



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

EXTENSÕES AUTO-ADJUNTAS DE OPERADORES EM MECÂNICA QUÂNTICA

por

Cleverson Filgueiras

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação
em Física do Departamento de Física da Universidade
Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para
obtenção do título de Mestre em Física.

Banca Examinadora:

Prof. Fernando Jorge Sampaio Moraes (Orientador-UFPE)
Prof. Cláudio Benedito Silva Furtado (DF – UFPE)
Prof. Bruno Geraldo Carneiro da Cunha (DF – UFPE)

Recife - PE, Brasil
Março - 2006

Figueiras, Cleverson

Extensões auto-adjuntas de operadores em
mecânica quântica / Cleverson Figueiras. –
Recife: O Autor, 2008.

63 folhas: il., tab., fig.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal
de Pernambuco. CCEN, Física, 2008.

Inclui bibliografia.

1. Física da matéria condensada. 2.
Mecânica quântica – Extensões auto-adjuntas de
operadores. 3. Método de Von Neumann-Krein –
Quantização não-equivalente. I. Título.

514.84

536.12

CDU (2.ed.)

CDD (22.ed.)

UFPE

BC2008-316



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física - CCEN
Programa de Pós-Graduação em Física
Campus Universitário - 50670-909 Recife PE - Brasil
Fone: (+55 81) 2126-8449/2126-8450 - Fax: (+55 81) 3271-0379
posgraduacao@ufpe.br - posgraduacao@ufpe.br

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Dissertação de Mestrado

Cleverson Filgueiras

EXTENSÕES AUTO-ADJUNTAS DE OPERADORES EM MECÂNICA QUÂNTICA

A Banca Examinadora composta pelos Professores Fernando Jorge Sampaio Moraes (Presidente e Orientador), Cláudio Benedito Silva Furtado, ambos da Universidade Federal da Paraíba e o Professor Bruno Geraldo Carneiro da Cunha do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, consideram o candidato:

☒ Aprovado com Distinção

☐ Aprovado

☐ Reprovado

Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco em vinte e três de março de 2006.


Prof. Fernando Jorge Sampaio Moraes
Presidente e Orientador


Prof. Cláudio Benedito Silva Furtado


Prof. Bruno Geraldo Carneiro da Cunha

*"Seus discípulos o interrogaram, dizendo: Por que, pois, os escribas dizem que é preciso que Elias venha antes? Mas Jesus lhes respondeu: É verdade que Elias deve vir e restabelecer todas as coisas; mas eu vos declaro que Elias já veio, e não o conheceram, mas o trataram como lhes aprouve...Então seus discípulos **compreenderam** que era de João Batista que lhes havia falado."São Mateus, cap. XVII, v. de 10 a 13; São Marcos, cap. IX, v. 11, 12 e 13.*

Agradecimentos

A Deus e a Jesus, o Cristo, por esta oportunidade.

A minha mãe; a pessoa mais importante que fez eu chegar aqui, no mundo fascinante da ciência. Maior incentivadora, patrocinadora, companheira... Obrigado por suportar minhas longas horas de estudo e por relevar algumas ausências de minha parte.

Ao meu Pai por compreender e emocionar-se ao perceber o caminho que estou traçando.

A minha nega, Ana Virgínia: primeiro, por ter aceitado ir ao cinema comigo, e segundo, por seu amor. Muita paz e equilíbrio tenho ao seu lado.

Ao meu orientador, Prof. Fernando Moraes, pela paciência, pela excelente orientação, e por algo que nem todos físicos possuem: humildade e humanidade.

À madrinha Rita e ao Beto Kitamura; palavras valorosas de incentivo ao estudo (a madrinha Rita, além de incentivar, puxou muito minhas orelhas, e com força, quando eu não queria estudar ou não entendia o assunto. Acho que valeu apenas).

À tia Céia e a minha avó pelo amor, pela paciência e compreensão.

A meu tio-avô Zé Merelle, pelas saudáveis conversas a respeito da vida; para mim, você é o maior dos sábios. (brabu)

A meu irmão Bruner por me emprestar suas blusas de frio (eram mais bonitas que as minhas poucas).

Ao Cheeeeeet, pela ajuda nas horas incertas, por ajudar trazer meu fitim, e pela grande amizade, além de cuidar muito bem da minha mãe.

Agradeço aos demais familiares e amigos, pela convivência harmoniosa: André, Gersin, Fredson, Didi, Rubens, Paulo Renato, Betin, os cabra do Ceará, Toin, Karla,

gaucho-tchê, Fabiano, Mib(és tu um Roscon?), Aléssio, Aníbal, Caio, Getúlio, e os demais colegas dos df's.

À Nazaré(sogra) por cuidar de mim (valeu também pelo fogão 6.0). Aos cunhados Alisson Morgana e Lan(mais fácil assim) pela amizade.

Ao Departamento de Física-UFPE pela compreensão, e ao Departamento de Física-UFPB pela estadia.

Agradeço ao Zargo e à Meg, por nunca terem me mordido. Espero que continuem assim.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico pelo apoio financeiro.

Resumo

O problema das extensões autoadjuntas de operadores em mecânica quântica, um assunto não abordado em livros textos, é brevemente discutido neste trabalho. O método de von-Neumman - Krein é evocado para se construir tais extensões autoadjuntas. Nos casos estudados aqui, as extensões autoadjuntas do hamiltoniano mostraram que tais sistemas admitem condições de contorno não usuais, levando a quantizações não-equivalentes. Por conta disso, observamos que eles admitem estados ligados, um fato que, em parte dos problemas, não ocorreria impondo-se a condição de contorno usual.

Abstract

The problem of the self-adjoint extensions of operators in quantum mechanics, a not boarded subject in books texts, is argued briefly in this work. The method of von-Neumman - Krein is evoked to construct to such self-adjoint extensions. In the cases studied here, the self-adjoint extensions of the hamiltoniano had shown that such systems admit not usual boundary condition, taking the not-equivalents quantizations. For account of this, we observe that they admit bound states, a fact that, in part of the problems, would not occur imposing it usual boundary condition.

Índice

1	Extensões autoadjuntas de Operadores em Mecânica Quântica	6
1.1	Introdução	6
1.2	O Operador Momento em um Intervalo Finito	7
1.3	O Operador Hamiltoniano em um intervalo finito	8
1.4	O Método de von Neumann-Krein	10
1.5	Partícula Livre no semi-eixo Positivo	16
2	Extensões Autoadjuntas para a Mecânica Quântica no Espaço Cônico	19
2.1	Partícula Quântica Livre não-Relativística no Espaço Cônico	19
2.2	O Efeito Aharonov-Bohm em Torno de Uma Corda Cósmica Revisitado	29
2.3	Dipolo Elétrico na Presença de um Espaço Cônico	30
3	Partícula Quântica Vinculada à uma Superfície Curva	34
4	Localização de Elétrons em Torno de Desclinações em uma Mono-	
	camada de Grafite	39
4.1	A Auto-interação	41
4.2	Localização	44

5	Estados Ligados em um Sistema Quântico 1 – D de N Partículas:	
	Modelo de Calogero	48
5.1	Interação Quadrado - inverso	48
5.2	Interações Quadrado - inverso e Harmônica	54

Lista de Figuras

3.1	Sistema de coordenadas curvilíneas sobre a superfície S , de equação paramétrica $\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2)$	35
5.1	Plotagem da eq. (5.42) [28], com $\omega = 0.25$, $\nu = 0.25$ e $\lambda = -1.5$. A linha horizontal reta corresponde ao valor do lado direito de (5.42). .	59

Introdução

Em mecânica quântica razões físicas dão uma expressão formal para o hamiltoniano e, em geral, sem que o seu domínio seja especificado. Não é difícil encontrar o domínio denso no qual o hamiltoniano seja bem definido e também um operador simétrico. A dinâmica quântica será, então, dada por um grupo unitário e o gerador infinitesimal de tal grupo deve ser autoadjunto.

No sentido de se determinar o domínio sobre o qual o hamiltoniano atua, estudamos alguns sistemas quânticos nos quais buscamos responder, primeiramente, duas questões: quando é que o operador hamiltoniano simétrico possui extensões autoadjuntas e, se as tem, como elas podem ser caracterizadas? A maneira como responder a estas questões é apresentada no Capítulo 1 pela teoria de von Neumann dos índices deficientes.

No Capítulo 2 estudamos a mecânica quântica de uma partícula livre não-relativística na presença de um espaço cônico, a qual leva a uma aplicação ao "Efeito Aharonov - Bohm" em torno de uma corda cósmica. A dinâmica de um dipolo elétrico na presença de um espaço cônico também é apresentada.

Uma breve revisão sobre a mecânica quântica de uma partícula vinculada a uma superfície curva $2 - D$ é apresentada no Capítulo 3. Isto é feito pois a física discutida aí será evocada no Capítulo 4, onde estudamos a dinâmica de um elétron em torno de uma desclinação presente em uma monocamada de grafite.

Os problemas discutidos até aqui são de partículas individuais movendo-se em um espaço de fases que apresenta uma singularidade cônica. Isto significa que o hamiltoniano é simétrico e não-autoadjunto. Porém, aplicando o método de von Neumann vimos que eles possuem extensões autoadjuntas. Desta forma, suas respectivas evoluções dinâmicas são unitárias. Conforme veremos, as extensões

autoadjuntas levam ao fato de que não podemos impor a condição de contorno que se refere à função de onda desaparecendo em tal singularidade: a função de onda diverge logaritmicamente conforme vamos em direção à ela. Isto leva a encontrarmos novos estados quânticos. Focamos nossa atenção principalmente aos novos estados ligados de cada problema.

Já no Capítulo 5 é feita uma revisão sobre o modelo de Calogero para mecânica quântica de N partículas em uma dimensão. Isto se deve ao fato de sua aplicação em diversos ramos da física: efeito Hall quântico, caos quântico, transporte elétrico quântico em sistemas mesoscópicos, buracos negros, dentre outros. Novamente, as extensões autoadjuntas mostraram a existência de estados ligados que não eram esperados se tais problemas fossem resolvidos impondo-se, de início, as condições de contorno que se referem à função de onda e a corrente desaparecendo quando duas partículas coincidem. Teremos, também, estados ligados quando a função de onda e/ou a corrente divergem na coincidência de duas partículas. Por fim, apresentamos algumas considerações finais e perspectivas futuras.

Capítulo 1

Extensões autoadjuntas de Operadores em Mecânica Quântica

Começamos, aqui, com alguns exemplos sem especificar explicitamente a física do problema, e as primeiras noções sobre extensões autoadjuntas são esboçadas. Após isto, vamos em direção à teoria de von-Neumann-Krein, que nos justificará a existência de tais extensões, além de nos fornecer a ferramenta necessária para construí-las.

1.1 Introdução

Em mecânica quântica lidamos com o fato de que um operador é um observável quando ele é hermitiano, i.é, $A = A^*$ [1]. Contudo, o que não fica claro é que, tecnicamente, um operador será observável se ele for autoadjunto, i.é, $D(A) = D(A^*)$ e $A = A^*$; $D(A)$ é o domínio em que ele atua. Para que um operador seja

autoadjunto, é preciso que ele seja simétrico [2]

$$\langle A\phi, \psi \rangle = \langle \phi, A\psi \rangle. \quad (1.1)$$

Um fato que passa despercebido nos cursos de mecânica quântica é que a condição (1.1) revela que as condições de contorno para um sistema não devem ser impostas(como no caso do poço infinito onde requeremos a condição usual do desaparecimento das funções de onda nos extremos da caixa [3]). Elas entram na própria definição do operador em questão. Isto quer dizer que outras autofunções, satisfazendo condições de contorno diferentes das usuais, devem entrar no domínio de tal operador. Estas outras autofunções correspondem à diferentes situações físicas. A pergunta que deve ser então respondida é: Qual é o domínio em que um operador simétrico será efetivamente autoadjunto? Esta será respondida primeiramente com dois exemplos: o operador momento e o operador hamiltoniano, ambos em um intervalo fechado. Depois, evocaremos a teoria de von Neumann-Krein das extensões autoadjuntas de operadores[4], onde exemplificaremos com a partícula livre não-relativística no semi-eixo positivo.

1.2 O Operador Momento em um Intervalo Finito

Vamos considerar o operador momento unidimensional $P = -i\hbar \frac{d}{dx}$ em um intervalo fechado $[0, L]$. Seguindo os livros textos, seu domínio será escrito como

$$D(P) = \left\{ \phi, \dot{\phi} \in L^2([0, L]); \phi(0) = \phi(L) = 0 \right\}. \quad (1.2)$$

Contudo, conforme foi dito anteriormente, para que P seja observável, deve satisfazer a condição (1.1), i.é

$$\left\langle \psi, -i\hbar \frac{d}{dx} \phi \right\rangle - \left\langle -i\hbar \frac{d}{dx} \psi, \phi \right\rangle = -i\hbar [\psi^*(L)\phi(L) - \psi^*(0)\phi(0)] = 0. \quad (1.3)$$

Se $\psi = \phi$ e $\phi(L) = e^{i\theta}\phi(0)$, P será simétrico no intervalo $[0, L]$ pois (1.3) será satisfeito[5]. Vemos que o seu domínio será maior do que o usual (1.2), sendo escrito como

$$D_\theta(P) = \left\{ \phi, \dot{\phi} \in L^2([0, L]); \phi(L) = e^{i\theta}\phi(0) \right\}. \quad (1.4)$$

com $\theta \in [0, 2\pi]$. O operador momento neste intervalo será autoadjunto e portanto observável. Ele possui infinitas condições de contorno parametrizadas por θ . Dizemos que P em $[0, L]$ possui infinitas extensões autoadjuntas. Quando $\theta = 0$, recuperamos as condições de contorno periódicas usuais.

Como vemos, matematicamente, este problema admite infinitas condições de contorno, onde cada uma está relacionada á física do problema. Podemos ter aí uma partícula na caixa unidimensional(o que chamamos de condição de contorno usual), partícula no círculo sem ou com fluxo magnético atravessando-o, etc.

1.3 O Operador Hamiltoniano em um intervalo finito

Consideremos a partícula livre na caixa. O hamiltoniano $H = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$ tem como domínio usual [3],

$$D(H) = \left\{ \phi, \dot{\phi}, \ddot{\phi} \in L^2([0, L]); \phi(L) = \phi(0) = \dot{\phi}(L) = \dot{\phi}(0) = 0 \right\}. \quad (1.5)$$

Conforme já sabemos, para que H seja autoadjunto em $[0, L]$ é preciso que ele seja simétrico, i.é

$$\langle H\phi, \psi \rangle - \langle \phi, H\psi \rangle = 0. \quad (1.6)$$

A integração (1.6), com $\psi = \phi$ (i.é, $D(H) = D(H^\perp)$) leva a

$$\frac{1}{2i} \left(\dot{\phi}(L)\phi^*(L) - \phi(L)\dot{\phi}^*(L) - \dot{\phi}(0)\phi^*(0) + \phi(0)\dot{\phi}^*(0) \right) = 0. \quad (1.7)$$

Usando a identidade

$$\frac{1}{2i}(xy^* - x^*y) = \frac{1}{4}(|x + iy|^2 - |x - iy|^2), \quad (1.8)$$

primeiro tomamos $x = L\dot{\phi}^*(L)$ e $Y = \phi(L)$; depois $x = L\dot{\phi}^*(0)$ e $Y = \phi(0)$. A expressão (1.7) pode ser reescrita como

$$\left|L\dot{\phi}(0) - i\phi(0)\right|^2 + \left|L\dot{\phi}(L) + i\phi(L)\right|^2 - \left|L\dot{\phi}(0) + i\phi(0)\right|^2 - \left|L\dot{\phi}(L) - i\phi(L)\right|^2 = 0 \quad (1.9)$$

Para que a expressão (1.9) desapareça identicamente, vemos que $\dot{\phi}(L)$, $\phi(L)$, $\dot{\phi}(0)$ e $\phi(0)$ devem satisfazer as seguintes condições de contorno

$$\begin{pmatrix} L\dot{\phi}(0) - i\phi(0) \\ L\dot{\phi}(L) + i\phi(L) \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} L\dot{\phi}(0) + i\phi(0) \\ L\dot{\phi}(L) - i\phi(L) \end{pmatrix}, \quad (1.10)$$

onde U é uma matriz unitária 2×2 que parametriza as condições de contorno. Deste modo, vemos que o domínio estendido de H em $[0, L]$ é

$$D_U(H) = \left\{ \phi, \dot{\phi}, \ddot{\phi} \in L^2([0, L]) \mid (1.10) \text{ satisfeita} \right\}. \quad (1.11)$$

Observe que $U = I$ corresponde à condição de contorno usual (1.5). Conforme antes, a física do problema selecionará a condição de contorno verdadeira.

Uma análise mais completa do espectro de H em $[0, L]$ pode ser visto em [5]. O que fica destas duas seções é o seguinte: em geral, um operador simétrico terá um domínio maior de atuação (i.é, terá extensões autoadjuntas), com condições de contorno parametrizadas por um ou mais parâmetros. As condições de contorno usuais são um caso particular dentre todas as possíveis extensões autoadjuntas de um operador simétrico.

1.4 O Método de von Neumann-Krein

A teoria de von Neumann-Krein das extensões autoadjuntas pode ser utilizada mais convenientemente para se determinar o número de parâmetros independentes que descrevem as extensões. Vamos, aqui, fazer uso da terminologia matemática, começando com algumas definições precisas.

Consideremos o espaço de Hilbert H . Um operador A , com domínio $D(A)$, definido em H é dito densamente definido se o subconjunto $D(A)$ é denso em H , isto é, para qualquer $\psi \in H$ podemos achar em $D(A)$ uma sequência ϕ_n que converge em norma para ψ .

Um operador A , com domínio $D(A)$, é dito ser fechado se ϕ_n é uma sequência em $D(A)$ tal que

$$\begin{aligned}\lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n &= \phi, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} A\phi_n &= \psi\end{aligned}\tag{1.12}$$

Então, $\phi \in D(A)$ e $A\phi = \psi$.

Nesta seção, discutiremos as extensões de operadores simétricos fechados. Começemos enunciando um teorema, o qual não provaremos aqui [4].

Teorema I: Seja A um operador simétrico fechado no espaço de Hilbert H . Então,

- 1a. $\dim [Ker(\lambda I - A^*)]$ é constante por todo o semi-plano superior aberto.
- 1b. $\dim [Ker(\lambda I - A^*)]$ é constante por todo o semi-plano inferior aberto.
2. O espectro de A é um dos seguintes:
 - (a) o semi-plano superior fechado

- (b) o semi-plano inferior fechado
- (c) o plano inteiro
- (d) um subconjunto do eixo real.

3 A é autoadjunto se e somente se o caso (2d) ocorre.

4 A é autoadjunto se e somente se ambas as dimensões 1.a e 1.b são zero.

Uma vez que os núcleos de $i - A^*$ e $i + A^*$ têm um papel importante, é conveniente dar nome a eles.

Definição: Suponha que A seja um operador simétrico. Sejam

$$\begin{aligned} K_+ &= \text{Ker}(i - A^*) \\ K_- &= \text{Ker}(i + A^*) \end{aligned} \tag{1.13}$$

K_+ e K_- são chamados de subespaços deficientes de A . O par de números (n_+, n_-) , dados por $n_+(A) = \dim[K_+]$, $n_-(A) = \dim[K_-]$ são chamados de índices deficientes de A .

Vamos agora para a tarefa de construir as extensões de A . Seja B tal extensão. Então, para $\phi \in D(B^*)$, nós temos $\langle \psi, B^*\phi \rangle = \langle B\psi, \phi \rangle = \langle A\psi, \phi \rangle$, para todo $\psi \in D(A)$. Assim, $\phi \in D(A)$ e $B^*\phi = A^*\phi$ tal que

$$A \subseteq B \subseteq B^* \subseteq A^* \tag{1.14}$$

Duas novas formas sesquilineares em $D(A^*)$ são introduzidas:

$$\begin{aligned} \langle \phi, \psi \rangle_A &= \langle \phi, \psi \rangle + \langle A^*\phi, A^*\psi \rangle \\ [\phi, \psi]_A &= \langle A^*\phi, \psi \rangle - \langle \phi, A^*\psi \rangle \end{aligned} \tag{1.15}$$

Um subespaço de $D(A^*)$ é chamado A -simétrico quando $[\phi, \psi]_A = 0$, para todos ϕ e ψ neste subespaço. Quando os subespaços de $D(A^*)$ são A -fechados ou A -ortogonais significa que o produto interno é dado por $\langle \cdot, \cdot \rangle_A$.

Lema: Seja A um operador simétrico fechado. Então,

- (a) As extensões simétricas de A são as restrições de A^* ao subespaços A -fechados e A -simétricos de $D(A^*)$.
- (b) $D(A)$, K_+ e K_- são subespaços A -fechados e mutuamente A -ortogonais de $D(A^*)$, e

$$D(A^*) = D(A) \oplus_A K_+ \oplus_A K_-$$

- (c) Existe uma correspondência uma-a-uma entre os subespaços S (A -simétricos e A -fechados) de $D(A^*)$ que contém $D(A)$ e os subespaços S_1 (A -simétricos e A -fechados) de $K_+ \oplus_A K_-$ dada por $S = D(A) \oplus_A S_1$.

Prova: para provar (a), note que (1.14) implica que qualquer extensão simétrica de A está contida em A^* . Mais ainda, a extensão é fechada se e somente se seu domínio é A -fechado e a extensão é A -simétrica se e somente se seu domínio é A -simétrico.

Para provar (b), note que $D(A)$ é um subespaço A -fechado pois A é fechado, e K_+ e K_- são A -fechados porque já são fechados perante o produto interno usual. O fato de que eles são três subespaços ortogonais é um cálculo direto que omitimos. Basta levar em conta (1.15). Suponha que $\psi \in D(A^*)$ e $D(A) \oplus_A \psi \perp_A K_+ \oplus_A K_-$. Para $\phi \in D(A)$, temos $\langle \phi, \psi \rangle_A = \langle \phi, \psi \rangle + \langle A^* \phi, A^* \psi \rangle = 0$, tal que

$$\langle \phi, \psi \rangle = - \langle A\phi, A^* \psi \rangle$$

Assim, $A^*\psi \in D(A^*)$ e $A^*A^*\psi = -\psi$, levando a

$$(A^*A^* + 1)\psi = (A^* + i)(A^* - i)\psi = 0$$

Logo, concluímos que $(A^* - i)\psi \in K_-$. Mas, se $\phi \in K_-$, então

$$\begin{aligned} i\langle \phi, (A^* - i)\psi \rangle &= \\ &= \langle \phi, \psi \rangle + \langle A^*\phi, A^*\psi \rangle = \langle \phi, \psi \rangle_A = 0 \end{aligned}$$

pois $\psi \perp_A K_-$. Assim, temos que $(A^* - i)\psi = 0$, o que implica que $\psi \in K_+$. Como $\psi \perp_A K_+$, concluímos que $\psi = 0$, o que completa a prova de (b).

Seja S_1 um subespaço (A -simétrico e A -fechado) de $K_+ \oplus_A K_-$. Suponha que $\phi = \phi_0 + \phi_1$, $\psi = \psi_0 + \psi_1$, com $\phi_0, \psi_0 \in D(A)$; $\phi_1, \psi_1 \in S_1$. Então, $[\phi_0, \psi_0]_A = 0$ pois A é simétrico e $[\phi_1, \psi_1]_A = 0$ pois S_1 é A -simétrico. Mais ainda,

$$[\phi, \psi]_A = [\phi_0, \psi_0]_A + [\phi_1, \psi_1]_A + [\phi_1, \psi_0]_A + [\phi_0, \psi_1]_A$$

implicando que $S = D(A) \oplus_A S_1$ é uma subespaço A -simétrico. S é A -fechado pois $D(A)$ e S_1 são A -fechados e A -ortogonais.

Inversamente, seja S um subespaço A -simétrico e A -fechado de $D(A^*)$ contendo $D(A)$. Seja $S_1 = S \cap (K_+ \oplus_A K_-)$. Então, S_1 é claramente A -fechado e A -simétrico. Agora, suponha que $\phi \in S$. Então, ϕ pode ser unicamente expressado como $\phi = \phi_0 + \phi_1$, onde $\phi_0 \in D(A)$ e $\phi_1 \in K_+ \oplus_A K_-$. Como $D(A) \subset S$, temos que $\phi_0 \in S$ o que implica que $\phi_1 \in S$ também. Assim, $\phi_1 \in S_1$ tal que $S = D(A) \oplus_A S_1$. Isto prova (c).

Como o domínio de A^* é dado por

$$D(A^*) = D(A) \oplus_A K_+ \oplus_A K_-. \quad (1.16)$$

vemos que, mesmo se $A = A^*$, isto não quer dizer que ele seja formalmente autoadjunto pois em geral os domínios $D(A)$ e $D(A^*)$ são diferentes.

Estamos, agora, prontos para provar o teorema principal deste trabalho.

Teorema II: Seja A um operador simétrico e fechado. As extensões simétricas fechadas de A estão numa correspondência uma-a-uma com o conjunto de isometrias parciais (no produto interno usual) de K_+ em K_- . Se U é tal isometria com espaço inicial $I(U) \subset K_+$, então a correspondente extensão simétrica fechada A_U tem domínio

$$D(A_U) = \{\phi + \phi_+ + U\phi_+ | \phi \in D(A), \phi_+ \in I(U)\}$$

e

$$A_U(\phi + \phi_+ + U\phi_+) = A\phi + i\phi_+ - iU\phi_+$$

Se a $\dim[I(U)] < \infty$, os índices deficientes de A_U são

$$n_{\pm}(A_U) = n_{\pm}(A) - \dim[I(U)]$$

Prova: Seja A_1 uma extensão simétrica fechada de A . Do lema, sabemos que $D(A_1) = D(A) \oplus_A S_1$, onde S_1 (A -simétrico e A -fechado) é um subespaço de $K_+ \oplus_A K_-$. Se $\phi \in S_1$, podemos escrever $\phi = \phi_+ + \phi_-$. Como S_1 é A -simétrico,

$$0 = \langle A^*\phi, \phi \rangle - \langle \phi, A^*\phi \rangle = 2i \langle \phi_-, \phi_- \rangle - 2i \langle \phi_+, \phi_+ \rangle$$

o que implica que

$$\|\phi_+\|^2 = \|\phi_-\|^2 \tag{1.17}$$

Como S_1 é um subespaço de $K_+ \oplus_A K_-$, (1.17) mostra que $\phi_+ \mapsto \phi_-$ é uma bem-definida isometria de um subespaço de K_+ em K_- . Chamamos a correspondente isometria parcial de U . Então,

$$D(A_U) = \{\phi + \phi_+ + U\phi_+ | \phi \in D(A), \phi_+ \in I(U)\} \tag{1.18}$$

e

$$A_U(\phi + \phi_+ + U\phi_+) = A^*(\phi + \phi_+ + U\phi_+) = A\phi + i\phi_+ - iU\phi_+ \quad (1.19)$$

Inversamente, seja U uma isometria do subespaço de K_+ em K_- e defina $D(A_1)$ e A_1 por (1.18) e (1.19). Então, $D(A_1)$ é um subespaço A -fechado e A -simétrico de $D(A^*)$, e pelo lema, A_1 é uma extensão simétrica fechada de A . A declaração sobre os índices deficientes segue dos núcleos de $i \mp A_1^*$ em $D(A_1)$

Corolário: Para um operador A com índices deficientes (n_+, n_-) existem três possibilidades:

1. Se $n_+ = n_- = 0$, então A é essencialmente autoadjunto.
2. Se $n_+ = n_- = n \geq 1$, então A possui infinitas extensões autoadjuntas, Existe uma correspondência uma-a-uma entre as extensões autoadjuntas de A e os mapas unitários de K_+ em K_- .
3. Se $n_+ \neq n_-$, então A não possui extensão autoadjunta.

Um critério simples e usual para um operador simétrico ter extensões autoadjuntas é dado pelo seguinte teorema.

Definição: Um mapa antilinear $C : H \rightarrow H$ ($C(\alpha\phi + \beta\psi) = \bar{\alpha}C\phi + \bar{\beta}C\psi$) é chamado de **conjugação** se ele preserva a norma e $C^2 = I$.

Teorema III: (Teorema de von Neumann) Seja A um operador simétrico e suponha que existe uma conjugação C com $C : D(A) \rightarrow D(A)$ e $AC = CA$. Então, A possui índices deficientes iguais e assim possui extensões autoadjuntas.

Prova: Uma vez que $C^2 = I$ e $CD(A) \subseteq D(A)$, temos $C^2D(A) \subseteq CD(A)$ implicando que $CD(A) = D(A)$. Suponha que $\phi_+ \in K_+$ e $\psi \in D(A)$. Então,

$$0 = C \langle \phi_+, (A + i)\psi \rangle = \langle C\phi_+, C(A + i)\psi \rangle = \langle C\phi_+, (A - i)C\psi \rangle$$

Como C leva $D(A)$ em $D(A)$, $C\phi_+ \in K_-$, tal que $C : K_+ \rightarrow K_-$. Um prova similar mostra que $C : K_- \rightarrow K_+$. Como C preserva a norma, então

$$\dim [K_+] = \dim [K_-].$$

Disso tudo, vemos que, em geral, o domínio de um operador simétrico A pode ser estendido ao domínio de A^* , ou seja,

$$D(A_U) = D(A^*) \quad (1.20)$$

Assim, pelo *Teorema II*, o domínio no qual A é autoadjunto será

$$D(A_U) = \{\phi + c(\phi_+ + U\phi_-) \mid \phi \in D(A), c \in C, U \text{ fixa}\} \quad (1.21)$$

onde U , agora, designa a matriz unitária que parametriza tais extensões, isto é, as isometrias de K_+ em K_- são os mapas unitários $\phi_+ \mapsto U\phi_-$.

A seguir, bem como nos capítulos seguintes, exemplificamos esta seção.

1.5 Partícula Livre no semi-eixo Positivo

Antes de iniciar o problema, ressaltamos que este caso também é apresentado em [5], onde foram obtidos os índices deficientes somente para dizer se o problema possui extensões autoadjuntas ou não. Vamos proceder de modo diferente usando o método de von Neuman-Krein como um todo. Nosso problema é encontrar o domínio máximo em que atua o operador hamiltoniano $-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2}$. Os índices deficientes são obtidos de

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = \pm i k_0^2 \Psi(x) \quad (1.22)$$

com $k_0 > 0$. A solução desta equação diferencial é

$$\Psi_{\pm}(x) = A_{\pm} e^{k_{\pm} x} + B_{\pm} e^{-k_{\pm} x} \quad (1.23)$$

onde $k_{\pm} = \frac{(1 \mp i)}{\sqrt{2}} k_0$. Por causa da barreira infinita em $x < 0$, temos H atuando no espaço de Hilbert $L^2(0, +\infty)$. Logo, (1.23) só é possível se $A \equiv 0$. A solução é agora escrita como

$$\Psi_{\pm}(x) = B_{\pm} e^{-k_{\pm} x} \quad (1.24)$$

Conclui-se daí que $(n_+, n_-) = (1, 1)$, ié, temos infinitas extensões autoadjuntas parametrizadas por $U(1) = e^{i\eta}$. O domínio em que H é autoadjunto é constituído de autovetores da forma

$$\Psi(x) = \chi(x) + C (e^{k_{\pm} x} + e^{i\eta} e^{-k_{\pm} x}) \quad (1.25)$$

onde $\chi(x) \in L^2(0, \infty)$ e $\eta \in [0, 2\pi)$ é o parâmetro de extensão. Temos ainda

$$\chi(0) = \dot{\chi}(0) = 0 \quad (1.26)$$

Sabemos que H possui espectro não-negativo. Porém, veremos que as extensões autoadjuntas levam a um resultado surpreendente: temos um estado ligado com energia negativa. Para verificar isto, primeiro escrevemos a equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = -|E| \Psi \quad (1.27)$$

Sua solução geral é

$$\Psi(x) = A e^{-\sqrt{|E|} x} \quad (1.28)$$

pois $\Psi(x) \in L^2(0, \infty)$. Igualando (1.25) a (1.28) e usando as condições (1.26), obtemos o espectro negativo

$$E = -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2M} \quad (1.29)$$

conforme mencionamos acima. Em (1.29) $k_0 \in (0, \infty)$. Note que este estado ligado não depende do parâmetro de extensão η . Ele aparece pois (1.28) satisfaz à condição de contorno não usual

$$\Psi(0) = \frac{1}{k_0} \dot{\Psi}(0) \quad (1.30)$$

Com esta condição de contorno, a partícula no semi-eixo possui também o espectro não-negativo dado por

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (1.31)$$

Dizemos que a condição de contorno usual $\Psi(0) = 0$ refere-se a $k_0 = \infty$ e que a condição $\dot{\Psi}(0) = 0$ refere-se a $k_0 = 0$.

Capítulo 2

Extensões Autoadjuntas para a Mecânica Quântica no Espaço Cônico

Neste capítulo, vamos em direção ao estudo das extensões autoadjuntas do operador hamiltoniano, tanto para um elétron quanto para um dipolo elétrico, no espaço cônico. Uma aplicação ao estudo de um elétron em torno de uma corda cósmica é apresentada.

2.1 Partícula Quântica Livre não-Relativística no Espaço Cônico

O estudo da mecânica quântica no cone tem grande importância para a compreensão dos efeitos quânticos em partículas movendo-se em meios cristalinos com defeitos topológicos tipo desclinações [6]. Estes defeitos aparecem também em sistemas 2 –

D , como por exemplo no grafite [7]. Outra aplicação interessante é o estudo do movimento de uma partícula quântica em torno de uma corda cósmica [8],[9]. Um cone pode ser obtido removendo-se ou inserindo-se uma cunha de ângulo diedral $2\pi|\alpha - 1|$, de tal forma que o ângulo total em torno do eixo z seja $2\pi\alpha$ em vez de 2π . Quando $\alpha < 1$, tem-se um déficit de ângulo, e quando $\alpha > 1$, tem-se excesso de ângulo. Este espaço cônico tem como métrica, em coordenadas cilíndricas,

$$ds^2 = dz^2 + d\rho^2 + \alpha^2 \rho^2 d\theta^2 \quad (2.1)$$

O hamiltoniano da partícula livre neste espaço é

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \quad (2.2)$$

O espaço de Hilbert correspondente de funções quadrado-integráveis pode ser representado como o produto tensorial $L^2(R^+, \rho d\rho) \otimes L^2(S^1, d\theta) \otimes L^2(R, dz)$, onde $L^2(R^+, \rho d\rho)$ é o espaço de Hilbert das funções quadrado-integráveis no semi-eixo R^+ , $L^2(S^1, d\theta)$ é o espaço de Hilbert das funções quadrado-integráveis no círculo S^1 , e $L^2(R, dz)$ é o espaço de Hilbert no eixo R . Vamos proceder às extensões autoadjuntas de (2.2) usando a propriedade de decomposição do produto tensorial. Primeiramente, vamos discutir a autoadjuntissade de $-\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ em R . Os índices deficientes deste operador são obtidos a seguir:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 f(z)}{\partial z^2} = \pm i \kappa_0^2 f(z) \quad (2.3)$$

com $\kappa > 0$. Pondo $\kappa_{\pm} = \frac{(1 \mp i)}{\sqrt{2}} \frac{2M}{\hbar^2} \kappa_0$, a solução da equação acima será

$$f_{\pm}(z) = A_{\pm} e^{\kappa_{\pm} z} + B_{\pm} e^{-\kappa_{\pm} z} \quad (2.4)$$

O que temos efetivamente é a partícula livre movendo-se ao longo eixo z . É fácil ver que $f_{\pm}(z) \notin L^2(R, dz)$ o que significa que $(n_+, n_-) = (0, 0)$. Logo, $-\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ é essencialmente autoadjunto, com espectro contínuo. Requerendo a condição de periodicidade

da função de onda

$$\psi(\theta + 2\pi\alpha) = \psi(\theta) \quad (2.5)$$

o espectro de $-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$ será dado por l^2 . Este operador é essencialmente autoadjunto em $L^2(S^1, d\theta)$ pois seus índices deficientes são $(n_+, n_-) = (0, 0)$. Com os resultados acima, assumimos que as autofunções são da forma

$$\Psi(z, \rho, \theta) = e^{ikz+il\theta}\psi(\rho). \quad (2.6)$$

levando ao hamiltoniano efetivo

$$H_{\alpha, k}^l = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{l^2}{\alpha^2 \rho^2} - k^2 \right]. \quad (2.7)$$

Os subespaços deficientes da parte radial deste hamiltoniano são obtidos de

$$H_{\alpha}^* \Phi_{\pm} = \pm i\kappa \Phi_{\pm}. \quad (2.8)$$

A solução desta equação diferencial pode ser apresentada em termos das funções modificadas de Bessel I_{μ} e K_{μ} como se segue

$$\Phi_{\pm}(\rho) = C_1 I_{\frac{l}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{\mp i 2m\kappa} \right) + C_2 K_{\frac{l}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{\mp i 2m\kappa} \right), \quad (2.9)$$

Para $l > 0$, (2.9) possui índices deficientes $(n_+, n_-) = (0, 0)$. Logo, nestes setores, (2.7) é essencialmente autoadjunto. Contudo, no setor $l = 0$, os índices deficientes são $(n_+, n_-) = (1, 1)$. Com $C_1 \equiv 0$, a solução

$$\Psi_{0,\pm}(\rho) = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{2M\kappa}{\pi}} K_0 \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{\mp i 2m\kappa} \right) \quad (2.10)$$

pertence a $L^2(R^+, \rho d\rho)$ uma vez que

$$\int_0^{\infty} d\rho \int_0^{2\pi} \rho d\theta \frac{\kappa^2}{\pi} K_0^2(\kappa\rho) = 1 \quad (2.11)$$

De acordo com a teoria de von Neumann-Krein, o domínio de H no sector $l = 0$ é dado pelos vetores

$$\Psi_0(\rho, \theta) = \chi_0(\rho, \theta) + C \left[K_0 \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{-i2M\kappa} \right) + e^{i\eta} K_0 \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{i2M\kappa} \right) \right] \quad (2.12)$$

onde

$$\chi_0(0, \theta) = \dot{\chi}_0(0, \theta) = 0 \quad (2.13)$$

C é um número complexo arbitrário e $\eta \in [-\pi, \pi)$, fixando o domínio. Observe que $\chi_0(\rho, \theta) \in L^2(R_+, \rho d\rho) \otimes L^2(S^1, d\theta)$. É fácil notar que H possui o espectro não-negativo de zero a infinito e possíveis estados ligados correspondentes às energias negativas, que é o caso que vamos nos concentrar. A parte radial da equação de Schrödinger neste caso é escrita como

$$H_0 \Psi_0(\rho) = -|E| \Psi_0(\rho) \quad (2.14)$$

cuja solução geral é

$$\Psi_0(\rho) = K_0 \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{2M|E|} \right) \quad (2.15)$$

Igualando (2.15) a (2.12), aplicando as condições (2.13), levando em conta o movimento ao longo do eixo z e usando a seguinte expansão para a função $K_0(x)$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \Psi_0(x) = \lim_{x \rightarrow 0} \left[-\ln \left(\frac{x}{2} \right) - \gamma + O(x^2 \ln x) \right], \quad (2.16)$$

onde γ é a constante de Euler, obtemos

$$E = -\kappa e^{\frac{\pi}{2} \tan \frac{\eta}{2}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (2.17)$$

Observe que κ possui dimensão de energia e que para cada η fixo temos um estado ligado apenas. Conforme notamos, o estado ligado com energia dada por (2.17) não apareceria se tivéssemos resolvido o problema impondo a condição de contorno usual

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \Psi_0 \right) (\rho) = 0 \quad (2.18)$$

a qual corresponde a $\eta = \pi$. A relação (2.17) refere-se à condição de contorno [8]

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \left[\left(\ln(\rho/R) \rho \frac{d}{d\rho} - 1 \right) \Psi_0(\rho) \right] = 0 \quad (2.19)$$

com $R = \exp\left(-\frac{\pi}{4} \tan(\eta/2)\right) \in (0, \infty)$. Note que não há nenhum problema com a divergência da função de onda em $\rho = 0$ por causa de (2.11). Uma outra realização possível para o problema é aquela em que a função de onda é antiperiódica, i.é,

$$\Psi(\rho, \theta + 2\pi\alpha) = -\Psi(\rho, \theta) \quad (2.20)$$

Antes de estudar este caso, vamos discutir a questão da invariância rotacional do problema, i.é, as possíveis realizações do grupo $SO(2) \approx U(1)$ no espaço de Hilbert H de funções em S^1 , bem como a simetria por reversão temporal. A ação mais geral de $SO(2)$ em H é da forma

$$U_\lambda(\zeta)f(\theta) = e^{i\lambda\zeta}f(\theta + \zeta) \quad (2.21)$$

onde $\lambda \in R$. O fator $e^{i\lambda\zeta}$ aparece pois $U(1)$ é um grupo aditivo de números reais. Levando em conta (2.21), vemos que a estrutura projetiva de H é preservada com período 2π se, para cada $f, g \in H$,

$$g^*(\theta + 2\pi)f(\theta + \zeta + 2\pi) = g^*(\theta)f(\theta + \zeta) \quad (2.22)$$

para todo θ e ζ . Com esta condição, e levando-se em conta o déficit/excesso de ângulo α , os vetores de H devem ser quasiperiódicos, i.é, para cada $f, g \in H$,

$$f(\theta + 2\pi\alpha) = e^{i\xi}f(\theta) \quad (2.23)$$

com $\xi \in [0, 1)$. Note que a transformação (2.21) preserva esta condição de quasiperiodicidade. Vamos denotar o espaço de Hilbert das funções quadrado-integráveis quasiperiódicas, com o produto escalar

$$\langle f, g \rangle = \frac{1}{2\pi\alpha} \int_0^{2\pi\alpha} d\theta f^*(\theta)g(\theta), \quad (2.24)$$

por $L^2(S^1, d\theta)_\xi$. Retornando à realização de $SO(2)$, $U_\lambda(\zeta)$ é gerado pelo operador J_λ via o mapa exponencial

$$U_\lambda(\zeta) = e^{i\zeta J_\lambda} \quad (2.25)$$

Levando em conta (2.21), encontramos que

$$J_\lambda = -i\frac{\partial}{\partial\theta} + \lambda \quad (2.26)$$

É fácil verificar que os índices deficientes de J_λ são $(n_+, n_-) = (0, 0)$. Logo, ele é essencialmente autoadjunto em $L^2(S^1, d\theta)_\xi$. Seu domínio é dado por $D(J_\lambda) = \{f, \frac{\partial f}{\partial\theta} \in L^2(S^1, d\theta)_\xi\}$. Uma questão importante é relacionada ao espectro de J_λ . A equação de autovalores

$$J_\lambda f_\mu = \mu f_\mu \quad (2.27)$$

tem como solução

$$f_\mu(\theta) = e^{i(\mu-\lambda)\theta} \quad (2.28)$$

Pelo fato de $f_\mu \in L^2(S^1, d\theta)_\xi$, elas satisfazem a condição de quasiperiodicidade (2.23) e conseqüentemente

$$\mu = \lambda + \xi - [\lambda + \xi] \equiv \epsilon + l \quad (2.29)$$

onde l é um inteiro e $\epsilon \in [0, 1)$ e $[\lambda + \theta]$ é o maior inteiro em $\lambda + \xi$. Vamos agora estudar a ação de $-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$ em $L^2(S^1, d\theta)_\xi$. Note que esta ação não viola a condição de quasiperiodicidade (2.23). É fácil verificar que os índices deficientes deste operador em $L^2(S^1, d\theta)_\xi$ são dados por $(n_+, n_-) = (0, 0)$, o que diz que ele essencialmente autoadjunto neste domínio. Levando em conta (2.26) e (2.29), encontramos que o espectro de $-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$ é dado por

$$(m + \xi)^2, m \in \mathbb{Z} \quad (2.30)$$

Os autovetores comuns de J_λ e $-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$, dados em (2.28), são reescritos como

$$f_{m,\xi}(\theta) = e^{i(m+\xi)\theta} \quad (2.31)$$

Note que para $\lambda = 0$, temos $m = l$; contudo, em geral, $m = l - [\lambda + \xi]$. Colocando agora as autofunções de (2.2) tendo a forma

$$\Psi(z, \rho, \theta) = e^{ikz+i(l+\lambda)\theta}\Phi(\rho). \quad (2.32)$$

o hamiltoniano efetivo será escrito como

$$H_{\frac{m+\xi}{\alpha},k} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{(m+\xi)^2}{\alpha^2 \rho^2} - k^2 \right]. \quad (2.33)$$

No sentido de encontrar os índices deficientes, olhamos para a equação $H_{\frac{m+\xi}{\alpha},k}^* F_{\pm,m}(\rho) = \pm i\kappa F_{\pm,m}$, a qual fornece

$$\Phi_{\pm}(\rho) = C_1 I_{\frac{m+\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{\mp i 2m\kappa} \right) + C_2 K_{\frac{m+\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{\mp i 2m\kappa} \right), \quad (2.34)$$

que pertence a $L^2(R^+, \rho d\rho)$ somente se $\frac{m+\xi}{\alpha} \in (-1, 1)$, ou seja, $\frac{m}{\alpha} = 0$ e $\frac{\xi}{\alpha} \in [0, 1)$ ou $\frac{m}{\alpha} = -1$ e $\frac{\xi}{\alpha} \in (0, 1)$. Fora destes setores, os índices deficientes são $(n_+, n_-) = (0, 0)$, implicando que $H_{\frac{m+\xi}{\alpha},k}$ seja essencialmente autoadjunto. Assim, (2.33) admite as soluções

$$K_{\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{\mp 2iM\kappa} \right), K_{\frac{\xi}{\alpha}-1} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{\mp 2iM\kappa} \right).$$

pois pertencem a $L^2(R^+, \rho d\rho)$. O caso $\xi = 0$, $m = 0$ foi o estudado acima. Vamos agora analisar o caso $\frac{\xi}{\alpha} \in (0, 1)$. Temos duas soluções

$$F_{\pm}^{(\frac{\xi}{\alpha}, 0)} = K_{\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{\mp 2iM\kappa} \right) \quad (2.35)$$

$$F_{\pm}^{(\frac{\xi}{\alpha}, -1)} = K_{1-\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{\mp 2iM\kappa} \right). \quad (2.36)$$

onde usamos a identidade

$$K_{\nu}(x) = K_{-\nu}(x) \quad (2.37)$$

Daí, tiramos que, para $\frac{\xi}{\alpha} \neq 0$, os índices deficientes do hamiltoniano são $(n_+, n_-) = (2, 2)$, i.é, tem-se infinitas extensões autoadjuntas parametrizadas por $U(2)$. O

domínio de H neste caso contém os vetores da forma

$$\begin{aligned} \Psi_{\frac{\xi}{\alpha}}(\rho, \theta, z) &= \chi_{\frac{\xi}{\alpha}}(\rho, \theta, z) + \\ &+ (A, B) \left[\begin{pmatrix} \Psi_{+}^{(\frac{\xi}{\alpha}, 0)}(\rho, \theta, z) \\ \Psi_{+}^{(\frac{\xi}{\alpha}, -1)}(\rho, \theta, z) \end{pmatrix} + U \begin{pmatrix} \Psi_{-}^{(\frac{\xi}{\alpha}, 0)}(\rho, \theta, z) \\ \Psi_{-}^{(\frac{\xi}{\alpha}, -1)}(\rho, \theta, z) \end{pmatrix} \right] \end{aligned} \quad (2.38)$$

onde $\chi_{\frac{\xi}{\alpha}}(0, \theta, z) = \dot{\chi}_{\frac{\xi}{\alpha}}(0, \theta, z) = 0$, $\chi_{\frac{\xi}{\alpha}}(\rho, \theta, z), \dot{\chi}_{\frac{\xi}{\alpha}}(\rho, \theta, z) \in L^2(R^+, \rho d\rho) \otimes L^2(S^1, d\theta)_{\xi} \otimes L^2(R, dz)$; (A, B) é um vetor complexo bidimensional arbitrário (matriz linha).

Evocando a invariância rotacional do domínio de H , i.é, a preservação da forma do segundo termo da equação (2.38), aplicamos $U_{\lambda}(\zeta)$ (veja (2.21) e (2.25)) em ambos os lados de (2.38), absorvendo as fases irrelevantes em (A, B) , encontramos que U deve ser diagonal. A invariância rotacional reduz a família de extensões autoadjuntas para dois parâmetros. Mais precisamente, podemos escrever (2.38) da seguinte forma

$$\begin{aligned} \Psi_{\frac{\xi}{\alpha}}(\rho, \theta, z) &= \chi_{\frac{\xi}{\alpha}}(\rho, \theta, z) + Ae^{i\xi\theta+iz} K_{\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{-i2M\kappa} \right) + \\ &+ Ae^{i\xi\theta+iz} e^{i\tau} K_{\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{i2M\kappa} \right) + \\ &+ Be^{i(\xi-\alpha)\theta+iz} \left[K_{1-\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{-i2M\kappa} \right) + e^{i\eta} K_{1-\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{i2M\kappa} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.39)$$

onde $\tau, \eta \in [-\pi, \pi)$ são as constantes que parametrizam as extensões autoadjuntas de H . Para $\frac{m}{\alpha} = 0$, (2.39) fornece

$$\begin{aligned} \Psi_{\frac{\xi}{\alpha}, 0}(\rho, \theta, z) &= \chi_{\frac{\xi}{\alpha}, 0}(\rho) e^{i\xi\theta+iz} + Ae^{i\xi\theta+iz} K_{\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{-i2M\kappa} \right) + \\ &+ Ae^{i\xi\theta+iz} e^{i\tau} K_{\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{i2M\kappa} \right) \equiv K_{\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{2M|E_0|} \right) e^{i\xi\theta+iz} \end{aligned} \quad (2.40)$$

e para $\frac{m}{\alpha} = -1$,

$$\begin{aligned} \Psi_{\frac{\xi}{\alpha}, -1}(\rho, \theta, z) &= \chi_{\frac{\xi}{\alpha}, -1}(\rho) e^{i(\xi-\alpha)\theta+iz} + Be^{i(\xi-\alpha)\theta+iz} K_{1-\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{-i2M\kappa} \right) + \\ &+ Be^{i(\xi-\alpha)\theta+iz} e^{i\eta} K_{1-\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{i2M\kappa} \right) \equiv K_{1-\frac{\xi}{\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{2M|E_{-1}|} \right) e^{i(\xi-\alpha)\theta+iz} \end{aligned} \quad (2.41)$$

Realizando o mesmo procedimento anterior, obtemos as energias

$$E_0 = -\kappa \left(\frac{\cos\left(\frac{\tau}{2} + \frac{\pi\xi}{4\alpha}\right)}{\cos\left(\frac{\tau}{2} - \frac{\pi\xi}{4\alpha}\right)} \right)^{\frac{\alpha}{\xi}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (2.42)$$

com

$$\tau \in \left(-\pi + \frac{\pi\xi}{2\alpha}, \pi - \frac{\pi\xi}{2\alpha} \right] \quad (2.43)$$

e

$$E_{-1} = -\kappa \left(\frac{\cos\left(\frac{\eta}{2} + \left(1 - \frac{\xi}{\alpha}\right) \frac{\pi}{4}\right)}{\cos\left(\frac{\eta}{2} - \left(1 - \frac{\xi}{\alpha}\right) \frac{\pi}{4}\right)} \right)^{\frac{\alpha}{\alpha-\xi}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (2.44)$$

com

$$\eta \in \left(-\left(1 + \frac{\xi}{\alpha}\right) \frac{\pi}{4}, \left(1 + \frac{\xi}{\alpha}\right) \frac{\pi}{4} \right] \quad (2.45)$$

Estes resultados mostram que existem três possibilidades:

1. não existe estado ligado quando nem τ nem η satisfazem as equações (2.43) e (2.45);
2. existe um estado ligado quando um dos parâmetros τ, η satisfaz (2.43) ou (2.45);
3. existe dois estados ligados se ambos τ e η satisfazem as equações (2.43) e (2.45).

Vamos requerer agora a invariância do domínio de H perante a reversão temporal, i.é

$$T\Psi(\rho, \theta, z) = \sigma\Psi^*(\rho, \theta, z) \quad (2.46)$$

onde σ é uma fase fixa, i.é, $|\sigma|^2 = 1$. Definindo o operador T em $L^2(R^+, \rho d\rho) \otimes L^2(S^1, d\theta)_\xi \otimes L^2(R, dz)$, é permitido definí-lo separadamente em $L^2(R^+, \rho d\rho)$, $L^2(S^1, d\theta)_\xi$ e $L^2(R, dz)$. Em $L^2(R^+, \rho d\rho)$ e $L^2(R, dz)$, a ação de (2.46) é bem definida pois não

afeta o comportamento assintótico dos vetores no infinito espacial $\rho \rightarrow \infty$ e $z \rightarrow \infty$. Mas, em $L^2(S^1, d\theta)_\xi$ a situação é diferente. Aplicando T em (2.23), temos

$$Tf(\theta + 2\pi\alpha) = e^{-i2\pi\xi}Tf(\theta) \quad (2.47)$$

que segue da antiunitariedade de T . Consequentemente, as condições (2.21) e (2.47) são compatíveis somente para $\xi = 0$ ou $\xi = \frac{1}{2}$, i.é, a simetria por reversão temporal pode ser definida somente para funções periódicas e antiperiódicas, com período $2\pi\alpha$. O caso $\xi = 0$ está estudado acima. Para o caso $\xi = \frac{1}{2}$, os resultados acima levam a

$$E_0 = -\kappa \left(\frac{\cos\left(\frac{\tau}{2} + \frac{\pi}{8\alpha}\right)}{\cos\left(\frac{\tau}{2} - \frac{\pi}{8\alpha}\right)} \right)^{2\alpha} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (2.48)$$

onde $\tau \in \left(-\pi + \frac{\pi}{4\alpha}, \pi + \frac{\pi}{4\alpha}\right]$, e

$$E_{-1} = -\kappa \left(\frac{\cos\left(\frac{\eta}{2} + \left(1 - \frac{1}{2\alpha}\right)\frac{\pi}{4}\right)}{\cos\left(\frac{\eta}{2} - \left(1 - \frac{1}{2\alpha}\right)\frac{\pi}{4}\right)} \right)^{\frac{2\alpha}{2\alpha-1}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (2.49)$$

onde $\eta \in \left(-\left(1 + \frac{1}{2\alpha}\right)\frac{\pi}{4}, \left(1 + \frac{1}{2\alpha}\right)\frac{\pi}{4}\right]$ com os respectivos autovetores

$$\Psi_{\frac{1}{2\alpha},0}(\rho, \theta, z) = cte K_{\frac{1}{2\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{2M|E|} \right) e^{\frac{i\theta}{2} + iz} \quad (2.50)$$

$$\Psi_{\frac{1}{2\alpha},-1}(\rho, \theta, z) = cte K_{1-\frac{1}{2\alpha}} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{2M|E|} \right) e^{i(\frac{1}{2}-\alpha)\theta + iz} \quad (2.51)$$

Por fim, notemos que a simetria por reversão temporal reduz as transformações em $SO(2)$ para

$$U(\zeta)\Psi(\rho, \theta) = \Psi(\rho, \theta + \zeta) \quad (2.52)$$

i.é, $\lambda = 0$. Consequentemente, o operador momento angular $J = \hbar J_0$ possui o espectro $\{\hbar m\}$, onde $m \in \mathbb{Z}$ para $\xi = 0$, e $\{\hbar(m + \frac{1}{2})\}$, onde $m \in \mathbb{Z}$, para $\theta = \frac{1}{2}$. Conforme foi dito no início desta seção, podemos aplicar o estudo aqui ao de uma partícula quântica não-relativística em torno de uma corda cósmica. Vamos discutir isto a seguir.

2.2 O Efeito Aharonov-Bohm em Torno de Uma Corda C3smica Revisitado

Quando uma part3cula qu4ntica 3 confinada entre duas c3lulas cil3ndricas impenetr4veis, atravessadas por um tubo de fluxo magn3tico ao longo de seus eixos comuns, seu espectro de energia depende deste fluxo. Este 3 o chamado "Efeito Aharonov-Bohm"[12]. O an4logo gravitacional deste efeito, com a corda c3smica no lugar do tubo de fluxo magn3tico, 3 apresentado em [13] e [14]. Podemos visitar este efeito Aharonov-Bohm gravitacional do ponto de vista das extens3es autoadjuntas do hamiltoniano, sem a necessidade das paredes confinantes [15]. Vamos esboar o problema. Temos uma part3cula qu4ntica n4o-relativ3stica movendo-se no espaço-tempo devido a corda c3smica

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dz^2 - d\rho^2 - \alpha^2 \rho^2 d\theta^2 \quad (2.53)$$

blindado por uma parede cil3ndrica impenetr4vel conc3ntrica com o raio da corda c3smica. Nesta m3trica, o 4ngulo θ varia no intervalo $[0, 2\pi]$ e o par4metro $\alpha = 1 - 4G\mu < 1$, onde μ 3 a densidade linear de massa da corda e G 3 a constante gravitacional, caracterizam a corda. α introduz o d3ficit angular $2\pi(1 - \alpha)$ na geometria de Minkowski. O movimento da part3cula 3 governado pelo hamiltoniano (2.2). Uma vez que o tamanho t3pico do raio da corda c3smica 3 da ordem da escala de comprimento GUT ($10^{-30}cm$), podemos tomar o raio do cilindro blindador como nulo. Logo, os resultados da se33o anterior podem ser evocados aqui. O resultado mais interessante 3 o (2.48), para $m = 0, \xi = \frac{1}{2}$. A depend3ncia da energia em α caracteriza o efeito Aharonov-Bohm. O que 3 surpreendente 3 que mesmo para o momento angular $m = 0$, a energia depender4 do par4metro α . Isto n4o foi observado nos outros casos previamente estudados [13], [14].

Conforme notamos, existe uma aparente arbitrariedade no valor do parâmetro de extensão. Mas isto não é bem verdade. O valor dele deve ser determinado a partir do conhecimento da estrutura interna da corda cósmica, isto é, da maneira como a partícula quântica interage com o seu núcleo. Esta questão será abordada futuramente [9].

2.3 Dipolo Elétrico na Presença de um Espaço Cônico

Vamos apresentar agora o problema de um dipolo elétrico na presença do cone. Consideraremos que a singularidade cônica esteja blindada por um cilindro de raio $a \ll 1$, ou seja, o dipolo move-se em $\rho \in [a, \infty)$. Um importante fato neste problema é a questão da auto-interação do dipolo, i.é, ele sente uma auto-força devida à deformação de suas linhas de campo elétrico produzida pela geometria deste espaço [10]. Um método direto para calcular esta auto-energia é apresentado em [11]. Temos assim,

$$U = \frac{\left(\frac{1}{\alpha^2} - 1\right)}{48\pi} \frac{D^2 \cos(2\phi)}{\rho^2} \quad (2.54)$$

onde ϕ é o ângulo entre um vetor dirigido da singularidade e a direção do dipolo e D é o momento de dipolo. Esta energia é mínima quando $\phi = \frac{\pi}{2}$. Então, deflexões em relação à posição de equilíbrio produz uma força restauradora que tende a alinhar o dipolo perpendicularmente ao vetor dirigido da singularidade. Este grau de liberdade rotacional fornece uma pequena contribuição para toda a dinâmica do dipolo, especialmente a estados de momento angular pequeno ou nulo. Logo, vamos

considerar este grau de liberdade, i.e

$$U = -\frac{\left(\frac{1}{\alpha^2} - 1\right)}{48\pi} \frac{D^2}{\rho^2} \quad (2.55)$$

A equação de Schrödinger é escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\left(\frac{1}{\alpha^2} - 1\right)}{48\pi} \frac{d^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \Psi = E\Psi \quad (2.56)$$

onde $d^2 = \frac{2M}{\hbar^2} D^2$. Usando a decomposição do produto tensorial, podemos proceder às extensões autoadjuntas de (48). Já sabemos sobre a autoadjuntissade dos operadores $-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$ em $L^2(S^1, d\theta)$ e $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ em $L^2(R, dz)$. Escrevendo a função de onda na forma

$$\Psi(\rho, \theta) = R(\rho) e^{il\theta + ikz} \quad (2.57)$$

a parte radial de (48) é reescrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\nu^2}{\rho^2} \right] \Psi = E\Psi \quad (2.58)$$

onde $\nu^2 = -\frac{l^2}{\alpha^2} + \frac{\left(\frac{1}{\alpha^2} - 1\right)}{48\pi} d^2$. Conforme já sabemos, obtemos os subespaços deficientes a partir de $H^* \Psi_{\pm} = \pm ik_0 \Psi_{\pm}$, o que nos leva à solução idêntica à (2.9). Como $a \ll 1$,

$$\Psi_{\pm}(\rho, \theta) = cte K_{\nu} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{\mp 2iMk_0} \right) \quad (2.59)$$

pertence a $L^2(R^+, \rho d\rho)$ somente para $\nu \in (-1, 1)$. Os índices deficientes de H neste caso são $(n_+, n_-) = (1, 1)$. Assim, seu domínio contém os vetores da forma

$$\Psi_{\nu}(\rho, \theta) = \chi_{\nu}(\rho, \theta) + C \left[K_{\nu} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{-2iMk_0} \right) + e^{i\eta} K_{\nu} \left(\frac{\rho}{\hbar} \sqrt{2iMk_0} \right) \right] \quad (2.60)$$

onde $\chi_{\nu}(\rho, \theta) \in L^2(R^+, \rho d\rho) \otimes L^2(S^1, d\theta)$, com $\chi_{\nu}(a, \theta) = \dot{\chi}_{\nu}(a, \theta) = 0$; C é uma constante arbitrária e $\eta \in [-\pi, \pi)$. Antes de obter os estados ligados, vamos escrever a expansão em série da função de Bessel K_{ν} [16]

$$K_{\nu}(x) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j f_j \quad (2.61)$$

onde

$$c_j = \left(\frac{x^2}{4}\right)^j \frac{1}{j!} \quad (2.62)$$

e

$$f_j = \frac{\pi}{2\text{sen}(i\nu)} \left[\frac{(x/2)^{-i\nu}}{\Gamma(j+1-i\nu)} - \frac{(x/2)^{i\nu}}{\Gamma(j+1+i\nu)} \right] \quad (2.63)$$

A expansão é justificada pois estamos tomando o raio da célula cilíndrica que blinda a singularidade muito pequeno. Assim, as relações acima produzem

$$c_0 = 1, \quad f_0 = \sqrt{\frac{\pi}{\nu \text{senh}(\pi\nu)}} \text{sen}[\nu \ln(x/2) + \nu\gamma] \quad (2.64)$$

onde γ é a constante de Euler. Isto produz a expansão

$$K_\nu(x) \approx \sqrt{\frac{\pi}{\nu \text{senh}(\pi\nu)}} \text{sen}[\nu \ln(x/2) + \nu\gamma] + O(\nu) \quad (2.65)$$

Procedendo conforme seções anteriores, obtemos o espectro negativo que corresponde a estados ligados. É uma questão de trabalho algébrico mostrar que estes níveis de energia(incluindo a parte em z) são dados por

$$E_\nu = -\frac{2\hbar^2 e^{-2\gamma + \Omega_{\nu,a}}}{Ma^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (2.66)$$

onde

$$\Omega_{\nu,a} = \frac{2}{\nu} \text{tg}^{-1} \left[\frac{\text{tg} \left(\frac{\nu}{2} \ln \left(\frac{Mk_0 a^2}{2\hbar^2} \right) + \nu\gamma \right) + \text{tg} \left(\frac{\eta}{2} \right) \text{tgh} \left(\frac{\nu\pi}{4} \right)}{1 - \text{tg} \left(\frac{\eta}{2} \right) \text{tgh} \left(\frac{\nu\pi}{4} \right) \text{tg} \left(\frac{\nu}{2} \ln \left(\frac{Mk_0 a^2}{2\hbar^2} \right) + \nu\gamma \right)} \right] \quad (2.67)$$

Usando a identidade

$$\text{tg}(A+B) = \frac{\text{tg}A + \text{tg}B}{1 - \text{tg}A \text{tg}B} \quad (2.68)$$

com $\text{tg}B = \text{tg}(\eta/2) \text{tgh}(\nu\pi/4)$, a expressão (2.66) é reescrita como

$$E_\nu = -k_0 \exp \left[\frac{2}{\nu} \text{tg}^{-1} \left(\text{tgh} \left(\frac{\nu\pi}{4} \right) \text{tg} \left(\frac{\eta}{2} \right) \right) \right] + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (2.69)$$

Note que quando $\nu = 0$, temos a energia dada exatamente por (2.17). Conforme foi dito na seção anterior, o valor do parâmetro de extensão é determinado se a interação do dipolo elétrico com o interior do cilindro é conhecida. O resultado encontrado aqui mostra, qualitativamente, o que ocorre com tal dipolo na presença, por exemplo, de uma corda cósmica, sólido com desclinação ou na presença de uma monocamda de grafite. Se, de início, resolvessemos o problema sem levar em conta que ele possui extensões autoadjuntas, i.é, se impomos a condição usual

$$\psi(ka) = \sqrt{ka}K_\nu(ka) = 0 \quad (2.70)$$

o espectro negativo será dado por

$$E = -\frac{2\hbar^2}{Ma^2} \exp \left[-\frac{2n\pi}{\nu} - 2\gamma \right] + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (2.71)$$

com $n = 1, 2, \dots$. Este seria o caso de um cilindro impenetrável, ou seja, uma barreira infinita de potencial. Os outros casos acima correspondem ao fato de haver algum fluxo (gravitacional, magnético,...) no interior do cilindro.

Capítulo 3

Partícula Quântica Vinculada à uma Superfície Curva

Neste capítulo discutiremos a mecânica quântica de uma partícula movendo-se em uma superfície $2 - D$ mergulhada no espaço euclidiano R^3 . Vale ressaltar que a quantização pode ser realizada via o método de Dirac [38], [39]. Questões interessantes, como o ordenamento de operadores, surgem aí. Outro método consiste na partícula movendo-se em uma interface curva. A diferença é que uma pequena mas finita largura da superfície é levada em conta enquanto que no método de Dirac esta largura é tomada nula de início [40]. Mais precisamente, tem-se a partícula livre confinada na região entre duas paredes curvas, separadas por uma largura constante. A escolha do potencial confinante não muda os resultados qualitativos, e o mesmo resultado é obtido independentemente do potencial no limite de largura zero. Um terceiro método consiste em considerar a partícula inicialmente movendo-se livre no espaço $3 - D$, mas sujeita a forças espaciais que mantêm, em qualquer instante, sua velocidade orientada ao longo de um intervalo pré-selecionado de direções (o plano

tangente de uma superfície ou a linha tangente de uma curva). Este último é o que vamos discutir aqui [37].

Conforme é conhecido em mecânica clássica, as forças de vínculo devem ser não-dissipativas, isto é, elas devem ter a direção da normal em todos os pontos da superfície. Em mecânica quântica, por causa do princípio da incerteza, é natural considerar somente forças que são ortogonais à superfície em todos os pontos do espaço onde a partícula pode ser encontrada. Na prática, consideramos o potencial sendo constante por toda a superfície mas cresce rapidamente para pequenos deslocamentos na direção normal, de tal modo que ela forneça uma reação normal na vizinhança bem próxima à superfície. O vínculo pode então ser considerado como um limite de um potencial atrativo forte que mantém a partícula permanentemente atachada na superfície. Indo em direção ao problema, a porção do espaço na vizinhança imediata da superfície pode ser parametrizada por (3.1)

$$\vec{R}(q_1, q_2, q_3) = \vec{r}(q_1, q_2) + q_3 \vec{N}(q_1, q_2) \quad (3.1)$$

onde $\vec{r}(q_1, q_2)$ é o vetor posição de um ponto arbitrário P na superfície e $\vec{N}(q_1, q_2)$ é o vetor normal unitário à superfície em P .

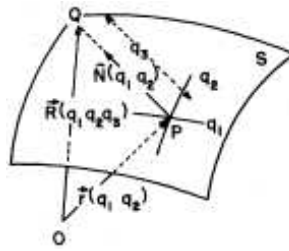


Figura 3.1: Sistema de coordenadas curvilíneas sobre a superfície S , de equação paramétrica $\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2)$.

O valor absoluto da coordenada q_3 fornece, para todos os pontos onde (3.1) é não-singular, a distância entre a superfície e o ponto $Q(q_1, q_2, q_3)$. Conforme as idéias acima, vamos considerar o potencial $V_\lambda(q_3)$, onde λ dá o valor do potencial,

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} V_\lambda(q_3) = \begin{cases} 0, & q_3 = 0, \\ \infty, & q_3 \neq 0. \end{cases} \quad (3.2)$$

A equação de Schrödinger é escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G} G_{i,j}^{-1} \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} \right) + V_\lambda(q_3) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (3.3)$$

onde

$$G_{ij} = G_{ji} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_j}, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (3.4)$$

são as componentes do tensor métrico. De (3.4), vem que

$$G_{ij} = g_{ij} + \left[\alpha g + (\alpha g)^T \right]_{ij} q_3 + (\alpha g \alpha^T)_{ij} q_3^2, \\ G_{i3} = G_{3i} = 0, \quad i = 1, 2; \quad G_{33} = 1 \quad (3.5)$$

onde T denota a matriz transposta e

$$\alpha_{11} = \frac{1}{g} (g_{12} h_{21} - g_{22} h_{11}), \quad \alpha_{11} = \frac{1}{g} (g_{21} h_{11} - g_{11} h_{21}) \\ \alpha_{11} = \frac{1}{g} (g_{12} h_{22} - g_{22} h_{12}), \quad \alpha_{11} = \frac{1}{g} (g_{12} h_{21} - g_{11} h_{22}) \quad (3.6)$$

Nesta relação, $h_{ij} = h_{ji}$ são os coeficientes da segunda forma fundamental. Por causa de (3.5), a equação de Schrödinger pode ser reescrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(q_1, q_2, q_3) \Psi - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial q_3^2} + \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\ln \sqrt{G} \right) \frac{\partial \Psi}{\partial q_3} \right) + v_\lambda(q_3) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (3.7)$$

Uma vez que admitimos a existência de uma função de onda superficial, dependendo somente de (q_1, q_2) , introduzimos uma nova função de onda $\chi(q_1, q_2, q_3) = \chi_t(q_1, q_2) \times$

$\chi_n(q_3)$, onde os índices t e n significam "tangente" e "normal", respectivamente, com densidade superficial de probabilidade dada por $|\chi_t(q_1, q_2)|^2 \int |\chi_n(q_3)|^2 dq_3$. A transformação $\Psi \rightarrow \chi$ pode ser realizada inferindo-se sobre o elemento de volume dV expresso em termo das coordenadas curvilíneas q_1, q_2, q_3 . Usando (3.5), temos

$$dV = f(q_1, q_2, q_3) dS dq_3 \quad (3.8)$$

onde $dS = \sqrt{g} dq_1 dq_2$ é o elemento de área da superfície e

$$f(q_1, q_2, q_3) = 1 + Tr(\alpha_{ij}) q_3 + det(\alpha_{ij}) q_3^2 \quad (3.9)$$

A expressão (3.8) fornece

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = [f(q_1, q_2, q_3)]^{1/2} \Psi(q_1, q_2, q_3) \quad (3.10)$$

Introduzindo esta substituição em (3.7), chegamos a

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = v_\lambda(q_3) \chi + \sqrt{f} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \left(\frac{\chi}{\sqrt{f}} \right) \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + \frac{1}{4f^2} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial q_3} \right)^2 - 2f \frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2} \right] \chi \right\} \quad (3.11)$$

Levando em conta que quando $\lambda \rightarrow \infty$, em $V_\lambda(q_3)$, a partícula "vê" duas barreiras de potencial em ambos os lados da superfície e sua função de onda será significamente diferente de zero somente em um pequeno intervalo em torno de $q_3 = 0$. Tomando $q_3 \rightarrow 0$ em todos os coeficientes da equação (3.11) (exceto no termo contendo $V_\lambda(q_3)$), temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi_n}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi_n = i\hbar \frac{\partial \chi_n}{\partial t} \quad (3.12)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{g} g_{i,j}^{-1} \frac{\partial \chi_t}{\partial q_j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} Tr(\alpha_{ij}) \right]^2 - det(\alpha_{ij}) \right) \chi_t = \hbar \frac{\partial \chi_t}{\partial t} \quad (3.13)$$

Nestas duas últimas expressões levamos em conta (3.5) e (3.9), além da separação da função χ . A expressão (3.12) é a equação de Schrödinger para a partícula sujeita ao potencial transversal $V_\lambda(q_3)$, e pode ser ignorada. A expressão (3.13) é mais interessante. Nela aparece um potencial superficial

$$V_s(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha_{ij}) \right]^2 - \det(\alpha_{ij}) \right) \quad (3.14)$$

Usando (3.6) este termo pode ser reescrito como

$$V_s(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K) = -\frac{\hbar^2}{2m} (k_1 - k_2)^2 \quad (3.15)$$

onde k_1 e k_2 são as curvaturas principais da superfície,

$$M = \frac{1}{2} (k_1 + k_2) = \frac{1}{2g} (g_{11}h_{22} + g_{22}h_{11} - 2g_{12}h_{12}) \quad (3.16)$$

é a curvatura média e

$$K = k_1 k_2 = \frac{1}{g} \det(h_{ij}) \quad (3.17)$$

é a curvatura Gaussiana. Conforme vemos, um potencial atrativo aparece devido a curvatura da superfície. Se tivéssemos considerado o problema extrinsecamente $2 - D$ este fato não ocorreria. Em outras palavras, a mecânica quântica "sem mundo exterior" é diferente da mecânica quântica de uma partícula movendo-se em uma superfície $2 - D$ mergulhada em R^3 . De um modo mais geral isto vale quando temos a partícula quântica movendo-se em uma hipersuperfície S_{N-1} mergulhada em R^N [38], [39]. Ou seja, embora ela "viva" em $N - 1$ dimensões, ela sente o efeito devido a dimensão extra. Uma vez que vários autores têm levado em conta as idéias apresentadas aqui [33], [34], [35], [36] ..., não vamos sobrecarregar este capítulo com exemplos. Em vez disto, usaremos a física aqui discutida no próximo capítulo, onde vamos estudar o movimento de um elétron no grafite.

Capítulo 4

Localização de Elétrons em Torno de Desclinações em uma Monocamada de Grafite

Desclinações têm um papel fundamental na formação de estruturas de carbono não planas de baixa dimensão tal como tubos fullerenos, grafenos, entre outros [22]. Elas são responsáveis pela curvatura local que encurva estas estruturas em várias formas. Isto é facilmente visto pela incorporação de desclinação à folha de grafite. O grafite possui uma rede de carbono semelhante a um favo-de-mel, plana e $2-D$, constituída unicamente de anéis de 6 membros. Anéis feitos de um número de carbono diferente de 6 corresponde à desclinações. Eles são formados pelo processo de "corte" e "colagem" característico de defeitos topológicos. Para criar um anel de 5 membros em uma folha de grafite infinita, cortamos uma cunha de ângulo $2\pi/6$ do centro de qualquer hexágono e identificamos as extremidades perdidas. O resultado é uma estrutura gráfitica cônica com um anel pentagonal em seu ápice. Já um anel

com 7 membros pode ser conseguido introduzindo-se um cunha de ângulo $2\pi/6$, adicionando-se uma borda extra a um dos hexágonos. O resultado é uma estrutura com um anel heptagonal em seu centro. Anéis com $n < 6$ membros são uma parte essencial dos fulerenos fechados e curvados positivamente que são topologicamente equivalente à esferas, e de tubos de grafenos. Anéis com $n > 6$ são indispensáveis à estruturas de carbonos abertas e curvadas negativamente.

Neste capítulo, vamos levar em conta o efeito de curvatura bem como as extensões autoadjuntas do hamiltoniano de um elétron na presença de uma monocamada de grafite desclinado. Usaremos a aproximação pela geometria contínua onde a inclusão da desclinação é realizada por uma singularidade delta - δ no tensor de curvatura. Deste modo, a deformação do plano do grafite por um anel de 5 ou 7 membros pode ser concentrada em um ponto individual na versão contínua, de tal modo que o espaço fora do defeito seja plano.

A aproximação para o contínuo é baseada na observação de que cristais com defeitos são geometricamente equivalentes a espaços com curvatura (desclinação) e torsão (deslocação). O limite ao contínuo é válido somente quando estamos tratando com escalas de comprimento que são maiores que o espaçamento da rede. Isto não é necessariamente verdade quando lidamos com estados ligados, cuja autofunções são localizadas em uma pequena região em torno do defeito (esta é uma particularidade mais para estados de baixa energia). Assim, os resultados apresentados aqui poderiam dar qualitativamente uma indicação do que ocorre com cargas pontuais na presença de desclinações no grafite quando a curvatura e as extensões autoadjuntas são levadas em conta.

4.1 A Auto-interação

Nesta seção, vamos obter a auto energia de uma carga pontual na camada de grafite com uma desclinação individual. Conforme foi dito acima, trabalharemos no limite de espaço contínuo, onde a geometria de Riemann faz sentido. A métrica correspondente, em coordenadas polares, é dada por [23]

$$ds^2 = d\rho^2 + \alpha^2 \rho^2 d\theta^2 \quad (4.1)$$

onde α mede o déficit ou excesso de ângulo devido à disclinação (conforme apresentado no capítulo 2). Para obter a auto-energia, devemos ser cuidadosos pois a carga está confinada em uma superfície $2 - D$, e suas linhas de campo estão distribuídas no espaço $3 - D$. Somente as linhas de campo contidas na superfície são afetadas pelo defeito. No que se segue, vamos tomar como meio material (isto é, a camada de grafite) a superfície $z = 0$ e a posição do defeito na origem ($\rho = 0$). Seguiremos o procedimento usado em [24] para se calcular a auto energia. Primeiro, resolve-se a equação de Poisson para uma partícula carregada individual no espaço de topologia não-trivial, no sentido de se encontrar a sua função de Green. A função de Green é, então, renormalizada pela extração de sua parte divergente (a função de Green na ausência do defeito). A auto-energia é obtida do limite coincidente da função de Green renormalizada. Notemos que, por estarmos tratando da eletrodinâmica $3 - D$ (embora a partícula esteja vinculada à superfície $2 - D$), necessitamos trabalhar com a função de Green $3 - D$.

A equação de Poisson para a função de Green G_p (estamos tomando ($1/p = \alpha$)) na presença do defeito é

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{p^2}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] G_p(x, x') = -4\pi \delta^3(x - x') \quad (4.2)$$

onde $x = z, \rho, \theta$, com $p \neq 1$ na superfície $z = 0$ e 1 no espaço restante. Ou seja, para $z \neq 0$ temos o laplaciano usual. Definindo

$$f(z) = 1 - [\Theta(z) + \Theta(-z)] \quad (4.3)$$

onde $\Theta(z)$ é a função degrau de Heaviside tal que $f(z) = 1$ se $z = 0$ e $f(z) = 0$ se $z \neq 0$, escrevemos a função de Green como a soma de duas partes

$$G_p(x, x') = f(z)G_p(x, x') + [1 - f(z)]G_p(x, x') \quad (4.4)$$

O primeiro termo corresponde à função de Green na superfície $z = 0$ enquanto que o segundo termo corresponde à função de Green no espaço $3-D$ menos esta superfície. Uma vez que o defeito afeta somente a superfície $z = 0$, então $p = 1$ no segundo termo. Necessitamos agora regularizar a função de Green pela subtração de sua parte sem o defeito, i.é,

$$G_p(x, x')_{ren} = G_p(x, x') - G_1(x, x') = f(z) [G_p(x, x') - G_1(x, x')] \quad (4.5)$$

Esta é a função de Green renormalizada restrita à superfície $z = 0$. Uma vez que o próximo passo é tomar o limite coincidente, vamos usar o resultado de [24] para a função de Green renormalizada $3 - D$,

$$G_p(x, x') = \lim_{x \rightarrow x'} [G_p(x, x') - G_1(x, x')] = \frac{\kappa(p)}{2\pi\rho} \quad (4.6)$$

onde

$$\kappa(p) = 2 \int_0^\infty \frac{p \coth(px) - \coth(x)}{\sinh(x)} \quad (4.7)$$

Como este resultado é independente de z , ele satisfaz a restrição $z = 0$. A auto energia da carga pontual q posicionada em x é dada por [25]

$$U(x) = \frac{1}{2} \int \rho_{densi}(x - x') \phi(x') d^3x' \quad (4.8)$$

onde

$$\rho_{densi} = q\delta^3(x - x') = \frac{q}{\rho}\delta(\rho - \rho')\delta(\theta - \theta')\delta(z) \quad (4.9)$$

é a densidade de carga e $\phi(x, x') = \frac{q}{\epsilon}G(x, x')$ é o potencial eletrostático em x' da carga q localizada em x ; ϵ é a constante dielétrica. Segue então que

$$U(x) = \frac{q^2}{2\epsilon} \frac{\kappa(p)}{\rho} \quad (4.10)$$

Notemos que este resultado é idêntico ao de uma partícula pontual na presença de uma linha de disclinação em um meio $3 - D$. Em outras palavras, o problema de uma carga pontual vinculada a uma superfície $2 - D$ com um defeito pontual é o mesmo que o da carga no meio $3 - D$ com uma linha de defeito, exceto pela invariância translacional em z . Na tabela abaixo listamos valores numéricos de $\kappa(p)$ para diferentes anéis relevantes no grafite.

n	p	$\kappa(p)$
4	6/4	1,418
5	6/5	0.5249
6	1	0
7	6/7	-0,3351
8	6/8	-0,5622

Tabela 4.1: Valores Numéricos de $\kappa(p)$ para anéis de n -membros.

4.2 Localização

Levando-se em conta (3.13) e (4.10), o hamiltoniano para o elétron de carga $q = e$ e massa efetiva M , movendo-se em torno da disclinação, é dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2M} \left[\left(\frac{1 - \alpha^2}{2\alpha\rho} \right)^2 - 2\pi(1 - \alpha)\delta(\rho) \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \frac{\kappa(p)}{\rho} \quad (4.11)$$

onde usamos que as curvaturas média e gaussiana do cone são, respectivamente $H = \frac{1-\alpha^2}{2\alpha\rho}$ e $K = 2\pi(1 - \alpha)\delta(\rho)$ [26]. Pondo $\chi(\rho, \theta) = f(\rho)e^{im\theta}$, $\eta = \frac{e^2\kappa(p)}{4\pi\epsilon}$, $1/p = \alpha$ e $\hbar = 1$, chegamos a

$$H_{mp} = -\frac{1}{2M} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\nu^2}{\rho^2} + \frac{2M\eta}{\rho} \right] + \frac{1}{M} \pi(1 - \alpha)\delta(\rho) \quad (4.12)$$

onde

$$\nu^2 = p^2 \left(m^2 - \frac{(p^2 - 1)^2}{4p^4} \right) \quad (4.13)$$

O hamiltoniano (4.12) pode ser reescrito como

$$H_{mp} = H_{mp}^0 + \frac{1}{M} \pi(1 - \alpha)\delta(\rho) \quad (4.14)$$

onde

$$H_{mp}^0 = -\frac{1}{2M} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\nu^2}{\rho^2} + \frac{2M\eta}{\rho} \right] \quad (4.15)$$

Para que o hamiltoniano seja autoadjunto, H_{mp}^0 deve ser extendido a seus subespaços deficientes, que são expandidos pela solução de $H_{mp}^{*0} f_{\pm}(\rho) = \pm i k_0^2 f_{\pm}(\rho)$, i.é,

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\nu^2}{\rho^2} - \frac{2M\eta}{\rho} \pm i 2M k_0^2 \right] f_{\mp}(\rho) = 0 \quad (4.16)$$

A solução desta equação diferencial, para $\rho \neq 0$, é dada por

$$\begin{aligned} f_{\mp}(\rho) = & A_{\mp} e^{iq_{\mp}\rho} (-2iq_{\mp}\rho)^{\nu} F(\nu + 1/2 + iM\eta/q_{\mp}; 2\nu + 1; -2iq_{\mp}\rho) + \\ & + B_{\mp} e^{iq_{\mp}\rho} (-2iq_{\mp}\rho)^{-\nu} F(-\nu + 1/2 + iM\eta/q_{\mp}; 1 - 2\nu; -2iq_{\mp}\rho) \end{aligned} \quad (4.17)$$

onde $F(a; b; c)$ é função hipergeométrica confluyente e $q_{\mp}^2 = \pm i2Mk_0^2$. Como queremos incluir a origem, então os subespaços deficientes são expandidos por

$$f_{\pm}(\rho) = A_{\pm} e^{iq_{\pm}} (-2iq_{\pm})^{\nu} F(\nu + 1/2 + iM\eta/q_{\pm}; 2\nu + 1; -2iq_{\pm}\rho) \quad (4.18)$$

ou seja, $(n_+, n_-) = (1, 1)$. Logo, o domínio extendido de H_{mp} leva à seguinte condição de contorno na origem:

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \rho^{|\nu|} \chi(\rho) = \lambda \frac{1}{\rho^{|\nu|}} \left[\chi(\rho) - \left(\lim_{\rho' \rightarrow 0} \rho'^{|\nu|} \chi(\rho') \right) \frac{1}{\rho^{|\nu|}} \right] \quad (4.19)$$

onde $\lambda \in [0, \infty)$. A solução de H_{mp} , para $\rho \neq 0$, pode ser convenientemente escrita como

$$\begin{aligned} \chi(\rho) = & A e^{ik\rho} (-2ik\rho)^{|\nu|} F(|\nu| + 1/2 + iM\eta/k; 2|\nu| + 1; -2ik\rho) + \\ & + B e^{ik\rho} (-2ik\rho)^{-|\nu|} F(-|\nu| + 1/2 + iM\eta/k; 1 - 2|\nu|; -2ik\rho) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Inserindo (4.21) na condição de contorno (4.19), encontramos a seguinte relação entre os coeficientes A e B ;

$$\lambda (-2ik)^{|\nu|} A = (-2ik)^{-|\nu|} B \left[1 - \frac{2\lambda M\eta}{1 - 2|\nu|} \left(\lim_{\rho \rightarrow 0} \rho^{1-2|\nu|} \right) \right] \quad (4.21)$$

Note que o coeficiente de B diverge se $|\nu| > \frac{1}{2}$. Logo, B é zero se $|\nu| > \frac{1}{2}$, e a condição para a ocorrência de uma solução singular é

$$|\nu| < \frac{1}{2} \quad (4.22)$$

Uma vez que estados ligados são obtidos na região imaginária de k , vamos encontrar o estado ligado da equação (4.21) fazendo a mudança $k = i\sqrt{2ME}$, onde $E = -\epsilon$ é a energia de tal estado ligado;

$$\chi(\rho) = A e^{-\sqrt{2ME}\rho} (2\sqrt{2ME}\rho)^{|\nu|} F\left(|\nu| + 1/2 + \sqrt{M/2E}\eta; 2|\nu| + 1; 2\sqrt{2ME}\rho\right) +$$

$$+Be^{-\sqrt{2ME}\rho}(2\sqrt{2ME}\rho)^{-|\nu|}F\left(-|\nu|+1/2+\sqrt{M/2E}\eta;1-2|\nu|;2\sqrt{2ME}\rho\right) \quad (4.23)$$

Contudo, não é garantido que a equação (4.23) seja um estado ligado. Para tal, $\chi(\rho)$ deve ser normalizável para grandes valores de ρ . Esta condição fornece a relação

$$A\frac{\Gamma(2|\nu|+1)}{\Gamma(|\nu|+1/2+\sqrt{M/2E}\eta)}+B\frac{\Gamma(1-2|\nu|)}{\Gamma(1/2-|\nu|+\sqrt{M/2E}\eta)}=0 \quad (4.24)$$

Inserindo (4.24) em (4.23), um estado ligado é obtido:

$$\chi(\rho)=N\frac{1}{\sqrt{\rho}}W_{-\sqrt{M/2E}\eta,|\nu|}\left(2\sqrt{2ME}\rho\right) \quad (4.25)$$

onde N é a constante de normalização e $W_{a,b}(x)$ é a função usual de Whittaker. Por causa de (4.23) e (4.22), a relação (4.21) pode ser reescrita como

$$\lambda\left(2\sqrt{2ME}\right)^{|\nu|}A-\left(2\sqrt{2ME}\right)^{-|\nu|}B=0 \quad (4.26)$$

Assim, a energia do estado ligado é implicitamente determinada das equações (4.24) e (4.26) pela equação secular

$$\begin{aligned} &\left(2\sqrt{2ME}\right)^{-|\nu|}\frac{\Gamma(2|\nu|+1)}{\Gamma(|\nu|+1/2+\sqrt{M/2E}\eta)}+ \\ &\lambda\left(2\sqrt{2ME}\right)^{|\nu|}\frac{\Gamma(1-2|\nu|)}{\Gamma(1/2-|\nu|+\sqrt{M/2E}\eta)}=0 \end{aligned} \quad (4.27)$$

Uma vez que é complicado calcular as energias (4.27) do estado ligado, vamos discutir dois limites interessantes. Para $\lambda \rightarrow 0$, tais energias são dadas por

$$\epsilon=-\frac{Me^4\kappa^2(p)}{32\pi^2\epsilon^2}\frac{1}{\left[n+\frac{1}{2}+|\nu|\right]^2} \quad (4.28)$$

com $n=0,1,2,\dots$ Quando $\lambda \rightarrow \infty$, as energias são dadas por

$$\epsilon=-\frac{Me^4\kappa^2(p)}{32\pi^2\epsilon^2}\frac{1}{\left[n+\frac{1}{2}-|\nu|\right]^2} \quad (4.29)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$. Estes dois casos correspondem ao fato de que, se a desclinação for impenetrável, a função de onda desaparece na singularidade cônica. Tais estados ligados correspondem à partícula quântica com momentos angulares efetivos de sentidos opostos. Salientamos novamente que o valor preciso do parâmetro de extensão deve ser determinado conhecendo-se a estrutura interna do defeito.

Temos obtido aqui dados qualitativos sobre a dinâmica de elétrons próximos à desclinações em uma camada de grafite em um modelo contínuo. Como podemos observar de (4.22), não é o sinal do potencial $\frac{2M\eta}{\rho}$ quem determina se há estados ligados. Quem determina é o momento angular efetivo ν . Isto ocorre pois o potencial proporcional a $\frac{1}{\rho^2}$ é dominante sobre o potencial proporcional a $\frac{1}{\rho}$, quando $\rho \rightarrow 0$. Levando-se em conta que $|\nu| < \frac{1}{2}$, podemos reescrever a tabela (4.1) indicando , para cada $\kappa(p)$, os valores de m para os quais existe estado ligado.

n	p	$\kappa(p)$	Estado Ligado($ \nu < 1/2$)
4	6/4	1,418	$m = 0$
5	6/5	0.5249	$m = 0$
6	1	0	$m = 0$
7	6/7	-0,3351	$m = 0$
8	6/8	-0,5622	$m = 0, 1$

Tabela 4.2: Valores de m , para cada $\kappa(p)$, para os quais há estados ligados.

Capítulo 5

Estados Ligados em um Sistema Quântico 1 – D de N Partículas: Modelo de Calogero

As extensões autoadjuntas da mecânica quântica de N partículas de massa m , interagindo em pares via potenciais harmônicos e/ou potenciais inverso-quadráticos, são revisadas neste capítulo.

5.1 Interação Quadrado - inverso

O Modelo de Calogero é descrito por N partículas interagindo entre si na linha, através de interações de longo alcance do tipo "quadrado-inverso" e interação harmônica [27]. Este é um exemplo de um sistema quântico de muitas partículas que é resolvido de forma exata. Este modelo e seus variantes são relevantes para o estudo de muitos ramos da física contemporânea [28]. Por este fato é que vamos apresentá-lo aqui. A

princípio, estamos interessados em aplicá-lo no estudo de gases de elétrons $2 - D$ em superfícies curvas [29]. Vamos, inicialmente, discutir a existência de estados ligados no modelo de Calogero de N -partículas sem o termo de confinamento, i.é, sem a interação harmônica.

Consideremos que as N partículas são idênticas, cada qual com massa m . O hamiltoniano deste sistema em $1 - D$ é dado por

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i \neq j} \frac{g}{(x_i - x_j)^2} \quad (5.1)$$

onde x_i é a coordenada da i -ésima partícula. A intensidade da interação g entre duas partículas é assumido sendo a mesma para qualquer par de partículas. As unidades são tais que $2M/\hbar^2 = 1$. Vamos assumir que $g \geq -\frac{1}{2}$, pois caso contrário o sistema de dois corpos será instável e ilimitado inferiormente [30].

Estamos interessados em encontrar soluções normalizáveis do problema de autovalores

$$H\Psi = E\Psi \quad (5.2)$$

quando $E = -\epsilon < 0$. Seguindo [27], consideramos a equação de autovalores acima no setor do espaço de configurações correspondente ao ordenamento de partículas dado por $x_1 \geq x_2 \geq \dots \geq x_N$. As autofunções, que são invariantes por translação, podem ser escritas como

$$\Psi = y^{a+1/2} \phi(r) P_k(x) \quad (5.3)$$

onde

$$y = \prod_{i \neq j} (x_i - x_j), \quad (5.4)$$

$$r^2 = \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} (x_i - x_j)^2, \quad (5.5)$$

$$a = \pm \frac{1}{2} (1 + 2g)^{1/2}. \quad (5.6)$$

e $P_k(x)$ é um polinômio homogêneo invariante por translação de grau k , que satisfaz a equação

$$\left[\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2 \left(a + \frac{1}{2} \right) \sum_{i \neq j} \frac{1}{(x_i - x_j)} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \right] P_k(x) = 0 \quad (5.7)$$

Substituindo a equação (5.3) na equação de autovalores e usando (5.7), chegamos a

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} - (1 + 2\nu) \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right] \phi(r) = E \phi(r) \quad (5.8)$$

onde

$$\nu = k + \frac{1}{2} (N - 3) + \frac{1}{2} N (N - 1) \left(a + \frac{1}{2} \right) \quad (5.9)$$

Realizando a transformação $\phi(r) = r^{-(1/2+\nu)} \chi(r)$ em (5.8), chegamos a

$$\tilde{H} \chi(r) = \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\tilde{g}}{r^2} \right] \chi(r) \quad (5.10)$$

onde $\tilde{g} = \nu^2 - 1/4$ é o acoplamento efetivo. Notemos que a variável r vinda de (5.5) toma valores no semi-eixo real positivo $R_+ \equiv [0, \infty]$. A medida para a qual as autofunções $\chi(r)$ do hamiltoniano efetivo $\tilde{H}$ sejam quadrado-integráveis é dada por

$$\int_0^\infty \chi^*(r) \chi(r) dr \quad (5.11)$$

Com esta quantidade finita, teremos $\chi(r) \in L^2[R_+, dr]$.

Vamos retornar à discussão do hamiltoniano efetivo $\tilde{H}$. Resolvendo a equação $\tilde{H}^* \chi_\pm(r) = \pm i \chi_\pm(r)$, chegamos a

$$\chi_\pm(r) = C_1 r^{1/2} H_\nu^{(1)}(q_\pm r) + C_2 H_\nu^{(2)}(q_\pm r) \quad (5.12)$$

onde $H_\nu^{(1)}$ e $H_\nu^{(2)}$ são as funções de Hankel, $q_\pm = \frac{1 \pm i}{\sqrt{2}}$. No sentido de se determinar os subespaços deficientes de $\tilde{H}$, observemos primeiramente que as funções de Hankel estão relacionadas à função hipergeométrica como se segue [32]

$$F(\nu + 1/2; 2\nu + 1; -2iz) = \frac{\pi^{1/2}}{2} e^{i[\pi(\nu+1/2)-z]} (2z)^{-\nu} H_\nu^{(1)}(z) \quad (5.13)$$

$$F(\nu + 1/2; 2\nu + 1; 2iz) = \frac{\pi^{1/2}}{2} e^{-i[\pi(\nu+1/2)-z]} (2z)^{-\nu} H_\nu^{(2)}(z) \quad (5.14)$$

Levando em conta a expansão da função hipergeométrica para grandes valores de z , temos

$$F(a; b; z) = z^{-a} \left\{ \sum_{n=0}^{R-1} \frac{(a)_n (1+a-b)_n (-z)^{-n}}{n!} + O(|z|^{-R}) \right\} \quad (5.15)$$

onde a e b são fixos, e $-\frac{3\pi}{2} < \arg(z) < \frac{3\pi}{2}$. Colocando $z = q_\pm r$, obtemos que somente as funções $r^{1/2} H_\nu^{(1)}(q_+ r)$ e $r^{1/2} H_\nu^{(2)}(q_- r)$, com $\nu > 0$, não divergem quando $r \rightarrow \infty$. Com estes resultados obtemos que os subespaços deficientes são expandidos por

$$\chi_+(r) = r^{1/2} H_\nu^{(1)}(q_+ r) \quad (5.16)$$

$$\chi_-(r) = r^{1/2} H_\nu^{(2)}(q_- r) \quad (5.17)$$

ou seja, $(n_+, n_-) = (1, 1)$. Assim, o domínio de $\tilde{H}$ contém os vetores da forma

$$\chi(r) = \phi(r) + C r^{1/2} [H_\nu^{(1)}(q_+ r) + e^{i\eta} H_\nu^{(2)}(q_- r)] \quad (5.18)$$

onde $\phi(0) = \dot{\phi}(0) = 0$ tal que $\phi(r) \in L^2(R_+, dr)$; $\eta \in [-\pi, \pi)$ é o parâmetro de extensão e C é uma constante. No limite $r \rightarrow 0$, tem-se

$$\begin{aligned} & \chi_+(r) + e^{i\eta} \chi_-(r) \rightarrow \\ & \rightarrow \frac{i}{\sin(\nu\pi)} \left[\frac{r^{\nu+1/2}}{2^\nu} \frac{e^{-i3\nu\pi/4} - e^{i(\eta+3\nu\pi/4)}}{\Gamma(1+\nu)} - \frac{r^{-\nu+1/2}}{2^{-\nu}} \frac{e^{-i\nu\pi/4} - e^{i(\eta+\nu\pi/4)}}{\Gamma(1-\nu)} \right] \end{aligned} \quad (5.19)$$

e

$$|\phi_{\pm}(r)|^2 dr \rightarrow [A_1 r^{2\nu+1} + A_2 r^{-2\nu+1} + A_3 r] dr \quad (5.20)$$

onde A_1 , A_2 e A_3 são constantes independentes de r . Da equação (5.20) e de do fato que $\nu > 0$, fica claro que no limite $r \rightarrow 0$ as funções $\phi_{\pm}(r)$ são quadrado-integráveis somente quando $0 < \nu < 1$. Vemos assim que a relação (5.9) torna-se positiva, levando à condição $a + 1/2 \geq 0$, para $N > 2$, a qual significa que a função de onda (5.3) torna-se bem comportada quando $x_i \rightarrow x_j$. O caso $a + 1/2 = 0$ corresponde ao hamiltoniano de N partículas livres. No que se segue vamos considerar apenas o caso $a + 1/2 > 0$, para o qual a função de onda desaparece no limite $x_i \rightarrow x_j$ [31].

Por outro lado, a solução geral da equação (5.10) é dada por

$$\chi(r) = B \left(\sqrt{E} \right)^{1/2} \left[J_{\nu} \left(i\sqrt{E}r \right) - e^{i\pi\nu} J_{-\nu} \left(i\sqrt{E}r \right) \right] \quad (5.21)$$

Nesta equação, B é uma constante. Tomando-se o limite $r \rightarrow 0$ em (5.21), vem que

$$\chi(r) \rightarrow B \left[\frac{r^{\nu+1/2}}{2^{\nu}} \frac{\left(\sqrt{E} \right)^{\nu+1/2}}{\Gamma(1+\nu)} e^{i\nu\pi/2} - \frac{r^{-\nu+1/2}}{2^{-\nu}} \frac{\left(\sqrt{E} \right)^{-\nu+1/2}}{\Gamma(1-\nu)} e^{i\nu\pi/2} \right] \quad (5.22)$$

Então, se $\chi(r) \in L^2(R_+, dr)$, os coeficientes de $r^{\nu+1/2}$ e $r^{-\nu+1/2}$ das equações (5.19) e (5.22) acima devem ser iguais. Com isso, obtemos a energia do estado ligado, $E = -\epsilon$,

$$\epsilon = - \left[\frac{\text{sen}(\eta/2 + 3\pi\nu/4)}{\text{sen}(\eta/2 + \pi\nu/4)} \right]^{1/\nu} \quad (5.23)$$

Logo, para qualquer valor de $0 < \nu < 1$ ($-1/4 < \tilde{g} < 3/4$), $\tilde{H}$ admite um estado ligado individual com autofunção dada por (5.21). Vamos agora mostrar que a existência deste estado ligado com energia negativa para o sistema original de N partículas depende de N e do grau k do polinômio $P_k(x)$. Para isso, lembremos que

ν vive no intervalo $(0, 1)$. Combinando este resultado com (5.9), temos

$$0 < k + \frac{1}{2}(N-3) + \frac{1}{2}N(N-1)\left(a + \frac{1}{2}\right) < 1 \quad (5.24)$$

Levando em conta que $a + 1/2 > 0$, a equação (5.24) fornece

$$0 < a + \frac{1}{2} < \frac{5 - N - 2k}{N(N-1)} \quad (5.25)$$

Vamos considerar a situação $k = 0$. Isto corresponde à classe de autoestados que incluem o estado fundamental do sistema e para $N = 3$ corresponde ao caso do setor de momento angular nulo. Neste caso, temos

$$0 < a + \frac{1}{2} < \frac{5 - N}{N(N-1)} \quad (5.26)$$

Os valores de N que satisfazem a equação acima são $N = 3$ e 4 . Este são os únicos casos em que estados ligados com energias negativas que podem aparecer. Para $N = 3$, o intervalo permitido para a e g são, respectivamente, $-1/2 < a < 1/6$ e $-4/9 < g < 0$. Similarmente, para $N = 4$, temos $-1/2 < a < -5/12$ e $-11/72 < g < 0$. Da discussão acima, segue que os estados ligados com energias negativas ocorrem somente quando o acoplamento g entre 2 partículas na equação (5.1) é atrativo.

Vamos agora considerar o caso $k > 0$. Da equação (5.25), segue que $5 - N - 2k > 0$. Não existe nenhum valor de $N > 2$ que satisfaz esta condição. Logo, não existe estado ligado com energia negativa para $k > 0$. Vemos então que o sistema original admite estados ligados com energia negativa quando $k = 0$ e $N = 3$ ou 4 . Note que, para $k = 0$, $P_k(x) = 1$. A função de onda geral do problema é dada por

$$\Psi = By^{a+1/2}r^{-(1/2+\nu)}\left(\sqrt{Er}\right)^{1/2}\left[J_\nu\left(i\sqrt{Er}\right)-e^{i\pi\nu}J_{-\nu}\left(i\sqrt{Er}\right)\right] \quad (5.27)$$

Para finalizar esta discussão, observemos que a condição $a + 1/2 > 0$ impõe sérias restrições aos valores permitidos de N . Este vínculo mantém a função de onda

bem comportada quando $x_i \rightarrow x_j$. É possível considerar a situação onde existe um corte natural no sistema impossibilitando qualquer duas partículas coincidirem uma com a outra. Na presença deste corte natural, a função de onda (5.3) poderia ser bem comportada mesmo se $a + 1/2 < 0$. Em tal caso, o estado ligado com energia negativa poderia existir para qualquer valor de N .

5.2 Interações Quadrado - inverso e Harmônica

Vamos considerar agora o Modelo de Calogero na presença de uma interação confinante tipo harmônica. O hamiltoniano neste caso é dado por

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i \neq j} \left[\frac{a^2 - \frac{1}{4}}{(x_i - x_j)^2} + \frac{\Omega^2}{16} (x_i - x_j)^2 \right] \quad (5.28)$$

onde a, Ω são constantes, x_i é como antes. Procedendo conforme seção anterior, devemos resolver o problema de autovalores $H\Psi = E\Psi$. Seguindo [27], consideremos a equação de autovalores acima no setor do espaço de configurações referente ao ordenamento de partículas dado por $x_1 \geq x_2 \geq \dots \geq x_N$. As autofunções invariantes por translação do hamiltoniano H podem ser escritas como

$$\Psi = \prod_{i \neq j} (x_i - x_j)^{a+1/2} \phi(r) P_k(x) \quad (5.29)$$

onde $x \equiv (x_1, x_2, \dots, x_N)$,

$$r^2 = \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} (x_i - x_j)^2, \quad (5.30)$$

e $P_k(x)$ é um polinômio homogêneo de grau $k \geq 0$ invariante por translação que satisfaz a equação

$$\left[\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2 \left(a + \frac{1}{2} \right) \sum_{i \neq j} \frac{1}{(x_i - x_j)} \frac{\partial}{\partial x_i} \right] P_k(x) = 0 \quad (5.31)$$

A existência das soluções completas de (5.31) foi discutida por Calogero em (??). Substituindo a equação (5.29) na equação de autovalores e usando as equações (5.30) e (5.31), chegamos a

$$\tilde{H}\phi(r) = \left[-\frac{d^2}{dr^2} - (1 + 2\nu) \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \omega^2 r^2 \right] \phi(r) = E\phi(r) \quad (5.32)$$

com $\omega^2 = \frac{1}{8}\Omega^2 N$ e

$$\nu = k + \frac{1}{2}(N - 3) + \frac{1}{2}N(N - 1) \left(a + \frac{1}{2} \right) \quad (5.33)$$

Conforme seção anterior, é fácil mostrar que $\phi(r) \in L^2[R_+, r^{1+2\nu} dr]$. O Hamiltoniano $\tilde{H}$ é um operador simétrico no domínio $D(\tilde{H}) \equiv \left\{ \phi, \dot{\phi} \in L^2[R_+, r^{1+2\nu} dr] \mid \phi(0) = \dot{\phi}(0) = 0 \right\}$. A solução da equação $\tilde{H}^*\phi_{\pm} = \pm i\phi_{\pm}$ é dada por

$$\phi_{\pm} = e^{-\frac{\omega r^2}{2}} F(d_{\pm}; c; \omega r^2) \quad (5.34)$$

onde $d_{\pm} = \frac{1+\nu}{2} \mp \frac{i}{4\omega}$, $c = 1 + \nu$ e F denota a função hipergeométrica confluyente de segundo tipo. O comportamento de F no infinito junto com o fator exponencial em (5.34) garante que $\phi_{\pm}$ desaparece no infinito. As soluções (5.34) possuem diferentes comportamentos assintóticos caso ν seja nulo ou diferente de zero. Vamos considerar apenas o caso $\nu \neq 0$, pois a análise de $\nu = 0$ é semelhante. Quando $\nu \neq 0$, $F(d_{\pm}; c; \omega r^2)$ pode ser reescrita como

$$F(d_{\pm}; c; \omega r^2) = C \left[\frac{M(d_{\pm}; c; \omega r^2)}{\Gamma(b_{\pm})\Gamma(c)} - (\omega r^2)^{1-c} \frac{M(d_{\pm}; 2 - c; \omega r^2)}{\Gamma(b_{\pm})\Gamma(2 - c)} \right] \quad (5.35)$$

onde $b_{\pm} = \frac{1-\nu}{2} \mp \frac{i}{4\omega}$, $C = \frac{\pi}{\sin(\pi + n\nu)}$; M denota a função hipergeométrica confluyente de primeiro tipo. No limite $r \rightarrow 0$, $M(d_{\pm}; c; \omega r^2) \rightarrow 1$. Juntando isto com as equações (5.34) e (5.35), implica que, quando $r \rightarrow 0$,

$$|\phi_{\pm}(r)|^2 \rightarrow [A_1 r^{(1+2\nu)} + A_2 r + A_3 r^{(1-2\nu)}] dr \quad (5.36)$$

onde A_1 , A_2 e A_3 são constantes independentes de r . De (5.36) fica claro que no limite $r \rightarrow 0$, as funções $\phi_{\pm}(r)$ não são quadrado-integráveis se $|\nu| \geq 1$. Neste caso, $(n_+, n_-) = (0, 0)$ e $\tilde{H}$ é essencialmente autoadjunto no domínio $D(\tilde{H})$. Agora, se $0 < \nu < 1$ ou $-1 < \nu < 0$, então as funções $\phi_{\pm}(r)$ são quadrado-integráveis. Logo, se ν reside nestes intervalos, temos que $(n_+, n_-) = (1, 1)$, e o hamiltoniano admite extensões autoadjuntas. Assim, o domínio no qual $\tilde{H}$ é autoadjunto contém os vetores da forma

$$\phi(r) = \chi(r) + c [\phi_+(r) + e^{i\lambda}\phi_-(r)] \quad (5.37)$$

onde $\chi(r) \in D(\tilde{H})$, com $\chi(0) = \dot{\chi}(0) = 0$; $\lambda \in [-\pi, \pi)$ é o parâmetro de extensão. Pode-se, similarmente, mostrar que $(n_+, n_-) = (1, 1)$ quando $\nu = 0$. Então, a extensão autoadjunto neste modelo existe quando $|\nu| \leq 1$. Podemos notar que os valores de n_+ e n_- bem como os valores permitidos de ν são os mesmo que os encontrados na seção anterior, onde discutimos o modelo de Calogero sem o termo de confinamento. Em ambos os casos, a existência das extensões autoadjuntas é essencialmente determinada pela natureza da singularidade em $r = 0$. O domínio acima obtido é diferente do correspondente domínio obtido sem a presença do confinamento pois este afeta as expressões $\phi_{\pm}(r)$ que determinam o domínio de $\tilde{H}$. Conforme mostraremos a seguir, esta diferença na estrutura do domínio leva a um espectro completamente diferente na presença do potencial de confinamento.

O intervalo ν requerido para a existência das extensões autoadjuntas juntamente com (5.33), implica que para um dado valor de N e k , $a + \frac{1}{2}$ deve residir no intervalo

$$-\frac{N-1+2k}{N(N-1)} < a + \frac{1}{2} < -\frac{N-5+2k}{N(N-1)} \quad (5.38)$$

Para $N \geq 3$, temos a seguinte classificação das condições de contorno dependendo do valor do parâmetro $a + \frac{1}{2}$:

1. $a + \frac{1}{2} \geq \frac{1}{2}$: isto corresponde à condição de contorno considerada por Calogero, pela qual ambos a função de onda e a corrente desaparecem quando $x_i \rightarrow x_j$. Neste caso, $\nu > 1$ para todos os valores de $k \geq 0$. O correspondente hamiltoniano é essencialmente autoadjunto no domínio $D(\tilde{H})$, levando a uma única teoria quântica.
2. $0 < a + \frac{1}{2} < \frac{1}{2}$: a função de onda desaparece no limite $x_i \rightarrow x_j$, mas a corrente pode apresentar um comportamento divergente no mesmo limite. Tal condição de contorno na função de onda é similar àquela que encontramos para a função- δ fortemente repulsiva do gás de Bose. Neste caso, ν é positivo e k deve ser igual a zero de tal forma que $0 < \nu < 1$. A correspondente condição em $a + \frac{1}{2}$ é dada por $0 < a + \frac{1}{2} < \frac{5-N}{N(N-1)}$, a qual pode ser somente satisfeita para $N = 3$ ou 4.
3. $-\frac{1}{2} < a + \frac{1}{2} < 0$: o limite inferior de $a + \frac{1}{2}$ é obtido da condição de que a autofunção deva ser quadrado-integrável. O parâmetro $a + \frac{1}{2}$ neste intervalo leva a uma singularidade na função de onda, resultante da coincidência de duas ou mais partículas. Usando a simetria de permutação, tal autoestado pode ser estendido àqueles do espaço de configurações, mesmo não sendo uma função suave. O novo estado quântico neste caso existe para um N arbitrário, mesmo para valores não-nulos de k . De fato, impondo a condição que o limite superior de $a + \frac{1}{2}$ seja maior que $-\frac{1}{2}$, encontra-se que k é restringido por $k < \frac{1}{4}(N^2 - 3N + 10)$.

No sentido de se determinar o espectro, notemos que a solução limitada no infinito da equação (5.32) é dada por

$$\phi(r) = B e^{-\frac{\omega r^2}{2}} F(d, c, \omega r^2) \quad (5.39)$$

onde $d = \frac{1+\nu}{2} - \frac{E}{4\omega}$ e B é uma constante. No limite $r \rightarrow 0$,

$$\phi(r) \rightarrow BC \left[\frac{1}{\Gamma(b)\Gamma(c)} - \frac{\omega^{-\nu} r^{-2\nu}}{\Gamma(d)\Gamma(2-c)} \right] \quad (5.40)$$

onde $b = \frac{1-\nu}{2} - \frac{E}{4\omega}$. Por outro lado, conforme $r \rightarrow 0$, vem que

$$\phi_+(r) + e^{i\lambda} \phi_-(r) \rightarrow C \left[\frac{1}{\Gamma(c)} \left(\frac{1}{\Gamma(b_+)} + \frac{e^{i\lambda}}{\Gamma(b_-)} \right) - \frac{\omega^{-\nu} r^{-2\nu}}{\Gamma(2-c)} \left(\frac{1}{\Gamma(d_+)} + \frac{e^{i\lambda}}{\Gamma(d_-)} \right) \right] \quad (5.41)$$

Comparando os coeficientes dos termos constantes e de $r^{-2\nu}$ em (5.40) e (5.41), vem que

$$f(E) \equiv \frac{\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2} - \frac{E}{4\omega}\right)}{\Gamma\left(\frac{1+\nu}{2} - \frac{E}{4\omega}\right)} = \frac{\xi_2 \cos(\lambda/2 - \eta_1)}{\xi_1 \cos(\lambda/2 - \eta_2)} \quad (5.42)$$

onde $\Gamma\left(\frac{1+\nu}{2} + \frac{i}{4\omega}\right) \equiv \xi_1 e^{i\eta_1}$ e $\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2} + \frac{i}{4\omega}\right) \equiv \xi_2 e^{i\eta_2}$. Para dados valores dos parâmetros ν e ω o estado ligado de energia E é obtido da equação (5.42) como função de λ . As correspondentes autofunções são obtidas pela substituição de (??) em (??). Diferentes escolhas de λ levam a quantizações não - equivalentes do modelo de Calogero de muitas partículas. Contudo, da equação (5.42), vemos que o modelo de Calogero com parâmetros (ν, ω) e $(-\nu, \omega)$ produzem espectros de energia idênticos, mas que correspondem a autofunções diferentes.

A escolha especial $\lambda = \pi + 2\eta_1$ produz anulamento do lado direito da equação (5.42), que corresponde à situação onde $\Gamma\left(\frac{1+\nu}{2} - \frac{E}{4\omega}\right) \rightarrow \infty$, i.é, $E_n = 2\omega(2n + \nu + 1)$, onde n é um inteiro positivo. Estes autovalores e suas correspondentes autofunções foram encontrados por Calogero. Similarmente, quando o lado direito de (5.42) é ∞ , uma análise similar mostra que $E_n = 2\omega(2n - \nu + 1)$, onde n é um inteiro positivo. Isto ocorre para a escolha especial $\lambda = \pi + 2\eta_2$. Para outras escolhas de λ , a natureza do espectro pode ser entendida da figura abaixo, onde plota-se a equação (5.42) para valores específicos de ν , λ e ω .

A linha horizontal reta corresponde ao lado direito de (5.42). As autoenergias são obtidas da interseção de $f(E)$ com esta linha. Note que o espectro consiste de um número infinito de soluções de energia positiva e uma solução com energia negativa. Observemos também que o espectro encontrado na seção anterior não pode ser obtido como o caso limite quando $\omega \rightarrow 0$. Isto se dá pelo fato de que a equação (5.42), que determina o espectro no caso desta seção, torna-se singular neste limite.

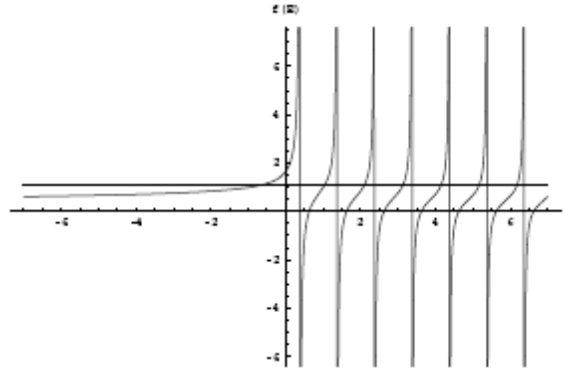


Figura 5.1: Plotagem da eq. (5.42) [28], com $\omega = 0.25$, $\nu = 0.25$ e $\lambda = -1.5$. A linha horizontal reta corresponde ao valor do lado direito de (5.42).

Considerações Finais

Conforme pudemos notar, devemos ser cuidadosos em especificar qual o domínio em que um operador efetivamente atua. Em geral, teremos extensões autoadjuntas. Argumentos físicos [5] tais como reversão temporal, paridade, positividade, invariância translacional, invariância rotacional e etc, restringirão certas extensões autoadjuntas, i.é, elimina alguns parâmetros da matriz unitária $U(n)$. Mas, provavelmente, não teremos argumentos suficientes para eliminar todas elas. Por isso se faz importante tal estudo. Vimos que as extensões autoadjuntas, nos exemplos apresentados aqui, levam a estados ligados com energia negativa. Isto pode ser relevante para o estudo das propriedades de transporte em meios com defeitos topológicos.

Quando existem extensões autoadjuntas, a física do problema é quem vai selecionar qual o valor do parâmetro de extensão. Temos, assim, a questão que consiste em encontrar qual é a extensão autoadjunta correta. Isto é o que pretendemos abordar futuramente.

O que fica também para o futuro será o cuidado em que teremos quando nos depararmos com algum sistema que requeira a mecânica quântica: vamos sempre nos perguntar se ele possui extensões autoadjuntas.

Bibliografia

- [1] J.J.sakurai, *Modern quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company, (1985).
- [2] Thomas F.Jordan, *Linear operators for Quantum Mechanics*, Jhon Wiley and Sons (1969)
- [3] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu and F.Laloe, *Quantum Mechanics*, John Wiley and Sons, New york(1977).
- [4] M.Reed and B.Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics II*(Academy Press, New York, 1975).
- [5] G.Bonneau, J.Faraut, and G.Valente, Am.J.Phys. 69, 322(2001).
- [6] J.Bardeen, W.Shockley, Phys. Rev. **80**, 72 (1950).
- [7] S.Azevedo, C.Furtado, F.Moraes, Phys. Stat. Sol.(b) **207**, 387 (1998).
- [8] B.S.Kay and U.M.Studer, Comm. Math. Phys. **139**, 103 (1991).
- [9] B.Allen, B.S.Kay, A.C. Ottewill, Phys. Rev. D **53**, 12 (1996).
- [10] E.R.Bezerra de Mello, V.B.Bezerra, C.Furtado, F.Moraes, Phys. Rev. D, **51**, 12 (1995).

- [11] Y.Grats, A.Garcia, Class. Quant. Grav, **13**, 189 (1996).
- [12] M.Peshkin, Phys.Rev. A**23**, 360 (1981).
- [13] V.B.Bezerra, J.math. Phys. **38**, 2553 (1997).
- [14] C.Furtado, V.B.Bezerra and F.Moraes, Mod. Phys. Lett. A **15**, 253 (2000).
- [15] C.Filgueiras and Fernando Moraes, Mod. Phy. Let. A (submetido)(2005).
- [16] A.Gil, J.Segura, N.M.Temme, J.Comp.Phys, **175**, 398 (2002).
- [17] K. Kowalski, K. Podlaski and J. Rembieliński, Phys. Rev. A **66**, 032118 (2002).
- [18] J.Audretsch, U.Jasper, V.D.Skarzhinsky, J. Phys. A, **28**, 2359-2368 (1995).
- [19] D.K.Park, Phys. rev. D, **50**, 7715 (1994).
- [20] T.J.Allen, Nuclear phys B, **360**, (2-3) , 409-424 (1991).
- [21] M.A.Cirone, K.Rzazewski, W.P.Schleich, F.Straub, J.A.Wheeler, Phys. Rev. A, **65**, 1050 (2001).
- [22] S. Azevedo, C. Furtado, F. Moraes, Phys. Stat. Sol. (b) **207**, 387 (1998).
- [23] M. O. Katanaev, I. V. Volovich, Ann. Phys. (N.Y) **216**, 1 (1992).
- [24] A. G. Smith, in: *The Formation and evolution of Cosmic String*, Eds. G. W. Gibbons, S. W. Hawking, T. Vachaspati, Cambridge (1990) (pg 263 to 292).
- [25] J. D. Jackson, Classical Eletrodynamics, Wiley, New York (1975).

- [26] H. S. M. Coxeter, F. R. S., Introduction to Geometry, Jhon Wiley and Sons, Inc, New York (1969).
- [27] F. Calogero, Jour. Math. Phys. 12, 3 (1971).
- [28] B. Basu-Mallick, Pijush K. Ghosh, Kumar S. Gupta, 311 (2003) 87-92
- [29] A. Lorke, S. Böhm, W. Wegscheider, Superlatt. and Microest. 33 (2003) 347 - 356.
- [30] B. Basu-Mallick, Kumar S. Gupta, 292, (2001) 36-42.
- [31] A. P. Polychronakos, Les Houches Lectures, 1998, hep-th/9902157.
- [32] M. Abramowitz, I. A. Stegun Handbook of Mathematical Functions,
- [33] L. I. Magarill, M. V. Entin, JETP Let. 96, (2003) 766-744.
- [34] A. V. Chaplik, JETP Let. 80 (2004) 140-142.
- [35] M. V. Entin, L. I. Margarill, Phys. Rev. B, 64, (2001) 085330.
- [36] L. Mott, M. Encinosa, B. Etemadi, Phy. E, 25 (2005) 521-529.
- [37] R. C. da Costa, Phys. Review A, 23, (1981), (1982-1987).
- [38] N. Ogawa, K. Fujii, A. Kobushukin, Prog. Theoric. Phys., 83, (1990) 894-905.
- [39] N. Ogawa, K. Fujii, N. Chepliko, A. Kobushukin, Prog. Theoric. Phys., 85, (1991) 1189-1201.
- [40] M. Ikegami, Y. Nagaoka, Prog. Theoric. Phys., 106 (1991), 235-248