}^2\psi + V(r) = E_T, \quad (2.2.5)$$

e, novamente, a única possibilidade é $-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\phi}\nabla_{\vec{R}}^2\phi$ ser uma constante, da mesma maneira que $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi}\nabla_{\vec{r}}^2\psi + V(r)$, e a primeira, podemos dizer que vale E_{CM} , que está relacionada com a energia do centro de massa e a segunda, chamaremos simplesmente de $E = E_T - E_{CM}$. A parte relativa ao centro de massa não nos diz nada em especial sobre os estados ligados. Vamos nos concentrar agora apenas na equação

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi}\nabla_{\vec{r}}^2\psi + V(r) = E, \quad (2.2.6)$$

que pode ser reescrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (2.2.7)$$

onde foram omitidas as coordenadas do laplaciano por simplicidade.

De agora em diante, todos os esforços serão direcionados para a Equação (2.2.7). usaremos coordenadas polares para reescrever a Equação (2.2.7) como

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (2.2.8)$$

Utilizaremos novamente o método de separação de variáveis, para escrever dessa vez

$$\psi(\vec{r}) = R(r)M(\phi).$$

De (2.2.8), temos

$$\left(\frac{r^2}{R(r)} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{r}{R(r)} \frac{d}{dr} \right) R(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) + \frac{1}{M(\phi)} \frac{d^2}{d\phi^2} M(\phi) = 0. \quad (2.2.9)$$

Como já visto antes, os termos com dependência em r tem que ser uma constante, assim como os termos dependentes em ϕ , para que a equação anterior seja verdadeira. Disso, olhando para a parte que é dependente em ϕ , temos

$$\frac{d^2 M}{d\phi^2}(\phi) = -m^2 M(\phi), \quad (2.2.10)$$

cuja solução pode ser encontrada trivialmente, resultando em

$$M(\phi) = A_2 e^{im\phi},$$

onde A_2 é simplesmente uma constante. Se exigimos a unicidade da função M , quando o argumento desta função for acrescido de 2π , devemos ter que

$$M(\phi + 2\pi) = M(\phi) \Rightarrow e^{im\phi} = e^{im\phi} e^{im2\pi} \Rightarrow e^{im2\pi} = 1,$$

concluindo, disso, que m deve ser um número inteiro. Este resultado já era esperado, uma vez que m está relacionado ao número quântico do momento angular.

Olhando agora para a função $R(r)$, temos

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right) R(r) + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu r^2} \right) R(r) = ER(r). \quad (2.2.11)$$

Como visto em [6], podemos fazer a mudança de variáveis

$$R(r) \rightarrow \frac{g(r)}{\sqrt{r}}, \quad (2.2.12)$$

o que nos leva à equação

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} g(r) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2(m^2 - \frac{1}{4})}{2\mu r^2} \right] g(r) = E g(r). \quad (2.2.13)$$

É de se notar a semelhança da Equação (2.2.13) com a equação de Schrödinger unidimensional, sujeita não apenas ao potencial $V(r)$, mas sim, a um potencial efetivo dado por

$$V_{\text{ef}} = V(r) + \frac{\hbar^2(m^2 - \frac{1}{4})}{2\mu r^2}, \quad (2.2.14)$$

e este potencial será importante quando estivermos calculando condições necessárias para a existência de estados ligados.

2.3. Estados ligados e estados espalhados

Nesta seção, vamos definir estados ligados e estados espalhados de acordo com as definições encontradas na referência [24]. Primeiro, antes de definirmos estados ligados ou espalhados, considere o operador de projeção ortogonal, F_r de $L_2(\mathbb{R}^n)$ em $L^2(B_r)$, onde B_r é uma bola de raio r centrada na origem. Se $\psi(x)$ representa o estado de um sistema, temos que $\int_{B_r} (F_r \psi)^* (F_r \psi) d^2x$ nos dá a probabilidade de encontrar o sistema no interior de B_r .

Definição 2.3.1 (Estados ligados e estados espalhados). *Seja $\{U_t\}$ um grupo de evolução e seja seu gerador infinitesimal o operador hamiltoniano H . Um estado $\psi(x)$ é dito ser um estado ligado se*

$$\int_{\mathbb{R}^n \setminus B_r} |U_t \psi(x)|^2 d^n x < \varepsilon, \text{ para algum } \mathbb{R} \ni r > 0.$$

De maneira análoga, dizemos que um estado é ligado se é verificado que

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \left(\sup_{t \in \mathbb{R}} \|(I - F_r) U_t \psi\|^2 \right) = 0, \quad (2.3.1)$$

onde I é o operador identidade. Dizemos que um estado é espalhado se o contrário acontece, isto é, se

$$\int_{B_r} |U_t \psi(x)|^2 d^n x < \varepsilon, \forall r \in \mathbb{R}_+, \text{ quando } t \rightarrow \pm\infty.$$

De maneira análoga, também podemos escrever

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} (\|F_r U_t \Psi\|^2) = 0, \forall r < \infty. \quad (2.3.2)$$

Aqui, U_t deve ser entendido como o operador de evolução temporal, que ao atuar em ψ , a leva de um tempo t_0 até um tempo $t_0 + t$.

Em conjunto com a Definição 2.3.1, é natural definirmos o conjunto M^o , que é o conjunto formado por todos os estados ligados e definirmos o conjunto M^∞ , de todos os estados espalhados. Também podemos definir os conjuntos M_\pm^o , que representam os estados ligados para tempos positivos e negativos e podemos definir também os conjuntos M_\pm^∞ , que representam os estados espalhados quando $t \rightarrow \pm\infty$. Obviamente, $M^o = M_+^o \cap M_-^o$ e $M^\infty = M_+^\infty \cap M_-^\infty$. Ainda podemos definir o conjunto H_p , que é o conjunto de todos os estados que são auto-estados relacionados ao espectro discreto de H e H_c , que é o conjunto dos estados relacionados com o espectro contínuo de H . É fato que $H_p \subset M^o$ [24]. Assim, se provarmos que H_p é não vazio para um hamiltoniano com potencial do tipo K_0 , provamos a existência de estados ligados.

Capítulo 3:

Resultados e discussões

3.1. Estudo da auto-adjunção do hamiltoniano do modelo

Antes de verificarmos se de fato há estados ligados, precisamos estudar a auto-adjunção do operador hamiltoniano, H , com o potencial $V(r) = -\alpha K_0(\beta r)$, uma vez que, como consequência do Teorema de Stone [20], a dinâmica quântica só existe se H for auto-adjunto. Antes de analisarmos a auto-adjunção de H , primeiramente precisaremos de algumas definições e teoremas.

Definição 3.1.1 ([21, Cap. 10]). *Sejam A e B dois operadores lineares densamente definidos em um espaço de Hilbert \mathcal{H} . Suponha que:*

- (i) $D(A) \subset D(B)$;
- (ii) Para algum a e algum b não negativos e todo $\varphi \in D(A)$,

$$\|B\varphi\| \leq a\|A\varphi\| + b\|\varphi\|. \quad (3.1.1)$$

Neste caso, dizemos que B é A -limitado. O ínfimo de a é chamado de **limite relativo** de B em relação a A . Se o limite relativo for 0, dizemos que B é **infinitesimalmente pequeno** em relação a A e escrevemos $B \ll A$.

Com a definição anterior, podemos apresentar o famoso critério de Kato, que é uma forma de se verificar a auto-adjunção de operadores simétricos.

Teorema 3.1.1 (Critério de Kato). *Suponha A um operador auto-adjunto e B um operador simétrico e A -limitado com limite relativo $a < 1$. Então $A + B$ é auto-adjunto em $D(A)$ e essencialmente auto-adjunto em qualquer core¹ de A .*

A demonstração do teorema anterior pode ser encontrada em [21].

¹Dizemos que o core de um operador fechável A é um subconjunto de seu domínio, tal que o fecho da restrição de A ao core nos dá o próprio A .

Definição 3.1.2. *Seja $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ o hamiltoniano livre. Dizemos que os domínios*

- $D_{max} = \{\varphi | \varphi \in L^2(\mathbb{R}^n), \nabla^2\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n), \text{ no sentido das distribuições}\};$
- $D_{min} = C_0^\infty(\mathbb{R}^n).$

são os domínios máximo e mínimo de H_0 , respectivamente.

O próximo Teorema, cuja prova pode ser encontrada em [21, pp. 54–55] nos diz sobre a auto-adjunção de H_0 .

Teorema 3.1.2. *O operador H_0 é auto-adjunto em D_{max} e essencialmente auto-adjunto em D_{min} .*

O seguinte Teorema, cuja demonstração pode ser encontrada em [21, pp. 55–56], será importante para o estabelecimento do critério que nos permitirá estudar a auto-adjunção de H .

Teorema 3.1.3. *Seja $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$, $n \leq 3$, uma função pertencente ao domínio de H_0 . Então:*

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

$$\|\varphi\|_\infty \leq a\|H_0\varphi\| + b\|\varphi\|. \quad (3.1.2)$$

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

$$\|\varphi\|_q \leq a\|H_0\varphi\| + b\|\varphi\|. \quad (3.1.3)$$

De posse de todos estes Teoremas e definições, podemos provar o seguinte

Teorema 3.1.4. ² *Seja um potencial V uma função real que pode ser escrita como $V = V_1 + V_2$, onde V_1 é uma função que pertence a $L_2(\mathbb{R}^2)$ e V_2 é uma função*

²A demonstração deste Teorema é análoga para o caso tridimensional, dada em [21, Teo. X.15]

que pertence a $L_\infty(\mathbb{R}^2)$. O operador hamiltoniano $H = H_0 + V$ é auto-adjunto em D_{max} e essencialmente auto-adjunto em D_{min} .

Demonstração. O domínio de V é dado por

$$D(V) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^2) : V\psi \in L^2(\mathbb{R}^2)\}$$

De fato, temos que se $\phi \in D(H_0)$, ϕ deve ser uma função limitada de acordo com o Teorema 3.1.3. Considere $\|\cdot\|_2 = \|\cdot\|$, por simplicidade. Ainda, temos que

$$\|V\phi\| = \|(V_1 + V_2)\phi\| \leq \|V_1\phi\| + \|V_2\phi\|, \quad (3.1.4)$$

pela desigualdade triangular. Ainda, segue que

$$\|V_1\phi\| + \|V_2\phi\| \leq \|V_1\| \|\phi\|_\infty + \|V_2\|_\infty \|\phi\| < \infty, \quad (3.1.5)$$

pela desigualdade de Hölder. De (3.1.5), podemos concluir que $\phi \in D(V)$, uma vez que $\|V\phi\| \leq \|V_1\phi\| + \|V_2\phi\| < \infty$. Logo, se $\phi \in D(H_0)$, segue que $\phi \in D(V)$, isto é, $D(H_0) \subset D(V)$. Além disso, de acordo com o Teorema 3.1.3, temos que para qualquer a maior que zero, existe um b tal que

$$\|\phi\|_\infty \leq a\|H_0\phi\| + b\|\phi\|, \quad (3.1.6)$$

o que nos permite concluir de (3.1.5) que

$$\|V_1\phi\| + \|V_2\phi\| \leq a\|V_1\| \|H_0\phi\| + (b\|V_1\| + \|V_2\|_\infty) \|\phi\|. \quad (3.1.7)$$

Escolhendo um a tal que $A = a\|V_1\| < 1$, é possível reescrever (3.1.7) como

$$\|V\phi\| \leq A\|H_0\phi\| + B\|\phi\|, \quad (3.1.8)$$

com $B = b\|V_1\| + \|V_2\|_\infty$ e $A < 1$, para qualquer $\phi \in D(H_0)$. Logo, V é H_0 -limitado, com limite relativo menor que 1. Assim, de acordo com o Teorema 3.1.1, o operador $H = H_0 + V$ é auto-adjunto no domínio D_{max} , uma vez que H_0 é auto-adjunto nesse domínio, como mencionado no Teorema 3.1.2. Além

disso, H é essencialmente auto-adjunto em D_{min} , devido a H_0 ser essencialmente auto-adjunto neste último. ■

Utilizando o Teorema 3.1.4, poderemos provar a auto-adjunção do hamiltoniano em D_{max} com o potencial atrativo do tipo K_0 . De (1.5.2), para valores de z muito próximos de zero, podemos ver que

$$K_0 \approx -\ln(z) + \ln(2) - \gamma,$$

com $\gamma = 0,5772156649\dots$. Isto quer dizer que para um determinado valor $z < \eta$ com η suficientemente próximo de zero, quando podemos desprezar os termos com potências de z^2 em (1.5.2), temos que $K_0 + \ln z \approx \ln 2 - \gamma \approx 0,12 < 1$, isto é, $K_0(z) < 1 - \ln(z)$. Assim, temos que

$$\int_0^{\frac{\eta}{\beta}} K_0^2(\beta r) r dr = \frac{1}{\beta^2} \int_0^{\eta} K_0^2(z) z dz < \frac{1}{\beta^2} \int_0^{\eta} (1 - \ln(z))^2 z dz.$$

A última integral é convergente, logo, a função $K_0(z)(1 - \chi(z - \eta))$ é $L_2(\mathbb{R}^2)$, onde $\chi(x) = 1$ se $x \geq 0$ e $\chi(x) = 0$ se $x < 0$. Vale ressaltar que não nos preocupamos com a parte angular para determinar se $K_0(z)(1 - \chi(z - \eta))$ é $L_2(\mathbb{R}^2)$, uma vez que a integral na parte angular dá como resultado simplesmente um fator de 2π . Além disso, a função $K_0(z)\chi(z - \eta)$ é limitada e, portanto, pertence a $L_\infty(\mathbb{R}^2)$. Note que podemos escrever

$$K_0(z) = K_0(z)(1 - \chi(z - \eta)) + K_0(z)\chi(z - \eta),$$

onde z vale βr . Assim, de acordo com o Teorema 3.1.4, vemos que o potencial da forma $-\alpha K_0(\beta r)$ é H_0 -limitado e, portanto, H é auto-adjunto em D_{max} e nesse domínio pode representar um observável.

3.2. Momento angular crítico

Sabe-se que o espectro essencial do operador hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V$$

é o intervalo $[0, \infty)$, se o potencial V se anula no infinito [22, p. 161]. Disto, concluímos que o espectro discreto do hamiltoniano com o potencial $V(r) = -\alpha K_0(\beta r)$ necessariamente se encontra nos números reais negativos, uma vez que $K_0(\beta r) \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow \infty$ e, portanto, os estados estacionários devem ter energia negativa. Além disso, qualquer sistema não pode ter valor de energia menor do que o valor mínimo do potencial. De fato, a partícula está sujeita a um potencial, que surge devido à interação. E devido à interação, a partícula deve possuir energia pelo menos igual ao valor mínimo do potencial. Um valor de energia mais baixo que a energia potencial mínima é fisicamente inaceitável, por contrariar a natureza da interação que se supõe ocorrer. Além disso, caso tivéssemos um estado com energia menor do que o valor mínimo do potencial, o valor esperado da energia neste estado também seria menor do que o valor mínimo do potencial, o que não faz sentido. Isto nos mostra que, para que tenhamos a possibilidade de o sistema ter um estado com energia negativa, o potencial deve conter, necessariamente, uma parte negativa.

Usando (2.2.14), podemos encontrar as condições necessárias para a existência de estados estacionários. Basta encontrarmos condições para que $V_{\text{eff}}(r)$ tenha uma parte negativa, lembrando que $V(r) = -\alpha K_0(\beta r)$. Isto pode ser avaliado facilmente se verificamos que caso haja duas raízes de $V_{\text{eff}}(r)$, pois nessas condições, $V_{\text{eff}}(r)$ necessariamente tem uma parte que é negativa, uma vez que $V_{\text{eff}}(r)$ tende a $+\infty$ quando r tende a zero e $V_{\text{eff}}(r)$ tende a zero quando r tende ao infinito. Isto nos mostra que basta encontrarmos raízes da equação

$$-\alpha K_0(\beta r) + \frac{\hbar^2 (m^2 - \frac{1}{4})}{2\mu r^2} = 0. \quad (3.2.1)$$

para buscar uma condição necessária para a existência de estados estacionários.

Como $r \neq 0$, podemos multiplicar a equação (3.2.1) por $\frac{\beta^2 r^2}{\alpha}$, obtendo

$$\frac{\beta^2 \hbar^2 (m^2 - \frac{1}{4})}{2\mu\alpha} = \beta^2 r^2 K_0(\beta r).$$

Fazendo $\beta r = x$ e $\frac{2\mu\alpha}{\beta^2 \hbar^2} = C$, obtemos

$$m^2 - \frac{1}{4} = Cx^2 K_0(x). \quad (3.2.2)$$

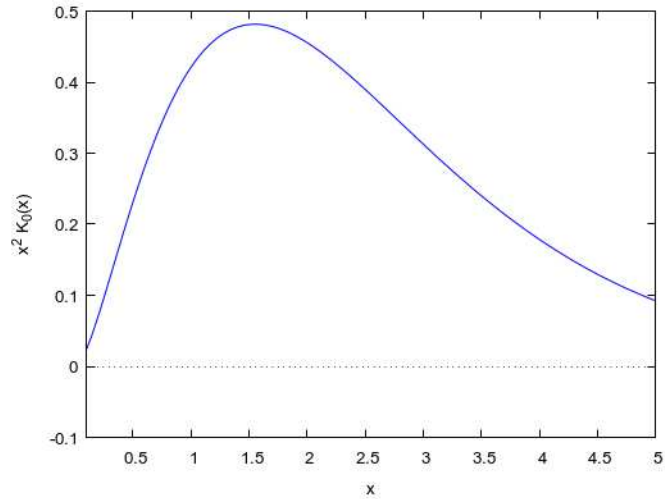
A equação (3.2.2) consegue nos mostrar um momento angular crítico em função de C , assim como também nos fornece um C crítico em função de m . De fato, se M é o momento angular crítico, isto é, o maior momento angular possível para o qual exista a possibilidade de estados estacionários, podemos ver que seu valor é

$$M = \left[\sqrt{C \times \text{máx}\{x^2 K_0(x)\} + \frac{1}{4}} \right], \quad (3.2.3)$$

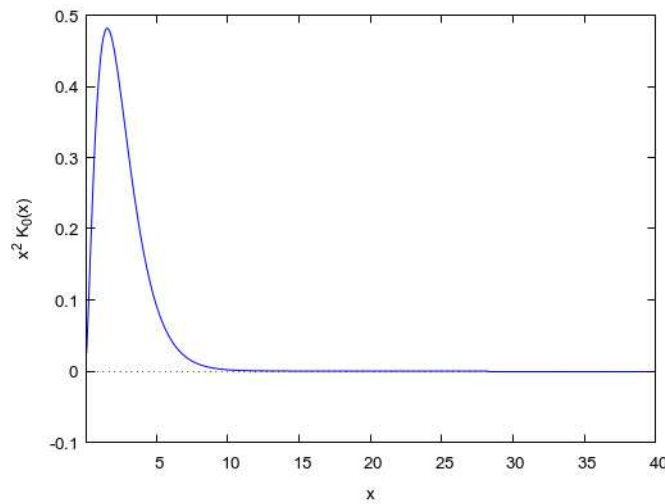
onde $[y]$ representa a função piso, que retorna o maior número inteiro que é menor ou igual a y . Com a ajuda do software Máxima, sabendo que

$$\frac{d}{dx} x^2 K_0(x) = 2x K_0(x) - x^2 K_1(x),$$

podemos encontrar os valores para os quais a primeira derivada de $x^2 K_0(x)$ se anula. No intervalo entre 0 e 100, a única raiz da primeira derivada encontrada foi aproximadamente 1,552. Para valores de x maiores que 100, não vale a pena procurarmos por pontos de possíveis valores de máximo, uma vez que $x^2 K_0(x)$ é praticamente zero para estes valores. O valor de $x^2 K_0(x)$ para $x = 1,552$ é aproximadamente 0,48 e realmente representa um ponto de máximo, como podemos ver nos gráfico a seguir.



(a)



(b)

Figura 3.1: Gráfico de $x^2 K_0(x)$ em (a) e em (b) o mesmo gráfico, mas estendido, para mostrar que o único máximo que esta função possui está no ponto de aproximadamente 1,552.

Disto, podemos ver que o momento angular crítico é aproximadamente

$$M = \left\lceil \sqrt{C \times 0,48 + \frac{1}{4}} \right\rceil. \quad (3.2.4)$$

Também podemos calcular o valor crítico de C , o qual chamaremos de C_{crit} , que será o menor valor possível de C para o qual há a possibilidade da existência de estados ligados. De fato, retornando à equação (3.2.2), podemos ver que

$$C = \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{x^2 K_0(x)}. \quad (3.2.5)$$

O valor máximo de $x^2 K_0(x)$ já foi calculado e vale aproximadamente 0,48. Isto nos mostra que o valor crítico de C vale aproximadamente

$$C_{\text{crit}} = 2,08 \times (m^2 - 0,25). \quad (3.2.6)$$

e temos que há a possibilidade de estados ligados caso

$$C > 2,08 \times (m^2 - 0,25). \quad (3.2.7)$$

Em [6], usando-se os resultados de [25], mostrou-se que o número N de estados estacionários obedecia a seguinte desigualdade, para momento angular não nulo:

$$N < \frac{C}{2m} \quad (3.2.8)$$

Segue que nos casos em que há pelo menos um estado estacionário, temos, segundo [6],

$$C > 2m, \quad (3.2.9)$$

como condição necessária para a existência de estados ligados. O que obtivemos em (3.2.7) para momento angular $m = 1$ nos dá uma condição mais fraca do que a apresentada em (3.2.9). Mas ao aumentarmos o momento angular, a condição expressa em (3.2.7) se torna melhor do que a condição expressa em (3.2.9). De fato, podemos ver que se $m = 2$, de (3.2.7) obtemos que uma condição necessária para a existência de estados estacionários é $C > 7,8$, enquanto que a condição expressa em (3.2.9) nos leva a $C > 4$. A condição necessária que apresentamos aqui neste trabalho só é pior do que a condição apresentada em [6] no caso de $m = 1$, mas para momentos angulares maiores, é uma condição melhor.

3.3. Condição suficiente para a existência de estados ligados

Na seção 3.2, encontramos uma condição necessária para a possibilidade da existência de estados estacionários. Agora, buscamos estabelecer uma condição su-

ficiente que nos garanta a existência de estados estacionários no modelo. Para tal, usaremos o fato que já foi apresentado na Seção 3.2, que nos diz que, se o espectro discreto existe, no modelo que estudamos, ele deve estar contido nos reais negativos. Vamos usar, ainda, o seguinte

Teorema 3.3.1. *Seja A um operador auto-adjunto. Se para algum η existe algum $u \in D(A)$ tal que*

$$\|(A - \lambda)u\| \leq \eta\|u\|, \quad (3.3.1)$$

com $\lambda \in \mathbb{R}$, então $\sigma(A) \cap [\lambda - \eta, \lambda + \eta] \neq \emptyset$, isto é, A tem espectro em $[\lambda - \eta, \lambda + \eta]$.

A prova do Teorema anterior pode ser encontrada em [22]. Note que, como consequência imediata, se obtemos $\|(A - \lambda)u\| < \eta\|u\|$, A tem espectro no interior do intervalo $[\lambda - \eta, \lambda + \eta]$, ou seja, A tem espectro em $(\lambda - \eta, \lambda + \eta)$. Se encontramos um intervalo, inteiramente contido nos reais negativos, que contem um ponto de espectro do operador auto-adjunto estudado, temos que o espectro contido nesse intervalo deve ser necessariamente espectro discreto, o que implica na existência de estados ligados.

Vamos aplicar o Teorema 3.3.1 para encontrar condições que nos garantam que, para algum $u \in D(H)$ e algum $\lambda < 0$, tenhamos

$$\|(H - \lambda)u\| < |\lambda|\|u\|. \quad (3.3.2)$$

Note que a condição expressa em (3.3.2), com a aplicação do Teorema 3.3.1, nos permite encontrar o maior raio possível para o qual é possível afirmar, com certeza, que há espectro em seu interior e que esse espectro seja discreto, o que nos garante a existência de estados ligados. De fato, se tivéssemos $\|(H - \lambda)u\| < \eta\|u\|$, com $\eta > |\lambda|$, o espectro contido no interior de $[\lambda - \eta, \lambda + \eta]$ poderia estar contido nos reais positivos, não nos garantindo assim necessariamente a existência de estados ligados. Se tivéssemos o contrário, isto é, se tivéssemos $\eta < |\lambda|$, chegaríamos a uma condição suficiente que seria mais fraca do que a que considera um raio igual a $|\lambda|$, pois haveria uma região dos números negativos que poderia conter espectro, mas que estariam sendo desprezadas. A figura a seguir ilustra bem porque a condição suficiente deve ser obtida com um raio igual a $|\lambda|$.

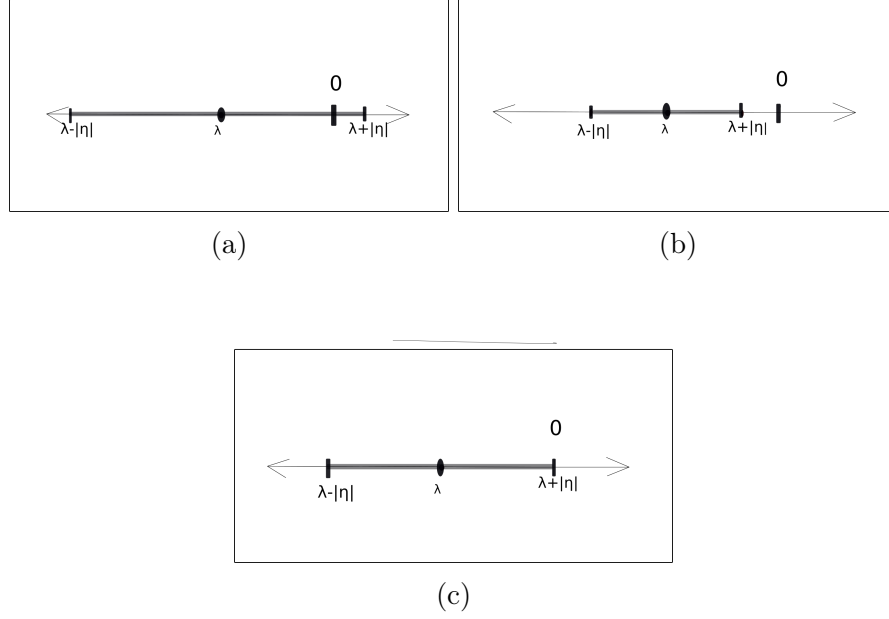


Figura 3.2: Intervalos onde há espectro com: (a) $|\eta| > |\lambda|$, (b) $|\eta| < |\lambda|$ e (c) $|\eta| = |\lambda|$. Note que apenas (c) nos dá o maior raio $|\eta|$ possível, onde é possível afirmar que há espectro discreto.

De fato, encontrar condições sobre λ para que ocorra $\|(H - \lambda)u\| < |\lambda|\|u\|$, com $u \in D(H)$ é o mesmo que encontrar condições para que ocorra $\|(H - \lambda)u\|^2 < |\lambda|^2\|u\|^2$. Da conexão da norma com o produto interno definido no espaço $L^2(\mathbb{R}^2)$ e pelo fato de λ ser um real negativo e H ser auto-adjunto, temos que

$$\begin{aligned} \|Hu\|^2 - 2\lambda\langle Hu, u \rangle + |\lambda|^2\|u\|^2 &< |\lambda|^2\|u\|^2 \Rightarrow \\ \Rightarrow \|Hu\|^2 - 2\lambda\langle Hu, u \rangle &< 0. \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

Ora, em (3.3.3), o termo $\|Hu\|^2$ é positivo. Como λ é negativo, a única maneira da desigualdade ser respeitada é se o termo $\langle Hu, u \rangle$ for negativo. Com isto, podemos ver que

$$-2\lambda\langle Hu, u \rangle < -\|Hu\|^2 \quad \Rightarrow \quad \lambda < \frac{\|Hu\|^2}{2\langle Hu, u \rangle}, \quad (3.3.4)$$

uma vez que $-2\langle Hu, u \rangle$ deve ser positivo. Note então que, para que consigamos um λ que respeite a condição expressa em (3.3.2), basta encontrarmos condições para que $\langle Hu, u \rangle$ seja menor que zero.

Agora, precisamos escolher uma boa função teste para descobrir uma condição suficiente que nos garanta a existência de estados ligados. Uma boa função teste

que pode ser usada é a função

$$u(r) = \frac{(2\rho)^{m+1}}{\sqrt{2\pi}\sqrt{\Gamma(m+2)}} r^m e^{-\rho r} e^{im\phi}, \quad (3.3.5)$$

e, como pelo menos um estado ligado existe quando o momento angular é nulo, podemos considerar que $m \neq 0$. Além disso, o parâmetro ρ é arbitrário e tem dimensão de inverso de comprimento. Esta função de onda foi escolhida como função de onda teste para se aplicar o Teorema 3.3.1 por representar o comportamento assintótico das soluções para grandes valores de r e, além disso, o valor dela para $r = 0$ é zero, mostrando que a probabilidade dos elétrons se tocarem é nula, o que faz sentido fisicamente, uma vez que possuímos uma barreira centrífuga quando o momento angular é diferente de zero. É evidente que esta função de onda está normalizada. Por simplicidade, faremos $\frac{(2\rho)^{m+1}}{\sqrt{\Gamma(m+2)}} = A_{\rho,m}$. Lembrando que $H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)$, com $V(r) = -\alpha K_0(\beta r)$, podemos ver que

$$Hu = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\rho^2 - \frac{\rho}{r}(2m+1) \right) u(r) + V(r)g(r). \quad (3.3.6)$$

Disto, é fácil ver que

$$\langle Hu, u \rangle = -2\pi \left[\int \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\rho^2 - \frac{\rho}{r}(2m+1) \right) ru^2(r)dr - \alpha \int K_0(\beta r)u^2(r)rdr \right]. \quad (3.3.7)$$

Para resolver a integral $-2\pi\alpha \int K_0(\beta r)u^2(r)rdr$, vamos usar um resultado que se encontra na referência [26], que nos diz que

$$\int_0^\infty x^{\mu-1} e^{-2\rho x} K_0(\beta x) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{(2\rho + \beta)^\mu} \frac{\Gamma^2(\mu)}{\Gamma(\mu + \frac{1}{2})} F\left(\mu, \frac{1}{2}; \mu + \frac{1}{2}; \frac{2\rho - \beta}{2\rho + \beta}\right). \quad (3.3.8)$$

Disto, podemos ver que

$$\int_0^\infty K_0(\beta r) r^{2m+1} e^{-2\rho r} dr = \frac{\sqrt{\pi}}{(2\rho + \beta)^{2m+2}} \frac{\Gamma^2(2m+2)}{\Gamma(2m + \frac{5}{2})} \times F\left(2m+2, \frac{1}{2}; 2m + \frac{5}{2}; \frac{2\rho - \beta}{2\rho + \beta}\right), \quad (3.3.9)$$

onde F é a função hipergeométrica. Disto, podemos perceber que

$$-2\pi\alpha \int K_0(\beta r)u^2(r)rdr = -\alpha A_{\rho,m}^2 \frac{\sqrt{\pi}}{(2\rho + \beta)^{2m+2}} \frac{\Gamma^2(2m+2)}{\Gamma(2m + \frac{5}{2})} \times F\left(2m+2, \frac{1}{2}; 2m + \frac{5}{2}; \frac{2\rho - \beta}{2\rho + \beta}\right). \quad (3.3.10)$$

A outra integral de (3.3.7) pode ser calculada se lembramos que

$$2\pi \int u^2(r)rdr = 1.$$

Portanto, o cálculo do produto interno nos dá como resultado

$$\langle Hu, u \rangle = \frac{\rho^2 \hbar^2 - \alpha(2\rho)^{2m+2} \sqrt{\pi} \Gamma(2m+2)}{2\mu (2\rho + \beta)^{2m+2} \Gamma(2m + \frac{5}{2})} F\left(2m+2, \frac{1}{2}; 2m + \frac{5}{2}; \frac{2\rho - \beta}{2\rho + \beta}\right), \quad (3.3.11)$$

e, uma vez que $\langle Hu, u \rangle$ deve ser negativo, segue que devemos ter

$$\frac{\rho^2 \hbar^2}{2\mu} < \alpha(2\rho)^{2m+2} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\rho + \beta)^{2m+2}} \frac{\Gamma(2m+2)}{\Gamma(2m + \frac{5}{2})} F\left(2m+2, \frac{1}{2}; 2m + \frac{5}{2}; \frac{2\rho - \beta}{2\rho + \beta}\right). \quad (3.3.12)$$

Rearranjando a expressão anterior e fazendo $\rho/\beta = x$, podemos escrever

$$f(x, m) = x^2 \frac{(2x+1)^{2m+2} \Gamma(2m+5/2)}{(2x)^{2m+2} \sqrt{\pi} \Gamma(2m+2)} \left[F\left(2m+2, \frac{1}{2}; 2m + \frac{5}{2}, \frac{2x-1}{2x+1}\right) \right]^{-1} < \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 \beta^2} = C, \quad (3.3.13)$$

onde o C aqui obtido é o mesmo da seção 3.2, em que discutimos sobre condições necessárias para a existência de estados ligados. É de se notar que o parâmetro x na expressão (3.3.13) é arbitrário e depende de ρ . Dessa liberdade de escolha, podemos escolher o x que minimiza o lado esquerdo da expressão anterior, para obter uma melhor condição suficiente para a existência de estados.

Para comparar o resultado que obtivemos com o que foi obtido em [6] para a condição suficiente para a existência de estados ligados, vamos considerar o caso de momento angular $m = 1$. Dos gráficos abaixo, podemos inferir o valor mínimo da função $f(x, m)$.

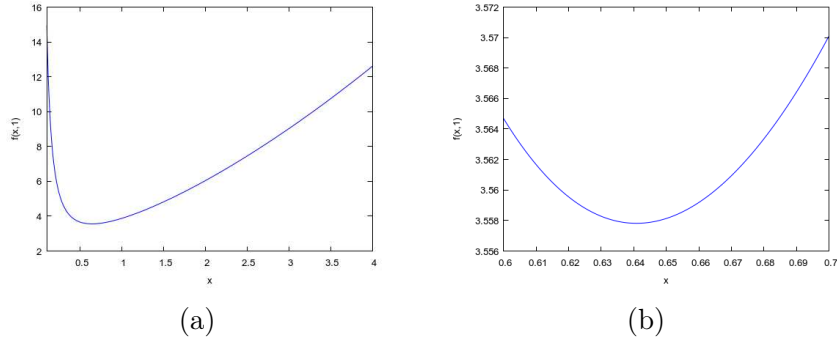


Figura 3.3: Gráficos de $f(x, 1)$. Em (a), temos o comportamento geral e em (b), temos um "zoom" na região próxima do mínimo.

Fica evidente da análise gráfica que se o valor da constante C for maior que 3.56, teremos estados ligados e, com isso, mostramos que o modelo admite a existência de tais estados.

Comparando agora com o trabalho realizado em [6], onde a análise foi feita utilizando-se o método variacional, que consiste em estimar a energia do estado fundamental, calculando-se o valor esperado do operador hamiltoniano numa função teste, que representa um possível estado do sistema. A função utilizada como teste foi a mesma função $u(r)$ utilizada no presente trabalho. Em [6], um $C = 4.25$ ainda não conseguia prever a existência de estados ligados, para o caso de momento angular $m = 1$, enquanto que neste trabalho, com a condição suficiente que obtivemos, qualquer valor de $C > 3.56$ já nos garante a existência de estados ligados. Com isso, vemos que conseguimos melhorar um pouco a condição suficiente. É claro que ela ainda não é conclusiva, pois este resultado ainda pode ser melhorado, a depender do quão boa seja a nossa função teste.

3.4. Limite no número de estados ligados para momento angular zero

Nas seções anteriores, tratamos de condições necessárias e suficientes para a existência de estados estacionários e, conseqüentemente, estados ligados. Nesta seção, estudaremos um limite superior para o número de estados ligados. O Teorema que utilizamos aqui está demonstrado na referência [27]. A demonstração é bastante longa, e além disso, a relação entre as constantes que aparecem no Teorema, bem como seus valores, são bastante difíceis de serem obtidos de forma explícita.

Mesmo assim, essa análise vale a pena ser feita, uma vez que reforça o limite do número de estados ligados, mesmo quando o potencial é puramente atrativo, como ocorre no caso do momento angular zero. O fato de o número de estados ligados ser sempre uma quantidade finita, independente do momento angular e das demais grandezas envolvidas, mostra-nos que o modelo tem um espectro de energias que é limitado inferiormente, o que é de interesse para aplicações físicas.

Antes de apresentar o Teorema que será utilizado, precisaremos definir as quantidades A_n e B_n , onde $n \in \mathbb{Z}$. Primeiro definimos as regiões U_n e W_n de \mathbb{R}^2 :

$$U_n = \begin{cases} e^{2^{n-1}} < |x| < e^{2^n} & n \geq 1; \\ e^{-1} < |x| < e, & n = 0; \\ e^{-2^{|n|}} < |x| < e^{-2^{|n|-1}}, & n \leq -1. \end{cases}$$

e

$$W_n = \{x \in \mathbb{R}^2 | e^n < |x| < e^{n+1}\}.$$

Agora podemos definir as quantidades A_n e B_n para um dado potencial V que seja localmente L^1 e para um $p > 1$:

$$A_n(V) = \int_{U_n} V(x)(1 + |\ln|x||)dx, \quad (3.4.1)$$

$$B_n(V) = \left(\int_{W_n} V^p(x)|x|^{2(p-1)}dx \right)^{1/p}. \quad (3.4.2)$$

Além disso, fazemos a ressalva de que o potencial, bem como as quantidades mostradas em (3.4.1) e (3.4.2), são grandezas adimensionais, uma vez que em [27], o operador de Schrödinger considerado é $H = -\nabla^2 - V$. Desta forma, considerando o nosso potencial $V_0 = -\alpha K_0(\beta r)$, o hamiltoniano dado por $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V_0$ se transforma no hamiltoniano adimensional

$$H = -\nabla_x^2 - \left(\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2\beta^2} K_0(x) \right) = -\nabla_x^2 - V(x), \quad (3.4.3)$$

onde $x = \beta r$ e $V(x) = \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2\beta^2} K_0(x)$.

Teorema 3.4.1. *Para qualquer função não negativa $V \in L^1_{loc}$ e $p > 1$ temos*³

$$\text{Neg}(V, \mathbb{R}^2) \leq 1 + K \sum_{\{n \in \mathbb{Z}: A_n > k\}} \sqrt{A_n} + K \sum_{\{n \in \mathbb{Z}: B_n > k\}} B_n, \quad (3.4.4)$$

onde K, k são constantes positivas que dependem apenas de p e $\text{Neg}(V, \mathbb{R}^2)$ é o número de auto-valores negativos do operador de Schrödinger.

Antes de aplicar o Teorema 3.4.1, vamos mostrar a motivação de o utilizarmos, com dois exemplos discutidos na referência [27], que nos mostra que a desigualdade mostrada em (3.4.4) pode dar um resultado melhor do que o mostrado em [25], que nos diz que

$$\text{Neg}(V, \mathbb{R}^2) \leq 1 + K \int_{\mathbb{R}^2} V(x)(1 + |\ln|x||) dx. \quad (3.4.5)$$

Exemplo 3.4.1. Consideremos um potencial V tal que, para todo $x \in \mathbb{R}^2$, observamos que $V(x) \leq \frac{\alpha}{|x|^2}$, para uma constante positiva α , que é bem pequena. Utilizando a expressão (3.4.2), temos

$$B_n \leq \alpha \left(\int_{e^n}^{e^{n+1}} \frac{1}{r^{2p}} r^{2(p-1)} 2\pi r dr \right)^{1/p} = \alpha (2\pi)^{1/p} \left(\int_{e^n}^{e^{n+1}} \frac{1}{r} dr \right) = \alpha (2\pi)^{1/p}.$$

Assim, considerando $\alpha \ll k$, nenhum B_n deverá ser considerado na soma na expressão (3.4.4). Além disso, como os A_n considerados são maiores que k , temos que

$$\frac{A_n}{k} > 1 \Rightarrow \sqrt{\frac{A_n}{c}} < \frac{A_n}{k}.$$

Portanto, usando a expressão (3.4.4), temos que

$$\begin{aligned} \text{Neg}(V, \mathbb{R}^2) &\leq 1 + K \sum_{\{n \in \mathbb{Z}: A_n > k\}} \sqrt{A_n} = 1 + K\sqrt{k} \sum_{\{n \in \mathbb{Z}: A_n > k\}} \sqrt{\frac{A_n}{k}} \\ &< 1 + \frac{K}{\sqrt{k}} \sum_{\{n \in \mathbb{Z}: A_n > k\}} A_n. \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

Além disso, na expressão em (3.4.6), podemos estender a soma para todos os A_n ,

³Os valores explícitos de K e k são muito difíceis de se obter. Chegamos a entrar em contato com um dos autores do artigo utilizado, e ele nos respondeu que explicitar a dependência K e k com p é muito trabalho para qualquer ser humano executar.

e podemos chamar $\frac{K}{\sqrt{k}}$ de K_2 , de modo que chegamos em

$$\text{Neg}(V, \mathbb{R}^2) \leq 1 + \frac{K}{\sqrt{k}} \sum_{\{n \in \mathbb{Z}: A_n > k\}} A_n \leq 1 + K_2 \int_{\mathbb{R}^2} V(x)(1 + |\ln|x||) dx.$$

Note que a estimativa que chegamos é melhor do que a que é dada por (3.4.5). ■

Exemplo 3.4.2. Considere o potencial

$$V(x) = \frac{1}{|x|^2(1 + \ln^2|x|)}.$$

Calculando novamente os B_n , temos

$$B_n(V) = \left(\int_{e^n}^{e^{n+1}} \frac{1}{r(1 + \ln^2 r)^p} 2\pi dr \right)^{1/p},$$

e, calculando esta integral, podemos usar a substituição $x = \ln r$, obtendo como primitiva a função $\text{atan}(r)$ que é limitada entre $-\pi/2$ e $\pi/2$. Logo,

$$B_n < 2.(2\pi)^{1/p}.$$

Agora, calculando os A_n , temos, para $n \geq 1$,

$$\int_{e^{2n-1}}^{e^{2n}} \frac{1}{r^2(1 + \ln^2 r)} (1 + \ln r) 2\pi r dr = 2\pi \left[\int_{e^{2n-1}}^{e^{2n}} \frac{dr}{r(1 + \ln^2 r)} + \int_{e^{2n-1}}^{e^{2n}} \frac{\ln r}{r(1 + \ln^2 r)} dr \right].$$

A primeira integral é limitada pela mesma quantidade que os B_n . Já a segunda integral pode ser resolvida fazendo a substituição $x = 1 + \ln^2 r$ e é fácil ver que esta segunda integral é limitada por alguma constante. Temos uma análise completamente análoga quando calculamos os A_n para $n \leq -1$. Com isso, escolhendo um α suficientemente pequeno, temos que $A_n(\alpha V)$ e $B_n(\alpha V)$ são menores que k , e o número de auto- valores não positivos do operador hamiltoniano é

$$\text{Neg}(\alpha V, \mathbb{R}^2) = 1,$$

uma vez que os somatórios são vazios nesse caso. Note que este resultado não pode ser obtido pela expressão (3.4.5), uma vez que a integral obtida usando esta

expressão diverge caso usemos o potencial do Exemplo 3.4.2.

Agora que verificamos que a estimativa na expressão (3.4.4) pode dar resultados melhores até mesmo que os encontrados em [25], vamos aplicá-la ao nosso potencial específico V_0 . Para tal, vamos calcular os A_n e os B_n usando o software livre Maxima, uma vez que analiticamente teríamos grandes dificuldades, dada a complexidade da função K_0 . É claro que para os cálculos, devemos utilizar o potencial V dado em (3.4.3). Além disso, podemos ver facilmente que o potencial $V(x) = \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2\beta^2}K_0(x) = CK_0(x)$ obedece às hipóteses do Teorema 3.4.1, uma vez que esta função é localmente L_1 .

Os resultados são apresentados na tabela abaixo, com $-4 \leq n \leq 3$ e consideramos $p = 2$. Para $n < -4$ ou $n > 3$, os resultados obtidos para A_n e B_n são consideravelmente pequenos, não alterando em praticamente nada o valor de nossa estimativa final.

n	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3
A_n	0	0,004	0,082	0,210	0,406	0,384	0,007	0
$\sqrt{A_n}$	0,005	0,164	0,718	1,149	1,598	1,479	0,208	0
B_n	0,010	0,053	0,237	0,742	1,126	0,461	0,011	0

Tabela 3.1: Cálculo dos A_n e B_n para o potencial $C_1K_0(x)$.

Como podemos observar na Tabela 1, os A_n e B_n são maiores para valores de n próximos de zero e decrescem rapidamente, à medida que $|n|$ aumenta. O valor exato da constante c que só depende de p no Teorema 3.4.1 é difícil de calcularmos e, por isso, consideramos todos os A_n e B_n nas somas na estimativa (3.4.4). Com isto, sabendo que para este caso,

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{A_n} + \sum_{n \in \mathbb{Z}} B_n \approx 7,97 ,$$

chegamos ao seguinte resultado quando consideramos um potencial atrativo do tipo K_0 ,

$$\text{Neg}(V, \mathbb{R}^2) \leq 1 + C_2. \quad (3.4.7)$$

onde fizemos $C_2 = 7,97.K.C$, sendo C_2 uma constante que depende de p , mas que também depende de nossas constantes que especificam a física do problema em questão, que são as constantes α e β . Note que o valor de p só influencia

em podermos encontrar uma melhor estimativa no número de auto- valores não positivos e não tem um significado físico. Já a constante α está relacionada com "força" da interação, enquanto a contante β está relacionada com o comprimento característico da interação. Note que quanto maior α , maior é o valor de C_2 e, com isso, maior o número possível de estados ligados, como era de se esperar. Da mesma forma, quanto menor β , maior o número possível de estados ligados.

Capítulo 4:

Conclusões e perspectivas

No Capítulo 3, aplicamos tudo o que havíamos exposto nos capítulos anteriores, além de desenvolver mais alguns resultados. Pudemos provar a auto-adjunção do operador hamiltoniano com o potencial do tipo K_0 em D_{max} , utilizando o critério de Kato, mostrando, assim, que este hamiltoniano poderia ser o representante de um observável e que a dinâmica quântica necessariamente existe.

Após o estudo da auto-adjunção, obtivemos condições necessárias para a existência de estados estacionários quando o momento angular era diferente de zero e, com isso, obtivemos um valor crítico para a constante C , que depende exclusivamente dos parâmetros do supercondutor, em função do momento angular, permitindo, assim, avaliar até quais valores nosso modelo pode ser aplicado para prever a formação de estados ligados. Ainda, obtivemos o valor do momento angular crítico em função de C , mostrando em quais os momentos angulares que os estados ligados poderiam ser encontrados, a depender do supercondutor, que estabelece o C . Além disso, melhoramos a condição necessária para a existência de estados ligados para momentos angulares maiores que 1, que havia sido obtida anteriormente em [6].

Também pudemos estudar uma condição suficiente para a existência de estados ligados, utilizando um teorema da Análise Funcional. Comparamos o resultado que obtivemos com o que havia sido obtido anteriormente por [6], para o caso de momento angular $m = 1$, e vimos que conseguimos melhorar o valor do C para o qual certamente havia estados ligados. Em [6], o valor para C nessa situação era maior que 4,25, enquanto o que obtivemos aqui foi um valor de C maior que 3,56.

Na última parte, discutimos o número de estados ligados para o caso de momento angular zero, aplicando o teorema principal da referência [27]. Ainda que o valor das constantes K, k seja difícil de se obter explicitamente [28], pudemos ver qualitativamente o que acontece com o número de estados estacionários para

o caso de momento angular zero.

Como perspectivas, pretendemos: (i) verificar possíveis aplicações do modelo para explicar o comportamento de supercondutores de altas temperaturas críticas grafeno e isolantes topológicos; (ii) estudar computacional e analiticamente a dinâmica e a termodinâmica de um gás de elétrons bidimensional interagindo via potencial de espalhamento dado por $V(r) = -\alpha K_0(\beta r)$, bem como verificar a possibilidade de transição de fase e computar os parâmetros críticos; (iii) verificar a estabilidade dos estados ligados formados; (iv) estudar o comportamento dos elétrons, interagindo por meio do potencial aqui descrito, na presença de um campo magnético aplicado.

5. Referências

- [1] M. B. S. Costa and A. C. Pavão, “Supercondutividade: um século de desafios e superação,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 34, no. 2, 2012.
- [2] D. van Delft and P. Kes, “The discovery of superconductivity,” *Physics Today*, vol. 63, no. 9, 2010.
- [3] T. J. M. de Almeida, “Filmes finos supercondutores de alta temperatura crítica,” 2008. Monografia apresentada para conclusão do curso de Bacharel em Física na Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Santa Maria, RS, Brasil.
- [4] P. S. Branício, “Introdução à supercondutividade, suas aplicações e a mini-revolução provocada pela redescoberta do MgB_2 : Uma abordagem didática,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 23, no. 4, 2001.
- [5] A. S. Alexandrov, *Theory of Superconductivity: From Weak to Strong Coupling*. London: Institute of Physics Publishing, 2003.
- [6] W. B. D. Lima, “Estados ligados elétron-elétron na eletrodinâmica quântica planar,” 2016. Monografia apresentada para a conclusão do curso de Bacharel em Física, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, Brasil.
- [7] E. Vries, “Ge completes trial of next generation superconductor technology,” 2013. Disponível em:
<<https://www.windpowermonthly.com/article/1177148/ge-completes-trial-next-generation-superconductor-technology>>. Acessado em 6 de dezembro de 2018.
- [8] M. M. Ferreira Jr., O. M. Del Cima, and J. A. Helayël-Neto, “High- t_c cuprate superconductors and a planar qed model,” in *XXII Encontro nacional de física de partículas e campos*, (Sao Lourenço, MG. Brasil), Sociedade Brasileira de Física, Outubro 2001.
- [9] P. W. Anderson, “The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity,” *Science*, vol. 235, no. 4793, 1987.

- [10] C. Itzykson and J.-B. Zuber, *Quantum field theory*. Estados Unidos: McGraw-Hill, 1980.
- [11] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs and Mathematical Tables*. Courier Corporation, 10 ed., December 1972.
- [12] E. Kreyszig, *Introductory Functional Analysis with applications*. Nova Iorque: John Wiley & sons, 1978.
- [13] E. L. Lima, *Análise Real*, vol. 1. Brasil: SBM, 12 ed., 2016.
- [14] H. Brezis, *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*. Nova Iorque: Springer, 2010.
- [15] D. J. Griffiths, *Mecânica Quântica*. Nova Iorque: Pearson, 2 ed., 2007.
- [16] F. Gieres, “Mathematical surprises and dirac’s formalism in quantum mechanics,” *Reports Prog. Phys.*, vol. 63, no. 12, pp. 1893–1931, 2000.
- [17] G. Leoni, *A first course in Sobolev Spaces*. Estados Unidos: American Mathematical Society, 2 ed., 2017.
- [18] D. T. H. Franco and L. S. Lima, “A simple application of the time evolution operator in the solution of a paradox in quantum mechanics,” *Quantum Studies: Mathematics and Foundations*, vol. 5, no. 2, pp. 273–278, 2018.
- [19] L. S. Lima, “Condições para a existência da dinâmica quântica: aplicações do Teorema de Stone e do Critério de Kato,” 2016. Monografia apresentada para a conclusão do curso de Bacharel em Física, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, Brasil.
- [20] S. Möller, “Stone’s theorem and applications,” 2010. Bacharelor’s Thesis.
- [21] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. 2. Academic Press, 1975.
- [22] P. D. Hislop and I. M. Sigal, *Introduction to Spectral Theory*. Nova Iorque: Springer, 1996.

- [23] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. 1. Academic Press, 1975.
- [24] W. O. Amrein, *Non-Relativistic Quantum Dynamics*. Holanda: D. Reidel Publishing Company, 1981.
- [25] K. Chadan, N. N. Khuri, and T. T. Wu, “Bound states in one and two spatial dimensions,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 44, no. 2, 2003.
- [26] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*. Estados Unidos: Elsevier, 7 ed., 2007.
- [27] A. Grigor’yan and N. Nadirashvili, “Negative eigenvalues of two-dimensional schrödinger operators,” *Archive for Rational Mechanics and Analysis, Springer Verlag*, vol. 217, no. 3, pp. 975–1028, 2015.
- [28] A. Grigor’yan. Comunicação privada.