

**TÓPICOS NA TEORIA
DA EQUAÇÃO
DE SCHRÖDINGER
RAFAEL JOSÉ ÍÓRIO JUNIOR**

COPYRIGHT © by RAFAEL JOSÉ IÓRIO JÚNIOR

Nenhuma parte deste livro pode ser reproduzida,
por qualquer processo, sem a permissão do autor.

ISBN

85-244-0030-7

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
CONSELHO NACIONAL DE DESENVOLVIMENTO CIENTÍFICO E TECNOLÓGICO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA PURA E APLICADA
Estrada Dona Castorina, 110
22.460 – Rio de Janeiro – RJ

PREFÁCIO

Antes de mais nada: atenção! Este livro não é, nem pretende ser, um texto de Mecânica Quântica. Longe disso. O objetivo do presente trabalho é o estudo de certos tópicos na teoria espectral de operadores auto-adjuntos em espaços de Hilbert fortemente relacionados com o problema de valor inicial para a equação de Schrödinger. Tendo em vista esta relação é inevitável o aparecimento de comentários sobre a física do problema de quando em quando.

O presente texto, do qual o leitor é talvez o feliz possuidor, tem quatro capítulos. O primeiro é um resumo da teoria espectral básica necessária à compreensão do restante do livro e, com a possível exceção da seção 4, que trata do teorema de Kato-Rellich, deve ser familiar a qualquer pessoa que tenha concluído um curso básico de operadores não-limitados em espaços de Hilbert.

No segundo capítulo a questão de existência e unicidade global no tempo de solução do problema de Cauchy é discutida utilizando idéias de T. Kato que permitem resolver tais problemas. Os dois capítulos finais consistem no estudo de parte da teoria de espalhamento associada à equação em questão.

Finalmente, o autor gostaria de aproveitar a oportunidade para agradecer o excelente trabalho de datilografia de Lais Ventura Santos, assim como sua paciência em decifrar os "hieroglyphos" que deram origem às páginas a seguir.

Rafael José Iório Jr.

Í N D I C E

	<u>Pág.</u>
PREFÁCIO	i
ÍNDICE	iii
INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO I - PRELIMINARES	8
CAPÍTULO II - EXISTÊNCIA DE SOLUÇÕES	89
CAPÍTULO III - TEORIA DE ESPALHAMENTO COM HAMILTONIANAS IN DEPENDENTES DO TEMPO	109
CAPÍTULO IV - TEORIA DE ESPALHAMENTO COM HAMILTONIANAS DE PENDENTES DO TEMPO	171
REFERÊNCIAS	200

"One upon a midnight dreary, while I pondered, weak and weary,
Over many a quaint and curious volume of forgotten lore -" [90]

0. INTRODUÇÃO

O principal objetivo destas notas é o estudo do comportamento assintótico (quando $t \rightarrow \pm\infty$) da solução de certos problemas de Cauchy da forma,

$$(0.1) \quad i \frac{d\psi}{dt} = A(t)\psi(t), \quad \psi(s) = \psi_s$$

onde $t, s \in \mathbb{R}$, $A(t)$ é um operador auto-adjunto em geral não limitado em um espaço de Hilbert complexo \mathcal{H} e a derivada em relação ao tempo deve ser interpretada como o limite do quociente de Newton na norma de \mathcal{H} . É claro que para dar sentido a esse tipo de pergunta, é preciso antes de tudo estabelecer existência de soluções globalmente no tempo. A unicidade e a dependência contínua na condição inicial são conseqüências simples da hipótese $A(t) = A(t)^*$, como veremos abaixo. A existência de soluções é um problema muito mais difícil que será estudado cuidadosamente mais adiante (Capítulo II). Cabem no entanto alguns comentários intuitivos que permitirão situar melhor o problema em que estamos interessados. É conveniente descrever a solução de (0.1) através de uma família de operadores a dois parâmetros chamado o propagador (ou operador de evolução) associado à equação diferencial em (0.1). Intuitivamente, o propagador leva a solução no instante t' na solução no instante t , i.e., $\psi(t) = U(t, t') \psi(t')$ para todo par $t, t' \in \mathbb{R}$. Portanto se $t, t', t'' \in \mathbb{R}$ devemos ter,

$\psi(t) = U(t, t') \psi(t') = U(t, t') U(t', t'') \psi(t'')$. Mas por outro lado $\psi(t) = U(t, t'') \psi(t'')$ de modo que o propagador deve satisfazer a chamada equação de Chapman-Komolgorov, i.e.,

(0.2) $U(t, t'') = U(t, t') U(t', t''), \quad t, t', t'' \in \mathbb{R}$.

Além disso, é claro que $U(t, t) = 1, \quad t \in \mathbb{R}$. Tomando $t = t''$ em (0.2) segue que $U(t, t') U(t', t) = 1, \quad t, t' \in \mathbb{R}$. Trocando os papéis de t e t' no argumento acima temos $U(t', t) U(t, t') = 1,$

$t, t' \in \mathbb{R}$ e portanto $U(t, t')$ é inversível quaisquer que sejam $t, t' \in \mathbb{R}$, com inversa dada por,

(0.3) $U(t, t')^{-1} = U(t', t), \quad t, t' \in \mathbb{R}$.

Sejam $(\cdot | \cdot)$ o produto interno de \mathbb{H} (anti-linear na segunda variável por questão de gosto e gosto não se discute) e

$\|\cdot\| = (\cdot | \cdot)^{1/2}$ a norma a ele associada. Então supondo que $\psi(t)$ é uma solução da equação diferencial em (0.1) temos,

$$(0.4) \quad \begin{cases} \frac{d}{dt} \|\psi(t)\|^2 = \frac{d}{dt} (\psi(t) | \psi(t)) = \\ = \left(\frac{d\psi}{dt} | \psi(t) \right) + \left(\psi(t) | \frac{d\psi}{dt} \right) = \\ = (-iA(t) \psi(t) | \psi(t)) + (\psi(t) | -iA(t) \psi(t)) = 0 \end{cases}$$

pois $A(t) = A(t)^*$, $t \in \mathbb{R}$. Consequentemente, a norma de uma solução, se existir, deve ser constante. Isto implica imediatamente na unicidade e na continuidade na condição inicial (em relação

à topologia de \mathcal{H}). Mais ainda, devido à unicidade e ao fato $U(t, t) = 1$ é fácil verificar que $U(t, t')$ é linear: $U(t, t')(af + \beta g)$ e $\alpha U(t, t')f + \beta U(t, t')g$ são soluções satisfazendo a mesma condição inicial (no instante t') para todo $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ e $f, g \in \mathcal{H}$. Note que o argumento acima é a versão abstrata da formulação usual encontrada nos livros de física ([6], [7]) onde se prova $\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^2} \psi(x, t) \overline{\psi(x, t)} dx = 0$ utilizando o teorema da divergência e certas condições de contorno que determinam o comportamento das soluções quando $|x| \rightarrow \infty$. Tais condições ocorrem na formulação abstrata através do domínio dos operadores auto-adjuntos $A(t)$.

Tendo em vista (0.3) que diz em particular que $U(t, t')$ é sobre \mathcal{H} para todo par $t, t' \in \mathbb{R}$ conclui-se imediatamente que o propagador é uma família de operadores unitários, isto é, $U(t, t')$ é uma isometria (aplicação que preserva norma) sobre \mathcal{H} . Lembre que no caso de dimensão infinita existem isometrias que não são sobrejetoras. Finalmente, tendo em vista que $\psi(t)$ deve ser diferenciável em relação à t no sentido mencionado acima, é de se esperar que $(t, t') \mapsto U(t, t')$ seja contínua em algum sentido. Na verdade o conceito de continuidade conveniente é a chamada continuidade forte, i.e., a aplicação $(t, t') \in \mathbb{R}^2 \mapsto U(t, t')f$ é contínua na norma de $\mathcal{H} \forall f \in \mathcal{H}$. As propriedades que acabamos de descrever são as características básicas dos propagadores. De fato, por definição um propagador é uma família fortemente contínua $(t, t') \in \mathbb{R}^2 \mapsto U(t, t')$ de operadores unitários satisfazendo $U(t, t) = 1 \forall t \in \mathbb{R}$ e a relação de Chapman-Komolgorov (0.2)

(que expressa o princípio de causalidade no caso de (0.1)).

O problema de existência de soluções para (0.1) consiste em construir um propagador associado à equação diferencial em questão. No caso em que $A(t) = A$ é constante e a solução é dada pelo cálculo funcional do operador A . Mais precisamente, nesta situação o propagador tem a forma,

$$(0.4) \quad U(t,s) = e^{-i(t-s)A} = \int_{\mathbb{R}} e^{-i(t-s)\lambda} E_A(d\lambda)$$

onde $E_A(\cdot)$ denota a única família espectral (contínua à esquerda de novo por pura questão de gosto) e a integral em (0.4) é uma integral forte de Riemann-Stieltjes ([24, vol. II], [27, vol II]). No caso em que $A(t)$ depende explicitamente do tempo e especialmente quando o domínio de $A(t)$ varia o problema de existência é bem mais complicado. Ele pode no entanto ser resolvido graças a poderosos teoremas de existência devidos principalmente a T. Kato ([1], [2], [3]) que estudaremos adiante. Existem resultados semelhantes para o caso de equações não lineares. O leitor interessado deve consultar [3], [4], [5].

É interessante notar que em termos de propagadores o problema (0.1) pode ser escrito na forma,

$$(0.5) \quad i \frac{dU(t,s)}{dt} = A(t) U(t,s), \quad U(s,s) = 1$$

que é formalmente equivalente à equação integral da Volterra,

$$(0.6) \quad U(t,s) = 1 - i \int_s^t A(r) U(r,s) dr$$

No que se segue vamos nos restringir, por simplicidade, ao caso de equação de Schrödinger para uma partícula, i.e., o caso em que $A(t)$ é dado formalmente pelo operador diferencial

$$(0.7) \quad A(t) = -\frac{\hbar}{2m} \Delta + \frac{V}{\hbar}$$

em $L^2(\mathbb{R}^n)$ onde $\hbar = 2\pi\hbar$ é a constante de Plank, $\Delta = \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$ é o laplaciano em \mathbb{R}^n e V denota o operador de multiplicação pela função mensurável real $V(x,t)$. Definindo a hamiltoniana total pela fórmula $H(t) = \hbar A(t)$ o problema em (0.1) se torna,

$$(0.8) \quad i \hbar \frac{d\psi}{dt} = H(t) \psi(t), \quad \psi(s) = \psi_s.$$

Além disso em vários pontos do presente texto vamos nos restringir aos casos $n = 3$ e $n = 1$. O primeiro destes descreve a interação de uma partícula quântica de massa m com um potencial $V(x,t)$ e é portanto o caso relevante do ponto de vista físico enquanto que o segundo fornece modelos (tanto físicos como matemáticos) suficientemente simples mas que no entanto contém essencialmente todas as características da situação geral.

A equação diferencial em (0.8) é conhecida como a equação de Schrödinger. Ela foi obtida em 1926 por E. Schrödinger. O leitor interessado em sua dedução, assim como na (estranha!) história da mecânica quântica deve consultar [6], [7], [8], [9], [10]. Antes de prosseguir devemos notar que muito do que segue pode ser generalizado para $L^2(\mathbb{R}^n)$ e também para o caso de muitas partículas. Tais questões não serão discutidos aqui pois desejamos

manter a discussão em um nível relativamente simples. O leitor que desejar maiores informações deve consultar [11], [12], [13], [14], [15], [16] e as referências aí contidas.

Finalmente é conveniente fazer alguns comentários sobre a relação da solução de (0.8), muitas vezes chamada a função de onda, com o movimento da partícula. A interpretação probabilística da mecânica quântica diz que $|\psi(x,t)|^2$ é proporcional à densidade de probabilidade de posição da partícula. Mais precisamente, lembrando que $\|\psi(\cdot, t)\|$ não depende do tempo a probabilidade de encontrar a partícula descrita por $\psi(x,t)$ no conjunto mensurável $S \subset \mathbb{R}^3$ no instante t é dada por

$$(0.9) \quad P(t; S; \psi_S) = \|\psi_S\|^{-2} \int_S |\psi(x,t)|^2 dx.$$

É claro que a interpretação diz muito mais do que isso, mas a observação acima é inteiramente suficiente para nossos propósitos. Mais informações sobre este assunto (e os muitos problemas filosóficos por ele levantados) podem ser encontrados em [6], [7], [9], [10], [17], [18], [19], [20].

O restante desta monografia está organizada da seguinte maneira. No Capítulo I se encontram as definições e resultados de teoria espectral em espaços de Hilbert necessários para o estudo de (0.8). O capítulo II trata as questões de existência global de soluções da equação de Schrödinger, enquanto que os dois capítulos finais consistem no estudo da teoria de espalhamento associada a (0.8).

Daqui por diante, por simplicidade, vamos adotar um sistema de unidades onde $\hbar = 1$ e $m = 1/2$, de modo que a hamiltoniana total será dada formalmente por $H(t) = -\Delta + V(x,t)$.

CONSERVAÇÃO

As leis de conservação de energia e momento são derivadas da invariância da ação sob transformações de gauge. A conservação de energia é consequência da invariância da ação sob transformações de gauge no tempo, enquanto a conservação de momento é consequência da invariância da ação sob transformações de gauge no espaço. A conservação de carga é consequência da invariância da ação sob transformações de gauge locais. A conservação de número de partículas é consequência da invariância da ação sob transformações de gauge globais.

$$\frac{d}{dt} \int d^3x \psi^\dagger \psi = 0$$

As leis de conservação de energia e momento são derivadas da invariância da ação sob transformações de gauge. A conservação de energia é consequência da invariância da ação sob transformações de gauge no tempo, enquanto a conservação de momento é consequência da invariância da ação sob transformações de gauge no espaço.

$$\frac{d}{dt} \int d^3x \psi^\dagger \psi = 0$$

$$\frac{d}{dt} \int d^3x \psi^\dagger \psi = 0$$

$$\frac{d}{dt} \int d^3x \psi^\dagger \psi = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{d}{dt} \int d^3x \psi^\dagger \psi = 0 \quad (1.2)$$

CAPÍTULO I

PRELIMINARES

O objetivo deste capítulo consiste em colecionar definições e resultados (na sua maior parte sem demonstração) que serão necessários para o estudo do problema de Cauchy para a equação de Schrödinger. O que segue não pretende (nem de longe!) ser uma introdução ao estudo da teoria dos operadores lineares em espaços de Hilbert. Nosso propósito é apenas tornar o livro auto-suficiente, apresentando um número bastante reduzido de demonstrações. Por outro lado, se o leitor assim o desejar, as afirmações feitas abaixo sem demonstração podem todas ser consideradas exercícios (alguns dos quais altamente não triviais). Suas soluções podem ser encontradas por exemplo em [11, vol. I, II], [21], [22], [23], [24], [25], [26], [27, vol. II], [28].

1. Operadores auto-adjuntos: teoria básica

Antes de mais nada é preciso introduzir uma certa quantidade de notações e definições. Seja \mathbb{H} um espaço vetorial sobre os complexos. Um produto interno em \mathbb{H} é uma aplicação $(\cdot|\cdot)_{\mathbb{H}}: \mathbb{H} \times \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$ tal que

$$(1.1) \quad (f|f) \geq 0, \quad (f|f)_{\mathbb{H}} = 0 \iff f = 0$$

$$(1.2) \quad (\alpha f + \beta g|h)_{\mathbb{H}} = \alpha(f|h)_{\mathbb{H}} + \beta(g|h)_{\mathbb{H}}$$

$$(1.3) \quad \overline{(f|g)}_{\mathbb{H}} = (g|f)_{\mathbb{H}}$$

para todo $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $f, g, h \in \mathbb{H}$. Note que (1.2) e (1.3) implicam

$$(1.4) \quad (h|\alpha f + \beta g)_{\mathbb{H}} = \overline{\alpha}(h|f)_{\mathbb{H}} + \overline{\beta}(h|g)_{\mathbb{H}}.$$

Um espaço vetorial \mathbb{H} munido de uma aplicação $(\cdot|\cdot)_{\mathbb{H}}$ como acima é chamado um espaço com produto interno. É fácil ver que a função $f \longrightarrow (f|f)_{\mathbb{H}}^{1/2} = \|f\|_{\mathbb{H}}$ define uma norma em \mathbb{H} , i.e., ela satisfaz

$$(1.5) \quad \|f\|_{\mathbb{H}} \geq 0, \quad \|f\|_{\mathbb{H}} = 0 \iff f = 0$$

$$(1.6) \quad \|\alpha f\|_{\mathbb{H}} = |\alpha| \|f\|_{\mathbb{H}}$$

$$(1.7) \quad \|f+g\|_{\mathbb{H}} \leq \|f\|_{\mathbb{H}} + \|g\|_{\mathbb{H}}.$$

Além disso vale sempre a desigualdade de Cauchy-Buniakowski-Schwartz (CBS),

$$(1.8) \quad |(f|g)_{\mathbb{H}}| \leq \|f\|_{\mathbb{H}} \|g\|_{\mathbb{H}}$$

onde $\|f\|_{\mathbb{H}} = (f|f)_{\mathbb{H}}^{1/2}$.

Um espaço com produto interno é dito de Hilbert se e só se ele é completo (ou de Banach) em relação a norma $\|\cdot\|_{\mathbb{H}}$. Isto significa que se $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ é uma seqüência de Cauchy (i.e.

$\|f_n - f_m\|_{\mathbb{H}} \rightarrow 0$ quando $m, n \rightarrow \infty$) então existe $f \in \mathbb{H}$ tal que

$f = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n$ (i.e., $\|f - f_n\|_{\mathbb{H}} \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$). É importante notar que em um espaço de Hilbert vale o lema de Riezs, i.e., todo funcional linear contínuo $E: \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{C}$ pode ser representado de maneira única na forma

$$(1.9) \quad F(f) = (f|g)_{\mathbb{H}}$$

onde $g \in \mathbb{H}$ e

$$(1.10) \quad \|F\| = \sup_{\|f\|=1} |(f|g)_{\mathbb{H}}| = \|g\|_{\mathbb{H}}.$$

Daqui por diante sempre que não houver possibilidade de confusão omitiremos os índices \mathbb{H} na norma e no produto interno e escreveremos simplesmente $(\cdot|\cdot)$ e $\|\cdot\|$.

Agora sejam \mathbb{H} e \mathbb{S} espaços de Hilbert. Um operador linear de \mathbb{H} em \mathbb{S} é uma aplicação A com domínio $D(A) \subset \mathbb{H}$ e imagem $A(D(A)) = \mathcal{R}(A) \subset \mathbb{S}$ tal que

$$(1.11) \quad \left\{ \begin{array}{l} D(A) \text{ é um subespaço de } \mathbb{H} \\ A(\alpha f + \beta g) = \alpha A f + \beta A g \end{array} \right.$$

para todo $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $f, g \in D(A)$. Note que a primeira condição em (1.11) é necessária para que a segunda faça sentido. Além disso, é fácil ver que $\mathcal{R}(A)$ é um subespaço de \mathbb{S} . No que segue escreveremos com freqüência

$$(1.12) \quad A: D(A) \subset \mathbb{H} \longrightarrow \mathbb{S}.$$

Se A e B são dois operadores lineares, a soma de A e B , de-

notada por $(A+B)$, é o operador linear definido da seguinte forma

$$(1.13) \quad \begin{cases} D(A+B) = D(A) \cap D(B) \\ (A+B)f = Af + Bf, \quad \forall f \in D(A+B). \end{cases}$$

Apesar de sua naturalidade, é preciso notar que esta definição apresenta algumas surpresas. Por exemplo, é razoável definir o operador 0 (zero) da seguinte forma

$$(1.14) \quad \begin{cases} D(0) = \mathbb{H} \\ 0f = 0, \quad f \in \mathbb{H}. \end{cases}$$

Neste caso se $A: D(A) \subset \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$ é tal que $D(A) \neq \mathbb{H}$ (e existem operadores muito importantes com esta propriedade), então $A-A \neq 0$ pois $D(A-A) = D(A) \neq \mathbb{H}$. Esta patologia não chega a assustar muito pois 0 pode ser considerado como uma extensão de $(A-A)$ (não definimos extensão precisamente ainda, mas o sentido é claro).

Muito mais assustadora é a seguinte situação: em espaços de Banach em geral e de Hilbert em particular é possível encontrar subespaços densos cuja intersecção é zero!!! Por exemplo, em $L^2(\mathbb{R})$, isto é verdade se considerarmos o espaço de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ (veja (1.36)) e a coleção de todas as funções degrau (i.e., combinações lineares finitas de funções características de intervalos). Isto significa que a soma de dois operadores densamente definidos (i.e., seus domínios são densos em \mathbb{H}) pode ter domínio zero!!! Por esta razão é muitas vezes necessário introduzir definições mais "sofisticadas" de soma. Mais adiante descreveremos uma tal si-

tuação. No entanto a definição "ingênua" dada acima é suficiente para a grande maioria de nossas aplicações.

Outra operação importante é a composição de dois operadores lineares: sejam $A: D(A) \subset \mathfrak{H} \rightarrow \mathfrak{G}$ e $B: D(B) \subset \mathfrak{G} \rightarrow \mathfrak{Q}$. Então BA é o operador é definido por

$$(1.15) \quad \begin{cases} D(BA) = \{f \in D(A) \mid Af \in D(B)\} = A^{-1}(D(B)) \\ (BA)f = B(Af), \quad f \in D(BA) \end{cases}$$

Note que, de novo, as questões de domínio envolvidas são muito delicadas. É bastante fácil exibir um par de operadores A, B tais que $D(BA) = \{0\}$.

Sejam \mathfrak{H} e \mathfrak{G} dois espaços de Hilbert. Vamos considerar algumas classes importantes de operadores em tais espaços. Se $M \subset \mathfrak{H}$ é um subespaço (não necessariamente fechado), um operador $A: D(A) = M \subset \mathfrak{H} \rightarrow \mathfrak{G}$ é dito limitado se e só se existe constante $C \geq 0$ tal que,

$$(1.16) \quad \|Af\| \leq C\|f\| \quad \forall f \in D(A)$$

(note que aqui a confusão entre as normas é impossível!). A coleção $B(M, \mathfrak{G})$ de todos os operadores limitados de M em \mathfrak{G} é um espaço de Banach em relação à norma

$$(1.17) \quad \begin{cases} \|A\|_{B(M, \mathfrak{G})} = \|A\| = \inf\{C \mid \text{vale (1.16)}\} = \\ = \sup\{\|Af\| \mid f \in M, \|f\| = 1\} = \\ = \sup\{\|Af\| / \|f\| \mid f \in M, f \neq 0\} \end{cases}$$

Além disso todo operador em $B(M, \mathfrak{S})$ pode ser estendido de maneira única ao fecho \bar{M} de M em \mathfrak{H} , a extensão \bar{A} assim definida pertence a $B(\bar{M}, \mathfrak{S})$ e tem exatamente a mesma norma que A . Caso $M = \mathfrak{H} = \mathfrak{S}$ escreveremos $B(\mathfrak{H}) = B(\mathfrak{H}, \mathfrak{H})$. Mais ainda, as seguintes afirmações são equivalentes,

$$(1.18) \quad A: M \subset \mathfrak{H} \longrightarrow \mathfrak{S} \quad \text{é limitado}$$

$$(1.19) \quad A: M \subset \mathfrak{H} \longrightarrow \mathfrak{S} \quad \text{é contínuo}$$

$$(1.20) \quad A: M \subset \mathfrak{H} \longrightarrow \mathfrak{S} \quad \text{é contínuo na origem.}$$

Exercício (1.1) - Prove todas as afirmações feitas acima sobre operadores limitados.

Infelizmente nem todos os operadores que ocorrem na prática são contínuos. Na verdade, muitos operadores de grande importância, como por exemplo as hamiltonianas que ocorrem na equação de Schrödinger, não são limitados (veja também o teorema de Hellinger-Toeplitz no volume I de [11]). Uma classe especialmente importante nas aplicações é a dos operadores fechados introduzida por J. von Neumann em 1932. Um operador linear $A: D(A) \subset \mathfrak{H} \longrightarrow \mathfrak{S}$ é fechado se e só se para toda seqüência $\{f_n\}_{n=1}^{\infty} \subset D(A)$ tal que

$$(1.21) \quad f_n \xrightarrow{\mathfrak{H}} f, \quad Af_n \xrightarrow{\mathfrak{S}} g$$

então $f \in D(A)$ e $Af = g$. A relação entre continuidade e a definição acima é dada por

Exercício (1.2) - $A \in B(M, \mathfrak{S})$ é fechado se e só se M é fechado em \mathfrak{H} .

Este resultado mostra que a condição " A é fechado" é muito mais fraca do que a continuidade. De fato, como mencionado acima, todo operador contínuo de $M \subset \mathfrak{H}$ em \mathfrak{S} pode ser estendido de maneira única a \bar{M} , que é fechado em \mathfrak{H} . Portanto todo operador contínuo é (essencialmente) fechado. No entanto nem todo operador fechado é contínuo. O seguinte exemplo (que nos acompanhará fielmente por todo o resto deste livro) mostra esse fato.

Proposição (1.3) - Seja M_0 o operador definido por

$$(1.22) \quad \begin{cases} D(M_0) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n, d\xi) \mid |\xi|^2 f \in L^2(\mathbb{R}^n, d\xi)\} \\ (M_0 f)(\xi) = |\xi|^2 f(\xi), \quad f \in D(M_0), \quad \xi\text{-q.t.p.} \end{cases}$$

é fechado mas não contínuo.

Demonstração - Para provar que M_0 é fechado, seja $\{f_k\}_{k=1}^{\infty} \subset D(M_0)$ tal que

$$(1.23) \quad f_k \xrightarrow{L_2} f, \quad M_0 f_k \xrightarrow{L_2} g.$$

Por um resultado bem conhecido de teoria da medida ([29], [30]) existe subsequência f_{k_j} tal que $f_{k_j} \rightarrow f$ q.t.p. Mas

$(M_0 f_{k_j}) \xrightarrow{L_2} g$ e portanto existe subsequência $f_{k_{j_t}}$ com a propriedade $|\xi|^2 f_{k_{j_t}} \rightarrow g$ q.t.p.. Portanto $|\xi|^2 f = g$

q.t.p. de modo que $f \in D(M_0)$ e $M_0 f = g$. Agora sejam

$$(1.24) \quad \varphi_k(\xi) = \begin{cases} |\xi|^{-\frac{(n+1)}{2}}, & k \leq |\xi| \leq k+1 \\ 0 & , \text{ caso contrário} \end{cases}$$

Introduzindo coordenadas esféricas

$$(1.25) \quad \xi = r\omega, \quad r \in [0, \infty), \quad \omega \in S^{n-1},$$

onde S^{n-1} denota como de hábito a esfera de raio um centrada na origem de \mathbb{R}^n , e lembrando que $d\xi = r^{n-1} dr d\omega$ segue que

$$(1.26) \quad \begin{cases} \|\varphi_k\|^2 = \int_{k \leq |\xi| \leq k+1} |\xi|^{-n-1} d\xi = \int_{S^{n-1}} d\omega \int_k^{k+1} dr r^{n-1} r^{-n-1} = \\ = C \int_k^{k+1} r^{-2} dr = C \left[-\frac{1}{r} \right]_k^{k+1} \rightarrow 0 \end{cases}$$

quando $k \rightarrow \infty$, onde C é a área de S^{n-1} . Por outro lado

$$(1.27) \quad \begin{cases} \|M_0 \varphi_k\|^2 = \int_{k \leq |\xi| \leq k+1} |\xi|^4 |\xi|^{-n-1} d\xi = \\ = C \frac{r^3}{3} \Big|_k^{k+1} = C(3k^2 + 3k-1) \rightarrow \infty \end{cases}$$

quando $k \rightarrow \infty$. Isto termina a demonstração.

Q.E.D.

Sejam A e B dois operadores lineares de \mathbb{H} em \mathbb{S} .
Diremos que B é uma extensão de A se e só se

$$(1.28) \quad \begin{cases} D(B) \supseteq D(A) \\ Af = Bf \quad \forall f \in D(A). \end{cases}$$

Neste caso escreveremos $A \subseteq B$.

Um operador $A: D(A) \subseteq \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{S}$ é dito fechável se e só se existe B fechado tal que $A \subseteq B$.

Exercício (1.4) - Sejam $\mathbb{H} = L^2(0,1)$ e $\phi \in \mathbb{H} \setminus \{0\}$ fixa. Prove que o operador

$$(1.29) \quad \begin{cases} D(A) = C([0,1]) \subset \mathbb{H} \\ Af = f(1)\phi \end{cases}$$

não é fechável (e portanto, em particular, não fechado).

É claro intuitivamente que se A é fechável então existe uma "extensão fechada mínima", chamada o fecho de A . Para defini-la (assim como para outros propósitos) é conveniente introduzir o gráfico de um operador A :

$$(1.30) \quad G(A) = \{(f, Af) \mid f \in D(A)\} \subset \mathbb{H} \times \mathbb{S}.$$

Observe que o produto interno,

$$(1.31) \quad ((f, g) \mid (\tilde{f}, \tilde{g}))_{\mathbb{H} \times \mathbb{S}} = (f \mid \tilde{f})_{\mathbb{H}} + (g \mid \tilde{g})_{\mathbb{S}}$$

torna $\mathbb{H} \times \mathfrak{Q}$ um espaço de Hilbert. Então,

Exercício (1.5) - (i) $A \subseteq B \iff G(A) \subseteq G(B)$

(ii) A é fechado $\iff G(A)$ é fechado em $\mathbb{H} \times \mathfrak{Q}$

(iii) Seja N um subespaço de $\mathbb{H} \times \mathfrak{Q}$. Então N é gráfico de um operador se e só se N não contém elemento da forma $(0, v)$, $v \neq 0$.

(iv) Se $A: D(A) \subset \mathbb{H} \rightarrow \mathfrak{Q}$ é fechável então $N = \overline{G(A)}$ é o gráfico de um operador.

O operador definido (iv) do exercício (1.5) é chamado o fecho de A e denotado por \bar{A} . Observe que um operador fechável é tão bom quanto um operador fechado uma vez que sempre podemos substituí-lo por uma extensão fechada, e em particular por seu fecho. Além disso é fácil verificar

Exercício (1.6) - Seja A fechável. Então, $D(\bar{A})$ é o conjunto das $f \in \mathbb{H}$ tais que existe $\{f_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathbb{H}$ satisfazendo

$$(1.32) \quad \left\{ \begin{array}{l} f_n \xrightarrow{\mathbb{H}} f \\ \{Af_n\}_{n=1}^{\infty} \text{ é de Cauchy em } \mathfrak{Q} \end{array} \right.$$

Mais ainda,

$$(1.33) \quad \bar{A} f = \lim_{n \rightarrow \infty} Af_n .$$

Com o objetivo de ilustrar as idéias e resultados acima assim como para uso posterior vamos provar que o operador M_0 definido em (1.22) é precisamente o fecho de

$$(1.34) \quad \begin{cases} D(m_0) = \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \\ (m_0 f)(\xi) = |\xi|^2 f(\xi), \quad f \in D(m_0) \end{cases}$$

onde $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ é o espaço de Schwartz. Para fazer isto, no entanto, é conveniente um pouco de preparação. Em primeiro lugar, seja $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, \dots\}$. Um multi-índice $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ é um elemento de \mathbb{N}^n . Sejam $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ e

$$(1.35) \quad \begin{cases} |\alpha| = \sum_{j=1}^n \alpha_j \\ x^\alpha = x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \dots x_n^{\alpha_n} \\ \partial^\alpha = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}\right)^{\alpha_1} \left(\frac{\partial}{\partial x_2}\right)^{\alpha_2} \dots \left(\frac{\partial}{\partial x_n}\right)^{\alpha_n} \end{cases}$$

Com essas notações em mente, o espaço de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ é a coleção das $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ de classe C^∞ tais que,

$$(1.36) \quad \|f\|_{\alpha, \beta} = \sup_{x \in \mathbb{R}^n} |x^\alpha \partial^\beta f(x)| < \infty$$

para todo par de multi-índices α, β . Note que se $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ denota a coleção das $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ de classe C^∞ e suporte compacto (i.e., $f \equiv 0$ fora de algum intervalo fechado finito) então $C_0^\infty(\mathbb{R}^n) \subsetneq \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. A contenção é clara. A desigualdade também pois

$$(1.37) \quad \gamma(x) = \exp\left(-\frac{|x|^2}{2}\right)$$

pertence a $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ mas não a $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$. Finalmente, não é difícil provar que $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ (e conseqüentemente $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$) é denso em $L^p(\mathbb{R}^n)$, $1 \leq p < \infty$ (veja o teorema (0.16) de [31]). Temos então,

Proposição (1.7) - O operador m_0 definido em (1.34) é fechável e seu fecho é precisamente o operador M_0 em (1.22).

Demonstração - É claro que M_0 é fechável pois $m_0 \subseteq M_0$ e este último é fechado. Em particular $D(m_0) \subseteq D(M_0)$. Vamos provar agora que $D(\overline{m_0}) = D(M_0)$ e que de fato $\overline{m_0} = M_0$. Não é difícil ver que $D(m_0) \subseteq D(M_0)$. Seja então $f \in D(M_0)$. Isto significa que $(1+|\xi|^2)f \in L^2(\mathbb{R}^n, d\xi)$ e portanto existe uma seqüência $\{f_k\}_{k=1}^\infty \subset \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ tal que $(1+|\xi|^2)f_k \xrightarrow{L^2} (1+|\xi|^2)f$.

O exercício (1.6) mostra então que $f \in D(\overline{m_0})$ e que $M_0 = \overline{m_0}$.

Q.E.D.

Nosso próximo objetivo é introduzir o conceito de adjunta de uma transformação linear $A: D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Antes de mais na da lembre que

Exercício (1.8) - Um subespaço M de um espaço de Hilbert é denso em \mathcal{H} se e só se $M^\perp = \{0\}$.

Agora, se $A: D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é densamente definido (i.e., $D(A) = \mathcal{H}$) o operador adjunto (ou a adjunta) de A é a aplicação

linear definida por,

$$(1.38) \quad \begin{cases} D(A^*) = \{g \in \mathbb{H} \mid \exists g^* \in \mathbb{H} \text{ t.q. } (Af|g) = (f|g^*) \\ \quad \quad \quad \forall f \in D(A)\} \\ A^*g = g^*, \quad g \in D(A^*). \end{cases}$$

Cabem agora várias observações. Em primeiro lugar A^* está bem definido: o elemento g^* em (1.38) é único uma vez que $D(T)$ é denso em \mathbb{H} (aplique o exercício (1.8)). A linearidade é inteiramente evidente. Observe que a definição acima diz que $D(A^*)$ é exatamente a coleção dos $g \in \mathbb{H}$ tais que

$$(1.39) \quad f \in \mathbb{H} \longrightarrow (Af|g) \in \mathbb{C}$$

é um funcional linear contínuo. Se $A \in B(\mathbb{H})$ a aplicação (1.39) é contínua em relação a f para toda $g \in \mathbb{H}$ fixa pois

$$(1.40) \quad |(Af|g)| \leq \|A\| \|f\| \|g\|$$

e portanto neste caso temos $D(A^*) = \mathbb{H}$. Mais ainda,

Exercício (1.10) - Se $A \in B(\mathbb{H})$ então, $A^* \in B(\mathbb{H})$, $(Af|g) = (f|A^*g) \quad \forall f, g \in \mathbb{H}$ e além disso $\|A\| = \|A^*\|$.

Na definição geral a igualdade entre os produtos internos no exercício (1.10) vale com a devida restrição aos domínios, i.e.,

$$(1.41) \quad (Af|g) = (f|A^*g) \quad \forall f \in D(A), \quad g \in D(A^*).$$

É importante notar que no caso geral o domínio de A^*

pode não ser denso. De fato,

Exercício (1.11) - i) Seja A o operador definido no Exercício (1.4) (equação (1.29)). Prove que $D(A^*) = \{\phi\}^\perp$ e $A^*f = 0$, $f \in D(A^*)$.

ii) Dê um exemplo de um operador A tal que $D(A) = \{0\}$.

Algumas das propriedades mais simples e úteis da operação $A \longrightarrow A^*$ estão resumidas nos exercícios abaixo.

Exercício (1.12) - Sejam A e B operadores lineares densamente definidos no espaço de Hilbert \mathfrak{H} . Então,

$$i) (\lambda A)^* = \bar{\lambda} A^*, \quad \forall \lambda \in \mathbb{C}$$

$$ii) A \subset B \implies B^* \subset A^*$$

$$iii) (A+B)^* \supseteq A^* + B^*$$

$$iv) (AB)^* \supseteq B^* A^*$$

$$v) (A+\lambda)^* = A^* + \bar{\lambda}$$

onde em v) λ e $\bar{\lambda}$ significam, como de hábito os operadores $\lambda 1$ e $\bar{\lambda} 1$ respectivamente.

Suponha que $A: D(A) \subset \mathfrak{H} \longrightarrow \mathfrak{H}$ é um operador injetivo. Então o inverso de A denotado por A^{-1} é o operador linear definido por,

$$(1.42) \quad \begin{cases} D(A^{-1}) = \mathfrak{R}(A) = \text{imagem de } A \\ A^{-1}(Af) = f \quad \forall f \in D(A). \end{cases}$$

Exercício (1.13) - Suponha que A e A^{-1} são densamente definidos. Então A^* também é injetivo e

$$(1.42) \quad (A^*)^{-1} = (A^{-1})^*$$

O próximo resultado é muito mais interessante e na nossa opinião inteiramente inesperado. Sua demonstração pode ser feita de maneira extremamente elegante utilizando o conceito de gráfico de um operador. O leitor poderá encontrá-la em [11] vol. I e é altamente recomendável que se familiarize com ela.

Teorema (1.14) - Seja $A: D(A) \subset \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$ um operador densamente definido. Então,

- i) A^* é fechado.
- ii) A é fechável se e só se A^* é densamente definido (i.e., $\overline{D(A^*)} = \mathbb{H}$). Nesse caso $\overline{A} = A^{**}$
- iii) A fechável $\implies (\overline{A})^* = A^{**}$

Como vimos anteriormente, existem operadores que não são fecháveis. No entanto todos os que se prezam têm essa propriedade. Para ilustrar este fato e também como aplicação da parte (ii) do Teorema (1.14) vamos fazer alguns comentários sobre a teoria dos operadores diferenciais em um aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, no contexto de espaços de Hilbert. Seja,

$$(1.44) \quad L = P(x, D) = \sum_{|\alpha| \leq m} a_\alpha(x) D^\alpha$$

onde $x \in \Omega$, $a_\alpha \rightarrow \mathbb{C}$ são "bem comportadas" (C^∞ por exemplo) e

$$(1.45) \quad D^\alpha = \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^{\alpha_1} \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^{\alpha_2} \dots \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_n} \right)^{\alpha_n}.$$

Defina então um operador T no espaço de $\mathcal{H} = L^2(\Omega)$ (com a medida de Lebesgue) da seguinte forma,

$$(1.46) \quad \begin{cases} D(T) = C^\infty(\Omega) \\ Tf = P(x, D)f, \quad f \in C_0^\infty(\Omega) \end{cases}$$

onde $C^\infty(\Omega)$ denota a coleção das funções C^∞ com suporte compacto contido em Ω . Note que para definir T basta exigir que $a_\alpha \in L^2(\Omega)$ para todo multi-índice α . Em geral, para aplicações mais profundas é preciso exigir muito mais que isso [31]. O operador T definido acima é chamado muitas vezes o operador minimal definido por L . A adjunta formal de L é operador dado por,

$$Mf = \sum_{|\alpha| \leq m} (-1)^{|\alpha|} D^\alpha \overline{a_\alpha(\cdot)} f.$$

Supondo que os coeficientes $a_\alpha(x)$ são suficientemente diferenciáveis e aplicando a regra de Leibniz para a derivada de produtos é fácil verificar que M é um operador exatamente do mesmo tipo que L . Seja então S o operador minimal associado a M . Integrando por partes, segue que,

$$(1.47) \quad \left\{ \begin{aligned} (Lf|g) &= \int_{\Omega} (Lf)(x) \overline{g(x)} \, dx = \\ &= \int_{\Omega} f(x) \overline{Mg(x)} \, dx + (\text{termos de fronteira}) = \\ &= (f|Mg) + (\text{termos de fronteira}). \end{aligned} \right.$$

Como $D(T) = D(S) = C_0^{\infty}(\Omega)$, os termos de fronteira se anulam e portanto

$$(1.48) \quad (Tf|g) = (f|Mg) \quad \forall f, g \in C_0^{\infty}(\Omega).$$

Conseqüentemente $M \subset T^*$ de modo que T^* é densamente definido pois M tem essa propriedade. Isto mostra que operadores diferenciais são fecháveis em $L^2(\Omega)$ devido à parte (ii) do teorema anterior.

Agora vamos passar à definição de operador auto-adjunto. Um operador $A: D(A) \subset \mathfrak{H} \rightarrow \mathfrak{H}$ é dito simétrico se e só se,

$$(1.49) \quad D(A) \text{ é denso em } \mathfrak{H}$$

$$(1.50) \quad (Af|g) = (f|Ag), \quad \forall f, g \in D(A).$$

Em outras palavras um operador é simétrico se e só se

$$(1.51) \quad A \subset A^*$$

Em particular, todo operador simétrico é fechável tendo em vista que pela parte i) do Teorema (1.14), A^* é sempre fechado. Além

disso vale o teorema de Hellinger-Toeplitz, a saber,

Exercício (1.15) - Se A é simétrico definido no espaço inteiro (i.e., $D(A) = \mathbb{H}$) então A é limitado.

Um operador simétrico $A: D(A) \subset \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$ é dito auto-adjunto se e somente se $A = A^*$. As motivações para esta definição são muitas. De um ponto de vista puramente matemático, uma vez que $A \subset A^*$, é natural perguntar se vale sempre a igualdade (pe-lo menos no caso em que A é fechado, pois A^* tem sempre esta propriedade). A resposta é em geral: não (veja o exercício (1.17) abaixo). De fato a propriedade "ser auto-adjunto" é muito mais delicada que a simetria. Além disso, e talvez mais importante ainda, é o fato indicado pela física, que vários operadores muito importantes em mecânica quântica devem ser auto-adjuntos e não simplesmente simétricos. Por exemplo todas as hamiltonianas das quais trataremos estão nesse caso.

Note que valem as seguintes relações,

Exercício (1.16) - Seja $A: D(A) \subset \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$ um operador linear.

i) Se A é simétrico então,

$$(1.52) \quad A \subset A^{**} \subset A^*$$

ii) Se A é simétrico e fechado

$$(1.53) \quad A = A^{**} \subset A^* .$$

Em particular, se A é auto-adjunto temos

$$(1.54) \quad A = A^{**} = A^*.$$

Além disso, os operadores auto-adjuntos são maximais no sentido seguinte.

Exercício (1.17) - $A: D(A) \subset \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$ é simétrico maximal se e só se para todo B tal que $B \subset B^*$ e $A \subset B$ temos $A = B$. Prove que todo operador auto-adjunto é simétrico maximal.

O próximo exercício (bastante difícil a essa altura da guerra), é muito ilustrativo.

Exercício (1.18) - Seja $\mathbb{H} = L^2(0,1)$ (com a medida de Lebesgue). Considere os operadores,

$$(1.55) \quad \begin{cases} D(T_3) = \{f \in \mathbb{H} \mid f \text{ absolutamente contínua e } f' \in \mathbb{H}\} \\ T_3 f = if', \quad f \in D(T_3) \end{cases}$$

$$(1.56) \quad \begin{cases} D(T_2) = \{f \in D(T_3) \mid f(0) = f(1)\} \\ T_2 f = if', \quad f \in D(T_2) \end{cases}$$

$$(1.57) \quad \begin{cases} D(T_1) = \{f \in D(T_2) \mid f(0) = f(1) = 0\} \\ T_1 f = if', \quad f \in D(T_1) \end{cases}$$

i) Os operadores acima são fechados, densamente definidos e $T_1 \not\subset T_2 \not\subset T_3$.

$$\text{ii) } T_1^* = T_3$$

$$\text{iii) } T_2^* = T_2$$

$$\text{iv) } T_3^* = T_1$$

Observe que i) e ii) mostram que T_1 é simétrico mas não auto-adjunto enquanto que por iii) T_2 é auto-adjunto. Mais ainda, T_3 não é simétrico pois caso contrário ele coincidiria com T_2 que é em particular simétrico maximal. É interessante elaborar um pouco mais este exemplo. Observe que os três operadores são definidos pela mesma fórmula, mas tem domínios diferentes. Estes domínios são definidos em termos de condições de contorno. A única imposição sobre $D(T_3)$ é que o operador faça sentido em $\mathcal{H} = L^2(0,1)$. Desse ponto de vista T_3 é maximal. No entanto T_3 não é simétrico: seu domínio é muito grande (e portanto o de T_3^* é muito pequeno!). Por outro lado T_1 é simétrico mas não auto-adjunto. As condições de contorno (chamadas condições de Dirichlet) são muito restritivas. O domínio de T_1 é muito pequeno enquanto que o de T_1^* é muito grande: não dá para "acertar". O domínio de T_2 , é no entanto, do "tamanho exato" e T_2 é auto-adjunto! Este exemplo indica como é delicada a questão de "auto-adjunticidade" de um operador. Finalmente, note que T_2 é uma extensão auto-adjunta de T_1 . Cabe portanto perguntar se existem outras. A resposta é sim. De fato existe uma infinidade de extensões definidas por

$$(1.58) \quad \begin{cases} D(A_\alpha) = \{f \in D(T_3) \mid f(0) = \alpha f(1)\} \\ A_\alpha f = if', \quad f \in D(A_\alpha) \end{cases}$$

onde $\alpha \in \mathbb{C}$, $|\alpha| = 1$. Note que $A_1 = T_2$.

Exercício (1.19) - Prove as afirmações feitas sobre as extensões de T_1 .

Deve-se notar ainda que é possível classificar completamente todas as extensões auto-adjuntas de um operador simétrico fechado. Tal estudo foge aos objetivos do presente texto de modo que nos limitaremos a remeter o leitor ao Capítulo X do volume II de [11] assim como à seção 14 de [27 vol. II], (ou essencialmente a qualquer bom livro que trate da teoria de operadores não limitados em espaços de Hilbert).

O exercício (1.18) e os comentários que o seguem mostram como é difícil provar diretamente que um operador é auto-adjunto. Conseqüentemente é conveniente obter teoremas, com condições facilmente verificáveis, que garantam esta propriedade. Para motivar o critério básico nesta direção, suponha que $A: D(A) \subset \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$ é auto-adjunto, e que $\varphi \in D(A) = D(A^*)$ é tal que $A^* \varphi = A\varphi = i\varphi$. Então,

$$(1.59) \quad i(\varphi|\varphi) = (A\varphi|\varphi) = (\varphi|A\varphi) = -i(\varphi|\varphi) .$$

Portanto $\varphi = 0$. O mesmo tipo de argumento mostra que se $A\varphi = A^* \varphi = -i\varphi$ então $\varphi = 0$. Em outras palavras, se $A = A^*$ en-

tão as equações $A^* \varphi = \pm i \varphi$ não tem solução não trivial. A recíproca desta afirmação, a saber, o fato que se A é simétrico, fechado e as equações $A^* \varphi = \pm i \varphi$ só tem a solução trivial, então $A = A^*$, é o critério básico que utilizaremos para provar que os operadores nos quais estaremos interessados são auto-adjuntos. Mais precisamente,

Teorema (1.20) - Seja $A: D(A) \subset \mathbb{H} \longrightarrow \mathbb{H}$ um operador simétrico. Então as seguintes afirmações são equivalentes,

- (i) A é auto-adjunto,
- (ii) A é fechado e $\text{Ker}(A^* \pm i) = \{0\}$, (onde $\text{Ker}(T) = T^{-1}(\{0\})$ denota o núcleo do operador T),
- (iii) $\mathcal{R}(A \pm i) = \mathbb{H}$, i.e., os operadores $T \pm i$ são (ambos!) sobre \mathbb{H} .

Demonstração - A implicação (i) \implies (ii) foi provada como motivação. Para provar que (ii) \implies (iii) basta mostrar

$$(1.60) \quad \overline{\mathcal{R}(A \pm i)} = \mathbb{H}$$

$$(1.61) \quad \mathcal{R}(A \pm i) \text{ é fechado em } \mathbb{H}$$

uma vez que um subespaço fechado e denso tem necessariamente que ser o espaço inteiro. Para provar (1.60), suponha que $\mathcal{R}(A+i)$ não é denso (a demonstração para $\mathcal{R}(A-i)$ é análoga). Então $\psi \perp \mathcal{R}(A+i)$ de modo que $((A+i)\varphi | \psi) = 0$ para todo $\varphi \in D(A)$. Portanto,

$$(1.62) \quad (A\varphi | \psi) = (\varphi | -i\psi) \quad \forall \varphi \in D(A).$$

A definição de A^* mostra então que $\psi \in D(A^*)$ e $A^*\psi = -i\psi$, uma contradição pois por hipótese $\text{Ker}(A^* \pm i) = \{0\}$. Quanto a (1.61) note que escrevendo $\|(A+i)\varphi\|^2$, $\varphi \in D(A)$ em termos do produto interno e usando a simetria segue que,

$$(1.63) \quad \|(A+i)\varphi\|^2 = \|A\varphi\|^2 + \|\varphi\|^2,$$

para todo $\varphi \in D(A)$. Seja agora $g \in \mathcal{R}(A+i)$. Então existe $\{\varphi_k\}_{k=1}^{\infty} \subset D(A)$ tal que $(A+i)\varphi_k \xrightarrow{\mathcal{H}} g$. Aplicando (1.63) temos

$$(1.64) \quad \|(A+i)(\varphi_k - \varphi_j)\|^2 \geq \|\varphi_k - \varphi_j\|^2.$$

Isto significa que $\{\varphi_k\}_{k=1}^{\infty}$ é de Cauchy em \mathcal{H} e portanto existe $f \in \mathcal{H}$ tal que $\varphi_k \xrightarrow{\mathcal{H}} f$. Temos então

$$(1.65) \quad \begin{cases} \varphi_k \xrightarrow{\mathcal{H}} f \\ (A+i)\varphi_k \xrightarrow{\mathcal{H}} g \end{cases}$$

Como A é fechado segue que $g \in D(A+i) = D(A)$ e $(A+i)f = g$. A demonstração para o caso de $(A-i)$ segue as mesmas linhas.

Resta provar que (iii) implica (i). Para isso seja $\varphi \in D(A^*)$. Como $(A-i)$ é sobre, existe $\eta \in D(A)$ tal que $(A-i)\eta = (A^* - i)\varphi$. Mas A é simétrico por hipótese de modo que $A \subset A^*$ e portanto $(\varphi - \eta) \in D(A^*)$ e $(A^* - i)(\varphi - \eta) = 0$. Consequentemente

$$(1.66) \quad ((A^* - i)(\varphi - \eta) \mid \theta) = 0$$

para toda $\theta \in D(A)$. Então,

$$(1.67) \quad (\varphi - \eta \mid (A + i)\theta) = 0$$

qualquer que seja $\theta \in D(A) = D(A + i)$. Como $\mathcal{R}(A + i) = \mathcal{H}$, (1.67) mostra que $\varphi - \eta = 0$ e portanto $D(T) \supseteq D(T^*)$. Isto encerra a demonstração.

Q.E.D.

Note que ambas as condições $\mathcal{R}(A \pm i) = \mathcal{H}$ foram usadas na demonstração (iii) \implies (i). Além disso para uso futuro é conveniente observar que

Exercício (1.21) - O Teorema (1.20) vale com $(A \pm i)$ e $(A^* \pm i)$ substituídos por $(A \pm \lambda i)$ e $(A^* \pm \lambda i)$ qualquer seja $\lambda \in \mathbb{R} - \{0\}$.

Corolário (1.22) - O operador M_0 definido na equação (1.22) é auto-adjunto.

Demonstração - É claro que M_0 é simétrico. Para provar que $M_0 = M_0^*$ vamos usar a parte (iii) do Teorema (1.20), i.e., vamos verificar que $(M_0 \pm i)$ são sobre $L^2(\mathbb{R}^3, d\xi)$. Dada $f \in L^2(\mathbb{R}^3, d\xi)$ defina,

$$(1.68) \quad g_{\pm} = \frac{f(\xi)}{|\xi|^2 \pm i}.$$

Então é claro que

$$(1.69) \quad \begin{cases} g_{\pm} \in D(M_0) \\ (M_0 \pm i)g_{\pm} = f \end{cases}$$

Q.E.D.

Antes de prosseguir é conveniente introduzir algumas definições úteis e deixar mais alguns exercícios a cargo do leitor. Um operador simétrico $A: D(A) \subset \mathbb{H} \longrightarrow \mathbb{H}$ é dito essencialmente auto-adjunto se e só se seu fecho \bar{A} é auto-adjunto. Nesse caso, existe uma única extensão auto-adjunta de A , a saber, \bar{A} . De fato, suponha que $S = S^*$ e $A \subset S$. Então $\bar{A} \subset S$. Mas \bar{A} é simétrico maximal de modo que $\bar{A} = S$. O conceito que acabamos de introduzir é bastante útil devido ao fato de que muitas vezes é difícil determinar explicitamente o domínio de um operador, mas seu comportamento é conhecido em um conjunto suficientemente grande onde ele é essencialmente auto-adjunto. O teorema (1.20) tem a seguinte consequência.

Exercício (1.23) - Seja $A: D(A) \subset \mathbb{H} \longrightarrow \mathbb{H}$ um operador simétrico. Então as seguintes afirmações são equivalentes,

- (i) A é essencialmente auto-adjunto
- (ii) $\text{Ker}(A \pm i) = \{0\}$
- (iii) $\mathcal{R}(A \pm i)$ são densos em \mathbb{H} .

Finalmente,

Exercício (1.24) - O operador m_0 definido em (1.34) é essencialmente auto-adjunto e seu fecho é precisamente o operador M_0 de (1.22). O mesmo resultado vale com $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ substituído por $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$.

Vamos agora introduzir os conceitos de resolvente e espectro que serão cruciais nos capítulos subsequentes. Seja $A: D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ um operador fechado. O conjunto resolvente (ou simplesmente o resolvente) de A é o conjunto

$$(1.70) \quad \rho(A) = \{z \in \mathbb{C} \mid (A-z)^{-1} \text{ existe e pertence a } B(\mathcal{H})\};$$

O espectro de A é o complemento de $\rho(A)$ em \mathbb{C} , i.e., o conjunto

$$(1.71) \quad \Sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A).$$

Além disso o operador

$$(1.72) \quad R_A(z) = (A-z)^{-1} \in B(\mathcal{H}), \quad z \in \rho(A)$$

é chamado o operado resolvente (ou simplesmente resolvente) de A no ponto $z \in \rho(A)$.

Exercício (1.25)

- (i) Suponha que $A: D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é injetivo (de modo que A^{-1} está definido). Prove que A é fechado se e só se A^{-1} é fechado.

(ii) Combine (i) com o teorema do gráfico fechado (veja por exemplo [11, vol. I], [21], [25], [26], [28]) para concluir que,

$$(1.73) \quad \rho(A) = \{z \in \mathbb{C} \mid (A - z) \text{ é injetivo e sobre}\}.$$

É claro que é possível definir $\rho(A)$ no caso de operadores não fechados, mas isso não é muito útil. Um indício deste fato é que a palavra "fechado" não pode ser substituída por "fechável" na parte (i) do exercício (1.25) (tente dar um exemplo!). Note também que se $(T - z)^{-1}$ existe e pertence a $B(\mathbb{H})$ então $(T - z)^{-1}$ é fechado e portanto $(T - z)$ e conseqüentemente T são fechados. As propriedades básicas dos objetivos definidos acima são,

Exercício (1.26). Seja $A: D(A) \subset \mathbb{H} \longrightarrow \mathbb{H}$ um operador fechado. Então,

- (i) $\rho(A)$ é aberto em \mathbb{C} e portanto $\Sigma(A)$ é fechado em \mathbb{C} .
- (ii) $A = A^*$ implica $\Sigma(A) \subset \mathbb{R}$ se A é simétrico a recíproca é verdadeira; veja por exemplo o Teorema X.1 do volume II de [11].
- (iii) $z \in \rho(T) \longrightarrow R_A(z)$ é uma função analítica e vale a primeira equação do resolvente,

$$(1.74) \quad R_A(z) = R_A(z_0) + (z - z_0) R_A(z_0) R_A(z)$$

para todo par $z, z_0 \in \rho(T)$.

(iv) Prove que $\Sigma(M_0) = [0, \infty)$.

É conveniente fazer alguns comentários em relação à parte (iii) do exercício acima. Sejam X um espaço de Banach e $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ um aberto. Uma função $f: \Omega \rightarrow X$ é dita analítica em $z_0 \in \Omega$ se e só se,

$$(1.75) \quad \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(z_0 + h) - f(z_0)}{h}$$

existe em relação à topologia de X (naturalmente). A função f é analítica em Ω se e só se ela é analítica em todo $z_0 \in \Omega$. A partir dessa definição é possível desenvolver uma teoria de funções analíticas com valores vetoriais inteiramente análoga à teoria usual. Por exemplo, uma função analítica no sentido acima tem uma série de potências convergente em cada ponto (em relação à norma de X), vale o teorema de Cauchy, a fórmula integral de Cauchy, o teorema de Liouville e por aí a fora. Para maiores detalhes o leitor diligente deve consultar o Capítulo 8 do excelente livro de E. Hille [32]. Deve-se notar ainda que existe outro conceito natural de analiticidade para funções com valores em espaços de Banach, a saber, uma função $f: \Omega \rightarrow X$ é fracamente analítica se e só se $\varphi \circ f: \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ é analítica qualquer que seja o elemento $\varphi \in X^*$, (o dual topológico de X). Um resultado notável, cuja demonstração pode ser encontrada na seção VI.3 do volume I de [11] é o

Teorema (1.27) - Uma função $f: \Omega \rightarrow X$ é fracamente analítica se e só se ela é analítica no sentido usual.

Além disso é importante notar a seguinte recíproca da parte (iii) do exercício (1.26),

Exercício (1.27) - Sejam \mathcal{H} um espaço de Hilbert, $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ aberto não vazio, $F: \Omega \rightarrow B(\mathcal{H})$ família de operadores limitados tais que,

(i) $F(\zeta)$ é injetivo para algum $\zeta \in \Omega$

(ii) $F(z) = F(z_0) + (z - z_0) F(z_0)F(z)$

para todo $z, z_0 \in \Omega$. Então existe um único operador fechado A em \mathcal{H} tal que $R_A(z) = F(z)$ em Ω .

(iii) O operador definido em (ii) é auto-adjunto se e somente se

$$(1.76) \quad F(z)^* = F(\bar{z})$$

para todo $z \in \Omega$.

O resultado enunciado no exercício (1.27) (cuja demonstração se encontra em [23]!) não é simples curiosidade. Ele pode ser usado de maneira muito eficaz na definição de operadores fechados e em particular auto-adjuntos em muitas situações de interesse. Uma aplicação profunda deste método pode ser encontrada em um notável artigo de T. Kato ([33]).

Finalmente, é preciso notar que ao contrário do caso dos operadores limitados muitas patologias podem ocorrer. Para enten

der melhor o significado disto lembre que,

Exercício (1.28) - Se $A \in B(\mathbb{H})$ então $\Sigma(A)$ é compacto e não vazio. Além disso para todo $\lambda \in \Sigma(A)$ temos $|\lambda| \leq r(A) \leq \|A\|$ onde

$$(1.77) \quad r(A) = \sup\{|\lambda| \mid \lambda \in \Sigma(A)\}$$

onde $r(A)$ é o raio espectral. Mais ainda,

$$(1.78) \quad r(A) = \lim_{n \rightarrow \infty} \|A^n\|^{1/n}$$

e se $A = A^*$ então $r(A) = \|A\|$.

No caso não limitado, nem tudo são flores! De fato,

Exercício (1.29) - Seja T_3 o operador definido no exercício

(1.18) e considere também,

$$(1.79) \quad \begin{cases} D(S) = \{f \in D(T_3) \mid f(0) = 0\} \\ Sf = if', \quad f \in D(S) \end{cases}$$

Como já sabemos T_3 é fechado. Prove que S tem essa mesma propriedade e que

$$(1.80) \quad \Sigma(T_3) = \mathbb{C}, \quad \Sigma(S) = \{ \}$$

onde $\{ \}$ denota o conjunto vazio.

2. A hamiltoniana livre

Nesta seção vamos descrever a teoria básica associada à equação de Schrödinger livre (i.e., (0.8) no caso $V \equiv 0$). Para isso é preciso um pouco de preparação. Em primeiro lugar convém lembrar alguns fatos sobre a transformada de Fourier usual. Se $f \in L^1(\mathbb{R}^n, dx)$, a transformada de Fourier $\hat{f} = \mathfrak{F}_0 f$ é a função definida por,

$$(2.1) \quad f(\xi) = (\mathfrak{F}_0 f)(\xi) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\xi \cdot x} f(x) dx.$$

Então é fácil ver que,

Exercício (2.1) - Seja $f \in L^1(\mathbb{R}^n, dx)$. Então

- (i) \hat{f} é contínua e limitada
- (ii) vale o lema de Riemann-Lebesgue, isto é

$$(2.2) \quad \lim_{|\xi| \rightarrow \infty} \hat{f}(\xi) = 0.$$

Antes de prosseguir é conveniente notar

Exercício (2.2) - Sejam $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n, dx)$. A convolução $f * g$ de f e g é definida pela fórmula

$$(2.3) \quad (f * g)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x-y) g(y) dy$$

(i) Prove que $(f * g)$ está bem definida e vale a desigualdade

$$(2.4) \quad \|f * g\|_{L^1} \leq \|f\|_{L^1} \|g\|_{L^1}$$

(ii) Mais geralmente, vale o teorema de Young para a convolução, a saber, sejam $p, q, r \in [1, \infty)$ tais que

$$p^{-1} + q^{-1} = 1 + r^{-1} \quad \text{e} \quad f \in L^p(\mathbb{R}^n, dx), \quad g \in L^q(\mathbb{R}^n, dx).$$

Então $(f * g) \in L^r(\mathbb{R}^n, dx)$ e

$$(2.5) \quad \|f * g\|_{L^r} \leq \|f\|_{L^p} \|g\|_{L^q}$$

(iii) Se $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n, dx)$ então,

$$(2.6) \quad (f * g)^\wedge(\xi) = (2\pi)^{n/2} \hat{f}(\xi) \hat{g}(\xi).$$

Antes de prosseguir, é nosso dever notar que o exercício acima é não tecnicamente trivial especialmente no que diz respeito à mensurabilidade da função $f(x-y)g(y)$. O leitor interessado deve consultar [34], [35] e também o Capítulo IX de [11, vol.II].

Apesar de ser possível desenvolver a teoria da transformada de Fourier tomando o espaço $L^1(\mathbb{R}^n, dx)$ como "base de operações" é muito mais conveniente para nossos fins trabalhar no espaço $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ definido em (1.36) da seção anterior.

Teorema (2.3) - A transformada de Fourier é injetora em e sobre $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. A fórmula de inversão que permite recuperar uma função a partir de sua transformada, é

$$(2.7) \quad f(x) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(\xi) e^{i\xi \cdot x} d\xi$$

Além disso, com a notação introduzida em (1.35) temos

$$(2.8) \quad (-i)^{|\alpha|} (\partial^\alpha f)^\wedge(\xi) = \xi^\alpha \hat{f}(\xi)$$

$$(2.9) \quad (-i)^{|\alpha|} (x^\alpha f)^\wedge(\xi) = (\partial^\alpha \hat{f})(\xi)$$

$$(2.10) \quad (f|g) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \overline{g(x)} dx = \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(\xi) \hat{g}(\xi) d\xi = (\hat{f}|\hat{g})$$

para toda $f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$.

O resultado acima é bem conhecido. Sua demonstração, que se rá omitida, pode ser encontrada em vários textos (veja por exemplo [11, vol II], [26], [35]). Cabem no entanto alguns comentários. Em primeiro lugar, a identidade de polarização (que vale em qualquer espaço com produto interno),

$$(2.11) \quad \begin{cases} (u | v) = \frac{1}{4} (\|u+v\|^2 - \|u-v\|^2) + \\ + \frac{i}{4} (\|u+iv\|^2 - \|u-iv\|^2) \end{cases}$$

mostra que (2.10) é equivalente a

$$(2.12) \quad \|f\| = \|\hat{f}\|$$

onde $\|\cdot\| = (\cdot|\cdot)^{1/2}$ é a norma $L^2(\mathbb{R}^n)$. Daqui por diante nos referiremos tanto a (2.10) quanto a (2.12) como a identidade de Parseval. Note que ela permite definir a transformada de Fourier em $L^2(\mathbb{R}^n)$ (a integral em (2.1) não faz sentido em geral em L^2 !). Mais precisamente, não é difícil verificar

Exercício (2.4) - A aplicação $\mathfrak{F}_0: \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ pode ser estendida de maneira única a $L^2(\mathbb{R}^n)$. A extensão, também denotada por \mathfrak{F}_0 ou $\hat{\cdot}$ é dada por,

$$(2.13) \quad f = \mathfrak{F}_0 f = \lim_{k \rightarrow \infty} \hat{f}_k, \quad f \in L^2(\mathbb{R}^n)$$

onde $\{f_k\}_{k=1}^{\infty}$ é qualquer sequência em $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ tal que $f_k \xrightarrow{L^2} f$.

Tendo em vista a fórmula de inversão é natural introduzir a transformada inversa de $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ pela fórmula,

$$(2.14) \quad \check{g}(x) = (\mathfrak{F}_0^{-1} g)(x) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} g(\xi) e^{i\xi \cdot x} d\xi$$

de modo que,

$$(2.15) \quad (\hat{f})^{\check{}} = f = (\check{f})^{\wedge}$$

para toda $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Além disso é fácil ver que \mathfrak{F}_0^{-1} pode ser estendida a $L^2(\mathbb{R}^n)$ exatamente da mesma forma que \mathfrak{F}_0 e portanto (2.12) e (2.115) valem também para toda $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Isto mostra que \mathfrak{F}_0 é um operador unitário em $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Finalmente, (2.8) mostra que operadores de derivação são

transformados em operadores de multiplicação através da operação \mathfrak{F}_0 . Isto permite transformar equações diferenciais lineares com coeficientes constantes em equações algébricas! Mais importante, para nossos propósitos, (2.8) nos coloca em posição de definir a hamiltoniana livre $(-\Delta)$ como operador auto-adjunto em $L^2(\mathbb{R}^n)$. Para isso, observe que (2.8) mostra em particular que,

$$(2.16) \quad (-\Delta f)^\wedge(\xi) = |\xi|^2 \hat{f}(\xi)$$

para toda $f \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^n)$. Conseqüentemente é natural introduzir a hamiltoniana livre H_0 como sendo o operador dado por

$$(2.17) \quad \begin{cases} D(M_0) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx) \mid \hat{f} \in D(M_0)\} \\ H_0 f = \mathfrak{F}_0^{-1} M_0 \mathfrak{F}_0 f, \quad f \in D(M_0) \end{cases}$$

onde M_0 é a aplicação definida em (1.22). Como M_0 é auto-adjunto e \mathfrak{F}_0 é unitário em $L^2(\mathbb{R}^n)$ segue imediatamente que $H_0 = H_0^*$. Além disso, é fácil verificar que o operador

$$(2.18) \quad \begin{cases} D(h_0) = \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \\ (h_0 f)(\xi) = -\Delta f(\xi) \end{cases}$$

é essencialmente auto-adjunto e H_0 é precisamente sua única extensão auto-adjunta em $L^2(\mathbb{R}^n, dx)$. Agora, é natural perguntar se o operador H_0 definido acima é um operador diferencial em algum sentido. A resposta é: sim. Para formulá-la rigorosamente, é preciso alguma preparação. Seja $\alpha \in \mathbb{N}^n$. Uma função $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$

é α -vezes diferenciável no sentido fraco em $L^2(\mathbb{R}^n)$ se e só se existe $g \in L^2(\mathbb{R}^n)$ tal que,

$$(2.19) \quad (g | \varphi) = (-1)^{|\alpha|} (f | \delta^\alpha \varphi)$$

para toda $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Neste caso escreveremos $g = \delta^\alpha f$. Observe que (2.19) é exatamente o que se obteria integrando $(f | \delta^\alpha \varphi)$ α -vezes no caso em que (por exemplo) $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. O leitor familiar com a teoria das distribuições temperadas ([11, vol. II], [26], [31], [35]) deve notar que esta definição diz que f , considerada como um elemento de $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$, tem derivada distribucional em $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Exercício (2.5) - Prove que $D(H_0)$ é exatamente a coleção das $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ tais que $(-\Delta f) \in L^2(\mathbb{R}^n)$, onde o laplaciano é calculado no sentido fraco.

Estas idéias podem ser levadas muito mais longe se introduzirmos o conceito de função do operador H_0 . Para isso seja $\mathfrak{f}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ uma função mensurável e considere o operador linear definido por

$$(2.19) \quad \begin{cases} D(\mathfrak{f}(H_0)) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx) \mid \mathfrak{f}(\xi^2)f(\xi) \in L^2(\mathbb{R}^n, d\xi)\} \\ \mathfrak{f}(H_0)f = (\tilde{\mathfrak{f}} \hat{f})^\vee = \mathfrak{F}_0^{-1} \tilde{\mathfrak{f}} \mathfrak{F} f, \quad f \in D(\mathfrak{f}(H_0)) \end{cases}$$

onde $\tilde{\mathfrak{f}}$ denota o operador de multiplicação por $\mathfrak{f}(\xi^2)$ em $L^2(\mathbb{R}^n, d\xi)$. Note que se \mathfrak{f} é uma função limitada então $\mathfrak{f}(H_0) \in B(\mathcal{M})$ e $\|\mathfrak{f}(H_0)\| \leq \|\mathfrak{f}\|_{L^\infty}$. O restante desta seção consistirá na descrição

de certas funções de H_0 que ocorrerão repetidamente no que segue. A primeira delas, talvez a mais simples do ponto de vista técnico, é o semigrupo fortemente contínuo a um parâmetro associado a H_0 , definido por

$$(2.20) \quad e^{-tH_0} f = (e^{-|\cdot|^2 t} \hat{f})^\vee, \quad t \in [0, \infty), \quad f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx)$$

É claro que $e^{-tH_0} \in B(L^2(\mathbb{R}^n, dx))$ e $\|e^{-tH_0}\| \leq 1$, para todo $t \in [0, \infty)$. O próximo exercício resume algumas das propriedades fundamentais da função definida em (2.20).

Exercício (2.26).

(i) Um semigrupo fortemente contínuo a um parâmetro (ou semigrupo de classe C^0) em um espaço de Banach X é uma aplicação $t \in [0, \infty) \longrightarrow U(t) \in B(X)$ tal que

$$(2.21) \quad \begin{cases} U(t+t') = U(t) U(t'), & U(0) = 1 \\ \lim_{t \downarrow 0} U(t)f = f \end{cases}$$

para todo par $t, t' \in [0, \infty)$ e $f \in X$ (com o limite tomado na norma de X). Prove que e^{-tH_0} tem estas propriedades.

(ii) Mostre que $e^{-tH_0} f = K_t * f$ para todo $t > 0$ e $f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx)$, onde K_t é o núcleo do calor,

$$(2.22) \quad K_t(x) = (4\pi t)^{-n/2} \exp\left(-\frac{|x|^2}{4t}\right), \quad t > 0, \quad x \in \mathbb{R}^n$$

(iii) Prove que $e^{-tH_0} f \in C^\infty(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ para todo $t > 0$ e $f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx)$.

(iv) Prove que $u(t) = e^{-tH_0} f$ é a única solução do problema

$$(2.23) \quad \begin{cases} u \in C([0, \infty), C([0, \infty), L^2(\mathbb{R}^n)) \cap C((0, \infty), D(H_0)) \cap \\ \quad \cap C^1((0, \infty), L^2(\mathbb{R}^n, dx))) \\ \frac{du}{dt} = -H_0 u, \quad t > 0 \\ u(0) = f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx) \end{cases}$$

(Sugestão: Para obter a unicidade mostre que $\partial_t \|u(t)\|^2 \leq 0$).

A próxima função na agenda é o resolvente de H_0 , definido por,

$$(2.24) \quad R_0(z)f = \mathfrak{F}_0^{-1}((|\cdot|^2 - z)^{-1} \mathfrak{F}_0 f), \quad z \notin [0, \infty), \quad f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx).$$

É fácil verificar que $R_0(z) \in B(L^2(\mathbb{R}^n, dx))$ e $\|R_0(z)\| \leq (\text{Im}z)^{-1}$. Além disso,

$$(2.25) \quad \begin{cases} (H_0 - z) R_0(z) f = f, & f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx) \\ R_0(z) (H_0 - z) f = f, & f \in D(H_0) \end{cases}$$

Em particular $u = R_0(z)f$ é a única solução do problema

$$(2.26) \quad \begin{cases} u \in D(H_0) \\ (H_0 - z)u = f, & f \notin [0, \infty) \end{cases}$$

Como veremos adiante, a solução deste problema ao longo do eixo real positivo é um dos ingredientes básicos da teoria de espalhamento. Agora, a questão análoga à parte (ii) do exercício (2.6) é mais complicada. É possível provar que

$$(2.27) \quad (R_0(z)f)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} R_0(x-y; z) f(y) dy$$

onde o núcleo do resolvente $R_0(x; z)$ pode ser expresso em termos de funções de Hankel ([36], [37], [38]). Felizmente a situação nos casos em que estaremos interessados é especialmente simples.

Exercício (2.7) - Use o teorema dos resíduos para provar que,

$$(2.28) \quad R_0(x; z) = \begin{cases} i(2\sqrt{z})^{-1} \exp(i\sqrt{z}|x|), & n=1 \\ (4\pi|x|)^{-1} \exp(i\sqrt{z}|x|), & n=3 \end{cases}$$

Vamos passar agora ao grupo unitário fortemente contínuo a um parâmetro associado a H_0 , a saber,

$$(2.29) \quad e^{-itH_0} f = (e^{-i|\cdot|^2} \hat{f})^\vee, \quad t \in \mathbb{R}, \quad f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx).$$

É claro que e^{-itH_0} é unitário para cada $t \in \mathbb{R}$ e em particular $\|e^{-itH_0}\| = 1$. De maneira análoga ao exercício (2.26) temos,

Exercício (2.8).

(i) Um grupo unitário fortemente contínuo a um parâmetro em um espaço de Hilbert \mathcal{H} é uma família de operadores unitários

$t \in \mathbb{R} \longrightarrow U(t)$ tal que

$$(2.30) \quad \begin{cases} U(t+t') = U(t) U(t') & U(0) = 1 \\ \lim_{t \rightarrow 0} U(t)f = f \end{cases}$$

para todo $t, t' \in \mathbb{R}$, $f \in \mathcal{H}$. Prove que e^{-itH_0} tem estas propriedades

(ii) Mostre que $\Psi(t) = e^{-itH_0} f$ é a única solução do problema de Cauchy para a equação de Schrödinger livre, i.e.,

$$(2.31) \quad \begin{cases} \Psi \in C(\mathbb{R}, D(H_0)) \cap C^1(\mathbb{R}, L^2(\mathbb{R}^n, dx)) \\ \frac{d\Psi}{dt} = H_0 \Psi, \quad t \in \mathbb{R} \\ \Psi(0) = f \in D(H_0) \end{cases}$$

Fisicamente, a solução $\Psi(t)$ obtida na parte (ii) do exercício acima descreve o comportamento de uma partícula livre (i.e., "isolada no universo") inicialmente no estado $\Psi(0) = f$. Formalmente, esta solução é muito parecida com a obtida no exercício (2.6) para a equação do calor: ambas são soluções de equações diferenciais ordinárias com coeficientes constantes (em um espaço de Hilbert) e portanto ambas devem ser dadas por exponenciais. No entanto, $\exp(-tH_0)$ é uma exponencial "rapidamente decrescente" (com $t > 0$) enquanto que $\exp(-itH_0)$ é uma exponencial complexa e portanto "oscilante". Estes comportamentos são

evidentemente muito diferentes. No entanto a comparação formal entre as duas soluções permite obter a fórmula correspondente àquela da parte (iii) do exercício (2.6). De fato, a mudança de variável $t \longleftrightarrow it$ leva $\exp(-tH_0)$ em $\exp(-itH_0)$ e vice-versa. Portanto é de se esperar que,

$$(2.32) \quad (e^{-itH_0} f)(x) = (4\pi it)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} \exp\left(-\frac{|x-y|^2}{4it}\right) f(y) dy.$$

Esta fórmula no entanto apresenta dificuldades. De saída é preciso fazer uma escolha apropriada para o ramo da raiz quadrada envolvida. Pior que isso é o fato que de maneira análoga à transformada de Fourier, a integral no lado direito de (2.32) faz sentido se $f \in L^1(\mathbb{R}^n, dx)$ mas não em geral para $f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx)$. De fato é possível provar que (2.32) vale em $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ e que é possível representar e^{-itH_0} como um "operador integral generalizado". De fato

Exercício (2.9) - Sejam $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ e $t \neq 0$. Então (2.32) vale com a escolha,

$$(2.33) \quad (4\pi it)^{-n/2} = |4\pi t|^{-n/2} = \begin{cases} \exp(-in\pi/4), & t > 0 \\ \exp(in\pi/4), & t < 0 \end{cases}$$

Para provar esse resultado é conveniente proceder em etapas. Em primeiro lugar, considere por simplicidade o caso $n = 1$.

(i) Seja $\alpha \in \mathbb{C}$ tal que $\text{Im} \alpha$ e $\text{Im} \sqrt{\alpha}$ são positivos. Mostre que

$$(2.34) \quad \left(\exp\left(-\frac{\alpha|\cdot|^2}{2}\right)\right)^\wedge(\xi) = \alpha^{-1/2} \exp\left(-\frac{|\xi|^2}{2\alpha}\right)$$

(compare com a parte (ii) do problema (2.6)).

(ii) A integral do lado direito de (2.32) está perfeitamente bem definida se $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, e portanto em particular para $f_a(x) = \exp(-(x-a)^2)$, $a \in \mathbb{R}$. Prove que (2.32) vale para toda f_a , $a \in \mathbb{R}$. Consequentemente (2.32) vale em \mathfrak{M} , a coleção de todas as combinações lineares finitas de funções da forma f_a .

(iii) Prove que \mathfrak{M} é denso em $L^2(\mathbb{R})$. (Sugestão: suponha que g é ortogonal a f_a para todo $a \in \mathbb{R}$. Use a identidade de Parseval para concluir que a transformada de Fourier da função $\overline{\hat{g}(\xi)} \exp(-\xi^2/4)$ é zero em todo $a \in \mathbb{R}$).

(iv) Prove que

$$(2.35) \quad e^{-itH_0} f = \lim_{k \rightarrow \infty} e^{-itH_0} f_k$$

na topologia de $L^2(\mathbb{R}, dx)$ onde $\{f_k\}_{k=1}^\infty \subset \mathfrak{M}$ é qualquer sequência tal que $f_k \xrightarrow{\mathfrak{M}} f$.

(v) Prove que se $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ (ou mais geralmente a $L^1(\mathbb{R}^n, dx) \cap L^2(\mathbb{R}^n, dx)$) então (2.32) é verdadeira. Mostre também que (iv) vale com \mathfrak{M} substituído por $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$.

(vi) Generalize a demonstração acima para o caso do \mathbb{R}^n .

(vii) Suponha que $f \in L^1(\mathbb{R}^n, dx)$. Então

$$(2.36) \quad \|e^{-itH_0}\|_{L^\infty} \leq |4\pi t|^{-n/2} \|f\|_{L^1}.$$

Neste ponto gostaríamos de observar que a motivação para (2.32) e o esquema de demonstração do exercício (2.9) são os adotados no Capítulo IX de [21] e no Capítulo 3 de [39]. Outro método pode ser encontrado em [11, vol II]. De posse dos resultados acima podemos apresentar agora o primeiro resultado sobre o comportamento assintótico das soluções da equação de Schrödinger, a saber, uma partícula livre escapa de qualquer subconjunto limitado do \mathbb{R}^n quando $t \rightarrow \pm\infty$.

Teorema (2.10) - Sejam $S \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto mensurável limitado e $f \in L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ (com $\|f\| = 1$ sem perda de generalidade). Então

$$(2.37) \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} P(t; S; f) = 0$$

onde $P(f; S; f)$ é a quantidade definida em (0.9).

Demonstração - Sejam $\epsilon > 0$ dado e $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ tal que $\|f-g\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} < \epsilon$. Então,

$$(2.38) \quad \begin{aligned} |P(t; S; f)| &= \int_S |(e^{-itH_0} f)(x)|^2 dx = \|e^{-itH_0} f\|_{L^2(S)}^2 \leq \\ &\leq (\|e^{-itH_0}(f-g)\|_{L^2(S)} + \|e^{-itH_0} g\|_{L^2(S)})^2 \leq \\ &\leq (\|f-g\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} + \|e^{-itH_0} g\|_{L^2(S)})^2. \end{aligned}$$

Devido a (2.38) temos,

$$(2.39) \quad \begin{cases} \|e^{-itH_0} g\|_{L^2(s)} = \int_s |(e^{-itH_0} g)(x)|^2 dx \leq \\ \leq |4\pi t|^{-n/2} \|g\|_{L^1} |s|, \quad t \in \mathbb{R} - \{0\} \end{cases}$$

onde $|s|$ denota a medida de Lebesgue do conjunto s . Conseqüentemente,

$$(2.40) \quad P(t;s;f) \leq (\epsilon + |4\pi t|^{-n/2} \|g\|_{L^1} |s|)$$

para todo $t \neq 0$. Portanto $P(t;s;f)$ pode ser feito arbitrariamente pequeno tomando $|t|$ suficientemente grande e o teorema está provado.

Q.E.D.

3. O teorema espectral.

"... I come to bury Ceasar, not to praise him ." [40]

Os objetivos desta seção consistem em enunciar o teorema espectral para um operador auto-adjunto em um espaço de Hilbert \mathfrak{H} (que daqui por diante suporemos separável exceto se feita menção em contrário; veja o exercício (3.5) e descrever algumas de suas conseqüências e ramificações que serão úteis no estudo do problema de Cauchy para a equação de Schrodinger. O teorema em questão, assim como a verdade, tem muitas faces. Para compreendê-las, é conveniente começar pela situação mais simples e cristalina, a saber o caso em que $\dim \mathfrak{H} < \infty$, ou seja

Teorema (3.1) - Seja \mathfrak{H} um espaço de Hilbert complexo com dimensão finita e $A: \mathfrak{H} \rightarrow \mathfrak{H}$ um operador auto-adjunto. Então existe uma base ortonormal de auto-vetores de A .

A demonstração do resultado acima é bem conhecida e pode ser encontrada em [41]. Vamos fazer agora uma série de comentários que nos levarão à formulação do teorema, em duas formas diferentes, no caso geral. Para começar, o significado do Teorema (3.1) é o seguinte: existe uma coleção $\{\phi_k\}_{k=1}^N$ de vetores linearmente independentes e números reais $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N$ tais que

$$(3.1) \quad (\phi_k | \phi_j) = \delta_{kj} = \begin{cases} 0, & k \neq j \\ 1, & k = j \end{cases}$$

$$(3.2) \quad A\phi_k = \lambda_k \phi_k, \quad k = 1, 2, \dots, N$$

e além disso o conjunto $\{\phi_k\}_{k=1}^N$, é completo no sentido que toda $f \in \mathfrak{H}$ pode ser escrita de maneira única na forma

$$(3.3) \quad f = \sum_{k=1}^N (f | \phi_k) \phi_k.$$

Utilizando então a linearidade de A obtém-se então a seguinte fórmula,

$$(3.4) \quad Af = \sum_{k=1}^N \lambda_k (f | \phi_k) \phi_k, \quad f \in \mathfrak{H}.$$

A equação (3.4) nos inspira imediatamente a definir funções do

operador A : seja $F: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ uma função. Então $F(A)$ é o operador definido por,

$$(3.5) \quad F(A) f = \sum_{k=1}^N F(\lambda_k) (f | \phi_k) \phi_k .$$

Observe que se $F(x) = x$ então $F(A) = A$. Três funções muito importantes são o resolvente de A ,

$$(3.6) \quad R_A(z)f = \sum_{k=1}^N \frac{(f | \phi_k)}{z - \lambda_k} \phi_k, \quad z \notin \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\},$$

o semigrupo gerado por A

$$(3.7) \quad e^{-itA} f = \sum_{k=1}^N e^{-\lambda_k t} (f | \phi_k) \phi_k$$

e o grupo gerado por A

$$(3.8) \quad e^{-itA} f = \sum_{k=1}^N e^{-i\lambda_k t} (f | \phi_k) \phi_k$$

Note que (3.6), (3.7) e (3.8) são as únicas soluções dos problemas,

$$(3.9) \quad (A-z)u = f, \quad z \notin \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$$

$$(3.10) \quad \frac{du}{dt} = -Au, \quad u(0) = f$$

$$(3.11) \quad i \frac{d\psi}{dt} = A\psi \quad u(0) = f.$$

Agora, seja \mathfrak{S} a coleção de todas as funções

$\varphi: \{1, 2, \dots, N\} \rightarrow \mathbb{C}$ munida do produto interno

$$(3.12) \quad (\varphi | \psi)_{\mathfrak{S}} = \sum_{k=1}^N \varphi(k) \overline{\psi(k)}.$$

Se $f \in \mathfrak{H}$, a transformada de Fourier de f (em relação ao conjunto ortonormal completo $\{\phi_k\}_{k=1}^N$) é a função $\hat{f} = \mathfrak{F}f \in \mathfrak{H}$ dada por,

$$(3.13) \quad \begin{aligned} \hat{f}: \{1, \dots, N\} &\rightarrow \mathbb{C} \\ k &\longmapsto \hat{f}(k) = (f | \phi_k) \end{aligned}$$

Fica portanto definida uma aplicação de \mathfrak{H} em \mathfrak{S} , a transformada de Fourier

$$(3.14) \quad \begin{aligned} \mathfrak{F}: \mathfrak{H} &\longrightarrow \mathfrak{S} \\ f &\longmapsto \hat{f} \end{aligned}$$

Se $\varphi \in \mathfrak{S}$ introduza a transformada inversa pela fórmula,

$$(3.15) \quad \mathcal{Q}\varphi = \check{\varphi} = \sum_{k=1}^N \varphi(k) \phi_k.$$

É claro que \mathcal{Q} leva \mathfrak{S} em \mathfrak{H} . Mais ainda, \mathfrak{F} e \mathcal{Q} são inver-sas uma da outra. De fato,

$$(3.16) \quad (\hat{f})^\vee = \sum_{k=1}^N \hat{f}(k) \phi_k = \sum_{k=1}^N (f | \phi_k) \phi_k = f$$

para toda $f \in \mathfrak{H}$ e

$$(3.17) \quad \left\{ \begin{aligned} (\check{\varphi})^\wedge(k) &= (\check{\varphi} | \phi_k) = \left(\sum_{j=1}^N \varphi(j) \phi_j | \phi_k \right) = \\ \sum_{j=1}^N \varphi(j) (\phi_j | \phi_k) &= \sum_{j=1}^N \varphi(j) f_{jk} = \varphi(k) \end{aligned} \right.$$

onde $k \in \{1, 2, \dots, N\}$. Portanto \mathfrak{F} é inversível e $\mathfrak{F}^{-1} = \mathfrak{G}$ como afirmado. Mas isto ainda não é tudo! Observe que se $f, g \in \mathfrak{H}$ então

$$(3.18) \quad \left\{ \begin{aligned} (\hat{f} | \hat{g})_{\mathfrak{Q}} &= \sum_{k=1}^N \hat{f}(k) \overline{\hat{g}(k)} = \sum_{k=1}^N (f | \phi_k) \overline{(g | \phi_k)} = \\ &= \sum_{k=1}^N (f | \phi_k) (\phi_k | g) = \sum_{k=1}^N ((f | \phi_k) \phi_k | g) = \\ &= \left(\sum_{k=1}^N (f | \phi_k) \phi_k | g \right) = (f | g). \end{aligned} \right.$$

Portanto a transformada de Fourier preserva o produto interno. Isto significa que ela é um operador unitário de \mathfrak{H} em \mathfrak{Q} (i.e., isometria (preserva norma) e sobre). Observe que a situação descrita acima é intrigantemente análoga à descrita na seção anterior para o caso da transformada de Fourier usual \mathfrak{F}_0 . É natural perguntar de que forma isso tudo se reflete no operador A . A resposta é muito simples: em termos de \mathfrak{F} e \mathfrak{F}^{-1} a fórmula (3.4) é a seguinte receita,

- (i) calcule a transformada de Fourier de f
- (ii) multiplique f pela função $\Lambda(k) = \lambda_k$, $k \in \{1, 2, \dots, N\}$

(iii) calcule a transformada inversa deste produto.

Colocando (i)-(iii) em símbolos, temos

$$(3.19) \quad Af = \mathfrak{F}^{-1} \Lambda \mathfrak{F} f.$$

O Teorema (3.1) diz portanto que o operador A é unitariamente equivalente a um operador de multiplicação no espaço \mathfrak{S} . Mais geralmente, o operador $F(A)$ é dado por

$$(3.20) \quad F(A)f = \mathfrak{F}^{-1} M_F \mathfrak{F} f$$

onde $M_F: \mathfrak{S} \rightarrow \mathfrak{S}$ é o operador de multiplicação por F , i.e., $(M_F \varphi)(k) = F(\lambda_k) \varphi(k)$. Note que a situação é exatamente a mesma que a encontrada na seção anterior quando definimos a hamiltonia na livre H_0 . Há, no entanto uma diferença crucial entre as duas situações. Se $\dim \mathfrak{H} = \infty$, existem (vastas quantidades de) operadores que não têm auto-funções no sentido usual. Na verdade o próprio H_0 tem essa propriedade. Considere o

Exercício (3.2) - Seja $A: D(A) \subset \mathfrak{H} \rightarrow \mathfrak{H}$. Um vetor $f \in D(A)$ é dito um auto-vetor de A pertencente ao auto-valor $z \in \mathbb{C}$ se e somente se $f \neq 0$ e $Af = zf$. O espaço gerado (i.e., a coleção de todas as combinações lineares finitas) por tais vetores é chamado o auto-espaço de A correspondentes ao auto-valor z . Sua dimensão é a multiplicidade do auto-valor z . A coleção de todos os auto-valores de A , denotada por $\Sigma_p(A)$, é chamada o espectro pontual de A .

(i) Prove que $\Sigma_p(A) \subseteq \Sigma(A)$.

(ii) Seja T_2 o operador do exercício (1.18). Prove que $\Sigma(T_2) = \Sigma_p(T_2) = 2\pi\mathbb{Z} = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid \lambda = 2\pi n, n \in \mathbb{Z}\}$ onde \mathbb{Z} é a coleção dos números inteiros.

(iii) Seja $\mathcal{H} = L^2(0,1)$ e $(Mf)(x) = xf(x)$, x q.t.p. . Prove que $M \in B(\mathcal{H})$, $\Sigma(M) = [0,1]$ e $\Sigma_p(M) = \{ \}$.

(iv) Prove que $\Sigma_p(H_0) = \{ \}$. (Sugestão. Mostre que $\Sigma_p(M_0) = \{ \}$ e use a transformada de Fourier \mathfrak{F}_0).

Apesar deste inquietante exercício, o teorema espectral vale de fato na "forma de operador de multiplicação" (veja o Capítulo VIII de [11, vol. I]),

Teorema (3.3) - Sejam \mathcal{H} um espaço de Hilbert e A um operador auto-adjunto em \mathcal{H} . Então existem um espaço com medida (X, \mathfrak{M}, μ) , um operador unitário $U: \mathcal{H} \rightarrow L^2(X, d\mu)$ e uma função mensurável $\mathfrak{f}: X \rightarrow \mathbb{R}$ (finita q.t.p.) tais que

$$(i) \psi \in D(A) \text{ se e só se } \mathfrak{f}(\cdot) \cup \psi \in L^2(X, d\mu)$$

$$(ii) A\psi = U^{-1} M_{\mathfrak{f}} \cup \psi, \quad \psi \in D(A)$$

onde $M_{\mathfrak{f}}$ é o operador maximal de multiplicação por \mathfrak{f} . Além disso (X, \mathfrak{M}, μ) pode sempre ser escolhido de modo que $\mu(X) < \infty$.

A hamiltoniana livre $H_0 = \mathfrak{F}_0^{-1} M_0 \mathfrak{F}_0$ ilustra claramente a situação descrita no resultado acima. Uma consequência simples é o cálculo funcional,

Exercício (3.4) - Seja $F: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ uma função de Borel limitada e defina,

$$(3.21) \quad F(A) = U^{-1} M_F U.$$

Prove que a aplicação $\Gamma: F \rightarrow F(A)$ tem as seguintes propriedades,

$$(i) \quad \Gamma(FG) = \Gamma(F) \Gamma(G), \quad \Gamma(\lambda F) = \lambda \Gamma(F)$$

$$\Gamma(1) = 1, \quad \Gamma(\bar{F}) = \Gamma(F)^*$$

$$(ii) \quad \|\Gamma(F)\|_{B(\mathbb{H})} \leq \|F\|_{L^\infty}$$

(iii) se $F_n(x) \rightarrow x$ pontualmente e $|F_n(x)| \leq |x|$ para todo $n \in \mathbb{N}$ e $x \in \mathbb{R}$. Então $\Gamma(F_n)f \xrightarrow{\mathbb{H}} Af$ para todo $f \in D(A)$.

(iv) se $F_n \rightarrow F$ pontualmente então $\Gamma(F_n)f \xrightarrow{\mathbb{H}} \Gamma(F)f$ para todo $f \in \mathbb{H}$

$$(v) \quad \text{se } Af = \lambda f \text{ então } \Gamma(F)f = F(\lambda)f.$$

Vamos descrever agora outra forma do teorema espectral que é talvez mais estranha que a anterior, mas de certa forma mais conveniente para nossos propósitos. O ponto de partida é de novo a fórmula (2.4). Note que se $f, g \in \mathbb{H}$ então,

$$(3.22) \quad \left\{ \begin{aligned} (Af | g) &= \sum_{k=1}^N \lambda_k (f | \phi_k) \overline{(g | \phi_k)} \\ &= \sum_{k=1}^N \int_{\mathbb{R}} \lambda (f | \phi_k) \overline{(g | \phi_k)} d_{\mu_{\lambda_k}}(\lambda) = \\ &= \int_{\mathbb{R}} \lambda \sum_{k=1}^N (f | \phi_k) \overline{(g | \phi_k)} d_{\mu_{\lambda_k}}(\lambda) \end{aligned} \right.$$

onde μ_{θ} denota a medida de Dirac concentrada em $\theta \in \mathbb{R}$, i.e.,

$$(3.23) \quad \mu_{\theta}(s) = \begin{cases} 1, & \theta \in S \\ 0, & \theta \notin S \end{cases}$$

para todo $S \in \mathbb{R}$. Note que o último membro da equação (3.22) é a integral da função $F(\lambda) = \lambda$ em relação à medida complexa $\nu_{f,g}$ dada por

$$(3.24) \quad \nu_{f,g}(S) = \int_S \sum_{k=1}^N (f | \phi_k) \overline{(g | \phi_k)} d_{\mu_{\lambda_k}}(\lambda)$$

e que para cada $S \subseteq \mathbb{R}$ fixo a aplicação $(f,g) \in \mathbb{H} \times \mathbb{H} \longrightarrow \longrightarrow \nu_{f,g}(S) \in \mathbb{C}$ é uma forma sesquilinear contínua. Existe portanto um único operador $E_A(S)$ tal que

$$(3.25) \quad (E_A(S)f | g) = \nu_{f,g}(S).$$

A função que a cada $S \subseteq \mathbb{R}$ faz corresponder o operador $E_A(S)$

é chamada a medida espectral associada ao operador A. Tendo em vista os comentários acima, é natural reescrever (3.22) na forma

$$(3.26) \quad (Af | g) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E_A(\lambda)f | g).$$

O teorema espectral na "forma integral" é simplesmente o fato a fórmula (3.26) vale em geral. Para enunciá-lo de maneira precisa é necessário introduzir o conceito de medida espectral no caso geral. Seja $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$ a coleção dos conjuntos de Borel da reta ($\mathfrak{B}(\mathbb{R})$ é a σ -álgebra gerada pelos abertos). Uma medida espectral é uma aplicação $E: \mathfrak{B}(\mathbb{R}) \rightarrow B(\mathfrak{H})$ ta que,

$$(3.27) \quad \left\{ \begin{array}{l} E(S) \text{ é uma projeção ortogonal para cada } S \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}), \\ \text{i.e., } E(S) = E(S)^2 \text{ e } E(S) = E(S)^* \end{array} \right.$$

$$(3.28) \quad E(\{\}) = 0, \quad E(\mathbb{R}) = 1$$

$$(3.29) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{se } S = \bigcup_{k=1}^{\infty} S_k, \quad S_k \cap S_j = \{\}, \quad k \neq j \\ \text{então} \\ E(S) = s\text{-}\lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^K E(S_k) \end{array} \right.$$

$$(3.30) \quad E(S_1 \cap S_2) = E(S_1) E(S_2)$$

onde $s\text{-}\lim_{k \rightarrow \infty}$ denota o limite forte da seqüência $\sum_{k=1}^K E(S_k)$. Este

conceito está definido no

Exercício (3.5).

(i) Um espaço de Hilbert \mathcal{H} é dito separável se e só se ele contém um conjunto enumerável denso. Prove que isto é equivalente à existência de um conjunto ortonormal completo (CONC) enumerável, i.e., uma coleção $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ tal que,

$$(3.31) \quad (\phi_k | \phi_j) = \delta_{kj} = \begin{cases} 0, & k \neq j \\ 1, & k = j \end{cases}$$

e todo vetor $f \in \mathcal{H}$ pode ser escrito na forma

$$(3.32) \quad f = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \phi_k$$

onde a série converge em relação à norma de \mathcal{H} . Note que os coeficientes de Fourier c_k (em relação ao CONC $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$) são dados por $c_k = (f | \phi_k)$ e a representação (3.32) é necessariamente única.

(ii) Uma seqüência $\{A_k\}_{k=1}^{\infty} \subset B(\mathcal{H})$ converge fortemente a $A \in B(\mathcal{H})$ (necessariamente!) se e só se $A_k f \xrightarrow{\mathcal{H}} Af$ para todo $f \in \mathcal{H}$. Nesse caso escreve-se $A_k \xrightarrow{s} A$ ou $A = s\text{-}\lim_{k \rightarrow \infty} A_k$. Prove que se $\{A_k\}_{k=1}^{\infty}$ converge a A na norma de $B(\mathcal{H})$ então $A_k \xrightarrow{s} A$.

(iii) A recíproca de (ii) é falsa. De fato seja $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ um

CONC e considere

$$(3.33) \quad p_k f = (f | \phi_k) \phi_k$$

$$(3.34) \quad P_K f = \sum_{k=1}^K p_k f .$$

Prove que P_K é uma projeção ortogonal para todo $K \in \mathbb{Z}^+ = \{1, 2, \dots\}$, i.e., $P_K^2 = P_K$ e $P_K^* = P_K$. Mostre além disso que

$$(3.35) \quad s\text{-}\lim_{K \rightarrow \infty} P_K = 1$$

mas não existe o limite na norma de $B(\mathfrak{H})$.

Observe agora, que se $f, g \in \mathfrak{H}$ então a aplicação $S \in \mathfrak{B}(\mathfrak{H}) \rightarrow (E(S)f|g)$ é uma medida complexa no sentido usual. Seja A o operador definido da seguinte forma,

$$(3.36) \quad \left\{ \begin{array}{l} D(A) = \{f \in \mathfrak{H} \mid \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d(E(\lambda)f|g) < \infty\} \\ (Af|g) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)f|g), \quad f \in D(A), \quad g \in \mathfrak{H} \end{array} \right.$$

Não é difícil verificar que A é um operador auto-adjunto. O teorema espectral na "forma integral" diz que todo operador auto-adjunto é desse tipo. Mais precisamente,

Teorema (3.6) - Seja $A: D(A) \subset \mathfrak{H}$ um operador auto-adjunto. Então existe uma única medida espectral E_A tal que

$$(3.37) \quad A = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, dE_A(\lambda)$$

É importante notar que a integral em (3.37) não faz absolutamente sentido algum. Esta equação é simplesmente uma notação simplificada para indicar (3.36). No entanto é possível formular o teorema espectral em termos de "integrais espectrais". Isto significa que é possível representar A na forma

$$(3.38) \quad Af = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, dE_A(\lambda)f, \quad f \in D(A)$$

onde a integral do lado direito de (3.38) deve ser interpretada como uma integral de Riemann-Stieltjes vetorial. O leitor interessado deve consultar [24, vol. II] e [27, vol. II].

Cabe agora perguntar qual é a relação entre as duas versões do teorema espectral apresentadas acima. A resposta é simples. Com a notação introduzida no Teorema (3.3) temos

$$(3.39) \quad E(S) = U^{-1} \chi_{\Phi^{-1}(S)} U$$

onde χ_B denota o operador de multiplicação pela função característica do conjunto $B \subseteq \mathbb{R}$. Em particular, no caso da hamiltoniana livre H_0 , o conjunto $\Phi^{-1}(S)$ é dado por

$$(3.40) \quad \Phi^{-1}(S) = \{\xi \in \mathbb{R} \mid |\xi|^2 \in S\}$$

e $U = \mathcal{F}_0$, a transformada de Fourier. Além disso no contexto

do Teorema (3.6) as funções do operador A são definidas da seguinte maneira,

$$(3.41) \quad \begin{cases} D(F(A)) = \{f \in \mathfrak{H} \mid \int_{\mathbb{R}} |F(\lambda)|^2 d(E(\lambda)f|f) < \infty\} \\ (F(A)f|g) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)f|g), \quad f, g \in \mathfrak{H}. \end{cases}$$

Deixaremos agora a cargo do leitor uma série de exercícios úteis e edificantes, que são muito importantes, tanto para a compreensão do teorema espectral quanto para as aplicações que temos em mente.

Exercício (3.7) - A função

$$(3.42) \quad \lambda \in \mathbb{R} \longrightarrow E_A(\lambda) = E_A((-\infty, \lambda])$$

é chamada a família espectral (contínua à direita: veja (3.45)) associada ao operador A . Daqui por diante, omitiremos o índice A e escreveremos simplesmente $E(\lambda)$ quando não houver possibilidade de confusão.

(i) Prove que

$$(3.43) \quad E(\lambda) \text{ é projeção ortogonal para todo } \lambda \in \mathbb{R}$$

$$(3.44) \quad \|E(\lambda)f\| \leq \|E(\mu)f\|, \quad \lambda \leq \mu, \quad f \in \mathfrak{H}$$

(ii) Prove que os limites $s\text{-}\lim_{\epsilon \downarrow 0} E(\lambda \pm \epsilon)$ existem para todo

$\lambda \in \mathbb{R}$ e além disso,

$$(3.45) \quad s\text{-}\lim_{\lambda \downarrow 0} E(\lambda + \epsilon) = E(\lambda)$$

Exercício (3.8) - Sejam A e $E_A(\lambda)$ como no exercício (2.7).

Prove que,

(i) auto-vetores pertencentes a auto-valores distintos são ortogonais.

(ii) $\Sigma_p(A)$ é no máximo infinitamente enumerável (lembre que estamos supondo que \mathbb{H} é separável).

(iii) $\lambda_0 \in \rho(A)$ se e só se $E_A(\lambda)$ é constante em alguma vizinhança aberta de λ_0 (portanto a família espectral varia apenas no espectro de A e a integral no Teorema (3.6) é sobre o conjunto $\Sigma(A)$).

(iv) um número real λ_0 é um auto-valor de A se e somente se $E(\lambda) - E(\lambda_0 - 0) \neq 0$ onde $E(\lambda_0 - 0) = s\text{-}\lim_{\epsilon \downarrow 0} E(\lambda_0 - \epsilon)$. Nesse caso, o operador $P(\lambda_0) = E(\lambda_0) - E(\lambda_0 - 0)$ é precisamente a projeção sobre o auto-espaço associado a λ_0 .

Exercício (3.9) - Um operador simétrico $A: D(A) \subset \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$ é dito positivo (resp. estritamente positivo) se é só se $(Af|f) \geq 0$ (resp. $(Af|f) > 0$) para todo $f \in \mathbb{H}$. Observe que isto permite introduzir uma relação de ordem no conjunto dos operadores: $A \geq B$ se e só se $D(B) \supseteq D(A)$ e $(A-B) \geq 0$

(i) Prove que $H_0 \geq 0$

(ii) Se $A = A^* \geq 0$ então $\Sigma(A) \subset [0, \infty)$. Além disso, a única solução do problema

$$(3.46) \quad \begin{cases} u \in C^1((0, \infty), \mathfrak{H}) \cap C((0, \infty), D(H_0)) \cap C([0, \infty), \mathfrak{H}) \\ \frac{du}{dt} = -Au, \quad t > 0 \\ u(0) = \phi \in \mathfrak{H} \end{cases}$$

é $u(t) = e^{-tA} \phi$ onde

$$(3.47) \quad (e^{-tA} f | g) = \int_0^\infty e^{-t\lambda} d(E(\lambda)f|g), \quad f, g \in \mathfrak{H}$$

(iii) Seja $A = A^*$. Então $u(t) = e^{-itA} \phi$ é a única solução do problema

$$(3.48) \quad \begin{cases} u \in C^1(\mathbb{R}, \mathfrak{H}) \cap C(\mathbb{R}, D(H_0)) \\ \frac{idu}{dt} = Au, \quad t \in \mathbb{R} \\ u(0) = \phi \in D(H_0) \end{cases}$$

onde

$$(3.49) \quad (e^{-itH_0} f | g) = \int_0^\infty e^{-it\lambda} d(E(\lambda)f|g), \quad f, g \in \mathfrak{H}$$

Neste caso a condição $A \geq 0$ não é necessária. Porque?

(iv) Prove que a condição $E(\lambda) \leq E(\mu)$, $\lambda \leq \mu$ é equivalente a (3.44).

Exercício (3.10).

(i) Verifique que a integral em (3.36) pode ser interpretada como uma integral de Riemann-Stieltjes em relação ao integrador

$$\theta_{f,g}^1(\lambda) = (E(\lambda)f|g).$$

(ii) Use as fórmulas (3.39) e (3.40) para provar diretamente o teorema (3.6) no caso da hamiltoniana livre H_0 .

(iii) Consulte [24, vol II] e/ou [27, vol. II] para se familiarizar com a versão vetorial do Teorema (3.6).

Exercício (3.11) - Um operador $A: \mathfrak{H} \rightarrow \mathfrak{H}$ é dito compacto se e só $A(S)$ é compacto em \mathfrak{H} para todo S limitado em \mathfrak{H} . A coleção destes operadores será denotada por $B_0(\mathfrak{H}, \mathfrak{H})$. Caso $\mathfrak{H} = \mathfrak{H}$ escreveremos $B_0(\mathfrak{H}) = B_0(\mathfrak{H}, \mathfrak{H})$. Prove que,

(i) $A \in B_0(\mathfrak{H}, \mathfrak{H})$ se e só se para toda seqüência limitada

$\{f_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \mathfrak{H}$, a seqüência $\{Af_k\}_{k=1}^{\infty}$ contém uma subsequência convergente

(ii) $B_0(\mathfrak{H}, \mathfrak{H}) \subset B(\mathfrak{H}, \mathfrak{H})$ e é um subespaço vetorial

(iii) produtos de operadores compactos com operadores limitados são compactos, (portanto $B_0(\mathfrak{H})$ é um ideal bi-lateral em $B(\mathfrak{H})$).

(iv) $A \in B_0(\mathbb{H})$ se e só se $A^* \in B_0(\mathbb{H})$

(v) se $\{A_k\}_{k=1}^{\infty} \subset B_0(\mathbb{H})$ é tal que $\|A_k - A\|_{B(\mathbb{H})} \rightarrow 0$ quando $k \rightarrow \infty$ então $A \in B_0(\mathbb{H})$.

(vi) todo operador de posto finito é compacto (lembro que A é de posto finito se e só se ele é da forma

$$(3.50) \quad Af = \sum_{k=1}^n \alpha_k \phi_k, \quad f \in \mathbb{H}$$

onde $\{\alpha_k\} \subset \mathbb{C}$ e $\{\phi_k\}_{k=1}^n$ é uma coleção fixa de vetores de \mathbb{H} .

(vii) todo $A \in B_0(\mathbb{H})$ pode ser aproximado por seqüência de operadores de posto finito na norma de $B_0(\mathbb{H})$

(viii) se $K \in L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n, dx dy)$ então o operador

$$(3.51) \quad (Af)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} K(x,y) f(y) dy$$

é compacto (A é chamado um operador de Hilbert-Schmidt). Além disso, $\|A\|_{B(\mathbb{H})} \leq \|K\|_{L^2}$.

Exercício (3.12) - Prove o teorema espectral para operadores compactos auto-adjuntos a saber, $\Sigma(A) - \{0\}$ é conjunto discreto de auto-valores de multiplicidade finita cujo único ponto de acumulação possível é zero. Além disso a totalidade dos auto-vetores de A forma um conjunto ortonormal completo enumerável.

Vamos introduzir agora certas decomposições de \mathbb{H} associadas ao operador $A = A^*$. Em primeiro lugar seja $\mathbb{H}_p(A)$ o subespaço puramente pontual associado a A , i.e., o fecho do espaço gerado pelos auto-vetores de A . Seu complemento ortogonal $\mathbb{H}_c(A)$ é chamado o subespaço puramente contínuo associado a A . Temos portanto uma primeira decomposição de \mathbb{H} , a saber, $\mathbb{H} = \mathbb{H}_p(A) \oplus \mathbb{H}_c(A)$. Para explorar esta decomposição um pouco mais e também para uso futuro é conveniente introduzir a seguinte definição: sejam \mathfrak{M} um subespaço fechado de \mathbb{H} e $T: D(T) \subset \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$ um operador linear. Diremos que \mathfrak{M} reduz T se e só se $PT \subset TP$ onde P denota a projeção ortogonal sobre \mathfrak{M} . Isto significa que se $f \in D(T)$ então $Pf \in D(T)$ e $TPf = P Tf$. Neste caso podemos restringir T de maneira natural a \mathfrak{M} para obter um operador $T_{\mathfrak{M}}: D(T) \cap \mathfrak{M} \subset \mathfrak{M} \rightarrow \mathfrak{M}$ chamado a parte T em \mathfrak{M} . Note que \mathfrak{M} reduz T se e só se \mathfrak{M}^\perp reduz T , uma vez que $(1-P)$ é a projeção sobre \mathfrak{M}^\perp . Com estas definições em mente temos,

Proposição (3.13) - $\mathbb{H}_p(A)$ e $\mathbb{H}_c(A)$ reduzem A .

Demonstração - Se $\dim \mathbb{H}_p(A) < \infty$ o resultado é evidente. Suponha portanto que $\mathbb{H}_p(A)$ tem dimensão infinita e sejam $f \in \mathbb{H}$ e $\{\phi_k\}_{k=1}^\infty$ conjunto ortonormal completo em $\mathbb{H}_p(A)$. Então a projeção ortogonal de f sobre $\mathbb{H}_p(A)$ é dada por,

$$(3.52) \quad P_p f = \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^K (f | \phi_k) \phi_k$$

onde o limite deve ser interpretado no sentido da norma de \mathbb{H} .

Agora, se $f \in \mathcal{H}$

$$(3.53) \quad \left\{ \begin{aligned} P_p Af &= \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^K (Af | \phi_k) \phi_k = \\ &= \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^K \lambda_k (f | \phi_k) \phi_k = \\ &= \lim_{K \rightarrow \infty} A \left(\sum_{k=1}^K (f | \phi_k) \phi_k \right) \end{aligned} \right.$$

Conseqüentemente se $f \in D(A)$ a seqüência

$$(3.54) \quad g_K = \sum_{k=1}^K (f | \phi_k) \phi_k$$

satisfaz $g_K \in D(A)$ para todo K e

$$(3.55) \quad g_K \xrightarrow{H} P_p f, \quad Ag_K \xrightarrow{H} P_p Af.$$

Como A é fechado segue $P_p f \in D(A)$ e $AP_p f = P_p Af$. Isto encerra a demonstração.

Q.E.D.

Exercício (3.14) - Prove que $f \in \mathcal{H}_c(A)$ se e só se a função $\lambda \in \mathbb{R} \rightarrow (E_A(\lambda)f | f)$ é contínua. Verifique este fato explicitamente no caso da hamiltoniana livre H_0 .

Vamos agora refinar a decomposição acima. Seja $\mathcal{H}_{ac}(A)$ a coleção das $f \in \mathcal{H}$ tais que a medida (positiva) é absolutamente

$$(3.56) \quad \mu_f(S) = (E_A(S)f \mid f), \quad S \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$$

contínua em relação à medida de Lebesgue. O conjunto $\mathcal{M}_{ac}(H)$ é evidentemente um subespaço vetorial de \mathcal{M} e é chamado o subespaço de continuidade absoluta associado a A. Isto significa que se $|S| = 0$ então $\mu_f(S) = 0$ onde $|\cdot|$ denota a medida de Lebesgue e portanto $E(S)f = 0$.

Teorema (3.15) - $\mathcal{M}_{ac}(A)$ é fechado e está contido em $\mathcal{M}_c(A)$. Além disso $\mathcal{M}_{ac}(A)$ reduz A.

Demonstração - Seja $f \in \overline{\mathcal{M}_{ac}(A)}$. Existe portanto $\{f_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \mathcal{M}_{ac}(A)$ tal que $f_k \xrightarrow{\mathcal{M}} f$. Mas então $\mu_{f_k}(S) \rightarrow \mu_f(S) = (E(S)f \mid f)$ para todo $S \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ fixo. De fato, temos

$$(3.57) \quad \begin{cases} (E(S)f_k \mid f_k) - (E(S)f \mid f) = \\ = (E(S)(f_k - f) \mid f_k) + (E(S)f \mid f_k - f) \end{cases}$$

de modo que,

$$(3.58) \quad |(E(S)f_k \mid f_k) - (E(S)f \mid f)| \leq \|f - f_k\|(\|f_k\| + \|f\|).$$

O lado direito de (3.58) tende a zero quando $k \rightarrow \infty$ e a afirmação está provada. Agora, se $|S| = 0$, então $\mu_{f_k}(S) = 0$ para todo k e portanto $\mu_f(S) = 0$. Isto mostra que $\mathcal{M}_{ac}(A)$ é fechado. A segunda afirmação segue do Exercício (3.14) tendo em vista que se $f \in \mathcal{M}_{ac}(A)$ então a função $\lambda \in \mathbb{R} \rightarrow (E(\lambda)f \mid f) = \mu_f((-\infty, \lambda])$

é absolutamente contínua. Para provar que $\mathfrak{H}_{ac}(A)$ reduz A , observe primeiro que $E(\lambda) P_{ac} = P_{ac} E(\lambda)$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}$. De fato, se $f \in \mathfrak{H}_{ac}(A)$ então

$$(3.59) \quad \mu_{E(\lambda)f}(S) = (E(S)E(\lambda)f | E(\lambda)f) = (E(\lambda)E(S)f | f)$$

de modo que $|S| = 0$ implica $E(S)f = 0$ e conseqüentemente $E(\lambda)f \in \mathfrak{H}_{ac}(A)$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}$. Mas então $E(\lambda)f = P_{ac}E(\lambda)f = E(\lambda)P_{ac}f$ quaisquer que sejam $\lambda \in \mathbb{R}$ e $f \in \mathfrak{H}_{ac}(A)$. Como $\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_{ac}(A) \oplus \mathfrak{H}_{ac}(A)^\perp$ e a projeção sobre $\mathfrak{H}_{ac}(A)^\perp$ é $(1 - P_{ac})$ segue que $E(\lambda)P_{ac} = P_{ac}E(\lambda)$, $\lambda \in \mathbb{R}$. Agora seja $f \in D(A)$. Então,

$$(3.60) \quad \|E(\lambda)P_{ac}f\|^2 = \|P_{ac}E(\lambda)f\|^2 \leq \|E(\lambda)f\|^2$$

e portanto

$$(3.61) \quad \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\|E(\lambda)P_{ac}\|^2 \leq \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 < \infty$$

ou seja $P_{ac}f \in D(A)$. Além disso,

$$(3.62) \quad \left\{ \begin{aligned} (A P_{ac} f | g) &= \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda) P_{ac} f | g) = \\ &= \int_{\mathbb{R}} \lambda d(P_{ac} E(\lambda) f | g) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda) f | P_{ac} g) = \\ &= (A f | P_{ac} g) = (P_{ac} A f | f) \end{aligned} \right.$$

para toda $g \in \mathfrak{H}$ e o teorema está provado.

Q.E.D.

Temos portanto a seguinte decomposição do espaço de Hilbert \mathfrak{H} .

$$(3.62) \quad \mathfrak{H} = \mathfrak{H}_p(A) \oplus \mathfrak{H}_c(A) = \mathfrak{H}_p(A) \oplus \mathfrak{H}_{ac}(A) \oplus \mathfrak{H}_{sc}(A)$$

onde $\mathfrak{H}_{sc}(A)$ é o complemento ortogonal de $\mathfrak{H}_{ac}(A)$ em $\mathfrak{H}_c(A)$. A estes três subespaços correspondem as partes puramente pontual, absolutamente contínua e singularmente contínua do operador A , que denotaremos por A_p , A_{ac} e A_{sc} . É fácil ver que os operadores

$$(3.63) \quad A_\alpha: D(A) \cap \mathfrak{H}_\alpha \subset \mathfrak{H}_\alpha \longrightarrow \mathfrak{H}_\alpha, \quad \alpha = p, ac, sc$$

são auto-adjuntos. Além disso a medida espectral associada a cada um deles é simplesmente $E_{A_\alpha} = P_\alpha E_A$. O espectro absolutamente contínuo (resp. singularmente contínuo) de A é o conjunto $\Sigma_{ac}(A) = \Sigma(A_{ac})$ (resp. $\Sigma(A_{sc})$). É importante notar no entanto que $\Sigma_p(A)$ é em geral diferente de $\Sigma(A_p)$ pois este último conjunto é sempre fechado, o que não é necessariamente verdade no caso de $\Sigma_p(A)$ (considere por exemplo um operador compacto, auto-adjunto e injetivo). No entanto é possível provar que $\Sigma(A_p) = \overline{\Sigma_p(A)}$.

Exercício (3.16)

(i) Prove que

$$(3.64) \quad \Sigma(A) = \overline{\Sigma_p(A)} \cup \Sigma_{ac}(A) \cup \Sigma_{sc}(A)$$

(ii) Seja $\mathfrak{H} = \mathbb{C} \oplus L^2([0,1])$ e considere a aplicação $A: \mathfrak{H} \rightarrow \mathfrak{H}$ dada por $A(\alpha, f) = (\frac{\alpha}{2}, Mf)$ onde $M: L^2([0,1]) \rightarrow L^2([0,1])$ é o operador de multiplicação $(Mf)(x) = xf(x)$, x q.t.p. . Prove $\Sigma(M) = \Sigma_{ac}(M) = [0,1]$. Além disso $\Sigma(A) = [0,1]$, mas o vetor $(1 \oplus 0)$ é auto-vetor de A com auto-valor $1/2$. Este exemplo mostra que os conjuntos no lado direito de (3.64) não são necessariamente disjuntos. Nesse sentido ela não é uma boa decomposição do espectro.

Um operador auto-adjunto A é dito puramente pontual (resp. absolutamente contínuo, singularmente contínuo) se e só se $A = A_p$ (resp. A_{ac} , A_{sc}).

Exercício (3.17)

(i) Verifique o operador T_2 do exercício (1.18) é puramente pontual.

(ii) Prove que H_0 é absolutamente contínuo.

(iii) Mais geralmente, seja $(M_F f)(x) = F(x) f(x)$ o operador maximal de multiplicação por $F(x)$ no espaço $L^2(S, dx)$ onde $S \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto mensurável. Prove que se $F(x)$ é real, continuamente diferenciável e $\text{grad } F \neq 0$ q.t.p. em S então M_F é auto-adjunto e absolutamente contínuo.

(Sugestão: Considere a hipersuperfície $\Omega_\mu = \{x \in S \mid F(x) = \mu\}$ e use o fato que $dx = \|\text{grad } F\|^{-1} d\Omega_\mu d\mu$ onde $d\Omega_\mu$ é o elemento de área de Ω_μ).

A parte singularmente contínua do operador A assim como seu espectro são muito mais complicados do que seus correspondentes absolutamente contínuo e puramente pontual e não tem, ao contrário destes últimos, interpretação física em teoria de espalhamento. Felizmente nas aplicações que seguem os operadores em questão não tem parte singularmente contínua. Infelizmente porém, como veremos este é um fato muito difícil de provar. Para reforçar este comentário deve-se notar que é possível construir operadores diferenciais (de segunda ordem!) cujo espectro contém parte singularmente contínua ([42], [43]).

4. O teorema de Kato-Rellich

O objetivo desta seção é indicar as definições e resultados básicos da teoria de perturbações que utilizaremos nos próximos capítulos. O leitor interessado em maiores detalhes deve consultar [11, vol II], [21] e [44] (no qual foi baseado grande parte do que segue).

Em primeiro lugar, a idéia fundamental envolvida em teorema de perturbações consiste em estudar o que ocorre a um certo objeto (por exemplo um operador fechado) quando adicionamos a ele alguma outra quantidade. Uma pergunta crucial consiste em saber se as propriedades do objeto inicial são mantidas sob a perturbação. Por exemplo,

Exercício (4.1) - Seja H um espaço de Hilbert (não-necessariamente separável). Prove que

(i) se $A \in B(\mathbb{H})$ e $\|A\| < 1$ então $(1-A)$ é inversível e seu inverso é dado pela série de Neumann.

$$(4.1) \quad (1-A)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} A^n = 1 + A + A^2 + \dots$$

onde a série converge na norma de $B(\mathbb{H})$. Além disso,

$$(4.2) \quad \|(1-A)^{-1}\| \leq (1 - \|A\|)^{-1}$$

(ii) se $A, B \in B(\mathbb{H})$, A^{-1} existe e $\|B\| \leq \|A^{-1}\|^{-1}$ então $(A+B)$ também é inversível. Em particular a coleção dos elementos inversíveis em \mathbb{H} é um aberto.

Este exemplo indica que a quantidade a ser somada deve ser uma "perturbação pequena" do objeto original para que as propriedades iniciais sejam mantidas. No caso de operadores auto-adjuntos (e em particular $(-A + V)$) é conveniente introduzir o seguinte conceito de pequenez conhecido como as condições de Kato-Rellich. Sejam A e B operadores lineares em \mathbb{H} . Então B é dito A-limitado (ou limitado em relação a A) se e só se

$$(4.3) \quad D(B) \supseteq D(A)$$

e existem $\alpha, \beta \geq 0$ tais que

$$(4.4) \quad \|B f\| \leq \alpha \|f\| + \beta \|A f\|, \quad f \in D(A).$$

O número,

$$(4.5) \quad \beta_0 = \inf\{\beta \mid (4.4) \text{ vale}\}$$

é chamado a A-cota de B.

Exercício (4.2) - Seja A fechado e B um operador A-limitado. Prove que,

(i) $\mathfrak{D} = (D(A), [\cdot | \cdot])$ é um espaço de Hilbert onde $[\cdot | \cdot]$ é o produto interno definido por

$$(4.6) \quad [f | g] = (f | g) + (Af | Ag), \quad f, g \in D(A)$$

(ii) $B \in B(\mathfrak{D}, \mathfrak{H})$.

É interessante notar que (4.3) e (4.4) não são inteiramente independentes. De fato, a condição de Kato-Rellich (i.e., (4.3) e (4.4)) é essencialmente uma condição de inclusão de domínios. De fato,

Proposição (4.3) - Sejam A e B operadores fechados em \mathfrak{H} tais que $D(A) \subseteq D(B)$ e $\rho(A) \neq \{ \}$. Então vale a relação (4.4).

Demonstração - Seja $z \in \rho(A)$. Então $B(A-z)^{-1}$ está bem definido (no espaço inteiro) uma vez que $D(A) \subseteq D(B)$ e $(A-z)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$. Vamos provar primeiro que $B(A-z)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$. Devido ao

teorema do gráfico fechado (veja [21], [25], [26], [28]) basta provar que $B(A-z)^{-1}$ é fechado. Para isso seja $\{f_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \mathbb{H}$ tal que

$$(4.7) \quad \begin{cases} f_k \xrightarrow{\mathbb{H}} g \\ B(A-z)^{-1} f_k \xrightarrow{\mathbb{H}} g \end{cases}$$

Como $(A-z)^{-1} \in B(\mathbb{H})$ temos,

$$(4.8) \quad \begin{cases} (A-z)^{-1} f_k \xrightarrow{\mathbb{H}} (A-z)^{-1} f \\ B(A-z)^{-1} f_k \xrightarrow{\mathbb{H}} g \end{cases}$$

Mas B é fechado e portanto $(A-z)^{-1}f \in D(B)$ e $B(A-z)^{-1}f = g$. Conseqüentemente $B(A-z)^{-1}$ é fechado e nossa afirmação está provada. Agora observe que qualquer que seja $z \in \rho(A)$ e $f \in D(A)$ temos

$$(4.9) \quad \begin{aligned} \|Bf\| &= \|B(A-z)^{-1}(A-z)f\| \leq \\ &\leq |z| \|B(A-z)^{-1}\| \|f\| + \|B(A-z)^{-1}\| \|Af\| \end{aligned}$$

e portanto (4.4) vale com $\alpha = |z| \|B(A-z)^{-1}\|$ e $\beta = \|B(A-z)^{-1}\|$.

Q.E.D.

Note que a fórmula (4.9) indica que α e β não são independentes em geral. Tipicamente β cresce quando α decresce. Mais adiante voltaremos a esse tema. Além disso,

Exercício (4.4) - Prove que,

(i) se $B \in B(\mathcal{H})$ então B é A -limitado (qualquer que seja A) com A cota igual a zero.

(ii) (4.4) é equivalente a: existem $\alpha', \beta' \geq 0$ tais que

$$(4.10) \quad \|B f\|^2 \leq \alpha'^2 \|f\|^2 + \beta'^2 \|A f\|^2, \quad f \in D(A)$$

e além disso $\beta_0 = \inf\{\beta' \mid (4.10) \text{ vale}\}$.

(Sugestão: Para provar (4.10) \implies (4.4) observe que

$$(\eta^{-1/2} \alpha \|f\| - \eta^{1/2} \beta \|A f\|)^2 = \eta^{-1} \alpha^2 \|f\|^2 + \eta \beta^2 \|A f\|^2 - 2\alpha\beta \|A f\| \geq 0$$

para todo $\eta > 0$ e tome o quadrado de (4.4) para escolher α' e β' em termos de α, β e η . Use esta escolha para provar a última afirmação.)

A Proposição (4.3) indica já a esta altura que o operador $B(A-z)^{-1}$ deve ser um dos objetos fundamentais da teoria que estaremos desenvolvendo. Em relação a isso é interessante notar que,

Exercício (4.5) - Seja A um operador auto-adjunto (por simplicidade). Então as seguintes afirmações são equivalentes

(a) B é A -limitado

(b) $B(A-z)^{-1} \in B(\mathcal{H})$ para algum $z \in \rho(A)$

(c) $B(A-z)^{-1} \in B(\mathcal{H})$ para todo $z \in \rho(A)$

Além disso a A-cota de B é menor do que um se e só se existe $z \in \rho(A)$ tal que $\|B(A-z)^{-1}\| < 1$.

Podemos agora considerar o tema central desta seção, a saber, o teorema de Kato-Rellich. Por conveniência vamos dividi-lo em duas partes. A primeira delas é o

Teorema (4.6).- (Kato-Rellich parte I).- Sejam $A = A^*$ e B um operador simétrico A-limitado com A-cota menor que 1. Então $(A+B)$ é auto adjunto em $D(A+B) = D(A)$. Além disso se A é limitado inferiormente (i.e., existe M tal que $A \geq M$ no sentido do Exercício (3.9)) então $A+B$ também tem esta propriedade.

Demonstração - É claro que $(A+B)$ é um operador simétrico em $D(A)$. Para provar que ele é auto-adjunto vamos utilizar o Teorema (1.20) (na forma descrita no Exercício (1.21)). Mais precisamente mostraremos que $\mathcal{R}(A+B \pm i \mu_0) = \mathcal{H}$ para algum $\mu_0 \in (0, \infty)$. Para isso observe primeiro que

$$(4.11) \quad (A+B \pm i \mu) = (1+B(A \pm i \mu)^{-1})(A \pm i \mu)$$

para todo $\mu > 0$. Mas $\mathcal{R}(A \pm i \mu) = \mathcal{H}$ uma vez que $A = A^*$. Basta portanto provar que podemos escolher $\mu_0 > 0$ tal que $(1+B(A \pm i \mu_0)^{-1})$ é sobre \mathcal{H} . Como B é A-limitado com A-cota menor que um podemos escolher $\alpha > 0$ e $\beta \in (0, 1)$ tais que,

$$(4.12) \quad \|B(A \pm i \mu)^{-1} \psi\| \leq \alpha \| (A \pm i \mu)^{-1} \psi \| + \beta \| A(A \pm i \mu)^{-1} \psi \|$$

para toda $\psi \in \mathcal{H}$, uma vez que $\mathcal{R}((A \pm i\mu)^{-1}) = D(A)$. Agora, aplicando o teorema espectral é fácil ver que

$$(4.13) \quad \|(A \pm i\mu)^{-1}\| \leq \mu^{-1}, \quad \|A(A \pm i\mu)^{-1}\| \leq 1.$$

Portanto,

$$(4.14) \quad \|B(A \pm i\mu)^{-1}\| \leq (\beta + \frac{\alpha}{\mu})$$

Como $\beta < 1$ podemos escolher $\mu_0 > 0$ tal que $\|B(A \pm i\mu_0)^{-1}\| < 1$. O exercício (4.1) implica então que $(1 + B(A \pm i\mu_0)^{-1})$ é inversível. Segue portanto que $(A+B) = (A+B)^*$ em $D(A+B) = D(A)$.

Para mostrar a segunda afirmação vamos usar o fato que se T é um operador auto-adjunto então $T > \lambda_0$ se e só se $\rho(T) \supset (-\infty, \lambda_0]$, (verifique!). Tendo em vista esta observação, basta provar que,

$$(4.15) \quad (A+B-\lambda) = (1+B(A-\lambda)^{-1})(A-\lambda).$$

é inversível para $\lambda < 0$ suficientemente grande. Por hipótese $A \geq M$ para algum $M \in \mathbb{R}$. Portanto $(A-\lambda)^{-1} \in B(\mathcal{H})$ para todo $\lambda < M$. Estimativas análogas às da primeira parte desta demonstração revelam que $\|B(A-\lambda)^{-1}\| < 1$ para todo λ suficientemente negativo. Por tanto existe $\lambda_0 < 0$ tal que $(A+B-\lambda)^{-1}$ existe e pertence a $B(\mathcal{H})$ para todo $\lambda \leq \lambda_0$. Conseqüentemente $(-\infty, \lambda_0] \subset \rho(A+B)$ e $A+B > \lambda_0$.

Q.E.D.

Exercício (4.7)

(i) Se B é A -limitado com A -cota menor que um então B é $(A+B)$ limitado.

(ii) De um exemplo mostrando que a $(A+B)$ cota de B em geral não é menor que um.

(Sugestão: $B = -\frac{3}{4}A$, $A = A^*$ qualquer.)

(iii) Se a A -cota de B é menor que $1/2$ então a $(A+B)$ cota de B é menor que um.

Nosso próximo objetivo é dar condições suficientes para a validade das condições do teorema (4.6) que possam ser facilmente verificadas na prática. Para isso é preciso alguma preparação. Sejam $A = A^*$ e $B \subseteq B^*$ tais que $D(A) \subseteq D(B)$. Então B é dito relativamente compacto com respeito a A ou simplesmente A -compacto se e só se $B(A-z)^{-1} \in B_0(\mathbb{H})$ para algum $z \in \rho(A)$. Tendo em vista a primeira equação do resolvente (veja o exercício (1.26)), esta condição é equivalente a $B(A-z)^{-1} \in B_0(\mathbb{H})$ para todo $z \in \rho(A)$. É claro que se B é A -compacto então B é A -limitado. O fato importante sobre um operador A -compacto é que sua A -cota é igual a zero! Para provar este fato precisaremos utilizar o

Exercício (4.8) - Seja $K \in B_0(\mathbb{H})$ e $\{S_k\}_{k=1}^{\infty} \subset B(\mathbb{H})$ tal que $\{S_k^*\}_{k=1}^{\infty}$ converge fortemente a um operador S^* . Então

$$KS \xrightarrow{B(\mathbb{H})} KS.$$

Observação: Este problema é difícil. Referência: seção (8.4) de [44].

Teorema (4.9) - Sejam $A = A^*$ e B um operador A -compacto. Então a A -cota de B é zero.

Demonstração - Sem perda de generalidade podemos supor que $B(A-i)^{-1}$ é compacto. Utilizando o cálculo funcional associado a A (veja o Exercício (3.4) e a equação (3.41)) é fácil verificar que $\|(A+i)(A+ik)^{-1}\| \leq 1$ para todo $k \in \mathbb{Z}^+$ e

$$(4.16) \quad s\text{-}\lim_{k \rightarrow \infty} (A+i)(A+ik)^{-1} = 0.$$

Mas,

$$(4.17) \quad B(A-ik)^{-1} = B(A-i)^{-1}[(A+i)(A+ik)^{-1}]^*.$$

Portanto $B(A-ik)^{-1}$ tende a zero na norma de $B(\mathbb{H})$ quando $t \rightarrow \infty$. O resultado segue então de (4.3) com $z = ik$, $k \in \mathbb{Z}^+$. Q.E.D.

O último ingrediente necessário para a segunda parte do teorema de Kato-Rellich é o

Exercício (4.9) - Seja $A = A^*$ com família espectral $E(\cdot)$. O espectro discreto de A , denotado por $\Sigma_p(A)$, é a coleção dos pontos $\lambda \in \Sigma(A)$ tais que $\mathcal{R}(E(\{\lambda\}))$ tem dimensão finita. O espectro essencial de A é o complemento de $\Sigma_p(A)$ em $\Sigma(A)$.

Portanto $\Sigma(A) = \Sigma_d(A) \cup \Sigma_e(A)$. Prove que,

(i) $\Sigma_d(A)$ é exatamente a coleção dos auto-valores isolados de multiplicidade finita.

(Sugestão: use o Exercício (3.8).

(ii) $\Sigma_e(A)$ é fechado.

(iii) $\mu \in \Sigma(A)$ se e só se $\mathfrak{R}(E(\mu-\eta, \mu+\eta)) \neq \{0\}$ para todo $\eta > 0$

(iv) $\mu \in \Sigma_e(A)$ se e só se existe $\{f_k\}_{k=1}^\infty \subset D(A)$ tal que $\|f_k\| = 1$ para todo k e

$$(4.18) \quad \omega\text{-}\lim_{k \rightarrow \infty} f_k = 0$$

$$(4.19) \quad s\text{-}\lim_{k \rightarrow \infty} (A - \mu)f_k = 0$$

onde $\omega\text{-}\lim_{k \rightarrow \infty} g_k$ denota o limite fraco da seqüência $\{g_k\}_{k=1}^\infty \subset \mathfrak{H}$ (i.e., $g = \omega\text{-}\lim_{k \rightarrow \infty} g_k$ se e só se $(g_k | \varphi) \rightarrow (g | \varphi)$ para toda $\varphi \in \mathfrak{H}$ quando $k \rightarrow \infty$).

(Sugestão: suponha que $\mu \in \Sigma_e(A)$ e seja $I_k = (\mu-1/k, \mu+1/k)$.) Use

(iii) para construir seqüência ortonormal infinita $\{f_k\}_{k=1}^\infty$ com $f_k \in \mathfrak{H}_k = \mathfrak{R}(E(I_k))$ para todo k . Para a recíproca sejam μ e

$\{f_k\}_{k=1}^\infty$ como em (iv) e considere $I = (a, b) \ni \mu$. Prove que

$\|E(I)f_k\| \rightarrow \|f_k\| = 1$ quando $k \rightarrow \infty$ e use (iii) lembrando que em dimensão finita as convergências forte e fraca são equivalen-

tes. Referência: seção (5.6) de [44].)

Finalmente,

Teorema (4.10). (Kato-Rellich parte II) - Seja $A = A^*$ e suponha que $B \subseteq B^*$ é A -compacto. Então $\Sigma_e(A+B) = \Sigma_e(A)$.

Demonstração - Suponha que $\mu \in \Sigma_e(A)$. Existe portanto seqüência $\{f_k\}_{k=1}^\infty$, como em (iv) do Exercício (4.9). Então, para qualquer $z \in \rho(A)$ a seqüência

$$(4.20) \quad (A-z)f_k = (A-\mu)f_k + (\mu-z)f_k$$

converge fracamente a zero. Logo,

$$(4.21) \quad \begin{cases} (A+B-\mu)f_k = (A-\mu)f_k + Bf_k = \\ = (A-\mu)f_k + B(A-z)^{-1}(A-z)f_k \end{cases}$$

converge a zero na norma de H pois $B(A-z)^{-1}$ é compacto (e operadores compactos transformam seqüências fracamente convergentes em seqüências convergentes na norma; veja o Capítulo VI de [11; vol I]). Conseqüentemente $\mu \in \Sigma_e(A+B)$. Portanto $\Sigma_e(A) \subseteq \Sigma_e(A+B)$. Para provar a contenção contrária, seja $\mu_0 > 0$ o número real positivo escolhido na demonstração do teorema (4.6) de modo que $\|B(A \pm i\mu_0)^{-1}\| < 1$. Então a equação (4.11) com $\mu = \mu_0$ implica que,

$$(4.22) \quad (A+B \pm i\mu_0)^{-1} = (A \pm i\mu_0)^{-1}(1+B(A \pm i\mu_0)^{-1})^{-1}$$

e portanto $B(A+B \pm i\mu_0)^{-1}$ é compacto ou seja B é $(A+B)$ -compacto. Trocando os papéis de A e $(A+B)$ no argumento acima segue que $\Sigma_e(A+B) \subseteq \Sigma_e(A)$. Isto encerra a demonstração.

Q.E.D.

Os resultados acima têm as seguintes importantes consequências,

Teorema (4.11) - Seja $V(x)$ uma função mensurável real tal que

$$(4.23) \quad \begin{cases} V(x) = V_1(x) + V_2(x) \\ V_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^3), \quad V_2 \in L^2(\mathbb{R}^3) \end{cases}$$

onde $L^\infty(\mathbb{R}^3)$ denota a coleção das $f \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ que tendem a zero no infinito, i.e., dado $\epsilon > 0$, existe $M > 0$ tal que

$$(4.24) \quad |f(x)| < \epsilon \quad \text{q.t.p.} \quad |x| \geq M.$$

Então operador maximal de multiplicação por $V(x)$, denotado por V , é H_0 -compacto. Portanto $H = H_0 + V$ é auto-adjunto em $D(H_0)$ e

$$(4.25) \quad \Sigma_e(H) = \Sigma_e(H_0) = [0, \infty).$$

Demonstração - Basta provar que $VR_0(z)$, $z \notin [0, \infty)$, é compacto. Tendo em vista o Exercício (2.7) $VR_0(z)$ é operador integral com núcleo,

$$(4.26) \quad K(x, y) = \frac{V(x) \exp(i\sqrt{z}|x-y|)}{4\pi|x-y|}$$

onde $\text{Im } \sqrt{z} > 0$. Suponha primeiro que $V \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Então, aplicando a parte (viii) do Exercício (3.11)

$$\begin{aligned}
 & \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_{\mathbb{R}^3} dy |K(x,y)|^2 = \\
 (4.27) \quad & = \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_{\mathbb{R}^3} dy \frac{|V(x)|^2 \exp(-2\text{Im}\sqrt{z}|x-y|)}{(4\pi)^2 |x-y|^2} \\
 & = (4\pi)^2 \|V\|_{L^2}^2 \| |\cdot|^{-2} \exp(-2\text{Im}\sqrt{z}|\cdot|) \|_{L^1} < \infty
 \end{aligned}$$

ou seja com $V \in L^2(\mathbb{R}^3)$ o operador $V R_0(z)$ é de Hilbert-Schmidt e portanto compacto.

Agora suponha que $V \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Então, dado $\epsilon > 0$ existe $M = M(\epsilon)$ tal que $|V(x)| \leq \epsilon$, q.t.p. se $|x| \geq M$. Seja

$$(4.28) \quad V_\epsilon(x) = \begin{cases} V(x), & |x| \leq M(\epsilon) \\ 0, & |x| > M(\epsilon) \end{cases}$$

Segue então que

$$(4.29) \quad \|V R_0(z) - V_\epsilon R_0(z)\| \leq \|V - V_\epsilon\|_{L^\infty} \|R_0(z)\| \leq \epsilon \|R_0(z)\|$$

Conseqüentemente o operador $V R_0(z)$ pode ser aproximado na norma de $B(L^2(\mathbb{R}^3))$ por operadores da forma $V_\epsilon R_0(z)$ que são compactos pois $V_\epsilon \in L^2(\mathbb{R}^3)$ para todo $\epsilon > 0$. Isto encerra a de-

monstração.

Q.E.D.

Corolário (4.12) - Seja $V_c(x) = C|x|^{-1}$ o potencial Coulombiano (C é uma constante real). Então V_c satisfaz as hipóteses do teorema (4.11) e portanto $H = H_0 + V_c$ é auto-adjunto em $D(H_0)$. Além disso vale (4.25).

Demonstração - Sejam

$$(4.30) \quad V_1(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq 1 \\ V_c(x), & |x| > 1 \end{cases}$$

$$(4.31) \quad V_2(x) = \begin{cases} V_c(x), & |x| \leq 1 \\ 0, & |x| > 1 \end{cases}$$

Então é claro que $V_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$, $V_2 \in L^2(\mathbb{R}^3)$ e $V_c = V_1 + V_2$.

Q.E.D.

CAPÍTULO II

EXISTÊNCIA DE SOLUÇÕES

O objetivo deste capítulo consiste essencialmente em descrever uma teoria de existência de soluções para o problema (1.1) que seja suficientemente geral de modo a englobar todas as aplicações de interesse. A maior parte do que segue é devida a T. Kato ([1], [2]), cujas idéias e resultados serão descritos no caso especial da equação de Schrodinger. É importante notar no entanto que a teoria apresentada a seguir difere muito pouco do caso geral, i.e., daquela referente às chamadas equações de evolução de tipo "hiperbólico". Em particular as simplificações obtidas a partir da hipótese $A(t) = A(t)^*$ são muito poucas de modo que as considerações abaixo fornecem um retrato bastante fiel da situação geral.

1. A teoria de T. Kato

Vamos considerar aqui a construção de soluções do problema de Cauchy

$$(1.1) \quad i \frac{d\psi}{dt} = A(t) \psi(t), \quad \psi(0) = \psi_0$$

onde $t \in [0, T]$, $T > 0$ e $A(t)$ é um operador auto-adjunto no espaço de Hilbert \mathcal{H} . Como mencionado na introdução a questão de unicidade é trivial. Além disso, é conveniente descrever a solu-

ção em termos de um propagador, i.e., uma família a dois parâmetros de operadores unitários $(t, t') \mapsto U(t, t')$ tais que

$$(1.2) \quad U(t, t'') U(t'', t') = U(t, t')$$

$$(1.3) \quad U(t, t) = 1$$

para todo $t, t' \in \mathbb{R}$ e

$$(1.4) \quad (t, t') \mapsto U(t, t') \text{ é fortemente contínua.}$$

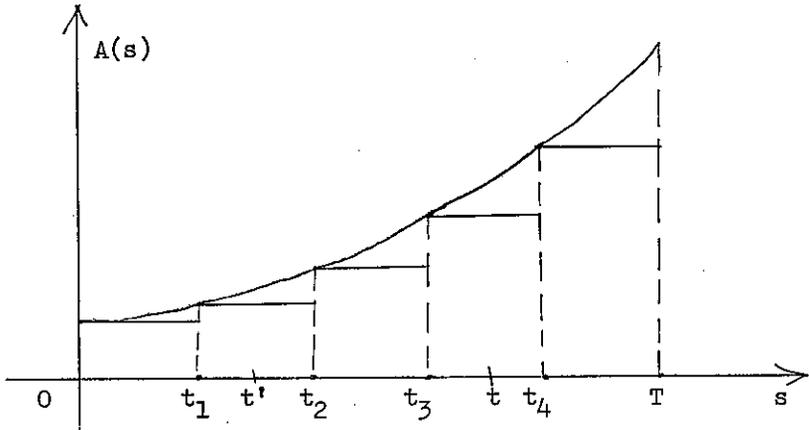
Seguindo então as idéias de T. Kato vamos procurar construir um propagador que resolva a equação diferencial em (1.1). O ingrediente básico envolvido é a implementação do método de Cauchy para equações diferenciais ordinárias para o caso em questão. Isto consiste em aproximar $A(t)$ por funções degrau, construir os propagadores correspondentes e tomar limites. Seja então $A(t)$ como em (1.1) e introduza a seqüência de funções degrau,

$$(1.5) \quad A_n(t) = A\left(\frac{T}{n} \left[\frac{nt}{T} \right]\right), \quad n = 1, 2, \dots$$

onde $[r]$ denota o maior inteiro menor ou igual a $r \in \mathbb{R}$. Antes de definir os propagadores associados aos A_n 's é conveniente considerar um caso específico. Tome $n = 5$. Então (1.5) fica

$$(1.6) \quad \begin{cases} A(t) = A(t_j) & t \in [t_{j-1}, t_j), \\ t_0 = 0, \quad t_5 = T, & j = 1, 2, 3, 4, 5. \end{cases}$$

Intuitivamente,



Agora, para evoluir a solução correspondente à função de grau $A_5(s)$ do ponto $t' \in [t_1, t_2)$ ao ponto $t \in [t_3, t_4)$ note que $A_5(t)$ é constante em cada intervalo $[t_j, t_{j+1})$, $j = 0, 1, 2, 3, 4$ de modo que neles a solução deve ser dada pelo cálculo funcional. Portanto saindo de t' podemos chegar a t_2 através da fórmula $\psi(t_2) = \exp(-i(t_2 - t')A(t_1)) \psi(t')$. Usando $\psi(t_2)$ como condição inicial, podemos prosseguir até t_3 e então repetir o processo (começando com $\psi(t_3)$) para chegar até t . Em outras palavras a evolução da solução da equação (1.1) com $A(t)$ substituída por $A_n(t)$, do ponto t ao ponto t' deve ser descrita por,

$$(1.7) \quad U_5(t, t') = e^{-i(t-t_3)A(t_3)} e^{-i(t_3-t_2)A(t_2)} e^{-i(t_2-t')A(t_1)}.$$

Usando este processo podemos construir $U_n(t, t')$ para

qualquer $n \in \mathbb{Z}^+$ no triângulo $0 \leq t' \leq t \leq T$. Se $0 \leq t \leq t' \leq T$ defina

$$(1.8) \quad U_n(t, t') = U_n(t', t)^*$$

de modo que se $n = 5$ e $t \leq t'$ tem-se,

$$(1.9) \quad U_5(t, t') = e^{i(t_2-t)A(t_1)} e^{i(t_3-t_2)A(t_2)} e^{i(t'-t_3)}$$

Exercício (1.1) - Seja $A_n(t)$ como em (1.5) e $U_n(t, t')$ os operadores construídos pelo método descrito acima.

(i) Prove que $(t, t') \in [0, T] \times [0, T] \longrightarrow U_n(t, t')$

de fato define um propagador.

(ii) Verifique formalmente (i.e., derivando sem preocupações com questões de domínio e etc.) as fórmulas

$$(1.10) \quad i \frac{d U_n(t, t')}{dt} = A_n(t) U_n(t, t')$$

$$(1.11) \quad -i \frac{d U_n(t, t')^*}{dt} = U_n(t, t')^* A_n(t)$$

se $t, t' \neq \frac{jT}{n}$ onde j é inteiro não negativo.

Agora, derivando a quantidade $U_n(t, t') U_m(t', r)$ formalmente em relação a t' , utilizando (1.9) e (1.10) e integrando em $t' \in [r, t]$ obtém-se

$$(1.12) \quad \begin{cases} U_n(t,r)f - U_m(t,r)f = \\ = i \int_r^t U_n(t,t')(A_n(t') - A_m(t')) U_m(t',r)f dt' \end{cases}$$

onde estamos supondo $0 \leq r \leq t' \leq t \leq T$. A equação (1.11) é a ferramenta fundamental na tomada dos limites quando m e $n \rightarrow \infty$ que fornecerá a solução procurada. Para isto é necessário introduzir algumas hipóteses sobre $A(t)$. Seja \mathfrak{H} um espaço de Hilbert contínua e densamente contido em \mathfrak{H} e suponha que para cada $t \in [0, T]$ fixo,

$$(1.13) \quad \begin{cases} e^{-isA(t)}(\mathfrak{H}) \subset \mathfrak{H}, \quad s \in \mathbb{R} \quad \text{e} \quad e^{-isA(t)} \\ \text{define um grupo fortemente contínuo a um parâmetro.} \end{cases}$$

Seja,

$$(1.14) \quad \pi_N = \pi_N(\{s_j\}) = \prod_{j=1}^N e^{-is_j A(t_j)}$$

onde $s_j \geq 0$, $j = 1, 2, \dots, N$, $N = 1, 2, 3, \dots$, $0 \leq t_1 \leq t_2 \leq t_3 \leq \dots \leq t_k \leq T$, e o produto em (1.14) é ordenado no tempo no sentido que as exponenciais com t_j 's maiores são escritas à esquerda das exponenciais com t_j 's menores. De (1.13) segue que $\pi_N(\mathfrak{H}) \subset \mathfrak{H}$, $\pi_k^*(\mathfrak{H}) \subset \mathfrak{H}$, onde a estrela denota a adjunta em \mathfrak{H} . Além disso suponha que existem constantes M e β satisfazendo,

$$(1.15) \quad \max\{\|\pi_N(\{s_j\})\|, \|\pi_N(\{A_j\})^*\| \} \leq M e^{\beta(s_1 + s_2 + \dots + s_N)}$$

para todas as seqüências $\{s_j\}_{j=1}^N$, $\{t_j\}_{j=1}^N$. Finalmente, suponha também que,

$$(1.16) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{Q} \subset D(A(t)), \quad t \in [0, T] \quad (\text{de modo que}) \\ A(t) \in B(\mathfrak{Q}, \mathfrak{H}), \quad \text{para todo } t \in [0, T]; \text{ prove!} \\ \text{e a aplicação } t \in [0, T] \longmapsto A(t) \in B(\mathfrak{Q}, \mathfrak{H}) \\ \text{é contínua na topologia da norma de } B(\mathfrak{Q}, \mathfrak{H}). \end{array} \right.$$

Exercício (1.2) - Sejam $A(t)$, \mathfrak{H} , \mathfrak{Q} como em (1.1), (1.13) - (1.16), $f \in \mathfrak{H}$ e $U_n(t, t')$, $n \in \mathbb{Z}^+$ os propagadores construídos acima. Prove (1.11) rigorosamente.

A condição (1.16) implica então que,

$$(1.17) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{t \in [0, T]} \|A_n(t) - A(t)\|_{B(\mathfrak{Q}, \mathfrak{H})} = 0$$

e portanto $\{A_n(t)\}_{n=1}^{\infty}$ é de Cauchy em $B(\mathfrak{Q}, \mathfrak{H})$. Além disso, os operadores $U_n(t, t')$ são produtos da forma (1.14) de modo que,

$$(1.18) \quad \|V_n(t, t')\|_{B(\mathfrak{H})} = , \quad \|U_n(t, t')\|_{B(\mathfrak{Q}, \mathfrak{H})} \leq M e^{\beta(t-t')}$$

para todo $t, t' \in [0, T]$. A equação (1.11) mostra então que se $f \in \mathfrak{Q}$,

$$(1.19) \quad \left\{ \begin{array}{l} \|U_n(t,r) f - U_m(t,r) f\| \leq \\ \leq M \|f\|_{\mathfrak{D}} \int_r^t dt' \|A_n(t') - A_m(t')\|_{B(\mathfrak{D}, \mathfrak{H})} e^{\beta(t'-r)} \leq \\ \leq M e^{\beta(t-r)} \|f\|_{\mathfrak{D}} \int_r^t dt' \|A_n(t') - A_m(t')\|_{B(\mathfrak{D}, \mathfrak{H})}. \end{array} \right.$$

Segue portanto que $\lim_{n \rightarrow \infty} U_n(t, t') f$ existe em \mathfrak{H} qualquer que seja $f \in \mathfrak{D}$. Como $\|U_n(t, t')\|_{B(\mathfrak{H})} \leq 1$ para todo $n \in \mathbb{Z}^+$, $t, t' \in [0, T]$ e \mathfrak{D} é denso em \mathfrak{H} , o limite,

$$(1.20) \quad U(t,r) = s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} U_n(t,r)$$

existe. Um argumento análogo mostra que o limite em (1.20) também existe se $0 \leq t \leq r \leq T$. Segue imediatamente que os operadores assim definidos são unitários e

$$(1.21) \quad U(t,r)^* = U(r,t) = U(t,r)^{-1}.$$

Agora é fácil verificar os resultados do

Exercício (1.3) - Sejam $A(t)$, \mathfrak{H} e \mathfrak{D} como no exercício (1.2).

(i) Prove que as aproximações $U_m(t, t')$ satisfazem,

$$(1.22) \quad i \frac{dU_m(t, t') f}{dt} = A_m(t) U_m(t, t') f$$

$$(1.23) \quad -i \frac{dU_m(t, t')f}{dt'} = U_m(t, t')'A_m(t')f$$

para todo $m \in \mathbb{Z}^+$, $f \in \mathfrak{S}$, $t, t' \in [0, T]$ e $t, t' \neq \frac{jT}{m}$.

(ii) Use (1.22) para obter

$$(1.24) \quad U_m(t, t')f = f + i \int_{t'}^t U_m(t, s)A(s)fds$$

onde $m \in \mathbb{Z}^+$, $f \in \mathfrak{S}$, $t, t' \in [0, T]$. Conclua então que

$$(1.25) \quad U(t, t')f = f + i \int_{t'}^t U(t, s)A(s)fds$$

(iii) Aplique (1.24) para verificar que,

$$(1.26) \quad \frac{dU(t, t')f}{dt'} = iU(t, t')A(t')f, \quad f \in \mathfrak{S}$$

onde a derivada é calculada na topologia de \mathfrak{H} .

(iv) Prove que se,

$$(1.27) \quad U(t, t')(\mathfrak{S}) \subseteq \mathfrak{S}, \quad 0 \leq t, t' \leq T$$

$$(1.28) \quad \left\{ \begin{array}{l} (t, t') \in [0, T] \times [0, T] \longmapsto U(t, t') \\ \text{fortemente contínua} \end{array} \right. \quad \text{é}$$

então

$$(1.29) \quad \frac{dU(t, t')f}{dt} = -iA(t)U(t, t')f, \quad f \in \mathcal{H}$$

onde a derivada é como em (iii).

Antes de prosseguir convém fazer alguns comentários sobre o exercício acima, Note que é mais difícil demonstrar (1.29) do que (1.26). A razão disso é o simples fato que o lado direito de (1.29) só faz sentido em \mathcal{D} se vale (1.27) enquanto que o membro correspondente de (1.26) está sempre bem definido se $f \in \mathcal{D}$. Portanto, como em tantas outras situações, a dificuldade crucial é essencialmente um problema de encaixar imagens e domínios. No entanto deve-se notar que sob as hipóteses (1.1), (1.13)-(1.16) é possível provar ([1], teorema 4.1)

$$(1.30) \quad D_t^+ U(t, s) \Big|_{t=s} = -iA(s)f, \quad f \in \mathcal{D}$$

onde D_t^+ denota a derivada à direita em relação à primeira variável. A obtenção de (1.30) ao invés de (1.29) é o principal defeito da teoria exposta até este ponto. Para resolver essa dificuldade precisamos dar condições facilmente verificáveis para a validade de (1.27) e (1.28). Isto significa em particular "restringir" $U(t, t')$ a \mathcal{D} de alguma "maneira operacional", i.e., necessitamos poder calcular $U(t, t')f$, $f \in \mathcal{D}$, para verificar se esse vetor pertence a \mathcal{D} . É claro que não é possível usar uma projeção pois \mathcal{D} é denso. Então, seguindo Kato, vamos supor a existência de uma família de isomorfismos $S(t): \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{H}$ que utilizaremos para definir a "restrição" através da expressão

$U(t, t')S(t')^{-1}$. Por exemplo, no caso em que $D(A(t))$ é constante, é natural escolher \mathfrak{D} como sendo o domínio comum dos operadores $A(t)$ e $S(t) = (A(t) + i)$. Agora se existir um operador limitado $W(t, t')$, $t, t' \in [0, T]$, satisfazendo a relação

$$(1.31) \quad U(t, t')S(t')^{-1} = S(t)^{-1} W(t, t')$$

é claro que $U(t, t')(\mathfrak{D}) \subseteq \mathfrak{D}$. Além disso se $W(t, t')$ e $S(t)$ tem as propriedades de continuidade apropriadas obteremos também a continuidade forte requerida na parte (iii) do exercício (1.3). Antes de mais nada convém supor que $U(t, t')$ tem todas as propriedades desejadas e que as operações abaixo fazem sentido. Seja então,

$$(1.32) \quad W(t, t') = S(t)U(t, t')S(t')^{-1}.$$

Derivando em relação a t' segue que,

$$(1.33) \quad \left\{ \begin{aligned} \frac{dW(t, t')}{dt'} &= S(t) \frac{dU(t, t')}{dt'} S(t')^{-1} + \\ &+ S(t)U(t, t') \frac{dS(t')}{dt'} = iS(t)U(t, t')A(t')S(t')^{-1} - \\ &- S(t)U(t, t')S(t')^{-1} \frac{dS(t')}{dt'} S(t')^{-1} = \\ &= W(t, t') \left[iS(t')A(t')S(t')^{-1} - \frac{dS(t')}{dt'} S(t')^{-1} \right] \end{aligned} \right.$$

Definindo

$$(1.34) \quad B(t) = [S(t), A(t)]S(t)^{-1}$$

$$(1.35) \quad C(t) = \frac{dS}{dt}(t)S(t)^{-1}$$

onde $[K, Q]$ denota o comutador dos operadores K e Q , segue que,

$$(1.36) \quad \frac{dW(t, t')}{dt'} = iW(t, t')A(t') + W(t, t')(iB(t') - C(t')).$$

Mas já sabemos resolver a equação (1.26) de modo que o método da variação dos parâmetros pode ser usado para obter uma equação integral do tipo de Volterra equivalente a (1.36). De fato, usando (1.26), podemos reescrever (1.36) na forma,

$$(1.37) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{dW(t, t')}{dt'} = iW(t, t')U(t', t)U(t, t')A(t') + \\ + W(t, t')(iB(t') - C(t')) = \\ = W(t, t')U(t', t) \frac{dU(t, t')}{dt'} + W(t, t')(iB(t') - C(t')). \end{array} \right.$$

Multiplicando (1.37) por $U(t', t)$ à esquerda e lembrando que

$$(1.38) \quad \frac{dU(t', t)}{dt'} = -U(t, t')^{-1} \frac{dU(t, t')}{dt'} U(t, t')^{-1}$$

segue que,

$$(1.39) \quad \frac{d}{dt'} (W(t, t')U(t', t)) = W(t, t')(iB(t') - C(t'))U(t', t).$$

Portanto,

$$(1.40) \quad W(t, t') = U(t, t') + \int_{t'}^t ds W(t, s) (iB(s) - C(s)) U(s, t).$$

Esta fórmula é a base da demonstração (devida a J. Dorroh, [72]) do Teorema 6.1 de [1] no caso da equação de Schrodinger. É interessante notar que a prova neste contexto é exatamente a mesma que no contexto geral das equações de tipo "hiperbólico". Temos,

Teorema (1.4) - Sejam $A(t)$, \mathbb{H} e \mathbb{S} como em (1.1), (1.13)-(1.16). Suponha além disso que existe uma família fortemente contínua $t \in [0, T] \rightarrow S(t)$ de isomorfismos de \mathbb{S} sobre \mathbb{H} , fortemente continuamente diferenciável tal que,

$$(1.41) \quad S(t) A(t) S(t)^{-1} = A(t) + B(t), \quad t \in [0, T]$$

onde $B(t) \in B(\mathbb{H})$ e $t \in [0, T] \rightarrow B(t)$ é fortemente contínua. Então, existe um único propagador $(t, t') \in [0, T] \times [0, T] \rightarrow U(t, t')$ satisfazendo (1.26), (1.27), (1.28) e (1.29).

Antes de prosseguir convém notar que (1.41) deve ser interpretada com a relação de domínio estrita por ela implicada. Além disso é claro que $B(t)$ é exatamente o operador definido por (1.34).

Demonstração - Seja $f \in \mathbb{H}$ e considere a equação integral do tipo de Volterra,

$$(1.42) \quad W(t, t') f = U(t, t') f - \int_{t'}^t W(t, s) [B(s) - C(s)] U(s, t') f ds.$$

Os métodos usuais de solução de tais equações ([32]) mostram que (1.26) tem uma única solução $W(t, t') \in B(\mathbb{H})$ e que a função $(t, t') \rightarrow W(t, t')$ é fortemente contínua. Como mencionado acima para obter o teorema basta provar a relação (1.31).

Antes de mais nada, note que $S(t)^{-1}$ é fortemente continuamente diferenciável (como aplicação de X em Y). De fato, como $S(t)$ tem esta propriedade (como aplicação de Y em X) segue que $S(t)$ é de Lipchitz. Conseqüentemente $S(t)^{-1}$ é também de Lipchitz. Combinando então este fato com a diferenciabilidade forte de $S(t)$ obtém-se a afirmação Além disso,

$$(1.43) \quad \frac{dS(t')^{-1}f}{dt'} = -S(t')^{-1} \frac{dS(t')}{dt'} S(t')^{-1}f$$

$f \in X$, $t' \in [0, T]$. Seja então $Q(t, t') = S(t)^{-1} W(t, t')$. Então (1.43) e as propriedades já estabelecidas do propagador $U(t, t')$ mostram que,

$$(1.44) \quad \begin{cases} \frac{d}{dt'} Q(t, t')f = U(t, t')A(t')S(t')^{-1}f - \\ - U(t, t')S(t')^{-1} \frac{dS(t')}{dt'} S(t')^{-1}f = \\ = U(t, t')A(t')S(t')^{-1}f - Q(t, t')C(t')f \end{cases}$$

para todo $f \in X$. Mas devido a (1.41) temos $A(t')S(t')^{-1} \in \mathfrak{S}$ e portanto,

$$(1.45) \quad \begin{cases} A(t')S(t')^{-1}f = S(t')^{-1}S(t')A(t')S(t')^{-1}f = \\ = S(t')^{-1} [A(t') + B(t')]f \end{cases}$$

para todo $f \in \mathfrak{S}$. Então,

$$(1.46) \quad \frac{d}{dt'} Q(t, t')f = Q(t, t')[A(t') + B(t') - C(t')]f$$

qualquer que seja $f \in \mathfrak{S}$ e $t', t' \in [0, T]$.

Sejam $A_n(t)$, $n = 1, 2, \dots$ os operadores definidos em (1.5) e $U_n(t, t')$ os propagadores associados. Então $U_n(t, t')(\mathfrak{S}) \subset \mathfrak{S}$ e se $f \in \mathfrak{S}$.

$$(1.47) \quad \frac{d}{dt} U_n(t, t')f = i A_n(t) U_n(t, t')f$$

exceto em um número finito de pontos t . Combinando (1.46) e (1.47) segue que,

$$(1.48) \quad \begin{cases} \frac{d}{dt'} Q(t, t') U_n(t', s)f = \\ = Q(t, t')[A(t') + B(t') - C(t') - A_n(t')]U_n(t', s)f \end{cases}$$

Integrando de $t' = r$ a $t' = t$ obtém-se,

$$(1.49) \quad \begin{cases} S(t)^{-1} U_n(t, r)f - Q(t, r)f = \\ = \int_r^t Q(t, t')[A(t') + B(t') - C(t') - A_n(t')]U_n(t', r)fdt' \end{cases}$$

Tomando o limite quando $n \rightarrow \infty$ nesta fórmula,

$$(1.50) \quad \begin{cases} S(t)^{-1} U(t, r)f - Q(t, r)f = \\ = \int_r^t Q(t, t')[B(t') - C(t')] U(t, r)fds \end{cases}$$

se $f \in \mathfrak{S}$. Por continuidade (1.50) vale em todo \mathfrak{M} . O resultado então segue multiplicando (1.40) por $S(t)^{-1}$ e comparando o resultado desta operação com (1.50)

Q.E.D.

Antes de encerrar esta seção convém fazer alguns comentários sobre a literatura existente. Após o aparecimento de [1] e [2] muitos autores simplificaram e generalizaram os trabalhos de T. Kato. Como já observado acima a demonstração do Teorema (1.4) é devida a J. Dorroh ([72]). Kobayasi em [47] provou o resultado supondo que $t \mapsto A(t)$ é fortemente contínua como aplicação de \mathfrak{S} em \mathfrak{M} enquanto Ishii [45] obteve a existência de propagadores utilizando a aproximação de Yosida. O mesmo autor em [46] supõe apenas que $t \mapsto A(t)$ é fortemente uniformemente mensurável, mas impõe uma condição adicional sobre $S(t)$. Finalmente que esse tipo de resultado pode ser estendido para equações de evolução não lineares, sendo muito útil em grande variedade de situações. O leitor deve consultar [3], [4] e [5] para maiores informações.

2. Aplicações

Nesta seção vamos indicar duas aplicações do Teorema (1.4). A primeira delas é muito simples e pode ser facilmente tratada utilizando resultados anteriores aos de Kato (veja as referências contidas em [1] e [2]). A segunda é muito mais difícil e interessante. Devido à complexidade técnica envolvida nos limitaremos

apenas a apontar e justificar a escolha dos operadores $S(t)$, remetendo o leitor a [73] para a demonstração das afirmações que faremos,

Seja $A(t)$, $t \in [0, T]$ uma família de operadores auto-adjuntos em \mathcal{H} tal que $D(A(t))$ é constante. Então é fácil verificar que as normas

$$(2.1) \quad \|f\|_t^2 = \|f\|_{\mathcal{H}}^2 + \|A(t)f\|_{\mathcal{H}}^2, \quad f \in D(A(t))$$

são todas equivalentes. De fato, se $s, t \in [0, T]$ temos $A(t)(A(s) + i)^{-1} \in B(\mathcal{H})$. Portanto,

$$(2.2) \quad \begin{cases} \|f\|_t^2 = \|f\|_{\mathcal{H}}^2 + \|A(t)(A(s) + i)^{-1} (A(s) + i)f\|_{\mathcal{H}}^2 \leq \\ \leq \|f\|_{\mathcal{H}}^2 + \|A(t)(A(s) + i)^{-1}\| \| (A(s) + i)f\|_{\mathcal{H}}^2 \end{cases}$$

e nossa afirmação segue imediatamente desta desigualdade. Fixe $t_0 \in [0, T]$ e seja \mathcal{D} o domínio comum dos $A(t)$ munido da norma dada por,

$$(2.3) \quad \| \| f \| \| = \| f \|_{t_0}.$$

Então é claro que \mathcal{D} está contido densa e continuamente em \mathcal{H} . Escolha $S(t) = (A(t) + i)^{-1}$ e suponha que $t \mapsto A(t)f$ é continuamente diferenciável (em relação à topologia de \mathcal{H}) para toda $f \in \mathcal{D}$. Então as hipóteses do Teorema (1.4) são satisfeitas (com $B(t) \equiv 0!$). Em particular se $V(x, t)$, $x \in \mathbb{R}^3$, $t \in [0, T]$ é tal que

$$(2.4) \quad V(\cdot, t), \quad \frac{\partial V}{\partial t}(\cdot, t) \in C([0, T], L^\infty(\mathbb{R}^3) + L^2(\mathbb{R}^3))$$

então $A(t) = H_0 + V(\cdot, t)$ é auto-adjunto em $D(A(t)) = H^2(\mathbb{R}^3)$ (veja os Teoremas 4.6 e 4.11) $t \in [0, T]$, e as condições descritas acima são satisfeitas.

A segunda aplicação que desejamos descrever é o caso de um campo elétrico dependente do tempo. Mais precisamente seja $g(t)$, $t \in \mathbb{R}$ uma função contínua. Então para cada t fixo o operador

$$(2.5) \quad \begin{cases} D(\mathring{A}(t)) = C_0^\infty(\mathbb{R}^3) \\ A(t)f = (-\Delta + g(t)x_1 + q(x))f, \quad f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3) \end{cases}$$

é essencialmente auto-adjunto ([11], vol. IV pag. 118; veja também [74], [75] e [76]), onde $x = (x_1, x^\perp) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2$ e $q(x)$ tende a zero suficientemente rápido quando $|x| \rightarrow \infty$. Por exemplo, para fixar as idéias, suponha daqui por diante que $q \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Seja $A(t)$ a única extensão auto-adjunta de $\mathring{A}(t)$ como operador em $L^2(\mathbb{R}^3)$. Neste caso a equação (1.1) descreve a interação de uma partícula quântica (na chamada aproximação semi-clássica) com um campo elétrico $g(t)(1, 0, 0)$ e um potencial estático $q(x)$. Um exemplo particularmente interessante desta situação é o caso $g(t) = G_0 \cos(\omega t + \alpha)$ onde $G_0, \alpha \in \mathbb{R}$ e $\omega > 0$ são constantes. Observe que a situação agora é muito diferente da anterior: o domínio de $A(t)$ pode variar de maneira não trivial! De fato, estes domínios são muito diferentes nos casos $g(t) \neq 0$ e $g(t) = 0$. Devido a isso o problema em questão é muito

to mais delicado e uma certa dose de engenhosidade se faz necessária na aplicação do Teorema (1.4) (para evitar por exemplo hipóteses desnecessárias sobre $q(x)$ como no Teorema 7.1 de [67] onde o potencial coulombiano não é permitido). Tendo em vista a hipótese (1.41) é crucial examinar o comutador $[S(t), A(t)]$ quem quer seja $S(t)$. Agora, é natural tentar incluir o efeito do campo em $S(t)$ (afinal de contas, no exemplo anterior o potencial entrou inteiro em $S(t)$). Além disso é importante fazer isso de maneira diferenciável pois o comutador em questão envolve derivadas. A idéia mais simples possível é então escolher $S(t) = S_0$, $t \in \mathbb{R}$, onde S_0 é dado formalmente por

$$(2.6) \quad \begin{cases} S_0 = -\Delta + \eta(x) \\ \eta(x) = (1 + x_1^2)^{1/2}. \end{cases}$$

Surge no entanto uma dificuldade: o comutador $[S_0, A(t)]$ contém derivadas de $q(x)$, o que é péssimo, pois queremos incluir o potencial coulombiano em nossos resultados. Para resolver este problema tome $\tilde{S} = -\Delta + \eta(x) + q(x)$ ao invés de S_0 . Então calculando $[\tilde{S}, A(t)]$ formalmente é fácil verificar que os termos contendo derivadas de q se cancelam! Isto é bastante animador, mas agora temos alguns problemas técnicos a resolver. Em primeiro lugar, os teoremas X.29 e X.32 de [11], volume II, mostram que $\overset{\circ}{S}_0 = (-\Delta + \eta(x))$ é um operador essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ de modo que S_0 pode ser definido como a única extensão auto-adjunta de $\overset{\circ}{S}_0$. Além disso é fácil ver que $S_0 \geq 1$,

e portanto S_0 é um isomorfismo de $\mathfrak{D} = D(S_0)$ sobre $L^2(\mathbb{R}^3)$. Ao adicionarmos o potencial $q(x)$ esta propriedade se perde em geral. No entanto se $q \in L^2(\mathbb{R}^3) + L_\infty^\infty(\mathbb{R}^3)$ não é difícil provar que ([73])

$$(2.7) \quad \tilde{S} = S_0 + q$$

é auto-adjunto em $D(S_0)$ e limitado inferiormente. Portanto adicionando uma constante γ suficientemente grande a \tilde{S} obtem-se um operador $S = \tilde{S} + \gamma \geq 1$. Conseqüentemente S é isomorfismo de $\mathfrak{D} = D(S) = D(S_0)$ (munido da norma do gráfico correspondente a S ou a S_0 ; elas são equivalentes) em \mathfrak{H} e além disso,

$$(2.8) \quad [S, A(t)] = \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + 2 \left(\frac{\partial \eta}{\partial x_1} + g(t) \right) \frac{\partial}{\partial x_1}$$

pelo menos formalmente. Note que o lado direito de (2.8) é independente de $q(x)$. Resta ainda no entanto um problema: não é possível realmente calcular (2.8) em geral pois não desejamos supor diferenciabilidade em $q(x)$. A saída consiste em um argumento de aproximação. Em [73] o leitor interessado encontrará a demonstração do

Teorema (2.1) - Sejam $q(x)$ tal que

$$(2.9) \quad \begin{cases} q(x) = q_1(x) + q_2(x) \\ q_1(x) \in L_\infty^\infty(\mathbb{R}^3) \cap C(\mathbb{R}^3) \\ q_2(x) \in L^2(\mathbb{R}^3) \end{cases}$$

e $A(t)$ o fecho do operador em (2.5). Então as hipóteses do Teorema (2.1) são satisfeitas.

Cabe finalmente notar que T. Kato em comunicação particular mostrou ao autor que a hipótese $q_1 \in C(\mathbb{R}^3)$ pode ser retirada, obtendo-se ainda o mesmo resultado. Observe no entanto que o potencial Coulombiano está contido na classe definida em (2.9) e portanto a hipótese feita sobre q_1 não é uma restrição séria pelo menos do ponto de vista físico.

CAPÍTULO III

TEORIA DE ESPALHAMENTO COM HAMILTONIANAS INDEPENDENTES DO TEMPO

O objetivo deste capítulo é o estudo das propriedades assintóticas do problema (0.8) quando $H(t) = H = H_0 + V$ é o operador definido na seção 4 do Capítulo I através da teoria de Kato-Rellich. Como veremos, tais propriedades estão intimamente ligadas à teoria espectral associada ao operador H .

1. Teoria básica

Como já sabemos a solução do problema de Cauchy

$$(1.1) \quad i \frac{d\psi}{dt} = H\psi, \quad \psi(s) = \psi_s$$

é dada por

$$(1.2) \quad \psi(t) = e^{-i(t-s)H} \psi_s.$$

Como a EDO em (1.1) é invariante sob translações temporais, podemos sem perda de generalidade, supor $s=0$ (isto equivale a tomar $i s H$ e $\psi_s = \psi_0$ como condição inicial!). Nosso propósito agora é estudar o comportamento do grupo unitário e^{-itH} quando $t \rightarrow \pm\infty$. No caso em que estaremos interessados neste capítulo, a função $V(x) \rightarrow 0$ quando $|x| \rightarrow \infty$ suficientemente rápido (este é parte

do significado intuitivo das condições que imporemos adiante; veja (3.14)). O efeito do potencial $V(x)$ deve ser pequeno muito longe da origem, e como (de novo intuitivamente), a grandes distâncias correspondem grandes tempos de viagem, é de se esperar que e^{-itH} se comporte como e^{-itH_0} quando $t \rightarrow \pm\infty$. Para tornar este comentário rigoroso é preciso introduzir a seguinte definição. Seja $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Diremos que a função de onda $\psi(t) = e^{-itH} \varphi$ se comporta como uma partícula livre quando $t \rightarrow \pm\infty$ se e só se existem $\varphi^\pm \in L^2(\mathbb{R}^3)$ tais que

$$(1.3) \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|e^{-itH} \psi - e^{-itH_0} \varphi^\pm\| = 0.$$

Neste caso escreveremos $e^{-itH} \psi \sim e^{-itH_0} \varphi^\pm$. Agora sejam

$$(1.4) \quad \mathfrak{K}^\pm = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3) \mid e^{-itH} \varphi \sim e^{-itH_0} \varphi^\pm\}$$

$$(1.5) \quad \mathfrak{K} = \mathfrak{K}^+ \cap \mathfrak{K}^-.$$

A primeira coisa a notar é a

Proposição (1.1) - Os conjuntos \mathfrak{K}^\pm são subespaços vetoriais fechados de \mathfrak{H} . Em particular \mathfrak{K} também tem essa propriedade.

Demonstração - É evidente da definição que \mathfrak{K}^\pm são subespaços. Vamos provar que \mathfrak{K}^+ é fechado. Argumentos idênticos implicam o resultado para \mathfrak{K}^- . Seja portanto $\varphi \in \overline{\mathfrak{K}^+}$. Então existe $\{\varphi_k\}_{k=1}^\infty \subset \mathfrak{K}^+$ tal que $\varphi_k \xrightarrow{\mathfrak{H}} \varphi$ ($\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$). Consequentemente existe $\{\varphi_k^+\}_{k=1}^\infty \subset \mathfrak{H}$ tais que $e^{-itH} \varphi_k \sim e^{-itH_0} \varphi_k^+$. Mas então

$\{\varphi_k\}_{k=1}^{\infty}$ é de Cauchy. De fato

$$(1.6) \quad \left\{ \begin{aligned} & \|\varphi_k^+ - \varphi_j^+\| = \|e^{-itH_0} \varphi_k^+ - e^{-itH_0} \varphi_j^+\| \leq \\ & \leq \|e^{-itH_0} \varphi_k^+ - e^{-itH} \varphi_k^+\| + \|e^{-itH} \varphi_k^+ - e^{-itH} \varphi_j^+\| + \\ & + \|e^{-itH} \varphi_j^+ - e^{-itH_0} \varphi_j^+\| \end{aligned} \right.$$

e o segundo membro de (1.6) pode ser feito arbitrariamente pequeno tomando k, j suficientemente grande tomando o limite quando $t \rightarrow +\infty$ uma vez que $\|e^{-itH} \varphi_k^+ - e^{-itH} \varphi_j^+\| = \|\varphi_k - \varphi_j\|$ e $e^{-itH} \varphi_l^+ \sim e^{-itH} \varphi_l^+$, $l = k, j$. Existe portanto φ^+ tal que $\varphi_k^+ \xrightarrow{H} \varphi^+$. Então

$$(1.7) \quad \left\{ \begin{aligned} & \|e^{-itH} \varphi - e^{-itH_0} \varphi^+\| \leq \|e^{-itH} \varphi - e^{-itH} \varphi_k^+\| + \\ & + \|e^{-itH} \varphi_k^+ - e^{-itH_0} \varphi_k^+\| + \|e^{-itH_0} \varphi_k^+ - e^{-itH_0} \varphi^+\| = \\ & = \|\varphi - \varphi_k\| + \|e^{-itH} \varphi_k^+ - e^{-itH_0} \varphi_k^+\| + \|\varphi_k^+ - \varphi^+\|. \end{aligned} \right.$$

Tomando o limite quando $k \rightarrow \infty$ segue que $\varphi \in \mathfrak{X}^+$ e a proposição está provada.

Q.E.D.

A próxima coisa a observar é o fato que se $\varphi \in \mathfrak{X}$ então $\psi(t) = e^{-itH} \varphi$ se comporta como partícula livre quando $t \rightarrow \pm\infty$. É claro que é isso o que a definição diz. No entanto, é útil e

instrutivo notar a

Proposição (1.2) - Sejam $\varphi \in \mathfrak{X}^+$, $\|\varphi\| = 1$ e $\psi(t) = e^{-itH} \varphi$.

Então,

$$(1.8) \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} P(t; S; \varphi) = 0$$

qualquer que seja $S \subset \mathbb{R}^3$, mensurável e limitado.

Demonstração - Seja $\varphi^+ \in L^2(\mathbb{R}^3)$ tal que $e^{-itH} \varphi \sim e^{-itH_0} \varphi^+$.

Então,

$$(1.9) \quad \left\{ \begin{array}{l} P(t; S; \varphi) = \|e^{-itH} \varphi\|_{L^2(S)}^2 \leq \\ \leq \left(\|e^{-itH} \varphi - e^{-itH_0} \varphi^+\|_{L^2(S)} + \|e^{-itH_0} \varphi^+\|_{L^2(S)} \right)^2 \leq \\ \leq \left(\|e^{-itH} \varphi - e^{-itH_0} \varphi^+\| + \|e^{-itH_0} \varphi^+\|_{L^2(S)} \right)^2 \end{array} \right.$$

e o resultado segue imediatamente da hipótese $e^{-itH} \varphi \sim e^{-itH_0} \varphi^+$ e do teorema (2.10) do Capítulo II.

Q.E.D.

Um argumento análogo mostra que \mathfrak{X}^- tem a mesma propriedade com $t \rightarrow -\infty$ ao invés de $(+\infty)$. Conseqüentemente,

Corolário (1.3) - Se $\varphi \in \mathfrak{X} = \mathfrak{X}^+ \cap \mathfrak{X}^-$ então

$$(1.10) \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} P(t; s; \varphi) = 0.$$

Em outras palavras, se $\varphi \in \mathfrak{E}$ a partícula descrita pela função de onda $\psi(t) = e^{-itH} \varphi$ escapa de qualquer subconjunto limitado do \mathbb{R}^3 quando $t \rightarrow \pm\infty$. Por esta razão, os elementos de \mathfrak{E} , assim como as funções de onda correspondentes serão chamados estados de espalhamento. Note que não há possibilidade de confusão. De fato,

Exercício (1.4) - Seja $\varphi \in \mathfrak{E}^+$. Prove que,

(i) $e^{-itH} \varphi \in \mathfrak{E}^+$ para todo $t \in \mathbb{R}$

(ii) \mathfrak{E}^+ reduz H (sugestão. Use (i) e o exercício (1.7) parte (i) abaixo).

(iii) resultado análogo vale para \mathfrak{E}^- . Portanto \mathfrak{E} reduz H e

$$(1.11) \quad e^{-itH} \varphi \in \mathfrak{E}, \quad t \in \mathbb{R}, \quad \varphi \in \mathfrak{E}.$$

Agora, é natural perguntar se $\mathfrak{E} = \mathfrak{H}$. Afinal de contas isto é verdade no caso $V = 0$. A resposta é: em geral não. Para ver isso, seja $\varphi \in D(H)$ tal que $H\varphi = \lambda\varphi$, $\|\varphi\| = 1$ para algum $\lambda \in \mathbb{R}$. Então $e^{-itH} \varphi = e^{-it\lambda} \varphi$ para todo $t \in \mathbb{R}$ e portanto

$$(1.12) \quad P(t; S; \varphi) = \int_S |\varphi(x)|^2 dx$$

não depende do tempo, qualquer que seja $S \subseteq \mathbb{R}^3$! Em particular dado $\epsilon > 0$ existe $R_0 = R_0(\epsilon, \varphi)$ tal que

$$(1.13) \quad P(t; \{|x| \geq R\}; \varphi) < \epsilon$$

para todo $R \geq R_0$ e $t \in \mathbb{R}$. Em outras palavras, a partícula descrita por $\psi(t) = e^{-itH} \varphi = e^{-it\lambda} \varphi$ está "concentrada perto da origem". Na verdade um argumento de aproximação bastante simples mostra que

Exercício (1.5) - Seja $\varphi \in \mathcal{H}_p(H)$ (veja seção 3 do Capítulo I). Então dado $\epsilon > 0$, existe $R_0 = R_0(\epsilon, \varphi)$ tal que (1.12) vale. Isto significa que qualquer elemento de $\mathcal{H}_p(H)$ tem a propriedade de estar concentrado perto da origem. Tais vetores são chamados estados ligados, (note que isto quer dizer que $\mathcal{H}_p(H)$ está contido na coleção dos estados ligados. Mais adiante veremos que de fato vale a igualdade sob condições bastante gerais. Isto no entanto é um TEOREMA! A mesma observação vale para \mathcal{K} e os estados de espalhamento.

Mais ainda temos,

Teorema (1.6) - $\mathcal{H}_p(H) \perp \mathcal{K}$.

Demonstração - Vamos mostrar que $\mathcal{H}_p(H) \perp \mathcal{K}^+$. O caso \mathcal{K}^- pode ser tratado exatamente da mesma forma. Sejam $f \in \mathcal{K}^+$ e $\varphi \in \mathcal{H}_p(H)$. Então existem $f^+ \in L^2(\mathbb{R}^3)$ e uma sequência $\{\varphi_N\}_{N=1}^{\infty}$ de combinações lineares finitas de auto-vetores de H tais que

$$(1.14) \quad e^{-itH} f \sim e^{-itH_0} f^+$$

$$(1.15) \quad \varphi_N \xrightarrow{H} \varphi.$$

Portanto podemos escrever,

$$(1.16) \quad \left\{ \begin{aligned} (\varphi|f) &= (\varphi - \varphi_N|f) + (\varphi_N|f) = \\ &= (\varphi - \varphi_N|f) + (e^{-itH} \varphi_N|e^{-itH} f) = \\ &= (\varphi - \varphi_N|f) + (e^{-itH} \varphi_N|e^{-itH} f - e^{-itH_0} f^+) + \\ &+ (e^{-itH} \varphi_N|e^{-itH_0} f^+) \end{aligned} \right.$$

Dado $\epsilon > 0$ seja N tal que $\|\varphi - \varphi_N\| \leq \epsilon$. Então $|(\varphi - \varphi_N|f)| \leq \epsilon \|f\|$ e $(e^{-itH} \varphi_N|e^{-itH} f - e^{-itH_0} f^+)$ tende a zero quando $t \rightarrow \infty$ (com N fixo como acima) combinando a desigualdade de Cauchy-Schwartz com a condição assintótica $e^{-itH} f \sim e^{-itH_0} f^+$. Agora observe que

$$(1.17) \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} (e^{-itH} \varphi_N|e^{-itH_0} f^+) = 0.$$

De fato, como φ_N é uma combinação linear finita de auto-vetores de H , basta provar que

$$(1.18) \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} (\varphi|e^{-itH_0} f^+) = 0$$

para toda auto função φ de H . Mas, lembrando que a medida espectral de H_0 é finita e absolutamente contínua em relação à medida de Lebesgue segue que,

$$(1.19) \quad (e^{-itH_0} f^+|\varphi) = \int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda} \theta(\lambda) d\lambda$$

onde $\theta \in L^1(\mathbb{R})$ é dada por

$$(1.20) \quad \theta(\lambda) = \frac{d}{d\lambda} (E(\lambda)f^+(\varphi)), \quad \lambda \text{ q.t.p.}$$

Mas então o produto interno em (1.19) tende a zero quando $t \rightarrow \infty$ devido ao lema de Riemann-Lebesgue. Usando estas observações é fácil verificar (tomando o limite quando $t \rightarrow \infty$ em (1.16)) que,

$$(1.21) \quad |(\psi|f)| \leq \epsilon \|f\|.$$

Como $\epsilon > 0$ é arbitrário o teorema está provado.

Q.E.D.

Agora, a física experimental, assim como um grande número de problemas que podem ser resolvidos explicitamente indicam que os únicos comportamento assintóticos aceitáveis são os obtidos a partir de condições iniciais em $H_p(H)$ e \mathfrak{z} (e combinações lineares de tais vetores uma vez que a equação de Schrodinger é linear). Em outras palavras é de se esperar (no caso em questão), que,

$$(1.22) \quad \begin{cases} \mathfrak{z} = \mathfrak{z}^+ = \mathfrak{z}^- \\ \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^3) = H_p(H) \oplus \mathfrak{z} \end{cases}$$

Esta conjectura é de fato verdadeira em uma enorme variedade de situações que inclui em particular o potencial Coulombiano, (veja [12], [48], [49]).

Vamos agora refinar esta conjectura em termos da teoria es

pectral desenvolvida no final da seção 3 do Capítulo I. De acordo com os resultados ali descrito devemos ter $\mathfrak{K} = \mathfrak{H}_{ac}(H) \oplus \mathfrak{H}_{sc}(H)$. Vamos tentar indicar agora que na verdade é de se esperar $\mathfrak{K} = \mathfrak{H}_{ac}(H)$ e $\mathfrak{H}_{sc}(H) = \{0\}$. Para isso note primeiro que a unitariedade de e^{-itH} mostra que a condição assintótica (1.3) é equivalente a

$$(1.23) \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|\varphi - e^{itH} e^{-itH_0} \varphi^\pm\| = 0.$$

É portanto natural introduzir os operadores de onda associados ao par (H, H_0) , a saber os limites

$$(1.24) \quad \mathfrak{W}_\pm = \mathfrak{W}_\pm(H, H_0) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH} e^{-itH_0}$$

(se existirem, é claro). A naturalidade (e importância!) da definição acima começa a ser evidente a partir do Lema (1.8). Antes de enunciá-lo no entanto é conveniente notar o

Exercício (1.7) - Seja A um operador auto-adjunto no espaço de Hilbert \mathfrak{H} . Então,

(i) $f \in D(A)$ se e só se $\lim_{t \downarrow 0} t^{-1}(e^{-itA} - 1)f$ existe e nesse caso o limite é precisamente $(-iAf)$.

(ii) vale a fórmula de Stone, i.e.,

$$(1.25) \quad E_A([a, b]) - E_A((a, b)) = s\text{-}\lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_a^b d\lambda (R_A(\lambda + i\epsilon) - R_A(\lambda - i\epsilon))$$

para todo par $a, b \in \mathbb{R}$.

(Sugestão: Seja

$$(1.26) \quad \theta_\epsilon(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_a^b [(x - \lambda - i\epsilon)^{-1} - (x - \lambda + i\epsilon)^{-1}] d\lambda .$$

Verifique que

$$(1.27) \quad \theta_\epsilon(x) \longrightarrow \begin{cases} 0, & x \notin [a, b] \\ 1/2, & x = a \text{ ou } x = b \\ 1, & x \in (a, b) \end{cases}$$

e use o cálculo funcional para obter o resultado).

Agora temos,

Lema (1.8) - Suponha que os operadores w_\pm existem. Então,

(i) $\mathfrak{K}^\pm = \mathfrak{R}(w_\pm)$

(ii) w_\pm são isometrias e entrelaçam os operadores H e H_0 (i.e., $Hw_\pm = w_\pm H_0$).

(iii) $\mathfrak{R}(w_\pm)$ são subespaços fechados de $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$, reduzem H e estão (ambos!) contidos em $\mathfrak{H}_{ac}(H)$.

Demonstração - Vamos considerar apenas w_+ . O caso do operador w_- é análogo. Para provar (i) observe que $\varphi \in \mathfrak{K}^+$ se e só se

$$(1.28) \quad \left\{ \begin{aligned} 0 &= \lim_{t \rightarrow \infty} \|e^{-itH} \varphi - e^{-itH_0} \varphi^+\| = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \|\varphi - e^{itH} e^{-itH_0} \varphi^+\| = \\ &= \|\varphi - w_+ \varphi^+\| \end{aligned} \right.$$

Mas a igualdade $\|\varphi - w_+ \varphi^+\| = 0$ é equivalente a $\varphi = w_+ \varphi^+$. Portanto $\mathfrak{R}^+ = \mathfrak{R}(w_+)$. Agora, a unitariedade dos grupos em questão mostra que $\|e^{itH} e^{-itH_0} f\| = \|f\|$ para toda $f \in \mathfrak{H}$. Tomando o limite quando $t \rightarrow \infty$ segue que $\|w_+ f\| = \|f\|$, $f \in \mathfrak{H}$ ou seja w_+ é uma isometria. Então, se $f \in \mathfrak{H}$ e $s \in \mathbb{R}$ temos,

$$(1.29) \quad \left\{ \begin{aligned} e^{isH} w_+ f &= e^{isH} \lim_{t \rightarrow \infty} e^{itH_0} e^{-itH_0} f = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} e^{i(t+s)H_0} e^{-i(t+s)H_0} e^{isH_0} f = \\ &= w_+ e^{isH_0} f \end{aligned} \right.$$

Portanto se $f \in D(H_0)$ Exercício (1.7) (i) mostra que

$$(1.30) \quad \frac{e^{-isH} - 1}{s} w_+ f = w_+ \left(\frac{e^{-isH_0} - 1}{s} f \right) \rightarrow w_+ H_0 f$$

quando $s \rightarrow 0$. Mas então, aplicando novamente a parte (i) do Exercício (1.7) segue que $w_+ f \in D(H)$ e $H w_+ f = w_+ H_0 f$. Isto encerra a demonstração de (ii). Resta provar (iii). Como é bem conhecido, qualquer isometria tem imagem fechada (verifique!) e

portanto $\mathcal{R}(w_+)$ tem esta propriedade. Além disso

$$(1.31) \quad \begin{cases} w_+^* w_+ = 1 \\ P_+ = w_+ w_+^* \end{cases}$$

onde P_+ é a projeção ortogonal sobre $\mathcal{R}(w_+)$. Estes também são fatos gerais sobre isometrias que o leitor é convidado a provar (ou consultar [21] por exemplo). Para mostrar que $\mathcal{R}(w_+)$ reduz H é preciso verificar que $HP_+ \supseteq P_+H$. Mas pela parte (ii) $Hw_+ \supseteq w_+H_0$ ou seja $H_0w_+^* \supseteq w_+^*H$. Portanto $HP_+ = Hw_+w_+^* \supseteq w_+H_0w_+^* \supseteq w_+w_+^*H = P_+H$. Com o intuito de provar a última parte de (iii) note que a contenção $Hw_+ \supseteq w_+H$ implica imediatamente que

$$(1.32) \quad R_H(z)w_+ = w_+R_0(z), \quad \text{Im}z \neq 0$$

Seja então $f \in \mathcal{H}$, de modo que $w_+f \in \mathcal{R}(w_+) = \mathcal{R}^+$. O Teorema (1.6) mostra que $w_+f \in \mathcal{H}_{ac}(H)$ e portanto $E_A([a,b])w_+f = E((a,b))w_+f$ para todo $a, b \in \mathbb{R}$. Mas então combinando (1.3) com a fórmula de Stone (Exercício (1.7)) obtém-se,

$$(1.33) \quad E_H([a,b])w_+f = w_+E_0([a,b])f.$$

Tomando o limite quando a tende a $(-\infty)$ segue que,

$$(1.34) \quad E_H((-\infty, b])w_+f = w_+E_0((-\infty, b])f.$$

para todo $b \in \mathbb{R}$. Mas então

$$(1.35) \quad \begin{cases} (E_H((-\infty, b]) \omega_+ f \mid \omega_+ f) = (\omega_+ E_0(-\infty, b]) f \mid \omega_+ f) = \\ = (E_0(-\infty, b]) f \mid \omega_+^* \omega_+ f) = (E_0(-\infty, b]) f \mid f) \end{cases}$$

se $b \in \mathbb{R}$, uma vez que por (1.31) $\omega_+^* \omega_+ = 1$. Mas então $b \in \mathbb{R} \mapsto (E_H((-\infty, b]) \omega_+ f \mid \omega_+ f)$ é absolutamente contínua e o teorema está provado.

Q.E.D.

Antes de prosseguir, convém notar que o lema que acabamos de provar é abstrato no sentido que nenhuma propriedade de $L^2(\mathbb{R}^3)$ foi utilizada, exceto é claro o fato que ele é um espaço de Hilbert. Portanto, com as definições apropriadas os resultados devem valer em um contexto abstrato. Nós não tocaremos nesse assunto, mas o leitor interessado deve consultar o volume III de [11] e o Capítulo X de [21]. Agora sejam H_{\pm} as partes de H em $\mathfrak{K}^{\pm} = \mathfrak{R}(\omega_{\pm})$, i.e.,

$$(1.36) \quad D(H_{\pm}) = D(H) \cap \mathfrak{K}^{\pm}, \quad H_{\pm} \varphi = H \varphi, \quad \varphi \in D(H_{\pm})$$

Então,

Corolário (1.9) - Os operadores H_{\pm} são unitariamente equivalentes a H_0 , assim como a M_0 em $L^2(\mathbb{R}^3, d\xi)$. Esta última equivalência é implementada através do operador $\mathfrak{F}^{\pm} = \mathfrak{F}_0 \omega_{\pm}^{-1} : \mathfrak{K}^{\pm} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3, d\xi)$.

Demonstração - Como $\omega_{\pm}^* \omega_{\pm} = 1$ e $\omega_{\pm} \omega_{\pm}^* = P_{\pm}$ (a projeção ortogonal sobre $\mathfrak{R}(\omega_{\pm})$) segue que $\omega_{\pm}^* \big|_{\mathfrak{R}(\omega_{\pm})} = \omega_{\pm}^{-1}$, onde ω_{\pm} está

sendo considerado como um operador de \mathcal{H} sobre $\mathcal{R}(\omega_{\pm})$. Portanto, se $\varphi \in D(H_{\pm})$ temos $H_{\pm} \varphi = H_{\pm} P_{\pm} \varphi = H_{\pm} \omega_{\pm} \omega_{\pm}^* \omega_{\pm} H_0 \omega_{\pm}^{-1} \varphi = \omega_{\pm} \mathcal{F}_0^{-1} M_0 \mathcal{F}_0 \omega_{\pm}^{-1} \varphi$ e o corolário está provado.

Q.E.D.

Agora é natural fazer duas perguntas, a saber, qual é a utilidade dos operadores de onda e como provar sua existência. Na verdade a primeira questão leva a novas perguntas! Um dos problemas básicos da teoria de espalhamento pode ser descrito da seguinte forma: o físico experimental "prepara um estado" $e^{-itH_0} \varphi^-$ muito longe do centro espalhador (i.e., "no instante $t = -\infty$ ") e permite que ele interaja com o potencial $V(x)$. Depois de um tempo muito longo (i.e., " $t = +\infty$ ") ele detecta a partícula em um estado $e^{-itH_0} \varphi^+$. O problema consiste então em dado φ^- determinar φ^+ . Para responder a esta pergunta suponha que ω_{\pm} existe e $\mathcal{R}(\omega_{+}) = \mathcal{R}(\omega_{-})$. Então dada φ^- existe uma única ψ , a saber $\psi = \omega_{-} \varphi^-$, tal que $e^{-itH} \psi \sim e^{-itH_0} \varphi^-$. Mas então existe uma única φ^+ tal que $\psi = \omega_{+} \varphi^+$ (pois estamos supondo que as imagens dos operadores de onda são iguais e como sabemos eles são isometrias). É claro que esta φ^+ é tal que $e^{-itH} \psi \sim e^{-itH_0} \varphi^+$. Portanto $\omega_{-} \varphi^- = \omega_{+} \varphi^+$ de modo que $\varphi^+ = \omega_{+}^* \omega_{-} \varphi^-$. Em outras palavras se ω_{\pm} existem e suas imagens coincidem, φ^+ fica determinada por φ^- através do chamado operador de espalhamento $S = \omega_{+}^* \omega_{-}$. Note que S está bem definido sempre que os operadores de onda existem mas,

Exercício (1.10) - S é unitário se e só se $\mathcal{R}(\omega_{+}) = \mathcal{R}(\omega_{-})$.

As considerações acima indicam que é desejável provar que $\mathfrak{R}(w_+) = \mathfrak{R}(w_-)$. Mas isto não é tudo. A teoria espectral abstrata mostra que $L^2(\mathbb{R}^3) = \mathfrak{H}_p(H) \oplus \mathfrak{H}_{ac}(H) \oplus \mathfrak{H}_{sc}(H)$ enquanto que a experiência física indica $L^2(\mathbb{R}^3) = \mathfrak{H}_p(H) \oplus \mathfrak{I}$ com $\mathfrak{I} = \mathfrak{I}^+ = \mathfrak{I}^-$. Mas $\mathfrak{I}^\pm = \mathfrak{R}(w^\pm) \subseteq \mathfrak{H}_{ac}(H)$. Portanto é razoável conjecturar

$$(1.37) \quad \mathfrak{I} = \mathfrak{R}(w_\pm) = \mathfrak{H}_{ac}(H)$$

$$(1.38) \quad \mathfrak{H}_p(H) = \mathfrak{H}_{ac}(H)^\perp.$$

Caso valha (1.37) diremos que os operadores de onda são completos enquanto que se tanto (1.37) quanto (1.38) forem satisfeitas os operadores de onda serão ditos fortemente completos. Note que (1.38) é equivalente a provar que $\mathfrak{H}_{sc}(H) = \{0\}$. Nas próximas seções indicaremos um método para atacar estes problemas.

Finalmente, para encerrar esta seção vamos apresentar um resultado simples que ilustra o método básico utilizado para demonstrar a existência dos operadores de onda, conhecido como o método de Cook-Kuroda. Generalizações podem ser encontradas em [11, vol. II], [50], [51].

Teorema (1.10) - Suponha que

$$(1.39) \quad \begin{cases} V(x) = (1+|x|^2)^{-\rho} V_1(x) + V_2(x) \\ V_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^3), \quad V_2 \in L^2(\mathbb{R}^3), \quad \rho > 1/2 \end{cases}$$

Então os operadores de onda w_{\pm} existem.

Demonstração - Vamos considerar w_{+} . A mesma técnica se aplica a w_{-} . Seja

$$(1.40) \quad w(t) = e^{itH} e^{-itH_0}, \quad t \in \mathbb{R}$$

de modo que $w_{+} = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} w(t)$ se o limite existe. Como $w(t)$ é uma função uniformemente limitada é suficiente provar que

$$(1.41) \quad \|w(t)f - w(t')f\| \longrightarrow 0$$

quando $t, t' \longrightarrow \infty$ para toda f em algum subconjunto denso S de $L^2(\mathbb{R}^3)$ (verifique!). Vamos escolher então $S = C_0^{\infty}(\mathbb{R}^3)$. Então um cálculo simples mostra que

$$(1.42) \quad \begin{cases} \frac{d}{dt} w(t)f = i e^{itH} (H - H_0) e^{-itH_0} f = \\ = i e^{itH} V e^{-itH_0} f \end{cases}$$

Portanto,

$$(1.43) \quad (w(t) - w(t'))f = i \int_{t'}^t e^{isH} V e^{-isH_0} f ds.$$

Supondo, sem perda de generalidade, que $t > t'$ temos,

$$(1.44) \quad \|(w(t) - w(t'))f\| \leq \int_{t'}^t \|V e^{-isH_0} f\| ds$$

e portanto para provar (1.41) é suficiente mostrar que

$$(1.45) \quad \int_a^\infty \|V e^{-isH_0} f\| ds < \infty$$

para algum $a > 0$. Além disso, devido à desigualdade triangular basta provar (1.43) com $V(x)$ substituído por $(1+|x|^2)^{-\rho} V_1(x)$ e por $V_2(x)$. Vamos começar com V_2 . Como $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ temos,

$$(1.46) \quad \left(V_2 e^{-itH_0} f \right)(x) = (4\pi it)^{-3/2} V_2(x) \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(-\frac{|x-y|^2}{4it}\right) f(y) dy$$

de modo que,

$$(1.47) \quad |(V_2 e^{-itH_0} f)(x)| \leq C t^{-3/2} |V_2(x)| \|f\|_{L^1}$$

onde $C > 0$ é uma constante (independente de t e f). Portanto,

$$(1.48) \quad \|V_2 e^{-itH_0} f\| \leq C t^{-3/2} \|V\|_{L^2} \|f\|_{L^1}.$$

Como $t^{-3/2} \in L^1([a, \infty), dt)$ para todo $a > 0$, o resultado segue no caso de V_2 . Vamos agora considerar $(1+|x|^2)^{-\rho} V_1(x)$. Observe primeiro que se $\rho > 3/4$ nada há a provar pois nesse caso, $(1+|x|^2)^{-\rho} V_1(x) \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Suponha portanto que $(1/2) < \rho \leq (3/4)$, e note que

$$(1.49) \quad \|e^{-itH_0} f\|_{L^\infty} \leq C t^{-3/2} \|f\|_{L^1}$$

para toda $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Então e^{-itH_0} define um operador limita-

do de $L^1(\mathbb{R}^3)$ em $L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Combinando este fato com a unitariedade de e^{-itH_0} e o teorema de Riesz-Thorin ([11, vol. II]) segue que,

$$(1.50) \quad \|e^{-itH_0} f\|_{L^q} \leq K t^{-3(\frac{1}{p} - \frac{1}{2})} \|f\|_{L^p}$$

onde K é uma constante positiva $1 \leq p \leq 2$ e $p^{-1} + q^{-1} = 1$. Agora seja, $r \in \left(\frac{3}{2p}, 3\right)$ de modo que $2 < r < 3$. Além disso $(1+|x|^2)^{-\rho} \in L^r(\mathbb{R}^3)$ pois $2\rho r > 3$. Escolha p satisfazendo

$$(1.51) \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1, \quad \frac{1}{q} + \frac{1}{r} = \frac{1}{2}.$$

É fácil verificar que $1 \leq p \leq 2$ e $q \geq 2$. Podemos portanto (1.50) com essa escolha. Combinando (1.50) com a desigualdade de Holder temos,

$$(1.52) \quad \left\{ \begin{array}{l} \|(1+|\cdot|^2)^{-\rho} V_1 e^{-itH_0} f\| \leq \\ \leq K \|V_1\|_{L^\infty} \|(1+|\cdot|^2)^{-\rho}\|_{L^r} \|e^{-itH_0} f\|_{L^q} \leq \\ \leq (\text{constante}) e^{-3/r} \|f\|_{L^p} \end{array} \right.$$

Como $(3/r) > 1$ segue que,

$$(1.53) \quad \int_a^\infty \|(1+|\cdot|^2)^{-\rho} V_1 e^{-itH_0} f\| dt < \infty$$

para toda $a > 0$. Isto conclui a demonstração.

Q.E.D.

2. Expansões em auto-funções e teoria de espalhamento

Nesta seção vamos descrever a conexão profunda existente entre a teoria de espalhamento e a expansão em auto-funções associada ao operador $(-\Delta+V)$. No que segue vamos proceder formalmente. É importante notar porém que os "resultados" descritos abaixo podem ser tornados inteiramente rigorosos. Nosso objetivo aqui consiste apenas em descrever a estrutura da teoria evitando detalhes técnicos bastante complexos (veja a próxima seção, [11, vol IV], [12] e [39] por exemplo). Para começar vamos reescrever (0.8) na forma

$$(2.1) \quad i \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-\Delta+V)\psi, \quad \psi(x,0) = \psi_0(x)$$

e aplicar o consagrado método de separação de variáveis. A idéia fundamental consiste em obter uma coleção "suficientemente grande" de "soluções elementares" da EDP em (2.1), formar uma superposição linear de modo a obter uma "solução geral" e então impor a condição inicial para calcular os coeficientes da superposição em termos da condição inicial de modo a representar desta forma a solução do problema (2.1). Para obter as soluções elementares vamos procurar soluções na forma de produto, i.e., $\psi(x,t)=X(x)T(t)$. Substituindo esta expressão na EDP e dividindo por XT obtém-se $X^{-1}(-\Delta+V)X = T^{-1} T'$. Como x e t são variáveis independentes, ambos os lados desta equação devem ser constantes. Obtém-se portanto,

$$(2.2) \quad i T'(t) = \lambda T(t)$$

$$(2.3) \quad (-\Delta+V)X = \lambda X$$

onde λ , a constante de separação, é suposta real (e que é razoável uma vez que $(-\Delta+V)$ é formalmente auto-adjunto se V é real; cuidado no entanto: veja o teorema X.1 de [11; vol. II] por exemplo). A EDP (4.3) é conhecida como a equação de Schrodinger independente do tempo ou como a equação de Helmholtz. Note que a solução geral de (2.2) é simplesmente $T(t) = C \exp(-i\lambda t)$ onde C é uma constante arbitrária de modo que o problema realmente difícil consiste em resolver (2.3). Guiado por vários cálculos explícitos assim como evidência experimental o físico supõe que é sempre possível obter um "conjunto ortonormal completo de auto-funções de $(-\Delta+V)$ " (veja o capítulo 8 de [6] e/ou a seção 7 de [7]). Vamos tentar esclarecer essa obscura afirmação no caso em que estamos interessados, a saber, a situação em que $V(x) \rightarrow 0$ "suficientemente rápido" quando $|x| \rightarrow \infty$. Neste contexto a afirmação acima significa que,

a) existe uma coleção de números reais $\{\lambda_k\}_{k=1}^N$ (possivelmente vazia e no máximo infinitamente enumerável) e uma coleção correspondente de funções $\{\varphi_k\}_{k=1}^N \subset L^2(\mathbb{R}^3)$ satisfazendo $-\infty < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \dots$ e

$$(2.4) \quad (-\Delta+V)\varphi_k = \lambda_k \varphi_k, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Como $\varphi_k \in L^2(\mathbb{R}^3)$ para todo k vamos supor daqui para a frente $\|\varphi_k\| = 1, \quad k = 1, 2, \dots$. É claro que, em termos da teoria espectral desenvolvida anteriormente, o fecho do espaço gerado pe

las φ_k precisamente $\mathfrak{H}_p(H)$ onde H é dado formalmente por $(-\Delta+V)$.

b) existem funções φ_ξ , $\xi \in \mathbb{R}^3$ que não são de quadrado integrável, tais que

$$(2.5) \quad (-\Delta+V)\varphi_\xi = |\xi|^2 \varphi_\xi.$$

Estas funções, como veremos adiante, geram $\mathfrak{H}_{ac}(H)$.

c) as funções φ_k e φ_ξ satisfazem às seguintes relações de ortogonalidade,

$$(2.6) \quad \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_k(x) \overline{\varphi_j(x)} dx = \delta_{k,j}$$

$$(2.7) \quad \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_k(x) \overline{\varphi_\xi(x)} dx = 0$$

$$(2.8) \quad \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_{\xi'}(x) \overline{\varphi_\xi(x)} dx = \delta(\xi-\xi')$$

para todo $j,k = 1,2,3,\dots$, $\xi,\xi' \in \mathbb{R}^3$ onde $\delta_{k,j}$ e $\delta(\xi-\xi')$ denotam a delta de Kroenecher e a delta de Dirac respectivamente.

d) as funções φ_k e φ_ξ satisfazem a relação de completamento, i.e.,

$$(2.9) \quad \sum_{k=1}^N \varphi_k(x) \overline{\varphi_k(y)} + \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_\xi(x) \overline{\varphi_\xi(y)} d\xi = \delta(x-y).$$

Evidentemente as condições a) - d) são ainda bastante obscuras. Para esclarecê-las convém considerar o caso do lapla-

ciano em \mathbb{R}^3 . Note que no caso de $(-A)$ a coleção $\{\varphi_k\}_{k=1}^N$ é vazia mas no entanto se $\varphi_\xi^0(x) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\xi \cdot x)$ segue que $(-A\varphi_\xi^0) = |\xi|^2 \varphi_\xi^0(x)$. Além disso a fórmula de inversão para a transformada de Fourier \mathcal{F}_0 mostra que se $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ (por exemplo), temos,

$$(2.10) \quad \begin{cases} f(x) = \int_{\mathbb{R}^3} d\xi \hat{f}(\xi) \varphi_\xi^0(x) & \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{|\xi| \leq N} d\xi \hat{f}(\xi) \varphi_\xi^0(x) = \\ = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^3} dy f(y) \int_{|\xi| \leq N} \varphi_\xi^0(x) \overline{\varphi_\xi^0(y)} d\xi \end{cases}$$

Portanto a função $f(x)$ pode ser "reobtida de si própria" através do limite em (4.10). Isto significa que

$$(2.11) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{|\xi| \leq N} \varphi_\xi^0(x) \overline{\varphi_\xi^0(y)} d\xi = \delta(x-y)$$

no sentido fraco indicado acima. O leitor familiar com a teoria das distribuições temperadas notará imediatamente que o limite (2.11) existe no sentido de $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^3)$. Este é o significado da relação de completamento no caso de $(-A)$. Analogamente, a relação de ortogonalidade é

$$(2.12) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{|x| \leq N} \varphi_\xi^0(x) \overline{\varphi_{\xi'}^0(x)} dx = \delta(\xi - \xi')$$

Agora, observe que a fórmula de inversão em (2.10) pode ser interpretada como uma expansão de f em auto-funções de $(-A)$.

Os coeficientes são precisamente $\hat{f}(\xi)$! Isto é análogo ao caso das séries de Fourier. A diferença consiste no fato que aqui temos um contínuo de auto-funções (que não pertencem ao espaço de Hilbert inicial) e por isso são muitas vezes chamadas auto-funções generalizadas e a superposição é feita através de uma integral e não de uma série. Estas considerações motivam então a introdução da transformada de Fourier generalizada (ou associada ao $\text{CONC } \{\varphi_k\} \cup \{\varphi_\xi\}$),

$$(2.13) \quad (\mathcal{F}f)(\xi) = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\varphi_\xi(x)} f(x) dx$$

e sua adjunta formal,

$$(2.14) \quad (\mathcal{G}g)(x) = \int_{\mathbb{R}^3} g(\xi) \varphi_\xi(x) d\xi.$$

Agora é possível reinterpretar as relações de ortogonalidade e completamento em termos dos operadores integrais \mathcal{F} e \mathcal{G} . De fato, se f é uma "função arbitrária" temos,

$$(2.15) \quad \left\{ \begin{aligned} f(\xi) &= \int_{\mathbb{R}^3} f(\xi') \delta(\xi - \xi') d\xi' = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d\xi' f(\xi') \int_{\mathbb{R}^3} dx \varphi(x) \overline{\varphi_{\xi'}(x)} = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} dx \varphi_\xi(x) \int_{\mathbb{R}^3} d\xi' f(\xi') \varphi_{\xi'}(x) = (\mathcal{F}\mathcal{G}f)(\xi) \end{aligned} \right.$$

ou seja, a relação de ortogonalidade (2.8) é equivalente a

$$(2.16) \quad \mathfrak{G} = 1$$

Analogamente, é fácil verificar que a relação de completamento (4.9) significa que uma "função arbitrária" pode ser escrita na forma,

$$(2.17) \quad f = \sum_{k=1}^N (f|\varphi_k)\varphi_k + \mathfrak{G}(f).$$

Portanto, uma função arbitrária pode ser expandida em termos das auto-funções de $(-\Delta+V)$. Note que (2.7) implica que os dois termos no lado direito de (2.17) são ortogonais uma vez que eles são combinações lineares de auto-funções ortogonais entre si. De fato as relações de ortogonalidade implicam a unicidade da decomposição (2.17), i.e., se

$$(2.18) \quad f = \sum_{k=1}^N C_k \varphi_k + \mathfrak{G}g$$

um cálculo formal bastante simples (utilizando (2.6)-(2.8)) mostra que

$$(2.19) \quad C_k = (f|\varphi_k), \quad g = \mathfrak{G}f.$$

A equação (2.18) indica que o espaço de estados $L^2(\mathbb{R}^3)$ deve ser decomposto em uma soma direta ortogonal da forma $L^2(\mathbb{R}^3) = \mathfrak{H}_p(H) \oplus \mathfrak{H}_p(H)^\perp$ (outra vez!) e tendo em vista os comentários e conjecturas feitas na seção anterior devemos ter $\mathfrak{H}_p(H)^\perp = \mathfrak{H}_{ac}(H)$. Em outras palavras, é de se esperar que os elementos de $\mathfrak{H}_{ac}(H)$ sejam da forma, $\varphi = \mathfrak{G}(\mathfrak{G}f)$ com $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$, i.e.,

$$(2.20) \quad \varphi(x) = (Q\mathfrak{F}f)(x) = \int_{\mathbb{R}^3} (\mathfrak{F}f)(\xi) \varphi_{\xi}(x) d\xi.$$

Isto significa que $\mathfrak{H}_{ac}(H)$ é "gerado" pelas auto-funções generalizadas (ou pertencentes ao espectro contínuo) de $(-\Delta+V)$. Além disso, um cálculo formal simples mostra que

$$(2.21) \quad (-\Delta+V) = \sum_{k=1}^N \lambda_k (f|\varphi_k) \varphi_k + Q(|\xi|^2 \mathfrak{F}f).$$

Portanto, como era de se esperar $(-\Delta+V)$ se comporta como o operador de multiplicação pela função $k \rightarrow \lambda_k$ em $\mathfrak{H}_p(H)$ enquanto que em $\mathfrak{H}_{ac}(H)$ ele é "equivalente" (compare com o Corolário(1.9) deste capítulo) ao operador de multiplicação por $|\xi|^2$. Finalmente, a solução de (2.1) pode ser escrita em termos do CONC $\{\varphi_{\xi}\} \cup \{\varphi_k\}$. De fato, devido a relação de completamento, podemos escrever a condição inicial como

$$(2.22) \quad \psi_0(x) = \sum_{k=1}^N (\psi_0 | \varphi_k) \varphi_k + \int_{\mathbb{R}^3} (\mathfrak{F}\psi_0)(\xi) \varphi_{\xi}(x) dx$$

e procurar uma solução da forma,

$$(2.23) \quad \psi(x,t) = \sum_{k=1}^N c_k(t) \varphi_k(x) + \int_{\mathbb{R}^3} c_{\xi}(t) \varphi_{\xi}(x) d\xi.$$

Impondo a EDP e a condição inicial obtém-se então,

$$(2.24) \quad i c_k'(t) = \lambda_k c_k(t), \quad c_k(0) = (\psi_0 | \varphi_k)$$

$$(2.25) \quad i c_{\xi}'(t) = |\xi|^2 c_{\xi}(t), \quad c_{\xi}(0) = (\mathfrak{F}\psi_0)(\xi)$$

e portanto $\psi(x, t)$ deve ser dada por,

$$(2.26) \quad \left\{ \begin{aligned} \psi(x, t) &= \sum_{k=1}^N \exp(-i \lambda_k t) (\psi_0 | \varphi_k) \varphi_k(x) + \\ &+ \int_{R^3} d\xi e^{-i|\xi|^2 t} (\mathfrak{F}\psi_0)(\xi) \varphi(x) = \\ &= \sum_{k=1}^N \exp(-i \lambda_k t) (\psi_0 | \varphi_k) \varphi_k(x) + \mathfrak{G}(e^{-i|\cdot|^2 t} \mathfrak{F}f)(x) \end{aligned} \right.$$

É claro que tudo que fizemos até agora é inteiramente formal e é preciso estabelecer rigorosamente a existência das auto-funções e as propriedades dos operadores \mathfrak{F} e \mathfrak{G} . Vale a pena no entanto continuar trabalhando de maneira formal para obter a conexão entre o que foi dito acima e os operadores de onda, que como vimos, tem um papel central na teoria de espalhamento. Antes porém devemos observar que a situação descrita acima é apenas uma das muitas formas do método de separação de variáveis e expansões em auto-funções. Por exemplo no caso de um oscilador harmônico unidimensional, i.e., o sistema descrito pela hamiltoniana

$$-\frac{d^2}{dx^2} + x^2, \quad \text{tem-se um conjunto ortonormal completo enumerável}$$

contido em $L^2(\mathbb{R})$, a saber, as famosas funções de Hermite (veja, [6], [7], [11, vol I], [37], [38]). Por outro lado a hamiltoniana

$$-\frac{d^2}{dx^2} + Ex, \quad \text{que descreve a interação de uma partícula unidimensional com um campo elétrico de intensidade } E, \text{ tem es-}$$

pectro puramente absolutamente contínuo que coincide com a reta real. Isto pode ser provado (facilmente!) utilizando a transformada de Fourier. As auto-funções correspondentes são as chamadas funções de Airy (veja [37], [33], [52], [53], [54]).

Vamos considerar agora a conexão entre a teoria de espalhamento e expansões em auto-funções. Como observado acima, a expansão em auto-funções associada a H_0 é simplesmente a fórmula de inversão para a transformada de Fourier usual. É natural portanto tentar obter um CONC associado a $(-\Delta+V)$ usando a expansão livre e a perturbação V . A primeira coisa a fazer é procurar candidatos a auto-funções pertencente ao auto-valor $|\xi|^2 \in (0, \infty)$. Para motivar a escolha seja, como acima, $\varphi_{\xi}^0(x) (2\pi)^{-3/2} e^{i\xi \cdot x}$. Lembrando que $(-\Delta \varphi_{\xi}^0) = |\xi|^2 \varphi_{\xi}^0$, a relação de entrelaçamento $H\psi_{\pm} \supset \psi_{\pm} H_0$ implica formalmente: $H\psi_{\pm} \varphi_{\xi}^0 = |\xi|^2 \psi_{\pm} \varphi_{\xi}^0$. Portanto, se conseguirmos fazer sentido disto tudo, as funções $\psi_{\pm} \varphi_{\xi}^0 = \varphi_{\xi}^{\pm}$ definem duas famílias de auto-funções generalizadas de $(-\Delta+V)$ pertencentes ao auto-valor $|\xi|^2$. Na verdade a conexão entre as auto-funções φ_{ξ}^{\pm} e os operadores de onda pode ser escrita de maneira muito mais promissora em termos da transformada de Fourier. Para isso sejam,

$$(2.27) \quad (\mathcal{F}^{\pm} f)(\xi) = \int_{\mathbb{R}^3} f(x) \overline{\varphi_{\xi}^{\pm}(x)} dx.$$

Então, pelo menos formalmente,

$$(2.28) \quad (\mathcal{F}^{\pm} f)(x) = (f | \psi_{\pm} \varphi_{\xi}^0) = (\psi_{\pm}^* f | \varphi_{\xi}^0) = (\mathcal{F}_0 \psi_{\pm}^* f)(\xi)$$

Mas o último membro de (2.28) está perfeitamente bem definido como elemento de $B(L^2(\mathbb{R}^3))$ caso os operadores de onda existam. Podemos portanto esquecer os passos intermediários e definir a transformada de Fourier generalizada através da fórmula

$$(2.29) \quad \mathfrak{F}^\pm = \mathfrak{F}_0 \mathfrak{W}_\pm^*$$

Isto significa que as propriedades de \mathfrak{F}^\pm podem ser estabelecidas a partir das de \mathfrak{W}_\pm e \mathfrak{F} . Por exemplo,

Exercício (2.1) - Suponha que os operadores de onda existem e são fortemente completos, i.e., $\mathfrak{W}(\mathfrak{W}_\pm) = \mathfrak{H}_p(H)^\pm = \mathfrak{H}_{ac}(H)$. Prove que

(i) $\ker \mathfrak{F}^\pm = \mathfrak{H}_p(H)$ e $\mathfrak{F}^\pm \Big|_{\mathfrak{H}_{ac}(H)} : \mathfrak{H}_{ac}(H) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$ é unitário,

(ii) a projeção P_{ac} sobre $\mathfrak{H}_{ac}(H)$ é dada por

$$(2.30) \quad P_{ac} = (\mathfrak{F}^\pm)^* \mathfrak{F}_0^\pm$$

(iii) $P_{ac} Hf = (\mathfrak{F}^\pm)^* M_0 \mathfrak{F}^\pm f$ para todo $f \in D(H)$

(iv) a parte de H em $\mathfrak{H}_{ac}(H)$ é unitariamente equivalente a H_0 , sendo que a equivalência é implementada pelos operadores de onde $\mathfrak{W}^\pm = (\mathfrak{F}^\pm)^* \mathfrak{F}_0$.

As observações acima mostram que se os operadores de onda existem e são fortemente completos podemos definir $\mathfrak{F}^\pm = \mathfrak{F}_0 \mathfrak{W}_\pm^*$ e provar que estes operadores diagonalizam (i.e. transformam em ope

radores de multiplicação) a parte de H em $\mathfrak{H}_{ac}(H)$. Para fazer isto é preciso conseguir provar a existência e completamento dos operadores de onda no contexto tempo dependente. Tais demonstrações foram obtidas recentemente através do chamado método de Enss (veja por exemplo [55], [56] e as referências aí contidas). O método mais tradicional, que adotaremos aqui, consiste em fazer as coisas ao contrário, i.e., primeiro obteremos CONC'S apropriados, $\{\varphi_k\}_{k=1}^N \cup \{\varphi_\xi^\pm\}$, associados a H , estudaremos suas propriedades e em seguida provaremos a relação fundamental

$$(2.30) \quad \mathfrak{W}_\pm = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH} e^{-itH_0} = (\mathfrak{F}^\pm)^* \mathfrak{F}_0.$$

Para utilizar tal procedimento é preciso expressar as auto-funções generalizadas independente de \mathfrak{W}_\pm . Ao obter tais fórmulas passaremos em particular pela relação formal entre os pontos de vista tempo dependente e tempo independente da teoria de espalhamento usual (i.e., com $H(t) = H = -\Delta + V$ para todo $t \in \mathbb{R}$). Em primeiro lugar, cálculos simples (porém puramente formais) mostram que,

$$(2.31) \quad \frac{d}{dt} (e^{itH} e^{-itH_0}) = -i e^{itH_0} V e^{-itH}$$

$$(2.32) \quad e^{itH} \varphi_\xi^+ = e^{-i|\xi|^2 t} \varphi_\xi^+.$$

Além disso $\varphi_\xi^+ = \mathfrak{W}_+ \varphi_\xi^0$ de modo que (2.31) e (2.32) implicam,

$$(2.33) \quad \left\{ \begin{aligned} \varphi_{\xi}^0 &= W_+^* \varphi_{\xi}^+ = \lim_{t \rightarrow \infty} e^{itH_0} e^{-itH} \varphi_{\xi}^+ = \\ &= \varphi_{\xi}^+ - i \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{istH_0} V e^{-isH} \varphi_{\xi}^+ ds = \\ &= \varphi_{\xi}^+ - i \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{-i|\xi|^2 s} e^{isH_0} V \varphi_{\xi}^+ ds \end{aligned} \right.$$

Agora, é um fato conhecido que se $f: [0, \infty) \rightarrow X$, onde X é um espaço de Banach, é limitada e mensurável e se

$$(2.34) \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_0^t f(s) ds = x \in X$$

então o limite abeliano definido pelo lado esquerdo de (2.36) (abaixo) existe e satisfaz

$$(2.35) \quad \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-\epsilon s} f(s) ds = x.$$

A demonstração desse fato (simples) pode ser encontrada em [11; vol. III]. Combinando (2.33), (2.34) e (2.35) segue que

$$(2.36) \quad \varphi_{\xi}^0 = \varphi_{\xi}^+ - \lim_{\epsilon \downarrow 0} i \int_0^{\infty} e^{-\epsilon s} e^{-i|\xi|^2 s} e^{isH_0} V \varphi_{\xi}^+ ds$$

Mas pelo cálculo funcional temos, (verifique!)

$$(2.37) \quad -i \int_0^{\infty} e^{-izs} e^{isH_0} ds = R_0(z), \quad \text{Im}z < 0.$$

Portanto (2.36) e (2.37) implicam,

$$(2.38) \quad \varphi_{\xi}^0 = \varphi_{\xi}^+ + \lim_{\epsilon \downarrow 0} R_0(|\xi|^2 - i\epsilon)V \varphi_{\xi}^+.$$

Um resultado análogo vale para φ_{ξ}^- com $(-i\epsilon)$ substituído por $(i\epsilon)$. Resumindo, as auto-funções φ_{ξ}^{\pm} devem satisfazer a equação de Lippmann-Schwinger,

$$(2.39) \quad \varphi_{\xi}^{\pm} = \varphi_{\xi}^0 - R_0^{\mp}(|\xi|^2)V \varphi_{\xi}^{\pm}$$

onde introduzimos a notação,

$$(2.40) \quad R_0^{\pm}(\lambda) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} R_0(\lambda \pm i\epsilon), \quad \lambda \geq 0.$$

Agora, se $R(z) = (H-z)^{-1}$, $\text{Im}z \neq 0$, é fácil ver que

$$(2.41) \quad (1 + R_0(z)(1 - R(z)V)) = 1 = (1 - R(z)V)(1 + R_0(z)V).$$

Portanto, tomando $z = |\xi|^2 \pm i\epsilon$ conclui-se que

$$(2.42) \quad \varphi_{\xi}^{\pm} = (1 + R_0^{\mp}(|\xi|^2)V)^{-1} \varphi_{\xi}^0 = (1 - R^{\mp}(|\xi|^2)V)\varphi_{\xi}^0$$

onde,

$$(2.43) \quad R^{\pm}(\lambda) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} R(\lambda \pm i\epsilon)$$

É importante observar que os significados de $R_0^{\pm}(\lambda)$, $R^{\pm}(\lambda)$ e $(1 + R_0^{\pm}(|\xi|^2)V)^{-1}$ não são claros! Estes limites não existem em qualquer sentido razoável em $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$. De fato, a definição destes objetos é um problema não trivial que deve ser resolvido

para permitir a formulação da teoria de espalhamento por métodos independentes do tempo (veja a seção 3 deste capítulo, [11, vol. IV], [12], [57], [58]).

É interessante notar que (2.42) pode ser obtida através de argumentos puramente independentes do tempo. De fato, como $V(x)$ tende a zero (suficientemente rápido!) quando $|x| \rightarrow \infty$ as soluções de (2.3) devem se comportar como as de $(-\Delta \varphi_\xi^0) = |\xi|^2 \varphi_\xi^0$ quando $|x|$ é muito grande. Isso indica que devemos procurar soluções de (2.3) com a forma, $\varphi_\xi = \varphi_\xi^0 + v_\xi$ onde $v_\xi(x) \rightarrow 0$ quando $|x| \rightarrow \infty$ (em algum sentido apropriado). Substituindo esta expressão em (2.3) segue que,

$$(2.44) \quad (-\Delta + V - |\xi|^2)v_\xi = -V \varphi_\xi^0 .$$

É preciso portanto resolver uma equação da forma

$$(2.45) \quad (-\Delta + V - \lambda)u = f, \quad \lambda \geq 0.$$

Mas o operador diferencial em (2.46) é (em princípio) não invertível e portanto a equação em questão não pode ser resolvida diretamente. Para sair dessa dificuldade considere

$$(2.46) \quad (-\Delta + V - (\lambda \pm i\varepsilon))u = f.$$

As soluções de (2.46) são

$$(2.47) \quad U_\varepsilon = R(\lambda \pm i\varepsilon)f$$

e portanto as "funções" $U^\pm = R^\pm(\lambda)f$ satisfazem em (2.46) pelo menos formalmente. Tomando $f = -V\varphi_\xi$ obtém-se então duas soluções para (2.44), a saber, $v_\xi^\pm = -R^\pm(|\xi|^2)V\varphi_\xi^0$ a v_ξ^\mp chega-se a (2.42).

A vantagem da dedução utilizando os operadores de onda consiste no fato que ela mostra claramente a conexão entre os pontos de vista dependente e independente do tempo. Na verdade (2.42) é essencialmente uma representação dos operadores de onda em termos do resolvente $R_0(z)$ e de V (no limite com $\pm \text{Im}z \downarrow 0$, $\text{Im}z > 0$). Esta conexão é cuidadosa e exaustivamente explorada, em um contexto abstrato, na (excelente!) referência [58]. Por outro lado, o segundo método indica que é crucial resolver (2.44) para obter $R^\pm(\lambda)$, $\lambda > 0$. Além disso como φ_ξ^0 é limitada, o decaimento do lado direito de (2.45) fica inteiramente determinado por $V(x)$. Se $V(x)$ cai a zero suficientemente rápido no infinito, $V\varphi_\xi^0$ pertence a um subespaço de $L^2(\mathbb{R}^3)$ onde (talvez) $R_0^\pm(\lambda)$ e $R^\pm(\lambda)$ façam sentido. Esta é exatamente a idéia utilizada na construção das auto-funções generalizadas em [12] (e em vários artigos que o precederam). Como nada é perfeito, a imagem dos limites $R_0^\pm(\lambda)$, $R^\pm(\lambda)$ vive em um espaço maior que $L^2(\mathbb{R}^3)$. Isso afinal de contas era de se esperar tendo em vista que as auto-funções generalizadas não são em geral de quadrado integrável.

Vamos considerar agora o espectro pontual. Em primeiro lugar é fácil ver que,

Exercício (3.2) - $Hf = \lambda f$, $f \in D(H)$, $\lambda < 0$ se e só se

$$(2.49) \quad -f = R_0(\lambda)f.$$

Isto significa que o espectro discreto (e as auto-funções correspondentes) são as soluções não triviais (se existirem) da equação integral,

$$(2.50) \quad -f(x) = (4\pi)^{-1} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\exp(-\sqrt{|\lambda|} |x-y|)}{|x-y|} f(y) dy$$

em $L^2(\mathbb{R}^3)$.

Agora, como mostra o célebre exemplo de Wigner e von Neumann, ([11, vol. IV]), é possível construir potenciais tais que H tem auto-valores dentro do espectro essencial $[0, \infty)$. Nesse caso a situação é muito mais delicada. O operador $(-\Delta - \lambda)$ não é inversível e por isso é preciso de novo utilizar um processo de limite. Note que se $Hf = \lambda f$, $\lambda \geq 0$ então $(H_0 - (\lambda \pm i\epsilon))f = -Vf \mp i\epsilon f$ para todo $\epsilon > 0$ de modo que,

$$(2.51) \quad f = -R_0(\lambda \pm i\epsilon)Vf \mp i\epsilon R_0(\lambda \pm i\epsilon)f.$$

Tomando o limite quando $\epsilon \downarrow 0$ em (2.50) e supondo que o resto $(\epsilon R_0(\lambda \pm i\epsilon)f)$ tende a zero obtém-se,

$$(2.52) \quad -f = R_0^\pm(\lambda)Vf$$

que é uma fórmula análoga a (2.48). Este resultado indica, em particular, que não se pode esperar a existência de $(1 + R_0^\mp(|\xi|^2)V)^{-1}$ se $|\xi|^2 \in \Sigma_p(H)$. Cabe ainda notar que se f e λ são tais que

(2.52) é satisfeita nada implica (em princípio) que f é uma auto-função pertencente ao auto-valor λ . A resposta a esta questão, que é afirmativa (pelo menos se λ é positivo, [11, vol IV], [12]), é muito difícil de se obter. A solução deste problema está intimamente ligada à demonstração de que o espectro singularmente contínuo de H é vazio.

Para encerrar esta seção é importante observar que as idéias descritas acima podem ser implementadas na forma em que foram expostas apenas no caso de potenciais de curto alcance (i.e., $V(x) = O(|x|^{-1-\epsilon})$, $\epsilon > 0$, quando $|x| \rightarrow \infty$; para definições mais precisas veja [11; vol IV] e [12]). No caso de longo alcance ($V(x) = O(|x|^{-1+\epsilon})$) a teoria acima tem, muitas vezes, que ser modificada (mas nem sempre! Veja [60]). Por exemplo, no caso Coulombiano, o mais importante para a física, é possível provar que, por um lado que os operadores de onda como definidos acima não existem enquanto que por outro as auto-funções pertencentes ao espectro contínuo não se comportam como $\varphi_{\xi}^0(x)$ quando $|x| \rightarrow \infty$. Uma excelente exposição sobre esta situação pode ser encontrada em ([48]). Para maiores informações sobre o caso de longo alcance o leitor interessado pode consultar [44], [61], [62], [63], [64], [65], [66], [67], [68], [69].

3. Teoria rigorosa a uma dimensão espacial

Nesta seção vamos implementar as idéias e conjecturas das seções anteriores para no caso de uma dimensão espacial. As razões para essa escolha são as seguintes. Em primeiro lugar, nessa situação é possível evitar certas dificuldades técnicas muito sérias que ocorrem em dimensões superiores, sem perder de vista as características principais do problema geral. Além disso várias das estimativas obtidas no caso $n = 1$ podem ser utilizadas no tratamento do problema em dimensões mais altas.

Como indicado na seção anterior, a primeira medida a ser tomada consiste em definir de maneira precisa os limites $R_0^\pm(\lambda)$ e $R^\pm(\lambda)$, $\lambda \geq 0$. Teoremas desse tipo são muitas vezes chamados princípios de absorção limite. Eles podem ser formulados em contexto abstratos bastante gerais como no interessante trabalho de M. Ben Artzi e A. Devinatz, [57], (veja também [58], [70]). Para fazer isto é preciso introduzir certos espaços de funções convenientes.

Exercício (3.1) - Seja $L_s^2(\mathbb{R}^n)$, $s \in \mathbb{R}$, a coleção das funções mensuráveis $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ tais que

$$(3.1) \quad \|f\|_{L_s^2}^2 = \int_{\mathbb{R}^n} (1+|x|^2)^s |f(x)|^2 dx < \infty$$

Note que $L_s^s(\mathbb{R}^n) = (H^s(\mathbb{R}^n))^\wedge$ onde $H^s(\mathbb{R}^n)$ são os espaços de Sobolev (de tipo L^2 ; veja por exemplo [11] vol. II, [31]). Prove que,

(i) $L_s^2(\mathbb{R}^n)$ é um espaço de Hilbert para todo $s \in \mathbb{R}$ em relação ao produto interno,

$$(3.2) \quad \begin{cases} (f | g)_{L_s^2} = \int_{\mathbb{R}^n} (1 + |x|^2)^s f(x) \overline{g(x)} dx = \\ = ((1 + |\cdot|^2)^{s/2} f | (1 + |\cdot|^2)^{s/2} g)_{L^2} \end{cases}$$

Na verdade $L_s^2(\mathbb{R}^n) = L^2(\mathbb{R}^n, (1 + |x|^2)^s dx)$.

(ii) se $s \geq s'$ então $L_s^2(\mathbb{R}^n) \subset L_{s'}^2(\mathbb{R}^n)$ onde a inclusão é um operador contínuo. De fato,

$$(3.3) \quad \|f\|_{L_s^2} \leq \|f\|_{L_{s'}^2}$$

para toda $f \in L_s^2(\mathbb{R}^n)$.

(iii) um operador linear $T \in B(L_s^2(\mathbb{R}^n), L_{s'}^2(\mathbb{R}^n))$ (resp. $B_0(L_s^2(\mathbb{R}^n), L_{s'}^2(\mathbb{R}^n))$) se e só se o operador $\sigma_s, T \sigma_s^{-1} \in B(L^2(\mathbb{R}^n))$ (resp. $B_0(L^2(\mathbb{R}^n))$) onde σ_θ denota o operador de multiplicação pela função

$$(3.4) \quad \sigma_\theta(x) = (1 + |x|^2)^{+\theta/2}$$

Com a notação introduzida acima podemos enunciar e provar o princípio de absorção limite para o operador livre H_0 nos espaços $L_s^2(\mathbb{R})$.

Teorema (3.2) - Sejam $s, s' > 1/2$. Então $R_0(z) \in B(L_s^2(\mathbb{R}), L_{s'}^2(\mathbb{R}))$ para todo $z \notin [0, \infty)$, e para todo $\lambda > 0$ os limites

$$(3.5) \quad R_0^\pm(\lambda) = \lim_{z \rightarrow \lambda} R_0(z), \quad \pm \operatorname{Im} z > 0$$

existem na topologia da norma de $B(L_s^2(\mathbb{R}), L_{s'}^2(\mathbb{R}))$. Além disso as funções,

$$R_0^\pm(z) = \begin{cases} R_0(z), & \pm \operatorname{Im} z > 0 \text{ ou } \operatorname{Im} z = 0, \quad z < 0 \\ R_0^\pm(\lambda), & \operatorname{Im} z = 0, \quad \lambda = 0 \end{cases}$$

são contínuas em relação a esta topologia.

Demonstração - Tendo em vista a parte (iii) do exercício acima (com s' substituído por $(-s')$) basta provar que $\sigma_{-s}, R_0(z)\sigma_s^{-1}$ tem as propriedades enunciadas acima em $B(L^2(\mathbb{R}))$. O exercício (2.7) do Capítulo I mostra então que $\sigma_{-s}, R_0(z)\sigma_s$ é um operador integral com núcleo dado por,

$$(3.6) \quad k(x, y; z) = i(1+x^2)^{-s'/2} \frac{\exp(i\sqrt{z}|x-y|)}{2\sqrt{z}} (1+y^2)^{-s/2}, \operatorname{Im} \sqrt{z} > 0$$

Como $|\exp(i\sqrt{z}|x-y|)| \leq 1$ e $s, s' > 1/2$ é fácil verificar que

$$(3.7) \quad \int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} dy |k(x, y; z)|^2 < \infty, \quad z \notin [0, \infty), \operatorname{Im} \sqrt{z} > 0$$

ou seja $\sigma_{-s}, R_0(z)\sigma_s^{-1}$ é um operador de Hilbert-Schmidt e por-

tanto em particular limitado para todo z como acima. As propriedades de continuidade podem ser provadas de maneira análoga. De fato, se $z, \xi \notin [0, \infty)$, $\text{Im } \sqrt{z}, \text{Im } \sqrt{\xi} > 0$, a parte (viii) do Exercício (3.11) do Capítulo I implica

$$(3.8) \quad \left\{ \begin{array}{l} \|\sigma_{-s}, R_0(z)\sigma_s^{-1} - \sigma_{-s}, R_0(\xi)\sigma_s^{-1}\| \\ \leq \int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} dy (1+x^2)^{-s} (1+y^2)^{-s} \left| \frac{\exp(i\sqrt{z}|x-y|)}{2\sqrt{z}} - \frac{\exp(i\sqrt{\xi}|x-y|)}{2\sqrt{\xi}} \right|^2 \end{array} \right.$$

e o resultado segue facilmente do teorema da convergência dominada.

Q.E.D.

O resultado acima mostra em particular que os vetores $R_0^\pm(\lambda)f$, $\lambda > 0$, $f \in L_s^2(\mathbb{R})$ são limites (na norma de $L_s^2(\mathbb{R})$) de elementos do domínio de H_0 . Cabe portanto perguntar se estes limites são diferenciáveis em algum sentido. A resposta é afirmativa. Para formulá-la de maneira precisa, seja,

$$(3.9) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{H}_{2,s}(\mathbb{R}) = \{f \in L_s^2(\mathbb{R}) \mid \Delta f \in L_s^2(\mathbb{R})\} \\ \|f\|_{2,s} = \|(1-\Delta)f\|_{L_s^2} \end{array} \right.$$

onde $\Delta = \frac{d^2}{dx^2}$ e as derivadas são calculadas no sentido fraco (veja o Exercício (2.5) do Capítulo I). Com essa definição temos o

Corolário (3.3) - Os resultados do teorema (3.1) permanecem verda

deiros com $L^2_{-s}(\mathbb{R})$ substituído por $H_{2,-s}(\mathbb{R})$. Além disso as funções $u^\pm = R_0^\pm(\lambda)f$, $f \in L^2_s(\mathbb{R})$ são soluções de

$$(3.10) \quad (-\Delta - \lambda)u = f, \quad \lambda > 0$$

no sentido que,

$$(3.11) \quad \int_{\mathbb{R}} u^\pm(x) (-\Delta - \lambda) \varphi(x) dx = \int_{\mathbb{R}} f(x) \varphi(x) dx$$

para toda $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ (i.e., u^\pm são soluções de (3.10) no sentido das distribuições temperadas, [11, vol. I], [26], [31], [35]).

Demonstração - Observe primeiro que

$$(3.12) \quad (1 - \Delta) R_0(z)f = f + (1 + z) R_0(z)f$$

e portanto a existência dos limites e as propriedades de continuidade seguem imediatamente do Teorema (3.2) (no entanto não há mais compacidade! Por que?). Para provar a última afirmação, seja $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$. Então

$$(3.13) \quad \left\{ \begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} u^\pm(x) (-\Delta - \lambda) \varphi(x) dx &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} (R_0(\lambda \pm i\epsilon)f | \overline{(-\Delta - \lambda)\varphi}) = \\ &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} ((-\Delta - \lambda) R_0(\lambda \pm i\epsilon)f | \overline{\varphi}) = \\ &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} [(f | \overline{\varphi}) \pm i\epsilon (R_0(\lambda \pm i\epsilon)f | \overline{\varphi})] = \\ &= (f | \overline{\varphi}) = \int_{\mathbb{R}} f(x) \varphi(x) dx \end{aligned} \right.$$

e o resultado está provado.

Q.E.D.

Conseguimos portanto resolver a equação (2.45) de maneira satisfatória no caso em que $V \equiv 0$. Para prosseguir, é necessário agora introduzir hipóteses sobre o potencial $V(x)$. Daqui por diante vamos supor que V é de curto-alcance, i.e., $V(x)$ pode ser escrito na forma,

$$(3.14) \quad \begin{cases} V(x) = (1 + |x|^2)^{-\rho-\gamma} (V_1(x) + V_2(x)) \\ V_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^3), V_2 \in L^2(\mathbb{R}^3), \rho > 1/2, \gamma > 0 \end{cases}$$

No que segue vamos utilizar a seguinte generalização do Teorema (4.11) do Capítulo I,

Exercício (3.4) - Sejam $F_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$, $F_2 \in L^2(\mathbb{R}^n)$, $G \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$, $Q \in L^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ e $F = F_1 + F_2$. Então o operador

$$(3.15) \quad (Af)(x) = F(x) \int_{\mathbb{R}} G(x-y) Q(x,y) f(y) dy$$

pertence a $B_0(L^2(\mathbb{R}^n))$ e satisfaz a desigualdade,

$$(3.16) \quad \|A\| \leq \left(\|F_1\|_{L^\infty} \|G\|_{L^1} + \|F\|_{L^2} \|G\|_{L^2} \right) \|Q\|_{L^\infty}$$

(Sugestão: Imita a demonstração do Teorema (4.11) do Capítulo I.)

Teorema (3.5) - Seja $V(x)$ como em (3.14). Então

$V_s \in B_0(\mathbb{H}_{2,-s}(\mathbb{R}), L^2_{-s+2\rho}(\mathbb{R}))$ para todo $s \geq 0$.

Demonstração - Seja $f \in \mathbb{H}_{2,-s}(\mathbb{R})$. Então,

$$(3.17) \quad Vf = (V(1-\Delta)^{-1} \sigma_{-s}^{-1}) \sigma_{-s}(1-\Delta)f.$$

Como $\sigma_{-s}(1-\Delta)f \in L^2(\mathbb{R})$, a definição de $L^2_{-s+2\rho}(\mathbb{R})$ mostra que basta provar

$$(3.18) \quad A = \sigma_{-s+2\rho}^{-1} V(1-\Delta)^{-1} \sigma_{-s}^{-1} \in B_0(L^2(\mathbb{R})).$$

Mas A é um operador integral com núcleo,

$$(3.19) \quad (1+x^2)^{-\rho} \frac{(V_1(x) + V_2(x))}{(1+x^2)^{\rho+\gamma}} \frac{e^{-|x-y|}}{2} (1+y^2)^{s/2}$$

que pode ser reescrito na forma,

$$(3.20) \quad \frac{V_1(x) + V_2(x)}{(1+x^2)^\gamma} \left(\frac{e^{-|x-y|} (1+|x-y|^2)^{s/2}}{2} \right) \frac{(1+y^2)^{s/2}}{(1+|x-y|^2)^{s/2} (1+x^2)^{s/2}}$$

Podemos então aplicar o lema anterior com

$$(3.21) \quad \begin{cases} F_1(x) = (1+x^2)^{-\gamma} V_1(x) \\ F_2(x) = (1+x^2)^{-\gamma} V_2(x) \\ G(x) = \frac{(1+x^2)^{s/2} e^{-|x|}}{2} \\ Q(x,y) = (1+y^2)^{s/2} (1+|x-y|^2)^{-s/2} (1+x^2)^{-s/2} \end{cases}$$

As hipóteses sobre F_1 , F_2 e G são claramente satisfeitas.

Quanto a $Q(x,y)$ note que,

$$(3.22) \quad \begin{cases} (1+y^2) \leq (1+|y|)^2 \leq (1+|x-y| + |x|)^2 \leq \\ \leq (1+|x-y|)^2 (1+|x|)^2 \leq C(1+|x-y|^2)(1+x^2) \end{cases}$$

para algum constante $c > 0$ e todo $x, y \in \mathbb{R}$ uma vez que a função

$$(3.23) \quad r \in [0, \infty) \longrightarrow (1+r)^2 (1+r^2)^{-1}$$

é limitada com inversa limitada. Isto completa a demonstração.

Q.E.D.

Antes de prosseguir convém notar que a definição de potencial de curto alcance que estamos utilizando não é a mais geral possível. Na verdade a propriedade crucial a ser esperada de um tal potencial é a compacidade que provamos no teorema acima em nosso caso especial. De fato é possível definir o conceito de potencial de curto alcance até em contextos abstratos exigindo simetria e compacidade convenientes (veja [11, vol IV], [12], [57]).

Vamos agora passar ao estudo do operador perturbado. Em primeiro lugar, tomando $s = 0$ segue que V é H_0 -compacto, uma vez que $H_{2,0}(\mathbb{R})$ é precisamente igual a $D(H_0)$. O teorema de Kato-Rellich implica então que $H = H_0 + V$ é auto-adjunto em $D(H_0)$, limitado inferiormente, $\Sigma_e(H) = \Sigma(H_0) = [0, \infty)$. Vamos considerar primeiro o espectro pontual de H . Se $\lambda \in \Sigma_d(H)$,

i.e., $Hf = \lambda f$, $\lambda < 0$ $f \in D(H)$ então,

$$(3.24) \quad -f = R_0(\lambda)Vf$$

e reciprocamente. O estudo de $\Sigma_d(H)$ se reduz portanto à análise da equação integral (3.23). A resolução explícita dessa equação é claramente um problema difícil e só é factível em alguns casos onde $V(x)$ é suficientemente simples. O exemplo mais bem conhecido desta situação é provavelmente o poço quadrado unidimensional (e nesse caso as soluções são obtidas resolvendo a EDO diretamente! Veja por exemplo [6], [7], [9]). Em geral os problemas relativos ao espectro discreto de maior interesse consistem em decidir se $\Sigma_d(H)$ é finito ou infinito e no primeiro caso determinar estimativas do número de auto-valores negativos. Nós não trataremos estas questões no presente texto pois nosso objetivo primário consiste na construção das auto-funções generalizadas associadas a H . O leitor interessado deve consultar o Capítulo XIII de [11, vol. IV] para um tratamento bastante completo, (veja também [71] onde o caso $n=1$ é estudado). O próximo passo consiste em estudar o espectro pontual embebido no contínuo. Para isso seja $Hf = \lambda f$, $f \in D(H)$, $\lambda > 0$. Então, como vimos no final da seção anterior, devemos ter

$$(3.25) \quad -f = R_0(\lambda \pm i\epsilon)Vf \mp i\epsilon R_0(\lambda \pm i\epsilon)f$$

para todo $\epsilon > 0$. Combinando o Corolário (3.3) e o Teorema (3.5) (com $s = \rho$) segue que $R_0^\pm(\lambda)V = \lim_{\epsilon \downarrow 0} R_0(\lambda \pm i\epsilon)V$ existe na norma

de $B(H_{2,-\rho}(\mathbb{R}))$. Conseqüentemente $\lim_{\epsilon \downarrow 0} \epsilon R_0(\lambda \pm i\epsilon)f$ existe em $H_{2,-\rho}(\mathbb{R})$. Vamos provar agora que este limite é zero. De fato temos o

Teorema (3.6) - Seja $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$. Então,

$$(3.26) \quad \lim_{\epsilon \downarrow 0} \epsilon R_0(\lambda \pm i\epsilon)\varphi = 0$$

na norma de $H_{2,-\rho}(\mathbb{R})$. Em particular se $Hf = \lambda f$, $f \in D(H)$, $\lambda > 0$ segue que,

$$(3.27) \quad -f = R_0 \pm (\lambda) Vf.$$

Demonstração - A segunda afirmação segue da primeira devido a (3.25). Para provar (3.26) observe primeiro que devido à definição de $H_{2,-\rho}(\mathbb{R})$ é suficiente mostrar,

$$(3.28) \quad \lim_{\epsilon \downarrow 0} \epsilon \sigma_{-\rho}(1-\Delta) R_0(\lambda \pm i\epsilon)\varphi = 0$$

em $L^2(\mathbb{R})$. Mas $(1-\Delta) R_0(\lambda \pm i\epsilon)\varphi = \varphi + (1+\lambda \pm i\epsilon) R_0(\lambda \pm i\epsilon)\varphi$ e portanto basta verificar

$$(3.29) \quad \lim_{\epsilon \downarrow 0} \epsilon \sigma_{-\rho} R_0(\lambda \pm i\epsilon)\varphi = 0.$$

Para isso observe primeiro que para todo $z \in \mathbb{C}$ com $\text{Im}z \neq 0$ temos,

$$(3.30) \quad \begin{cases} |\operatorname{Im} z| \|R_0(z) \sigma_{-\rho} \varphi\|^2 = |\operatorname{Im}(\varphi | \sigma_{-\rho} R_0(z) \sigma_{-\rho} \varphi)| \leq \\ \leq |(\varphi | \sigma_{-\rho} R_0(z) \sigma_{-\rho} \varphi)| \leq \|\varphi\|^2 \|\sigma_{-\rho} R_0(z) \sigma_{-\rho}\| \end{cases}$$

Portanto,

$$(3.31) \quad |\operatorname{Im} z| \|R_0(z) \sigma_{-\rho}\|^2 \leq \|\sigma_{-\rho} R_0(z) \sigma_{-\rho}\|.$$

Mas $(\sigma_{-\rho} R_0(z))^* = R_0(\bar{z}) \sigma_{-\rho}$ de modo que,

$$(3.32) \quad \|R_0(\bar{z}) \sigma_{-\rho}\| = \|\sigma_{-\rho} R_0(z)\|$$

Conseqüentemente, tomando $z = \lambda \pm i\epsilon$ e combinando (3.31) e (3.32) segue que,

$$(3.33) \quad \begin{cases} \epsilon^2 \|\sigma_{-\rho} R_0(\lambda \pm i\epsilon) \varphi\| \leq \epsilon^2 \|\sigma_{-\rho} R_0(\lambda \pm i\epsilon)\|^2 \|\varphi\|^2 = \\ = \epsilon^2 \|\sigma_{-\rho} R_0(\lambda \mp i\epsilon) \sigma_{-\rho}\|^2 \leq \epsilon \|\sigma_{-\rho} R_0(\lambda \pm i\epsilon) \sigma_{-\rho}\|^2 \|\varphi\|^2. \end{cases}$$

Mas pelo Teorema (3.2) $\lim_{\epsilon \downarrow 0} \sigma_{-\rho} R_0(\lambda \mp i\epsilon) \sigma_{-\rho}$ existe em $B(L^2(\mathbb{R}))$ e o resultado está provado.

Q.E.D.

Nosso próximo objetivo consiste em provar que as equações

$$(3.34) \quad -f = R_0^\pm(\lambda) V f, \quad f \in \mathcal{H}_{2,-\rho}(\mathbb{R}), \quad \lambda > 0$$

tem apenas a solução trivial. Este fato tem conseqüências muito importantes. De saída ele mostra em particular que (3.27) tem a

mesma propriedade e portanto $\Sigma_p(H) \cap (0, \infty) = \{ \}$. Mais ainda, como $R_0^\pm(\lambda)V \in B_0(\mathcal{H}_{2,-\rho}(\mathbb{R}))$ segue que $(1 + R_0^\pm(|\xi|^2)V)^{-1}$ existe para todo $\xi \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ e portanto a fórmula, (veja 2.42),

$$(3.35) \quad \varphi_\xi^\pm = (1 + R_0^\mp(|\xi|^2)V)^{-1} \varphi_\xi^0$$

para as auto-funções generalizadas está perfeitamente bem definida no espaço $\mathcal{H}_{2,-\rho}(\mathbb{R})$.

No que segue vamos considerar o caso de $R_0^+(\lambda)$. O outro pode ser tratado de maneira análoga. Em primeiro lugar convém fazer algumas observações. Seja $f \in \mathcal{H}_{2,-\rho}(\mathbb{R})$. Aplicando o Teorema (3.5) com $s = \rho$ segue $Vf \in L_p^2(\mathbb{R})$. Como $\rho > 1/2$ (e $n=1!$) temos $L_p^2(\mathbb{R}) \subset L^1(\mathbb{R})$ de modo que $(Vf)^\wedge$ é uma função contínua e limitada que tende a zero no infinito. Além disso, se $-f = R_0^+(\lambda)Vf$, o Corolário (3.3) mostra que $(-\Delta - \lambda)f = -Vf$ (pelo menos no sentido fraco ali descrito). Tomando a transformada de Fourier desta identidade segue que $(\xi^2 - \lambda) \hat{f}(\xi) = -(Vf)^\wedge(\xi)$ e portanto $(Vf)^\wedge(\pm\sqrt{\lambda}) = 0$ pelo menos formalmente. Na verdade estas igualdades podem ser provadas de maneira rigorosa. Temos,

Lema (3.7) - Seja $f \in \mathcal{H}_{2,-\rho}(\mathbb{R})$ tal que $-f = R_0^+(\lambda)Vf$. Então $(Vf)^\wedge(\pm\sqrt{\lambda}) = 0$.

Demonstração - Da mesma forma que na prova do Teorema (3.6), é fácil ver que,

$$(3.36) \quad \epsilon \|R_0(\lambda + i\epsilon)Vf\|^2 = |\text{Im}(Vf | R_0(\lambda + i\epsilon)Vf)|$$

para todo $\epsilon > 0$. Tomando então o limite quando $\epsilon \searrow 0$ segue que

$$(3.37) \quad \begin{cases} \lim_{\epsilon \downarrow 0} \epsilon \|R_0(\lambda + i\epsilon)Vf\|^2 = |\operatorname{Im}(Vf | R_0^+(\lambda)Vf)| = \\ = |\operatorname{Im}(Vf | f)| = 0 \end{cases}$$

pois V é uma função real! Usando a fórmula de Parseval para a transformada de Fourier, obtém-se,

$$(3.38) \quad \begin{cases} \epsilon \|R_0(\lambda + i\epsilon)Vf\|^2 = \epsilon \int_{\mathbb{R}} d\xi \frac{|(Vf)^\wedge(\xi)|^2}{(\xi^2 - \lambda)^2 + \epsilon^2} = \\ = \epsilon \int_0^\infty d\xi \frac{|(Vf)^\wedge(\xi)|^2 + |(Vf)^\wedge(-\xi)|^2}{(\xi^2 - \lambda)^2 + \epsilon^2} \end{cases}$$

Escrevendo $(\xi^2 - \lambda) = (\xi - \sqrt{\lambda})(\xi + \sqrt{\lambda})$ e introduzindo a mudança de variável $\eta = \epsilon^{-1}(\xi - \sqrt{\lambda})$, a igualdade em (3.38) toma a forma,

$$(3.39) \quad \begin{cases} \epsilon \|R_0(\lambda + i\epsilon)Vf\|^2 = \int_{\lambda/\epsilon}^\infty \frac{|(Vf)^\wedge(\epsilon\eta + \sqrt{\lambda})|^2 + |(Vf)^\wedge(-\epsilon\eta - \sqrt{\lambda})|^2}{\eta^2(\epsilon\eta + 2\sqrt{\lambda})^2 + \epsilon} d\eta = \\ = \int_{\mathbb{R}} d\eta \chi_{(-\frac{\lambda}{\epsilon}, \infty)}(\eta) \frac{|(Vf)^\wedge(\epsilon\eta + \sqrt{\lambda})|^2 + |(Vf)^\wedge(-\epsilon\eta - \sqrt{\lambda})|^2}{\eta^2(\epsilon\eta + 2\sqrt{\lambda})^2 + 1} \end{cases}$$

Mas então o teorema da convergência dominada implica que

$$(3.40) \quad \begin{cases} 0 = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \epsilon \|R_0(\lambda + i\epsilon)Vf\|^2 = \\ = (|(Vf)^\wedge(\sqrt{\lambda})|^2 + |(Vf)^\wedge(-\sqrt{\lambda})|^2) \int_{\mathbb{R}} \frac{d\eta}{4\lambda\eta^2 + 1} \end{cases}$$

Isto encerra a demonstração.

Q.E.D.

O Lema (3.7) permite reescrever a equação em questão como uma equação de Volterra homogênea de duas maneiras diferentes. De fato $(Vf)^\wedge(\sqrt{\lambda}) = 0$ significa que,

$$(3.41) \quad \int_{-\infty}^x e^{-i\sqrt{\lambda}y} v(y) f(y) dy + \int_x^{\infty} e^{-i\sqrt{\lambda}y} v(y) f(y) dy = 0$$

Portanto se $f = -R_0^+(\lambda)Vf$, temos,

$$(3.42) \quad \left\{ \begin{aligned} -f(x) &= \frac{i}{2\sqrt{\lambda}} \int_{\mathbb{R}} e^{i\sqrt{\lambda}|x-y|} v(y) f(y) dy = \\ &= \frac{ie^{i\sqrt{\lambda}x}}{2\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^x e^{-i\sqrt{\lambda}y} v(y) f(y) dy + \\ &+ \frac{ie^{-i\sqrt{\lambda}x}}{2\sqrt{\lambda}} \int_x^{\infty} e^{i\sqrt{\lambda}y} v(y) f(y) dy = \\ &= \frac{-ie^{i\sqrt{\lambda}x}}{2\sqrt{\lambda}} \int_x^{\infty} e^{-i\sqrt{\lambda}y} v(y) f(y) dy + \\ &+ \frac{ie^{-i\sqrt{\lambda}x}}{2\sqrt{\lambda}} \int_x^{\infty} e^{i\sqrt{\lambda}y} v(y) f(y) dy \end{aligned} \right.$$

Portanto,

$$(3.43) \quad -f(x) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_x^{\infty} \operatorname{sen} \sqrt{\lambda} (x-y) V(y) f(y) dy.$$

De maneira análoga, a relação $(Vf)^{\wedge}(-\sqrt{\lambda}) = 0$ implica,

$$(3.44) \quad -f(x) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^x \operatorname{sen} \sqrt{\lambda} (y-x) V(y) f(y) dy$$

Agora,

Lema (3.8) - Seja f como no Lema (3.7). Então f tem suporte compacto. Em particular $f \in L^2(\mathbb{R})$.

Demonstração - A Equação (3.43) e a desigualdade de Cauchy-Schwartz implicam a seguinte estimativa,

$$(3.45) \quad \left\{ \begin{aligned} |f(x)| &\leq \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_x^{\infty} |V(y)| |f(y)| dy = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_x^{\infty} dy (1+y^2)^{\rho/2} \frac{|V(y)| |f(y)|}{(1+y^2)^{\rho/2}} \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left[\int_x^{\infty} (1+y^2)^{\rho} |V(y)|^2 dy \right]^{1/2} \left[\int_x^{\infty} (1+y^2)^{-\rho} |f(y)|^2 dy \right]. \end{aligned} \right.$$

Portanto qualquer que seja $x_0 \leq x$ temos

$$(3.46) \quad |f(x)| \leq \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left| \int_x^{\infty} (1+|y|^2)^{\rho} |V(y)|^2 dy \right|^{1/2} \| \chi_{[x_0, \infty)} \|_{L_{-\rho}^2}$$

onde χ_S denota como de hábito a função característica do conjunto

to S. Quadrando (3.46), multiplicando por $(1+x^2)^{-\rho} \chi_{[x_0, \infty)}$ e integrando em relação a x segue que,

$$(3.47) \quad \begin{cases} \| \chi_{[x_0, \infty)} f \|_{L^2_{-\rho}}^2 \leq \frac{1}{\lambda} \int_{x_0}^{\infty} (1+x^2)^{-\rho} dx \times \\ \times \int_{x_0}^{\infty} (1+y^2)^{\rho} |V(y)|^2 dy \| \chi_{[x_0, \infty)} f \|_{L^2_{-\rho}}^2 \end{cases}$$

Agora escolha x_0 tal que o produto das duas integrais sobre $[x_0, \infty)$ é menor que $(\lambda/2)$. Nesse caso $\chi_{[x_0, \infty)} f = 0$ ou seja $f(x) = 0$ em $[x_0, \infty)$ (note que f é contínua!). Um argumento semelhante utilizando (3.44) mostra que $f(x) = 0$ em $(-\infty, x'_0]$ para algum $x'_0 \in \mathbb{R}$. Segue portanto que f tem suporte compacto. Este fato combinado com a continuidade implica que $f \in L^2(\mathbb{R})$ e o lema está provado.

Q.E.D.

Agora seja $\alpha > 0$ tal que $f(x) = 0$ em $\mathbb{R} \setminus [-\alpha, \alpha]$. Então (3.43) se reduz a

$$(3.48) \quad -f(x) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\alpha}^x \text{sen } \sqrt{\lambda} (x-y) V(y) f(y) dy$$

que é uma equação de Volterra em $L^2[-\alpha, \alpha]$ com núcleo

$$(3.49) \quad k(x, y; \lambda) = \frac{\text{sen } \sqrt{\lambda} (x-y)}{\sqrt{\lambda}} V(y) \in L^2[-\alpha, \alpha] \times [-\alpha, \alpha].$$

Como é bem sabido (capítulo 5 de [32]) equações desse tipo tem

uma única solução. Mas então $f = 0$ pois (3.) é homogênea.

Resumindo,

Teorema (3.9) - Se $f \in \mathcal{H}_{2,-\rho}(\mathbb{R})$ satisfaz uma das equações

$$(3.50) \quad -f = R_0^\pm(\lambda) \text{ Vf, } \lambda > 0$$

então $f = 0$. Em particular (devido ao Teorema (3.6)), H não tem auto-valores positivos.

Agora, lembrando a relação $R(z) = R_0(z) - R_0(z)VR(z)$, segue que

$$(3.51) \quad R(z) = (1 + R_0(z))^{-1} R_0(z).$$

Tendo em vista os resultados e técnicas apresentados acima é fácil provar o princípio da absorção limite para H , a saber,

Exercício (2.10) - Os limites

$$(3.52) \quad R^\pm(z) = \lim_{z \rightarrow \lambda} R(z) = (1 + R_0^\pm(\lambda)V)^{-1} R_0^\pm(\lambda)$$

onde $\pm \text{Im}z > 0$ existem para todo $\lambda > 0$ na topologia da norma de $B(L_p^2(\mathbb{R}), \mathcal{H}_{2,-\rho}(\mathbb{R}))$ e as funções

$$R^\pm(z) = \begin{cases} R(z), & \pm \text{Im}z > 0 \text{ ou } \text{Im}z = 0, \quad z < 0 \\ & z \notin \Sigma_d(H) \\ R^\pm(\lambda), & \text{Im}z = 0, \quad z = \lambda > 0 \end{cases}$$

são contínuas nessa topologia. Além disso se $f \in L^2_{\rho}(\mathbb{R})$ então $U^{\pm} = R^{\pm}(\lambda)f$ são soluções da equação

$$(3.53) \quad (-\Delta + V - \lambda)u = f$$

no sentido que

$$(3.54) \quad \int_{\mathbb{R}} u^{\pm}(x)(-\Delta + V - \lambda)\varphi(x)dx = \int_{\mathbb{R}} f(x)\varphi(x)dx$$

para toda $\varphi \in \mathcal{H}(\mathbb{R})$ (ou seja no sentido das distribuições temperadas). É conveniente notar devido ao Teorema (3.5) (com $s = \rho$) temos $R^{\pm}_0(\lambda)V \in \mathcal{B}_0(\mathcal{H}_{2,-\rho})$ de modo que $(1 + R^{\pm}_0(\lambda)V)^{-1}$ está bem definido em $\mathcal{H}_{2,-\rho}(\mathbb{R})$ e portanto (3.52) faz sentido.

Agora podemos provar

Teorema (3.11) - $\mathcal{H}_{sc}(H) = \{0\}$ e portanto

$$(3.55) \quad L^2(\mathbb{R}) = \mathcal{H}_{\rho}(H) \oplus \mathcal{H}_{ac}(H).$$

Demonstração - Sejam $[a, b] \subset (0, \infty)$ e $f \in L^2_{\rho}(\mathbb{R})$. Então

$E_H([a, b]) = E_H((a, b))$ e portanto os exercícios (1.7) e (3.10) deste capítulo mostram que

$$(3.56) \quad (E_H([a, b])f|f) = \frac{1}{2\pi i} \int_{[a, b]} \langle R^+(\lambda)f - R^-(\lambda)f, f \rangle d\lambda$$

onde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota o parêntese de dualidade entre $L^2_{\rho}(\mathbb{R})$ e $L^2_{-\rho}(\mathbb{R})$, i.e.,

$$(3.57) \quad \langle \varphi, \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \varphi(x) \overline{\psi(x)} dx$$

para toda $\varphi \in L^2_{-p}(\mathbb{R})$, $\psi \in L^2_p(\mathbb{R})$. Se $[c, d] \subset \mathbb{R}$ é um intervalo fechado qualquer é fácil verificar que

$$(3.58) \quad \begin{cases} (E_H([c, d]) E_H([a, b])f | f) = \\ = \frac{1}{2\pi i} \int_{[c, d] \cap [a, b]} \langle R^+(\lambda)f - R^-(\lambda)f, f \rangle d\lambda \end{cases}$$

Mas $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$, a σ -álgebra de Borel, é gerada pelos intervalos fechados e portanto se $S \in \mathfrak{B}(\mathbb{R})$,

$$(3.59) \quad (E_H(S) E_H([a, b])f | f) = \frac{1}{2\pi i} \int_{S \cap [a, b]} \langle R^+(\lambda)f - R^-(\lambda)f, f \rangle d\lambda$$

O lado esquerdo de (3.57) é igual a

$(E_H(S) E_H([a, b])f | E_H(S) E_H([a, b])f)$ de modo que se $|S| = 0$ então $E_H(S) E_H([a, b])f = 0$. Conseqüentemente

$$(3.60) \quad E_H([a, b])f \in \mathfrak{H}_{ac}(H), \quad f \in L^2_p(\mathbb{R})$$

e portanto qualquer que seja $f \in \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R})$ e $[a, b] \subset (0, \infty)$, pois $L^2_p(\mathbb{R})$ é denso em $L^2(\mathbb{R})$ e $\mathfrak{H}_{ac}(H)$ é fechado. Como E_H é contínua à direita e $\mathfrak{H}_{ac}(H)$ é subespaço fechado, segue que,

$$(3.61) \quad E_H([0, \infty))f = \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ b \rightarrow \infty}} E([a, b])f \in \mathfrak{H}_{ac}(H)$$

para toda $f \in \mathcal{H}$. Mas

$$(3.62) \quad L^2(\mathbb{R}) = E_H((-\infty, 0))(\mathcal{H}) \oplus E_H([0, \infty))(\mathcal{H})$$

Como $E_H((-\infty, 0))(\mathcal{H}) \subset \mathcal{H}_p(\mathcal{H})$ o teorema está demonstrado.

Q.E.D.

Para finalizar resta estabelecer a conexão entre os resultados acima e as auto-funções generalizadas dadas por (3.35). A primeira coisa a fazer consiste em introduzir as transformadas de Fourier generalizadas,

$$(3.63) \quad (\mathcal{F}^\pm f)(\xi) = \int_{\mathbb{R}} \overline{\varphi_\xi^\pm(x)} f(x) dx, \quad f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$$

Note que a fórmula (3.63) faz sentido para todo $\xi \neq 0$ pois $\varphi_\xi^\pm \in \mathcal{H}_{2, -\rho}(\mathbb{R}) \subset L^2_{-\rho}(\mathbb{R})$ e $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$. Vamos provar que \mathcal{F}^\pm podem ser estendidos como operadores limitados a todo $L^2(\mathbb{R})$. Temos

Teorema (3.12) - Seja $[a, b] \subset (0, \infty)$. Então,

$$(3.64) \quad \|E_H([a, b])f\|^2 = \int_{\xi^2 \in [a, b]} |(\mathcal{F}^\pm f)(\xi)|^2 d\xi$$

para toda $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$

Demonstração - Combinando a fórmula (3.56) com a primeira equação do resolvente e com a transformada de Fourier segue que

$$(3.65) \quad \left\{ \begin{aligned} \|E([a, b])f\|^2 &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{\epsilon}{\pi} \int_a^b \|R(\lambda \pm i\epsilon)f\|^2 d\lambda = \\ &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{\epsilon}{\pi} \int_a^b \|(R(\lambda \pm i\epsilon)f)^\wedge\|^2 d\lambda \end{aligned} \right.$$

Agora note que $(R(z)f)^\wedge = (\xi^2 - z)^{-1} \tilde{f}(\xi; z)$ onde

$$(3.66) \quad \tilde{f}(\xi; z) = \int_{\mathbb{R}} f(x) [(1 - R(\bar{z})V)\varphi_\xi^0](x) dx.$$

De fato, $R(z) = R_0(z)(1 - VR(z))$ de modo que, $(R(\xi)f)^\wedge(\xi) = (\xi^2 - z)^{-1}((1 - VR(z))f)^\wedge(\xi)$. Mas

$$(3.67) \quad \left\{ \begin{aligned} ((1 - VR(z))f)^\wedge(\xi) &= ((1 - VR(\bar{z})f)|\varphi_\xi^0) = \\ &= (f | (1 - R(\bar{z})V)\varphi_\xi^0) \end{aligned} \right.$$

e o lado direito desta igualdade é precisamente a função $\tilde{f}(\xi; z)$ definida em (3.66). Aplicando então o teorema de Fubini e o teorema da convergência dominada, obtém-se

$$(3.68) \quad \left\{ \begin{aligned} \|E_H([a, b])f\|^2 &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{\epsilon}{\pi} \int_a^b d\lambda \|R(\lambda \pm i\epsilon)f\|^2 = \\ &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{\mathbb{R}} d\xi \frac{\epsilon}{\pi} \int_a^b d\lambda \frac{|\tilde{f}(\xi; \lambda \pm i\epsilon)|^2}{(|\xi|^2 - \lambda)^2 + \epsilon^2} = \\ &= \int_{\xi^2 \in [a, b]} |\tilde{f}(\xi; |\xi|^2 \pm i0)|^2 d\xi = \int_{\xi^2 \in [a, b]} |(\mathcal{R}^\pm f)(\xi)|^2 d\xi \end{aligned} \right.$$

e o resultado está provado.

Q.E.D.

O Teorema (3.12) tem como consequência imediata o

Exercício (2.13) - Seja $S \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$. Então

$$(3.69) \quad \|E_H(S)f\|^2 = \int_{\xi^2 \in S} |\mathcal{F}^\pm f(\xi)|^2 d\xi.$$

Em particular a restrição de $E_H(\cdot)$ a $(0, \infty)$ é absolutamente contínua e se $S = (0, \infty)$ segue $E_H(0, \infty) \subset \mathcal{H}_{ac}(H)$ (como já sabíamos devido à demonstração do Teorema (3.11)) e

$$(3.70) \quad \|E_H(0, \infty)f\|^2 = \|\mathcal{F}^\pm f\|^2$$

para toda $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$. As aplicações \mathcal{F}^\pm podem portanto ser estendidas de maneira única como operadores limitados definidos em todo o $L^2(\mathbb{R})$ e (3.69) vale para toda $f \in L^2(\mathbb{R})$ (com \mathcal{F}^\pm denotando também as extensões em questão). Mais ainda,

$$(3.71) \quad E_H(S) = (\mathcal{F}^\pm)^* \chi_{\{\xi^2 \in S\}} \mathcal{F}^\pm$$

e portanto

$$(3.72) \quad E_H((0, \infty)) = (\mathcal{F}^\pm)^* \mathcal{F}^\pm.$$

Resta agora provar que os operadores de onda são fortemente completos no sentido definido por (1.37) e (1.38). Para começar convém introduzir as transformadas inversas generalizadas Q^\pm pelas fórmulas,

$$(3.73) \quad Q^\pm = (\mathfrak{F}^\pm)^*$$

Então,

Exercício (3.14) - Prove que

$$(3.74) \quad Q^\pm f = \lim_{j \rightarrow \infty} \int_{K_j} \varphi_\xi(x) f(\xi) d\xi, \quad f \in L^2(\mathbb{R})$$

onde $K_j \subset \mathbb{R}$ é uma seqüência crescente de conjuntos compactos tais que $\bigcup_{j=1}^{\infty} K_j = \mathbb{R} \setminus \{0\}$ e o limite deve ser interpretado na topologia de $L^2(\mathbb{R})$. Além disso,

$$(3.75) \quad \ker \mathfrak{F}^\pm = \mathfrak{H}_p(H)$$

$$(3.76) \quad Q^\pm \mathfrak{F}^\pm = P_{ac}(H)$$

$$(3.77) \quad \mathfrak{F}^\pm g^\pm = 1$$

onde $P_{ac}(H)$ denota a projeção ortogonal sobre $\mathfrak{H}_{ac}(H)$. Verifique também que os operadores

$$(3.78) \quad Q^\pm: L^2(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathfrak{H}_{ac}(H)$$

$$(3.79) \quad \mathfrak{F}^\pm \Big|_{\mathfrak{H}_{ac}(H)}: \mathfrak{H}_{ac}(H) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$$

são unitários e que vale a relação de Parseval generalizada, i.e.,

$$(3.80) \quad \|f\|^2 = \sum_{j=1}^N |(f|\varphi_j)|^2 + \|\mathfrak{F}^\pm f\|^2$$

onde $\{\varphi_j\}_j^N$ é a coleção das auto-funções usuais de H e N pode ser infinito (e nesse caso a série obtida é convergente).

Finalmente,

Teorema (3.15) - Os operadores de onda w_{\pm} associados ao par H, H_0 são fortemente completos. Na verdade,

$$(3.81) \quad w_{\pm} = (x^{\pm})^* \mathfrak{F}_0$$

Demonstração - O que segue é apenas um esquema dos argumentos que conduzem a (3.81). O leitor diligente é convidado a justificar rigorosamente todas as passagens abaixo. Vamos considerar w_+ . O caso w_- é idêntico. Em primeiro lugar note que

$$(3.82) \quad w_+ = s\text{-}\lim_{\epsilon \downarrow 0} 2\epsilon \int_0^{\infty} ds e^{-2\epsilon s} e^{isH} e^{-isH_0}$$

Como todas as famílias de operadores em questão são uniformemente limitadas, para provar (3.82) basta verificar que

$$(3.83) \quad w_+ f = \lim_{\epsilon \downarrow 0} 2\epsilon \int_0^{\infty} ds e^{-2\epsilon s} e^{isH} e^{-isH_0} f$$

para toda $f \in \mathfrak{S}(\mathbb{R})$. Seja então

$$(3.84) \quad \begin{cases} h(\epsilon) = 2\epsilon \int_0^{\infty} ds e^{-2\epsilon s} e^{isH} e^{-isH_0} f, \\ = - \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t ds \frac{d}{ds} (e^{-2\epsilon s}) e^{isH} e^{-isH_0} f \end{cases}$$

com $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$. Integrando por partes,

$$(3.85) \quad \left\{ \begin{aligned} k(\epsilon) &= - \lim_{t \rightarrow \infty} \left[e^{-\epsilon s} e^{isH} e^{-isH_0} \right]_0^t - \\ &- \int_0^t ds e^{-2\epsilon s} \frac{d}{ds} (e^{isH} e^{-isH_0} f) \\ &= f + \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{-2\epsilon s} \frac{d}{ds} (e^{isH} e^{-isH_0} f) ds \end{aligned} \right.$$

Tendo em vista (3.84) segue que

$$(3.86) \quad \left\{ \begin{aligned} \lim_{\epsilon \downarrow 0} h(\epsilon) &= f + \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t ds \frac{d}{ds} (e^{isH} e^{-isH_0} f) = \\ &= f + w_+ f - f = w_+ f \end{aligned} \right.$$

Isto prova (3.). Agora,

$$(3.87) \quad w_+ = s\text{-}\lim_{\epsilon \downarrow 0} 2\epsilon \int_0^\infty ds (e^{-\epsilon s} e^{isH} e^{-\epsilon s} e^{isH_0})^*$$

Mas se A é um operador auto-adjunto o cálculo funcional mostra que

$$(3.88) \quad \int_0^\infty (e^{-\epsilon s} e^{iAs} e^{-is\lambda}) e^{-\epsilon s} ds = i(A - (\lambda - i\epsilon))^{-1}$$

e portanto (3.87) pode ser reescrita na forma (aplicando a identidade de Parseval!),

$$(3.89) \quad w_+ = s\text{-}\lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{\epsilon}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda R(\lambda - i\epsilon) R_0(\lambda + i\epsilon).$$

Mas $R(z)(H_0 - z) = R(z)(H_0 + V - z) - R(z)V = 1 - R(z)V$ se $\text{Im}z \neq 0$ de modo que,

$$(3.90) \quad w_+ = s\text{-}\lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{\epsilon}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (1 - R(\lambda - i\epsilon)V) R_0(\lambda - i\epsilon) R_0(\lambda + i\epsilon) d\lambda$$

Sejam $f, g \in \mathfrak{S}(\mathbb{R})$. Então,

$$(3.91) \quad (w_+ f | g) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \frac{\epsilon}{\pi} (R_0(\lambda - i\epsilon) R_0(\lambda + i\epsilon) f | q(\lambda + i\epsilon) g)$$

onde

$$(3.92) \quad q(\lambda + i\epsilon) = (1 - VR(\lambda + i\epsilon))g$$

Aplicando então a transformada de Fourier usual,

$$\begin{aligned} (w_+ f | g) &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \frac{\epsilon}{\pi} ((R_0(\lambda - i\epsilon) R_0(\lambda + i\epsilon) f)^\wedge | q(\lambda + i\epsilon)^\wedge) = \\ &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \frac{\epsilon}{\pi} \int_{\mathbb{R}^3} d\xi \frac{1}{(|\xi|^2 - \lambda)^2 + \epsilon^2} \hat{f}(\xi) \overline{(q(\lambda + i\epsilon))^\wedge(\xi)} \\ &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \hat{f}(\xi) \frac{\epsilon}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \frac{(q(\lambda + i\epsilon))^\wedge(\xi)}{(|\xi|^2 - \lambda)^2 + \epsilon^2} = \\ &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \hat{f}(\xi) \frac{\epsilon}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{(|\xi|^2 - \lambda)^2 + \epsilon^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi^0(x) (1 - VR(\lambda + i\epsilon))g = \end{aligned}$$

$$= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \hat{f}(\xi) \frac{\epsilon}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{(|\xi|^2 - \lambda)^2 + \epsilon^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx g(x) (1 - R(\lambda - i\epsilon)V)\phi_\xi =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \hat{f}(\xi) (\mathfrak{F}^+g)(\xi) = (\mathfrak{F}_0 f | \mathfrak{F}^+g) = ((\mathfrak{F}^+)^* \mathfrak{F}_0 f | g)$$

e isto encerra a demonstração.

Q.E.D.

CAPÍTULO IV

TEORIA DE ESPALHAMENTO COM HAMILTONIANAS DEPENDENTES DO TEMPO

Neste capítulo vamos considerar a teoria existente no caso em que a hamiltoniana em questão depende explicitamente do tempo. Como veremos, tal teoria está longe de ser tão satisfatória como aquela estudada no capítulo anterior. Existem essencialmente duas situações distintas a saber,

- a) a dependência temporal é amortecida. Neste caso o potencial deve satisfazer condições de integrabilidade e/ou variação limitada em relação à variável t em topologias convenientes.
- b) a dependência temporal é não amortecida. Nesta situação se encontram os potenciais periódicos e quase-periódicos (no tempo) que são de grande interesse em física.

Antes de prosseguir convém notar que a grande dificuldade envolvida no que segue consiste em identificar os estados de espalhamento. De maneira mais precisa, lembre que no capítulo anterior fomos levados mais ou menos naturalmente à conjectura que o espaço de estados $L^2(\mathbb{R}^n)$ se decompõe na soma direta $\mathcal{H}_{ac}(H) \oplus \mathcal{H}_p(H)$ e além disso $\mathcal{H}_{ac}(H)$ é exatamente a coleção das condições iniciais para as quais a solução da equação de Schrödinger é assintoticamente livre (i.e., se comporta como partícula livre

quando $t \rightarrow \pm\infty$). É necessário então obter um substituto para este subespaço quando a hamiltoniana depende explicitamente do tempo. Na verdade este é um problema difícil e são muito poucas as situações para as quais existe uma resposta satisfatória. O caso a) foi estudado em [77] e [78], onde aparecem formulações abstratas do problema juntamente com aplicações a operadores da forma $H(t) = H_0 + q(t)$. Tipicamente, toda solução da equação de Schrödinger se comporta como uma partícula livre quando $t \rightarrow \pm\infty$. Não existem estados ligados. O segundo caso é bem mais complicado e certas anomalias podem ocorrer (veja [79] e a seção 2). Dentro do nosso conhecimento, apenas o caso periódico foi tratado de maneira satisfatória ([67], [73], [80], [81], [82]) restando assim uma grande variedade de problemas em aberto. O caso quase-periódico por exemplo que é muito interessante permanece intocado.

Nas seções que seguem vamos tentar descrever os resultados de uma parte dos artigos mencionados acima procurando evitar ao máximo as complicações técnicas (que são muitas!). Além disso, neste capítulo suporemos sempre a existência de um único propagador associado a qualquer das equações que considerarmos.

1. O caso amortecido

Para fixar as idéias, suponha que $V(x, t)$ satisfaz,

$$(1.1) \quad \begin{cases} V(\cdot, t) = V_1(\cdot, t) + V_2(\cdot, t), & t \in \mathbb{R} \\ V_1(\cdot, t) = L_\infty^\infty(\mathbb{R}^3), & V_2 \in L^2(\mathbb{R}^3) \end{cases}$$

de modo que $H(t) = H_0 + V(\cdot, t)$ é um operador auto-adjunto com $D(H(t)) = D(H_0) = H^2(\mathbb{R}^3)$, $t \in \mathbb{R}$. Seja $\mathfrak{S} = D(H_0)$ munido da norma do gráfico, i.e.,

$$(1.2) \quad \|f\|^2 = \|f\|_{L^2}^2 + \|H_0 f\|_{L^2}^2, \quad f \in \mathfrak{S}$$

Note que $V(t) \in B(\mathfrak{S}, L^2(\mathbb{R}^3))$ para todo $t \in \mathbb{R}$ fixo.

Em analogia com o caso das hamiltonianas independentes do tempo defina os operadores de onda (com condição inicial no instante s) como sendo,

$$(1.3) \quad w_{\pm}(s) = w_{\pm}(H(\cdot), H_0; s) = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} U(t, s)^* e^{-i(t-s)H_0}$$

caso estes limites existam.

Exercício (1.1) - Prove que $w_{\pm}(s)$ existe para algum $s \in \mathbb{R}$ se e só se $w_{\pm}(s)$ existe para todo $s \in \mathbb{R}$ e nesse caso

$$(1.4) \quad w_{\pm}(s') = U(s, s')^* w_{\pm}(s) e^{-i(s-s')H_0}, \quad s, s' \in \mathbb{R}$$

Devido ao Exercício (1.1) podemos supor sem perda de generalidade que $s = 0$. Para simplificar a notação escreveremos simplesmente $w_{\pm}(0) = w_{\pm} = w_{\pm}(H(\cdot), H_0)$. A primeira coisa a notar é

Proposição (1.2) - Suponha que $V(\cdot, t)$ satisfaz (2.4) do Capítulo II e além disso

$$(1.4) \quad V(\cdot, t) \in L^1(\{t \geq a\}, B(\mathfrak{S}, L^2(\mathbb{R}^3)))$$

para algum $a > 0$. Isto significa que a função $t \mapsto V(t)$ é integrável no sentido de Bochner ([32]) em $[a, \infty)$. Então o operador w_+ existe.

Demonstração - Observe primeiro que $\exp(-itH_0) \in B(\mathfrak{S})$ e é unitário para todo $t \in \mathbb{R}$. De fato, estas afirmações são uma consequência trivial da fórmula

$$(1.5) \quad \| \| e^{-itH_0} f \| \| = \| f \|^2 + \| H_0 e^{-itH_0} f \| = \| f \|^2, \quad t \in \mathbb{R}$$

Vamos agora aplicar o método de Cook-Kuroda. Seja

$$(1.6) \quad w(t) = U(t, 0)^* e^{-itH_0}$$

de modo que $w_+ = s\text{-}\lim_{t \rightarrow +\infty} w(t)$ se o limite existir. Uma vez que $w(t)$ é uniformemente limitado, basta provar que o limite existe em um sub-conjunto denso de $L^2(\mathbb{R})$ que tomaremos como sendo $H^2(\mathbb{R}^3) = D(H_0)$. Tendo em vista a primeira aplicação feita na seção 2 do Capítulo II segue que $w(t)f$ pode ser derivado na topologia da norma de $L^2(\mathbb{R}^3)$. Calculando a derivada e utilizando as equações diferenciais satisfeitas por $U(t, t')$ e $e^{-i(t-t')H_0}$ obtém-se

$$(1.7) \quad w(t)f - w(t')f = -i \int_{t'}^t U(s, 0)^* V(\cdot, s) e^{-isH_0} f ds$$

Conseqüentemente,

$$(1.8) \quad \|w(t)f - w(t')f\| \leq \int_{t'}^t \|V(\cdot, s)\|_{B(\mathbb{S}, L^2(\mathbb{R}^3))} \|f\| ds$$

e o resultado está provado pois devido à condição (1.4) o lado direito de (1.8) tende a zero quando $t, t' \rightarrow \infty$.

Q.E.D.

É claro que vale um resultado análogo para w_- . A próxima coisa a fazer é atacar a questão do completamento dos operadores de onda. Utilizando métodos análogos aos do Capítulo III é fácil verificar

Exercício (1.3) - Prove que se $f \in \mathcal{R}(w_+)$ então $U(t,0)f$ se comporta como partícula livre quando $t \rightarrow +\infty$, i.e., existe (uma única) $\varphi \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ tal que,

$$(1.9) \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \|U(s,0)f - e^{-itH_0} f\|_{\mathcal{H}} = 0.$$

Resultado análogo vale para w_- .

É portanto natural tentar identificar a imagem dos operadores w_{\pm} e verificar se elas coincidem entre si e com a coleção dos estados de espalhamento, i.e., a classe das $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$ tais que

$$(1.10) \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} P(t, S; f) = 0$$

para todo $S \subset \mathbb{R}^3$ limitado e mensurável, onde $P(t, S; f)$ é a probabilidade definida na equação (0.9) da introdução. No caso amor-tecido a resposta é muito simples. Com uma hipótese adicional

(veja o Teorema (1.4) abaixo) segue que $\mathcal{R}(W_{\pm}) = L^2(\mathbb{R}^3)$, ou seja todos os elementos do espaço de estados dão origem a estados de espalhamento. Em outras palavras não existem estados ligados. Para provar este resultado, basta mostrar que $s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} W(t)^*$ existe pois nesse caso é fácil verificar que W_{\pm} é unitário. De fato a existência do limite acima implica que

$$(1.10) \quad \begin{cases} W_{\pm}^* &= s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} W_{\pm}(t)^* \\ W_{\pm}^* W_{\pm} &= W_{\pm} W_{\pm}^* = I \end{cases}$$

Devido a essa observação é natural tentar aplicar o método de Cook-Kuroda a $W(t)^*$. Notando que $U(t, t')(\mathcal{S}) \subset \mathcal{S}$, e argumentando como na proposição (1.2) obtém-se

$$(1.11) \quad \|W(t)^* f - W(t')^* f\|_{\mathcal{H}} \leq \int_{t'}^t \|q(s)\|_{B(\mathcal{S}, \mathcal{H})} \|U(s, 0)f\| ds$$

onde $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$, $\mathcal{S} = D(H_0) = H^2(\mathbb{R}^3)$ munido da norma do gráfico $\|\cdot\|$ (veja (1.2)) e $f \in \mathcal{S}$. Agora, é possível provar (veja a seção 2 de [77] e a demonstração do teorema 2 de [83])

$$(1.12) \quad \|U(t, t')\|_{B(\mathcal{S})} \leq C \exp[C \text{Var}(V; [t, t'])]$$

onde $C > 0$ é uma constante e a variação de uma função \mathfrak{f} definida em um intervalo $I \subset \mathbb{R}$ tomando valores no espaço de Banach X é dada pela quantidade,

$$(1.13) \quad \text{Var}(\mathfrak{f}, I) = \sup \sum_{j=1}^{n-1} \|\mathfrak{f}(t_{j+1}) - \mathfrak{f}(t_j)\|_X$$

onde o supremo deve ser tomado sobre todas as seqüências finitas em I da forma $t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n$. Então

Teorema (1.4) - Suponha que as condições da Proposição (1.2) são satisfeitas e que além disso

$$(1.14) \quad \text{Var}(V; \mathbb{R}) = K < \infty.$$

Então os operadores de onda são unitários.

Demonstração - Combinando a equação (1.11) com a hipótese (1.14) segue que,

$$(1.15) \quad \|w(t)^* f - w(t')^* f\| \leq K \|f\| \int_{t'}^t \|q(s)\|_{B(\mathfrak{S}, \mathfrak{H})} ds$$

para toda $f \in \mathfrak{S}$ e o teorema está provado.

Q.E.D.

Para finalizar esta seção é conveniente fazer alguns comentários. Observe em primeiro lugar que os resultados aqui apresentados são muito diferentes daqueles obtidos no caso das hamiltonianas independentes do tempo. Por exemplo, como mencionado no final da seção 2 do Capítulo III os operadores de onda usuais não existem no caso do potencial Coulombiano $V_c(x) = C|x|^{-1}$ e a teoria deve ser modificada. No entanto é muito fácil verificar que o potencial

$$(1.16) \quad V_\epsilon(x, t) = C \exp(-\epsilon|t|) |x|^{-1}$$

satisfaz as condições de integrabilidade e variação limitada do Teorema (1.4) (a não diferenciabilidade de $V(\cdot, t)$ em $t = 0$ não atrapalha em nada a existência do propagador; como mencionado na seção 3 do Capítulo II é possível substituir a diferenciabilidade forte da família $A(t)$ por hipóteses mais fracas, [46], [47]). Consequentemente, se $\epsilon > 0$, os operadores de onda associados a $V_\epsilon(x, t)$ existem e são unitários. É então extremamente tentador procurar tomar o limite quando $\epsilon \downarrow 0$ da teoria obtida com $\epsilon > 0$ e assim tratar o caso Coulombiano. Infelizmente não é possível fazer tal coisa. Dollard ([84]) provou que os operadores de onda construídos com $\epsilon > 0$ não tem limite quando $\epsilon \downarrow 0$ e mostrou como modificá-los de modo a obter a teoria correta ao tomar o limite $\epsilon \downarrow 0$. Na seção 3 faremos mais alguns comentários sobre este tipo de procedimento no caso de campos elétricos dependentes do tempo.

Cabe também notar que se retirarmos as condições de amortecimento certas anomalias podem ocorrer. Em [79] Jafaev exibiu um potencial para o qual existem vetores ortogonais à imagem de W_+ que ainda satisfazem (1.10). No entanto, como veremos na próxima seção, tal coisa não ocorre no caso em que o potencial é periódico. Finalmente, o leitor interessado encontrará algumas informações sobre o caso geral (i.e., amortecido ou não) no teorema 1 de [67]).

2. O caso periódico

Para fixar as idéias, vamos supor de saída que $V(x, t)$ sa-

tisfaz a condição (2.4) do Capítulo II e é uma função periódica com período 2π , i.e.,

$$(2.1) \quad V(\cdot, t+2\pi) = V(\cdot, t)$$

para todo $t \in \mathbb{R}$. Estas hipóteses como sabemos garantem a existência do propagador associado à equação de Schrodinger com hamiltoniana $H(t) = H_0 + V(\cdot, t)$. Além disso devido à periodicidade temos

$$(2.2) \quad U(t+2\pi, t'+2\pi) = U(t, t')$$

para todo $t, t' \in \mathbb{R}$. De fato, é muito fácil verificar que $U(t, t')\varphi$ e $V(t+2\pi, t'+2\pi)\varphi$ satisfazem

$$(2.3) \quad i \frac{d\psi}{dt} = H(t)\psi, \quad \psi(0) = \varphi \in D(H_0) \subset \mathfrak{S}.$$

Agora, a existência dos operadores de onda, definidos como em (1.3) da seção anterior, pode ser provada utilizando o método de Cook-Kuroda. Mais precisamente,

Exercício (2.1) - Suponha que $V(x, t)$ pode ser escrito na forma

$$(2.4) \quad \begin{cases} V(x, t) = (1 + |x|^2)^{-\rho} V_1(x, t) + V_2(x, t), & \rho > 1/2 \\ V_1(\cdot, t) = L^\infty(\mathbb{R}^3), & V_2 \in L^2(\mathbb{R}^3) \\ V_j(\cdot, t+2\pi) = V_j(\cdot, t), & t \in \mathbb{R}, \quad j = 1, 2 \end{cases}$$

$$(2.5) \quad \begin{cases} t \in \mathbb{R} \mapsto V_j(\cdot, t) \text{ são funções limitadas em} \\ L^\infty(\mathbb{R}^3) \text{ e } L^2(\mathbb{R}^3), \quad j = 1, 2. \end{cases}$$

Então os operadores de onda (definidos em (1.3)) existem.

Sugestão: Verifique se a demonstração pode ser feita exatamente como no Teorema (1.10) do Capítulo III.)

O próximo passo consiste como de hábito em caracterizar as imagens dos operadores de onda. Este problema é muito mais difícil que no caso amortecido. Ele pode ser atacado do ponto de vista "tempo independente" (i.e., estudado das propriedades dos resolventes de certos operadores apropriados) utilizando o chamado método de Howland ([11] vol. II, [73], [78], [80], [81], [82], [85]). Na verdade o método pode ser empregado no caso geral (amortecido ou não), mas sua eficiência é seriamente reduzida devido a certos problemas técnicos que não ocorrem na situação periódica. Por esta razão vamos nos limitar a apresentá-lo neste último contexto. A idéia básica em questão consiste em colocar a variável temporal em pé de igualdade com as variáveis especiais. Neste sentido o método de Howland é o análogo quântico do truque clássico que permite obter um sistema conservativo a partir de um não conservativo, a saber, adicionar uma equação (com tempo e energia como variáveis conjugadas) às equações de Hamilton que descrevem o sistema em estudo.

Para entender o que deve ser feito, é conveniente começar

com algumas observações sobre o propagador no caso periódico. Experiência anterior com equações diferenciais com coeficientes periódicos indica que o comportamento das soluções deve ser determinado essencialmente pelo operador de Floquet (ou operador de período) associado, que no nosso caso é o operador unitário $U(2\pi, 0)$. As propriedades usuais de $U(t, t')$ juntamente com (2.2) implicam,

$$(2.6) \quad \begin{cases} U(t+2\pi, 0) = U(t, 0) U(2\pi, 0), & t \in \mathbb{R} \\ U(\theta+2\pi\iota, 0) = U(\theta, 0) U(2\pi, 0)^\iota, & \theta \in [0, 2\pi], \iota \in \mathbb{Z} \end{cases}$$

Exercício (2.2) - Prove (2.6)

Para estender a conexão entre a teoria espectral do operador de Floquet e a equação de Schrodinger, seja ϕ tal que

$$(2.7) \quad U(2\pi, 0)\phi = e^{-2\pi i \lambda} \phi$$

para algum $\lambda \in \mathbb{R}$ (lembre que $U(2\pi, 0)$ é unitário). Seja

$$(2.8) \quad \phi(t) = e^{i\lambda t} U(t, 0)\phi.$$

Então a primeira relação em (2.6) implica que $\phi(t)$ é periódica com período 2π e um cálculo simples mostra,

$$(2.9) \quad \left(\frac{1}{i} \frac{d}{dt} + H(t) \right) \phi(t) = \lambda \phi(t).$$

Portanto $\phi(t)$ é uma auto-função do operador $\frac{1}{i} \frac{d}{dt} + H(t)$ e

$e^{-i\lambda t} \phi(t) = U(t,0)\phi$ é a solução de (2.3) com $\varphi = \phi$. Reciprocamente, suponha que $\phi(t)$ é uma solução periódica de (2.9). Não é difícil verificar que,

$$(2.10) \quad \psi(t) = e^{-i\lambda t} \phi(t)$$

satisfaz (2.3) com $\psi(0) = \phi(0)$. Mas então devemos ter $\psi(t) = U(t,0)\psi(0) = U(t,0)\phi(0)$. Tomando $t = 2\pi$ obtém-se $\psi(2\pi) = U(2\pi,0)\phi(0)$. A periodicidade de $\phi(t)$ e a definição de $\psi(t)$ implicam então que $U(2\pi,0)\phi(0) = e^{-2\pi i\lambda}\phi(0)$. Estas observações sugerem então que para entender a teoria espectral do operador de Floquet é preciso estudar o operador $\frac{1}{i} \frac{d}{dt} + H(t)$ com "condições de contorno periódicas em $[0, 2\pi]$ ". Antes de prosseguir convém fazer uma observação crítica: os argumentos que ligam os operadores $U(2\pi,0)$ e $\frac{1}{i} \frac{d}{dt} + H(t)$ funcionam tanto no caso de auto-funções usuais, i.e., as que vivem honestamente no espaço de Hilbert em questão, assim como, pelo menos formalmente, para as auto-funções "associadas ao espectro contínuo".

Para implementar rigorosamente as idéias descritas acima, seja T_0 a única extensão auto-adjunta de

$$(2.11) \quad \begin{cases} D(\overset{\circ}{T}_0) = \{f \in C^\infty([0, 2\pi]) \mid f(0) = f(2\pi)\} \\ \overset{\circ}{T}_0 f = \frac{1}{i} \frac{d}{dt}, \quad f \in D(\overset{\circ}{T}_0) \end{cases}$$

em $L^2([0, 2\pi])$. A teoria elementar das séries de Fourier mostra que T_0 possui um conjunto ortonormal completo de auto-funções dado por,

$$(2.12) \quad \varphi_k(t) = (2\pi)^{-1/2} \exp(ikt), \quad k \in \mathbb{Z}.$$

Seja agora $\mathcal{K} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2([0, 2\pi])$ o produto tensorial de $L^2(\mathbb{R}^3)$ e $L^2([0, 2\pi])$, i.e., o fecho da coleção de todas as combinações lineares de funções da forma $g(x) f(t)$, $g \in L^2(\mathbb{R}^3)$, $f \in L^2([0, 2\pi])$ em relação à norma

$$(2.13) \quad \|\varphi(x, t)\|_{\mathcal{K}}^2 = \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_0^{2\pi} dt |\varphi(x, t)|^2$$

Exercício (2.3) - Prove que

$$(2.14) \quad \mathcal{K} \simeq L^2(\mathbb{R}^3 \times [0, 2\pi]) \simeq L^2([0, 2\pi], L^2(\mathbb{R}^3))$$

onde o símbolo \simeq significa que os espaços assim relacionados são isometricamente isomorfos e $L^2(I, X)$, X de Banach denota a coleção das $f: I \rightarrow X$, $I \subset \mathbb{R}$ tais que

$$(2.15) \quad \|f\|_{L^2(I, X)}^2 = \int_I \|f(t)\|_X^2 dt < \infty.$$

Daqui por diante as identificações em (2.14) serão usadas sem maiores comentários. O leitor interessado deve consultar [11], vols. I, II, IV para maiores informações sobre produtos tensoriais. Além disso, uma excelente discussão da relação entre estes objetos e o método de separação de variáveis pode ser encontrada no Capítulo VI de [86]. Sejam J_k e G_k , $k \in \mathbb{Z}$ os operadores,

$$(2.16) \quad (J_k \varphi)(x, t) = (\varphi \otimes \varphi_k)(x, t) \quad \varphi(x) \varphi_k(t), \quad \varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$$

$$(2.17) \quad (G_k f)(x) = \int_0^{2\pi} dt \overline{\varphi_k(t)} f(x, t), \quad f \in \mathcal{K}.$$

Exercício (2.4) - Prove que,

$$(2.18) \quad G_k J_m \varphi = \delta_{k,m} \varphi, \quad \varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$$

$$(2.19) \quad (G_k f | \varphi)_H = (f | J_k \varphi)_K$$

$$(2.20) \quad \sum_{j=-\infty}^{+\infty} J_k G_k = s\text{-}\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N J_k G_k = 1$$

onde $\delta_{k,m}$ denota o delta de Kroenecker. Além disso vale a identidade de Parseval, i.e.,

$$(2.21) \quad \|f\|_K^2 = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \|G_k f\|^2 < \infty$$

para toda $f \in \mathcal{K}$.

Observe que o exercício acima é nada mais nada menos que um resumo da teoria L^2 de séries de Fourier no caso em que as funções a serem expandidas tomam valores em $L^2(\mathbb{R}^3)$! Os vetores $(G_k f) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ são simplesmente os coeficientes de Fourier de f ou se o leitor assim preferir, a aplicação $k \in \mathbb{Z} \rightarrow G_k f$ é a transformada de Fourier de $f \in \mathcal{K}$.

Estamos agora em posição de definir o operador $(\frac{1}{i} \frac{d}{dt} + H(t))$

com condições contorno periódicas em $[0, 2\pi]$. Seja

$$(2.22) \quad \begin{cases} D(H_0) = D(H_0) \otimes D(T_0) \\ H_0 = 1 \otimes T_0 + H_0 \otimes 1 \end{cases}$$

onde se A e B são operadores auto-adjuntos em $L^2(\mathbb{R}^3)$ e $L^2([0, 2\pi])$ respectivamente, a notação $(A \otimes B)$ representa a única extensão auto-adjunta do operador linear definido por

$$(2.23) \quad \begin{cases} (A \otimes B) \left(\sum_{j=1}^K C_k g \otimes \varphi \right) (x, t) = \\ = \sum_{j=1}^K C_k (A g)(x) (B \varphi)(t) \end{cases}$$

onde $g \in D(A)$ e $\varphi \in D(B)$, (veja [11] vols. I, II, IV e/ou [86]).

Exercício (2.5) - Prove que

(i) o resolvente e a família espectral de H_0 tem a forma

$$(2.24) \quad R_0(z) = (H_0 - z)^{-1} = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} J_k R_0(z - k) G_k$$

$$(2.25) \quad E_0(S) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} J_k E_0(S - k) G_k$$

onde ambas as séries convergem em $B(L^2(\mathbb{R}^3))$ com $\text{Im} z \neq 0$ e se S é um boreliano contido em \mathbb{R} , $S - k = \{\theta \in \mathbb{R} \mid \theta + k \in S\}$.

(ii) o operador H_0 possui um conjunto ortonormal completo dado por,

$$(2.26) \quad \varphi_{n,\xi}(x,t) = \varphi_n(t) \varphi_\xi^0(x) = (\varphi_n \otimes \varphi_n^0)(x,t).$$

Isto significa que a aplicação

$$(2.27) \quad (Ff)(\xi,k) = t.i.m. \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_0^{2\pi} dt \varphi_{n,\xi}(x,t) f(x,t)$$

é um operador unitário de \mathcal{K} em $F(\mathcal{K}) = L^2(\mathbb{R}^3, d\xi) \otimes l^2(\mathbb{Z})$. Além disso F diagonaliza H_0 no sentido que F transforma H_0 no operador maximal de multiplicação por $(|\xi|^2 + k)$ em $F(\mathcal{K})$. Finalmente, devido aos fatos que $H_0 \otimes 1$ e $1 \otimes T_0$ comutam e que T_0 gera o grupo das translações temos

$$(2.28) \quad \begin{cases} e^{-i\sigma H_0} f(\cdot, t-\sigma) = (e^{-i\sigma T_0} \otimes e^{-i\sigma H_0} f)(x,t) \\ = (e^{-i\sigma H_0} f(\cdot, t-\sigma))(x) = (U_0(t,t-\sigma) f(\cdot, t-\sigma))(x) \end{cases}$$

onde $U(t,t') = \exp(-i(t-t')H_0)$.

Agora, se $V(\cdot, t)$ satisfaz a condição (2.4) desta seção (ou mais geralmente se $V(\cdot, t) = V_1(\cdot, t) + V_2(\cdot, t)$ onde $V_1(\cdot, t) \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$, $V_2(\cdot, t) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ são funções limitadas de t) uma aplicação simples do teorema de Kato-Rellich mostra que,

$$(2.29) \quad \mathbb{H} = \mathbb{H}_0 + V$$

é auto-adjunto em $D(\mathbb{H}) = D(\mathbb{H}_0)$ onde V denota o operador de multiplicação por $V(x,t)$ em \mathcal{K} . Além disso,

Exercício (2.6) - Prove que,

$$(2.30) \quad (e^{-i\sigma H} f) = (U(t, t-\sigma)f(\cdot, t-\sigma))$$

onde $U(t, t')$ é o propagador associado à hamiltoniana $H(t)$. Mais ainda, os operadores de onde $w(H(\cdot), H_0; s)$ definidos em (1.3) existem para todo $s \in \mathbb{R}$ se e só se os limites

$$(2.31) \quad w_{\pm}(H, H_0) = s\text{-}\lim_{\sigma \rightarrow \pm\infty} e^{i\sigma H} e^{-i\sigma H_0}$$

existem em \mathcal{K} . Neste caso temos

$$(2.32) \quad w_{\pm}(H, H_0)f(x, s) = (w_{\pm}(s)f(\cdot, t))(x).$$

Tendo em vista estes comentários é natural estudar a teoria espectral do operador H e depois traduzir os resultados para o operador de Floquet do sistema (lembre da conexão entre os dois via auto-funções descrita logo após o Exercício (2.2)). Como H e H_0 são operadores fixos no espaço de Hilbert \mathcal{K} , podemos utilizar métodos tempo-independentes do tipo descrito no capítulo anterior para estudar o espectro de H e a teoria de espalhamento associada. Deve-se notar no entanto que o problema agora é muito mais difícil que o caso usual de hamiltonianas independentes do tempo. De saída H e H_0 não são limitados inferiormente e seus espectros coincidem com \mathbb{R} . Mais ainda, não é difícil verificar que

$$(2.33) \quad \Sigma(H_0) = \{|\xi|^2 + k \mid k \in \mathbb{Z} \text{ e } \xi \in \mathbb{R}^3\}$$

de modo que $\Sigma(H_0)$ consiste de uma superposição de um número in-

finito de semiretas, cada uma começando do ponto $k \in \mathbb{Z}$. O espectro do operador perturbado é em princípio muito mais complicado. Ainda assim, é possível adaptar os métodos tempo independentes e em particular as técnicas de S. Agmon ([12]) para obter uma teoria satisfatória em certos casos. Antes de descrever tais resultados lembre que se A é um operador unitário então $\Sigma(A)$ está contido no círculo unitário e o teorema espectral vale para A ([24]). É então possível definir $\mathcal{H}_p(A)$, $\mathcal{H}_{ac}(A)$, $\mathcal{H}_{sc}(A)$ e desenvolver uma teoria espectral semelhante à dos operadores auto-adjuntos para o caso unitário. Utilizando os métodos descritos acima, Howland ([80]) mostrou que se o potencial $q(x, t)$ se comporta como $|x|^{-2-\epsilon}$ $\epsilon > 0$ quando $|x| \rightarrow \infty$ e é "bem comportado localmente" então

$$(2.34) \quad L^2(\mathbb{R}^3) = \mathcal{H}_p(\mathcal{P}) \oplus \mathcal{H}_{ac}(\mathcal{P})$$

$$(2.35) \quad \mathcal{H}_{ac}(\mathcal{P}) = \mathcal{R}(W_{\pm}(H(\cdot), H_0)).$$

onde $\mathcal{P} = U(2\pi, 0)$ é o operador de Floquet do sistema.

Além disso é possível provar que $\mathcal{H}_p(\mathcal{P})$ e $\mathcal{H}_{ac}(\mathcal{P})$ são respectivamente as coleções dos estados ligados e de espalhamento. De maneira mais precisa, $f \in \mathcal{H}_p(\mathcal{P})$ se e só se dado $\epsilon > 0$, existe $R = R(\epsilon) > 0$ tal que,

$$(2.36) \quad \sup_{t \in \mathbb{R}} P(t, \{|x| \geq R\}; f) < \epsilon$$

enquanto $f \in \mathcal{H}_{ac}(\mathcal{P})$ se e só se

$$(2.37) \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} P(t, S; f) = 0$$

para todo $S \subset \mathbb{R}^3$ mensurável, limitado.

Finalmente, que saibamos, o comportamento $|x|^{-1-\epsilon}$, $\epsilon > 0$ quando $|x| \rightarrow \infty$ não foi tratado por métodos tempo-independentes, exceto em certos casos especiais (veja o apêndice 2 de [73]). O caso de longo alcance também permanece aberto, mas alguns resultados foram obtidos por métodos tempo-dependentes em [67]).

3. Campos elétricos periódicos no tempo

Nesta seção vamos descrever alguns resultados recentes sobre o comportamento assintótico das soluções da equação

$$(3.1) \quad i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (-\Delta + e^{-\epsilon|t|} g(t)x_1 + q(x))\Psi$$

onde $x = (x_1, x^\perp) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2$, $\epsilon \geq 0$, $g \in C(\mathbb{R})$, $g(t+2\pi) = g(t)$, $t \in \mathbb{R}$ com média zero em um período e $q(x)$ é uma função mensurável real que tende a zero suficientemente rápido quando $|x| \rightarrow \infty$. As soluções de (3.1) descrevem a interação de uma partícula quântica (na aproximação semi-clássica) com um potencial estático $q(x)$ e um campo elétrico $e^{-\epsilon|t|} g(t)(1,0,0)$. Note que variando ϵ podemos controlar o período de tempo durante o qual o efeito do campo é não-desprezível. Maiores informações sobre a física envolvida em (3.1) pode ser encontrada em [87], [88] e nas referências aí contidas.

Antes de mais nada convém fazer alguns comentários gerais sobre a equação de Schrödinger com hamiltonianas definidas por

operadores diferenciais da forma

$$(3.2) \quad \mathring{A}(t) = -\Delta + \theta(t) x_1 + q(x)$$

onde $\theta(t)$ é uma função contínua. Suponha que $\psi(x, t)$ satisfaz

$$(3.3) \quad i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathring{A}(t) \psi$$

e defina

$$(3.4) \quad \varphi(x, t) = \exp(i\rho(t) x_1) \psi(x, t)$$

$$(3.5) \quad \chi(x, t) = \exp(i\zeta(t)) \varphi(x_1 - 2\Theta(t), x^\perp) \chi(x, t)$$

onde

$$(3.6) \quad \Theta''(t) = \rho'(t) = \theta(t), \quad \zeta'(t) = \rho(t)^2$$

Um cálculo simples mostra então que,

$$(3.7) \quad i \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[\left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_1} - \rho(t) \right)^2 - \Delta^\perp \right] \varphi + q\varphi$$

$$(3.8) \quad i \frac{\partial \chi}{\partial t} = (-\Delta + q(x_1 - 2\Theta(t), x^\perp)) \chi$$

onde Δ^\perp denota o laplaciano em relação à variável x^\perp . Suponha que

$$(3.9) \quad \begin{cases} q(x) = q_1(x) + q_2(x) \\ q_1(x) \in L_\infty^\infty(\mathbb{R}^3) \cap C(\mathbb{R}^3), \quad q_2 \in L^2(\mathbb{R}^3). \end{cases}$$

Então é possível mostrar que o operador $\overset{\circ}{A}(t)$ de (3.2) assim como

$$(3.10) \quad \overset{\circ}{B}(t) = \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial t} - p(t)\right)^2 - \Delta^\perp + q(x)$$

$$(3.11) \quad \overset{\circ}{H}(t) = -\Delta + q(x_1 - 2\theta(t), x^\perp)$$

são essencialmente auto-adjuntos em $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ (veja a seção 2 de [73]). Suas (únicas) extensões auto-adjuntas serão denotados por $A(t)$, $B(t)$ e $H(t)$. Caso $q = 0$ escreveremos $A_0(t)$, $B_0(t)$ e H_0 . Agora, as duas aplicações contidas na seção 2 do Capítulo II implicam a existência dos propagadores associados, $U_A(t, t')$, $U_B(t, t')$, $U_H(t, t')$, $U_{A_0}(t, t')$, $U_{B_0}(t, t')$, $\exp(-i(t-t')H_0)$. Convém notar que exceto pela existência de $U_A(t, t')$, todas as afirmações acima são válidas com a condição $q_1 \in L_\infty^\infty(\mathbb{R}^3) \cap C(\mathbb{R}^3)$ substituídas por $q_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Definindo então

$$(3.12) \quad (T(t)f)(x) = \exp(ip(t) x_1)f(x)$$

$$(3.13) \quad (V(t)f)(x) = \exp(i\zeta(t))f(x_1 - 2\theta(t), x^\perp)$$

com $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$, é fácil verificar que,

$$(3.14) \quad \begin{cases} U_A(t, t') = T(t)^{-1} U_B(t, t')T(t') = \\ = T(t)^{-1} V(t)^{-1} U_H(t, t') V(t')T(t') \end{cases}$$

para todo t, t' . Uma fórmula análoga vale para o caso $q = 0$. Note que isto permite obter uma fórmula explícita para o propagador $U_{A_0}(t, t')$!

Com estes comentários em mente vamos agora voltar a (3.1). A dependência no parâmetro ϵ será indicada por meio super-índices, isto é, $A^\epsilon(t)$, $A_0^\epsilon(t)$, $U_A^\epsilon(t, t')$, $U_{A_0}^\epsilon(t, t')$, $T^\epsilon(t)$ e assim por diante. Considere primeiro o caso $\epsilon > 0$. Então, pelo menos formalmente, $A^\epsilon(t) \rightarrow H$ quando $t \rightarrow \pm\infty$, e portanto é de se esperar que o comportamento assintótico das soluções de (7.1) seja mesmo que o das de

$$(3.15) \quad i \frac{d\psi}{dt} = H\psi$$

que descrevemos em detalhe no Capítulo II. Vamos supor daqui por diante que $q(x)$ é um potencial de curto alcance, i.e.,

$$(3.16) \quad \begin{cases} q(x) = (1 + |x|^2)^{-\rho} (q_1(x) + q_2(x)) \\ q_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^3), q_2 \in L^2(\mathbb{R}^3), \rho > 1/2 \end{cases}$$

de modo que a teoria de espalhamento para o par H, H_0 é fortemente completa, ou seja,

$$(3.17) \quad L^2(\mathbb{R}^3) = \mathcal{H}_p(H) \oplus \mathcal{H}_{ac}(H)$$

$$(3.18) \quad \mathcal{H}_{ac}(H) = \mathcal{R}(W_\pm), \quad \mathcal{H}_{sc}(H) = \{0\}.$$

Com o propósito de comparar os comportamentos assintóticos de (3.1) e (3.15) é natural introduzir operadores de onda dados por

$$(3.19) \quad \Gamma_{\pm}^{\epsilon} = \Gamma_{\pm}^{\epsilon}(A(\cdot), H) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U_A^{\epsilon}(t, 0)^* e^{-itH}.$$

Com esta definição temos,

Teorema (3.1) - Seja $\epsilon > 0$ e suponha que

$$(3.20) \quad \begin{cases} q(x) = (q_1(x) + q_2(x))(1 + |x|^2)^{-\rho}, & \rho > 1/2 \\ q_1 \in L^{\infty}(\mathbb{R}^3) \cap C(\mathbb{R}^3), & q_2 \in L^2(\mathbb{R}^3) \end{cases}$$

Então os limites em (3.19) existem e os operadores por eles definidos são unitários.

A demonstração deste resultado é muito longa e técnica e pode ser encontrada em [89]. Em linhas gerais ela consiste de dois passos. O primeiro deles é provar que os limites

$$(3.21) \quad \Omega_{\pm}(B^{\epsilon}(\cdot), H) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U_B^{\epsilon}(t, 0)^* e^{-itH}$$

existem e são operadores unitários. Isto se faz aplicando o método de Cook-Kuroda a $U_B(t, 0)^* e^{-itH}$ e a sua adjunta. A hipótese $\epsilon > 0$ é crucial neste ponto. Na verdade os limites em

(3.21) não existem se $\epsilon = 0$. O segundo passo consiste em mostrar

$$(3.22) \quad s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH} T^{\epsilon}(t) e^{-itH} = 1$$

e tomar o limite quando $t \rightarrow \pm\infty$ na expressão

$$(2.23) \quad \begin{cases} U_A(t,0)^* e^{-itH} = T^\epsilon(0)^{-1} U_B^\epsilon(t,0)^* T^\epsilon(t) e^{-itH} = \\ = (T^\epsilon(0)^{-1} U_B^\epsilon(t,0)^* e^{-itH})(e^{itH} T^\epsilon(t) e^{-itH}) \end{cases}$$

O teorema (3.1) mostra em particular que $L^2(\mathbb{R}^3)$ pode ser escrito na forma

$$(3.24) \quad L^2(\mathbb{R}^3) = \Gamma_\pm^\epsilon(\mathcal{H}_p(H)) \oplus \Gamma_\pm^\epsilon(\mathcal{H}_{ac}(H)).$$

Tendo em vista a definição dos operadores Γ_\pm^ϵ é fácil verificar que se $f \in \Gamma_\pm^\epsilon(\mathcal{H}_p(H))$ (resp. $\Gamma_\pm^\epsilon(\mathcal{H}_{ac}(H))$) então a função de onda $U_A(t,0)f$ se comporta assintoticamente como um estado ligado (resp. estado de espalhamento). É interessante notar, que dentro do nosso conhecimento, a igualdade $\Gamma_+^\epsilon(\mathcal{H}_{ac}(H)) = \Gamma_-^\epsilon(\mathcal{H}_{ac}(H))$ é um problema em aberto.

Vamos considerar agora o caso $\epsilon = 0$. Nessa situação o problema é puramente periódico tendo sido analisado em [73] (veja também [67]). A primeira coisa a notar é que devido à hipótese

$$(3.25) \quad \int_0^{2\pi} g(t)dt = 0$$

o operador $(-\Delta + g(t)x_1 + q(t))$ tem $(-\Delta + q)$ como média sobre um período. Portanto é razoável esperar que as soluções de (3.1), também neste caso, se comportem como as soluções de (3.15) em algum sentido. O que não é claro é em que sentido isto deve valer! Para ilustrar este ponto considere o caso $q = 0$ onde devemos

comparar as soluções da equação de Schrödinger com hamiltonianas $A_0^0(t)$ e H_0 . Por simplicidade, seja $g(t) = \text{sen } t$. Escolhendo então

$$(3.26) \quad \rho(t) = -\cos(t), \quad \theta(t) = -\text{sen } t$$

$$(3.27) \quad \zeta(t) = \frac{t}{2} + \frac{\text{sen } 2t}{4}$$

tomando $t_n = 2n\pi$, $n \in \mathbb{Z}^+$ e aplicando a fórmula (3.14) (no caso $q = 0$) obtém-se,

$$(3.28) \quad \begin{cases} U_{A_0}^0(t_n, 0)^* e^{-it_n H_0} = \\ = e^{ix_1} e^{it_n H_0} e^{-ix_1} e^{-it_n/2} e^{it_n H_0} \end{cases}$$

O lema de Riemann-Lebesgue implica então que a seqüência em (3.28) converge fracamente a zero. Conseqüentemente o limite forte não existe pois todos os operadores em questão são unitários.

Agora, a teoria para $\epsilon > 0$ é perfeitamente satisfatória e é portanto razoável tentar tomar seu limite quando $\epsilon \downarrow 0$ para tratar a situação acima. Como provado em [89] isto também não dá certo: os operadores de onda usuais não tem limite quando $\epsilon \downarrow 0$. A situação é análoga à considerada por Dollard em [84] (mas muito diferente do ponto de vista técnico). A saída para a dificuldade é tentar modificar os objetos básicos da teoria de maneira conveniente. Uma tentativa natural consiste em argumentar como no caso das hamiltonianas independente do tempo, i.e., como $q(x) \rightarrow 0$

quando $|x| \rightarrow \infty$ e a grandes distâncias de percurso correspondem a grandes períodos de viagem é tentador comparar as soluções de (3.1) e

$$(3.29) \quad i \frac{d\psi}{dt} = A_0(t) \psi .$$

Para isso é preciso introduzir operadores de onda modificados a saber, os limites

$$(3.30) \quad w_{\pm}^0(A(\cdot), A_0^0(\cdot)) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U_A^0(t, 0)^* U_{A_0^0}^0(t, 0)$$

caso existam. Em outras palavras, estamos substituindo H_0 por $A_0^0(t)$. Estas idéias funcionam perfeitamente bem. Combinando a transformação (3.13) com o método de Howland (como descrito na seção anterior) é possível provar ([73]),

Teorema (3.2) - Seja q como no teorema (3.1). Além disso suponha que

$$(3.31) \quad \frac{\partial q_2}{\partial x_1} \in L^2(\mathbb{R}^3)$$

onde a derivada é calculada no sentido das distribuições. Então os operadores $w_{\pm}^0(A^0(\cdot), A_0^0(\cdot))$ existem e são completos no sentido que

$$(3.32) \quad L^2(\mathbb{R}^3) = \mathcal{H}_p(\mathcal{P}) \oplus \mathcal{H}_{ac}(\mathcal{P})$$

$$(3.33) \quad \mathcal{R}(w_{\pm}^0(A^0(\cdot), A_0^0(\cdot))) = \mathcal{H}_{ac}(\mathcal{P})$$

onde $\mathcal{P} = U_A^0(2\pi, 0)$ é o operador de Floquet do sistema. Além disso, $f \in \mathcal{H}_p(\mathcal{P})$ se e só se dado $\epsilon > 0$ existe $R = R(\epsilon) > 0$ tal que

$$(3.34) \quad \sup_{t \in \mathbb{R}} P(t, \{|x| > R\}; f) < \epsilon$$

enquanto que $f \in \mathcal{H}_{ac}(\mathcal{P})$ se e só se,

$$(3.35) \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} P(t, S; f) = 0$$

qualquer que seja $S \subset \mathbb{R}^3$ mensurável e limitado.

Para finalizar devemos fazer alguns comentários. Em primeiro lugar a condição $\frac{\partial q_2}{\partial x_1} \in L^2(\mathbb{R}^3)$ é uma hipótese técnica utilizada em [73] para controlar a "singularidade móvel" em $q_2(x_1 - 2\theta(t), x^+)$. Ela é um pouco embaraçosa, pois q_2 é contínua na direção x_1 , e seria desejável retirá-la.

As relações (3.34) e (3.35) mostram que $\mathcal{H}_p(\mathcal{P})$ e $\mathcal{H}_{ac}(\mathcal{P})$ são respectivamente a coleção dos estados ligados e a coleção dos estados de espalhamento da teoria. No entanto é importante ter em mente que a evolução livre no caso é questão é determinada por $A_0^0(t)$ e não por H_0 . Do ponto de vista da física este fato é um tanto constrangedor. Apesar das dificuldades descritas acima, ainda é de se esperar que seja possível comparar $U_A^\epsilon(t, 0)$ com e^{-itH} e portanto com e^{-itH_0} tendo em vista o caso independente do tempo. O leitor interessado deve consultar [87] e [88] onde tal comparação é feita formalmente e aplicada a problemas de ióni

zação. A saída consiste novamente em modificar os operadores de onda incorporando a eles o comportamento assintótico correto. A situação presente é, de certa forma, análoga à dos potenciais longo alcance independentes do tempo. O campo elétrico oscilante tem um "efeito de longo alcance no tempo" pois além de durar para sempre, ele é no caso $\epsilon > 0$ uma perturbação muito forte para certos valores arbitrariamente grandes de t . Em [89] o leitor encontrará a modificação mencionada acima e o estudo dos limites quando $\epsilon \downarrow 0$. Nesse trabalho são introduzidos operadores de onda modificados da forma

$$(3.36) \quad \tilde{w}_{\pm}^{\epsilon}(A(\cdot), H_0) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U_A^{\epsilon}(t, 0)^* \Lambda^{\epsilon}(t) e^{-itH_0}$$

onde $\epsilon \geq 0$ e $\Lambda^{\epsilon}(t)$ é um operador que cancela as oscilações responsáveis pela não existência dos operadores de onda usuais. A teoria assim obtida é satisfatória mas os detalhes técnicos são bastante complicados e por isso nos limitaremos a remeter o leitor a [89]. Cabe no entanto notar que a função $\epsilon \longmapsto w_{\pm}^{\epsilon}(A(\cdot), H_0)$ é fortemente contínua e que

$$(3.37) \quad \Re(\tilde{w}_{\pm}^0(A(\cdot), H_0)) = \Re(w_{\pm}^0(A^0(\cdot), A_0^0(\cdot))).$$

Este resultado é extremamente agradável pois ele mostra que os estados de espalhamento associados a $A^0(t)$ e $A_0^0(t)$ são exatamente os mesmos que aqueles correspondentes a $A^0(t)$ e H_0 .

"... Quoth the Raven, "Nevermore."" [90]

REFERÊNCIAS

- [1] T. Kato, "Linear evolution equations of "hyperbolic" type", J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sect. 1A, 17, (1970), 241-258.
- [2] T. Kato, "Linear evolution equations of "hyperbolic" type, II", J. Math. Soc. Japan, 25, (1973), 648-666.
- [3] T. Kato, "Linear and quasi-linear equations of evolution of hyperbolic type", em "Hyperbolicity", C.I.M.E. II CICLO 1976, 125-191.
- [4] T. Kato, "On the Cauchy problem for the (generalized) Korteweg - de Vries equation", Studies in Applied Mathematics, Advances in Mathematics Supplementary Studies, vol. 8, Academic Press, (1983), 93-128.
- [5] T. Kato, "Non-linear equations of evolution in Banach spaces", Proceedings of Symposia in Pure Mathematics, vol. 45, Part 2, (1986) 9-23.
- [6] E. Merzbacher, "Quantum Mechanics", John Wiley and Sons, New York, (1970, second edition).
- [7] K. Gottfried, "Quantum Mechanics, vol. I: Fundamentals", W.A. Benjamin, Inc., New York, (1966).
- [8] R. Koberle "Sobre a genese da mecânica ondulatória", Revista Brasileira de Física, vol. 9, nº 1, (1979), 243-272.

- [9] R. Shankar "Principles of quantum mechanics", Plenum Press, New York, (1980).
- [10] J. Gribben "In search of Schrodinger's cat: Quantum physics and reality". Bantam Books, Inc., (1984).
- [11] M. Reed e B. Simon, "Methods of Modern Mathematical Physics" vol. I, II, III, IV, Academic Press, (1972, 1978, 1979, 1978).
- [12] S. Agmon "Spectral properties of Schrodinger operators and scattering theory", Ann.Scuola.Norm.Sup. Pisa, Cl. Sci 2, (1975), 151-218.
- [13] R.J. Iório, Jr., "On the discrete spectrum of the N-body quantum mechanical hamiltonian, I", Commun.Math.Phys.
- [14] R.J. Iório, Jr. "On the discrete spectrum of the N-body quantum mechanical hamiltonian, II", Letters in Math. Phys. I, (1981), 341-349.
- [15] I.M. Sigal "Seattering theory for manybody quantum systems - Rigorous results" Lecture Notes in Mathematics, vol. 1011, Springer-Verlag, (1983).
- [16] P. Perry, I.M. Sigal, B. Simon "Spectral analysis of N-body Schrödinger operators" Ann. Math., 114, (1981), 519-567.
- [17] B.S. de Witt e Neill graham (editores) "The many world interpretation of quantum mechnics", Princeton University, Press, Princeton, New Jersey, (1976).

- [18] J. Jauch "Foundations of Quantum Mechanics", Addison-Wesley Publishing Co., (1973).
- [19] C. Piron, "Foundations of quantum physic", W.A. Benjamin. Inc., (1976).
- [20] G. Svetlichchry, "On the foundations of quantum mechanics, an eclectic survey" em "Lectures on Quantum Mechanics and Linear Differential Operators", Informes de Matemática, Série C, IMPA, (editado por R.J. Iório, Jr.), 97-119, (1985).
- [21] T. Kato: "Perturbation theory for linear operators", Springer Verlag (1976, second edition).
- [22] F. Riesz e B.Sz.Nagy: "Functional Analysis", F. Ungar Publishing Co., (1965, tradução da segunda edição francesa).
- [23] M.H. Stone "Linear transformations in Hilbert spaces", A.M. S., (1932).
- [24] N. Akhiezer, I. Glazman, "Theory of linear operators in Hilbert space", volumes I e II. Pitman Advanced Publishing Program, (1981).
- [25] G. Helmbert: "Introduction to spectral theory in Hilbert space", North-Holland Publishing Co. e American Elsevier, (1975).
- [26] K. Yosida: "Functional Analysis", Springer-Verlag, (1968, second edition).

- [27] M.A. Naimark: "Linear Differential Operators" partes I e II, F. Ungar Publishing Co. (1967).
- [28] G. Bachman e L. Narici: "Functional Analysis", Academic Press, International Edition, (1966).
- [29] R.G. Bartle: "The elements of integration", John Wiley and Sons, Inc., (1966).
- [30] H.L. Royden: "Real Analysis", Collier-MacMillan Limited, (1971, second edition).
- [31] G.B. Folland: "Introduction to partial differential equations", Princeton University Press, (1976).
- [32] E. Hille: "Methods in classical and functional analysis", addison-Wesley Publishing Co., (1972).
- [33] T. Kato: "Wave operators and similarity for some non-self-adjoint operators", Math. Annalen, 162, (1966), 258-279.
- [34] W. Rudin: "Real and complex Analysis" McGraw Hill. Book Co., (1966, second edition).
- [35] R.J. Iório, Jr. e V.M. Iório, "Equações diferenciais parciais: uma introdução", a ser publicado na série Projeto Euclides (1987).
- [36] R. Courant, D. Hilbert, "Methods of Mathematical physics", volumes I e II, Wiley Interscience, New York, (1953).

- [37] H. Hochstadt: "The functions of mathematical physics", John Wiley and Sons, Inc. (1972).
- [38] N.N. Lebedev: "Special functions and their applications", Dover Publications, Inc., (1972).
- [39] W. O. Amrein, J.M. Jauch, K.B. Sinha: "Scattering theory in quantum mechanics", W.A. Benjamin, Inc., (1977).
- [40] W. Shakespeare, "Julius Ceasar", Ato III, Cena II .
- [41] K. Hoffman, R. Kunze, "Linear Algebra", Prentice Hall, New Jersey, (1971, second edition).
- [42] N. Aronszajn, "On a problem of Weil in the theory of singular Sturm-Liouville equations", Am.J.Math., 79 (1957), 597-610
- [43] K.B. Sinha: "On the absolutely and singularly continuous subspaces in scattering theory", Ann.Inst. Henri Poincaré, section A: Physique Théorique, vol. XXVI, n° 3, 263-277, (1977).
- [44] W.O. Amrein, J.M. Jauch, K.B. Sinha: "Scattering theory in Quantum Mechanics", W.A. Benjamin, Inc., (1977).
- [45] S. Ishii, "An approach to linear hyperbolic evolution equations by the Yosida approximation method", Proc. Japan Acad., 54, Ser. A, (1978), 17-20.

- [46] S. Ishii, "Linear evolution equations $\frac{du}{dt} + A(t)u = 0$: a case where $A(t)$ is strongly uniformly measurable" J. Math. Soc. Japan, vol. 34, nº 3, (1982), 413-424.
- [47] K. Kobayasi, "On a theorem for linear evolution equations of hyperbolic type" J. Math. Soc. Japan, vol. 31, nº 4, (1979), 647-654.
- [48] J. Dollard: "Quantum mechanical scattering theory for short-range and Coulomb interactions", Rocky Mountain J. of Math., vol. 1, nº 1, (1971), 5-88.
- [49] A. Berthier: "Spectral theory and wave operators for the Schrödinger equation", Research Notes in Mathematics nº71, Pitman Advanced Publication Program, Boston, Massachusetts, (1982).
- [50] T. Kato: "On the Cook-Kuroda criterium in scattering theory", Commun.Math.Phys., 67, (1979), 85-90.
- [51] B. Simon: "Scattering theory and quadratic forms: on a theorem of Schecter", Commun.Math.Phys. 53, (1977), 151-153.
- [52] E.C. Titchmarsh: "Eigenfunction expansions associated with second order differential equations", Oxford at the Clarendon Press (1962, segunda edição).
- [53] J. Avron, I. Herbst, "Spectral and scattering theory of Schrödinger operators related to the Stark effect", Commun Math.Phys. 52, (1977), 239-254.

- [54] I. Herbst, "Unitary equivalence of Stark hamiltonians",
Math. Z., 155 (1977), 55-70.
- [55] P. Perry, "Scattering theory by the Enss method", Mathematical Reports, vol. 1, part 1, Harwood Academic Publishers, (1983).
- [56] B. Simon, "Phase space analysis of simple scattering systems: extensions of the work of Enss", Duke Math.J., 46, (1979), 119-168.
- [57] M. Ben-Artzi, A. Devinatz: "The limiting absorption principle for partial differential operators", preprint, U.C. Berkeley, (1986).
- [58] T. Kato, S.T. Kuroda, "The abstract theory of scattering", Rocky Mountain J. of Math., vol. 1, n°1, (1970), 127-171.
- [59] M. Ben-Artzi, A. Devinatz, "Spectral and scattering theory for the adiabatic oscillator and related potentials", J. Math. Phys., 20, (4), 1979, 594-607.
- [60] Y. Saito, "Spectral representations for Schrödinger operators with long range potentials", Lecture Notes in Mathematics, 727, Springer Verlag Berlin, (1979).
- [61] M. Arai, "Eigenfunction expansions associated with Schrödinger operators with long range potentials", Publ. RIMS Kyoto Univ., 16, (1980), 35-59.

- [62] T. Ikebe, H. Isosaki, "Completeness of modified wave operators for long range potentials", Publ. RIMS Kyoto Univ., 15, (1979), 679-718.
- [63] T. Ikebe, H. Isosaki, "A stationary approach to the existence and completeness of long-range wave operators", Integral Equations and Operator Theory, vol. 5, (1982), 18-49.
- [64] V. Enss, "Asymptotic completeness for quantum mechanical potential scattering, II. Singular and long range potentials", Ann. Phys., 119, (1979), 117-132.
- [65] P. Alsholm, T. Kato, "Scattering with long range potentials" Proc.Sympo. Pure Math., A.M.S., Providence, Rhode Island, 23, (1973), 393-399.
- [66] H. Kitada, K. Yajima, "A scattering theory for time dependent long range potentials", Duke Math.J., 49,(1982), 341-376.
- [67] V. Enss - "Asymptotic time evolution for strictly outgoing multiparticle quantum systems with long range potentials", Proceedings of the VIII ELAM, a ser publicado na série Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, (1987).
- [68] L. Hormander, "The analysis of linear partial differential operators", vol. I, II, III, IV, Springer-Verlag, (1983, 1983, 1985, 1985).

- [69] T. Kato, S.T. Kuroda, "Theory of simple scattering and eigenfunction expansions", Functional Analysis and Related Fields, Springer-Verlag, Berlin and New York, (1970), 99-131.
- [70] M. Schechter, "Operator methods in quantum mechanics" Elsevier North Holland, Inc., (1981).
- [71] J. Dorroh, "A simplified proof of a theorem of Kato on linear evolution equations", J. Math. Soc. Japan vol.27, nº 3, (1975), 474-478.
- [72] R.J. Iório, Jr., D. Marchesin, "On the Schrödinger equation with time dependent electric fields". Proceedings of the Royal Society of Edinburgh, 96A, (1984), 117-134.
- [73] J. Avron, I. Herbst, "Spectral and scattering theory of Schrödinger operators related to the stark effect", Commun. Math. Phys. 52, (1977), 239-254.
- [74] K. Yajima, "Scattering theory for Schrödinger operators with Stark Effect", J. Fac. Sci. Japan, Sect. 1A, 26, (1979), 377-390.
- [75] M. Ben-Artzi, "Unitary equivalence and scattering theory for Stark-like Hamiltonians", J. Math. Phys., 25, (1984), 951-964.
- [76] G. Schmidt, "On scattering by time dependent perturbations", Indiana Univ. Math. J., vol. 24, nº 10, (1975), 925-935.

- [77] J. Howland, "Stationary scattering theory for time-dependent hamiltonians", *Math. Ann.*, 207, (1974), 315-335.
- [78] D.R. Jafaev, "On the asymptotic behavior of the solutions of the time-dependent Schrödinger Equation", *Math., USSR Sbornik*, vol. 39, n° 2, (1981), 169-188.
- [79] J. Howland, "Scattering theory for Hamiltonians periodic in time", *Indiana Univ. Math. J.* 28, (1979), 471-494.
- [80] J. Howland, "Two problems with time dependent hamiltonians", *Lecture Notes in Physics*, 130, Springer-Verlag, (1980).
- [81] K. Yajima, "Scattering theory for Schrödinger equations with a potential periodic in time", *J. Math. Soc. Jap.*, 29, (1977), 729-743.
- [82] T. Kato, "Integration of equations of evolution in Banach spaces", *J. Math. Soc. Japan*, 8, (1953), 208-234.
- [83] J. Dollard, "Adiabatic switching in the Schrödinger theory of Scattering", *J. Math. Phys.*, vol. 7, n° 5, (1966), 802, 810.
- [84] H. Kitada, K. Yajima, "Bound states and scattering states for time periodic hamiltonians", *Ann. Inst. Henri Poincaré*, vol. XXXIX, n° 2, (1983), 145-157.
- [85] Ju.M. Berezanskii, "Expansion in eigenfunctions of self-adjoint operators", *Translations of Mathematical Monographs*, 17, A.M.S. (1968).

- [86] H. Brandi, L. Davidovich, N. Zagury, "High intensity approximation applied to multiplaston ionization", Phys. Rev. A24, (1981), 2044.
- [87] H. Brandi, L. Davidovich, N. Zagury, "Interaction of strong eletromagnetic fields with atoms", VII Simposio Brasileiro de Física Teórica, Editado por J.A. Mignaco e R.C. Shellard, CNPq, (1982), 33-52.
- [88] R.J. Iório, Jr., M.A.G. Scialoru, "Adiabatic switching for oscillating electric fields", Relatorio Interno, IMECC/ /UNICAMP, submetido para publicação em J.Math.Phys., (1987).
- [89] E.A. Poe., "The Raven", The Illustrated Tales of Edgar Allan Poe, Drake Publishers Inc. New York, (1975), 163-169.



Impresso na Gráfica do

