Operadores de Schrödinger discretos e estados ligados repulsivos

[notas de aula – Curso de Verão IF-USP, 2015]

1 Fundamentos Matemáticos da Mecânica Quântica

Bibliografia indicada: Gerald Teschl. "Mathematical Methods in Quantum Mechanics With Applications to Schrödinger Operators". American Mathematical Society, 2009.

1.1 Espaços vetoriais, álgebras, espaços normados

A seguir revisaremos algumas noções básicas de álgebra linear e análise. Observe que só serão considerados espaços vetoriais complexos.

Definição 1 (espaços vetoriais) *A tripla $(V, +, \cdot)$ é chamada "espaço vetorial" (sobre $\mathbb{C}$) se V é um conjunto não vazio, e $+ : V \times V \to V$ (soma) e $\cdot : \mathbb{C} \times V \to V$ (multiplicação por escalar) são operações com as seguintes propriedades:*

(i) *$(V, +)$ é um grupo abeliano:*

  (a) *Para todo $v_1, v_2 \in V$, $v_1 + v_2 = v_2 + v_1$.*

  (b) *Para todo $v_1, v_2, v_3 \in V$, $(v_1+v_2)+v_3 = v_1+(v_2+v_3) =: v_1+v_2+v_3$.*

  (c) *Existe um elemento único $0 \in V$, chamado "elemento neutro" de V, tal que, para todo $v \in V$, $0 + v = v$.*

  (d) *Para todo $v \in V$, existe um elemento único $-v \in V$, chamado "elemento inverso" de v, tal que $v + (-v) = 0$.*

(ii) *A multiplicação por escalar $(\alpha, v) \mapsto \alpha \cdot v \in V$, $\alpha \in \mathbb{C}$, $v \in V$, tem as seguintes propriedades:*

  (a) *Associatividade: $\beta \cdot (\alpha \cdot v) = (\beta\alpha) \cdot v$ para todo $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $v \in V$.*

  (b) *$1 \cdot v = v$ para todo $v \in V$, onde $1 \in \mathbb{C}$ é a unidade de $\mathbb{C}$.*

  (c) *Distributividade em relação a soma em $(V, +)$: Para todo $v_1, v_2 \in V$ e todo $\alpha \in \mathbb{C}$, $\alpha \cdot (v_1 + v_2) = \alpha \cdot v_1 + \alpha \cdot v_2$.*

  (d) *Distributividade em relação a soma em $(\mathbb{C}, +)$: Para todo $v \in V$ e todo $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $(\alpha + \beta) \cdot v = \alpha \cdot v + \beta \cdot v$.*

Dizemos que $V' \subset V$, $V' \neq \emptyset$, é um "subespaço" do espaço vetorial $(V, +, \cdot)$ se, para todo $v_1', v_2' \in V'$ e todo $\alpha \in \mathbb{C}$,

$$v_1' + v_2' \in V' \quad e \quad \alpha \cdot v_1' \in V' \ .$$

Note que o corpo $\mathbb{C}$ dos complexos é um espaço vetorial (sobre $\mathbb{C}$). Outros exemplo de espaços vetoriais são:

(i) $\mathbb{C}^N$, $N \in \mathbb{N}$, com as operações

$$\begin{aligned}(z_1, \ldots, z_N) + (z_1', \ldots, z_N') &= (z_1 + z_1', \ldots, z_N + z_N') \ , \\ \alpha \cdot (z_1, \ldots, z_N) &= (\alpha z_1, \ldots, \alpha z_N) \ .\end{aligned}$$

(ii) O conjunto $Mat_{M\times N}$ das matrizes complexas $M \times N$, $M, N \in \mathbb{N}$, com as operações

$$\begin{aligned}&\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M1} & \cdots & a_{MN} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_{11}' & \cdots & a_{1N}' \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M1}' & \cdots & a_{MN}' \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} + a_{11}' & \cdots & a_{1N} + a_{1N}' \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M1} + a_{M1}' & \cdots & a_{MN} + a_{MN}' \end{pmatrix} \ ,\end{aligned}$$

$$\alpha \cdot \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M1} & \cdots & a_{MN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha a_{11} & \cdots & \alpha a_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha a_{M1} & \cdots & \alpha a_{MN} \end{pmatrix} \ .$$

(iii) Funções periódicas $\mathbb{R} \to \mathbb{C}$ com período $T > 0$ com as operações

$$[f + g](t) = f(t) + g(t) \quad \text{e} \quad [\alpha \cdot f](t) = \alpha(f(t)) \ .$$

(iv) Se V é um espaço vetorial, então $\{0\} \subset V$ é subespaço. Este último é chamado "subespaço trivial" de V.

Definição 2 (independência linear, bases) *Seja V um espaço vetorial. Dizemos que $v \in V$ é "combinação linear" dos vetores $v_1, \ldots, v_N \in V$ se existem constantes $\alpha_1, \ldots, \alpha_N \in \mathbb{C}$ tais que*

$$v = \alpha_1 \cdot v_1 + \cdots + \alpha_N \cdot v_N \ .$$

Para toda família de vetores $\Omega \subset V$ denotamos por $lin(\Omega) \subset V$ o conjunto de todas as combinações lineares de vetores de Ω. Note que $lin(\Omega)$ é o menor subespaço de V que contém todos os vetores de Ω. Dizemos que $\Omega \subset V$ é uma família de vetores "linearmente independentes" se, para todo $v \in \Omega$, $v \notin lin(\Omega \backslash \{v\})$ (ou seja, v não é combinação linear de outros vetores de Ω). A família de vetores $B \subset V$ é chamada "base" do espaço vetorial V se seus elementos forem linearmente independentes e $lin(B) = V$.

É sabido que todo espaço vetorial possui uma base. Além disso, duas bases $B_1, B_2 \subset V$ de um mesmo espaço vetorial V têm sempre a mesma cardinalidade (ou seja, o mesmo número de elementos). Tal propriedade nos permite introduzir a noção de dimensão de um espaço vetorial:

Definição 3 (dimensão) *Seja V um espaço vetorial com $V \neq \{0\}$. Dizemos que V tem dimensão infinita se este possui uma base com infinitos elementos. Notação:* $\dim(V) = \infty$. *V tem dimensão $N \in \mathbb{N}$ se toda base deste espaço tem exatamente N elementos. Notação:* $\dim(V) = N$. *Se $V = \{0\}$, então definimos* $\dim(V) := 0$.

É fácil mostrar que $\mathbb{C}^N$, $N \in \mathbb{N}$, é um espaço vetorial de dimensão N e que $\dim(Mat_{M\times N}) = M \times N$, $M, N \in \mathbb{N}$. O espaço, no exemplo acima, das funções periódicas $\mathbb{R} \to \mathbb{C}$ com período $T > 0$ tem dimensão infinita.

Definição 4 (aplicações lineares) *Sejam V e W espaços vetoriais. Dizemos que a função $\Theta : V \to W$ é "linear" se, para todo $v_1, v_2 \in V$ e todo $\alpha \in \mathbb{C}$,*

$$\Theta(v_1 + v_2) = \Theta(v_1) + \Theta(v_2) \quad e \quad \Theta(\alpha \cdot v_1) = \alpha \cdot \Theta(v_1) \ .$$

Denotaremos o conjunto de todas as funções lineares $V \to W$ por $\mathcal{L}(V;W)$. Se $V = W$ utilizaremos a notação $\mathcal{L}(V) \equiv \mathcal{L}(V;V)$.

Seja Ω um conjunto qualquer não vazio e W um espaço vetorial. O conjunto $\mathcal{F}(\Omega;W)$ das funções $\Omega \to W$ possui naturalmente a estrutura de espaço vetorial:

(i) Para todo $f_1, f_2 \in \mathcal{F}(\Omega;W)$ definimos $f_1 + f_2 \in \mathcal{F}(\Omega;W)$ por:

$$[f_1 + f_2](x) := f_1(x) + f_2(x) \ .$$

(ii) Para todo $f \in \mathcal{F}(\Omega;W)$ e $\alpha \in \mathbb{C}$, definimos $\alpha \cdot f \in \mathcal{F}(\Omega;W)$ por:

$$[\alpha \cdot f](x) := \alpha \cdot f(x) \ .$$

(iii) Se V é um segundo espaço vetorial, então $\mathcal{L}(V;W)$ é subespaço do espaço vetorial $\mathcal{F}(V;W)$. Em particular, o conjunto das funções lineares $V \to W$ é um espaço vetorial.

Exercício 5 *Sejam V e W espaços vetoriais não triviais. Mostre que*

$$\dim(\mathcal{L}(V;W)) = \dim(V) \times \dim(W).$$

Definição 6 (álgebras) *A quadrupla $(\mathcal{A}, +, \cdot, \circ)$ é uma "álgebra" (sobre $\mathbb{C}$) se $(\mathcal{A}, +, \cdot)$ é um espaço vetorial (sobre $\mathbb{C}$) e a operação binária $\circ : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \to \mathcal{A}$ (produto em $\mathcal{A}$) tem as seguintes propriedades:*

(i) Distributividade em relação a soma em $(\mathcal{A}, +)$: Para todo $A_1, A_2, A_3 \in \mathcal{A}$,

$$A_1 \circ (A_2 + A_3) = A_1 \circ A_2 + A_1 \circ A_3 \quad e \quad (A_1 + A_2) \circ A_3 = A_1 \circ A_3 + A_2 \circ A_3 \ .$$

(ii) A multiplicação por escalares comuta com o produto de $\mathcal{A}$: Para todo $A_1, A_2 \in \mathcal{A}$ e todo $\alpha \in \mathbb{C}$,

$$\alpha \cdot (A_1 \circ A_2) = (\alpha \cdot A_1) \circ A_2 = A_1 \circ (\alpha \cdot A_2) \ .$$

Dizemos que a álgebra $\mathcal{A}$ é "comutativa" se, para todo $A_1, A_2 \in \mathcal{A}$,

$$A_1 \circ A_2 = A_2 \circ A_1 \ .$$

Se, para todo $A_1, A_2, A_3 \in \mathcal{A}$,

$$(A_1 \circ A_2) \circ A_3 = A_1 \circ (A_2 \circ A_3) =: A_1 \circ A_2 \circ A_3 \ ,$$

a álgebra $\mathcal{A}$ é chamada "associativa". O elemento $\mathbf{1} \in \mathcal{A}$ é chamado "unidade" desta álgebra se, para todo $A \in \mathcal{A}$,

$$\mathbf{1} \circ A = A \circ \mathbf{1} = A \ .$$

Neste caso dizemos que $\mathcal{A}$ é uma "álgebra com unidade".

Note que se a álgebra $\mathcal{A}$ possui unidade, então esta é necessariamente única. Seja $\Omega \neq \emptyset$ um conjunto qualquer. O espaço vetorial $\mathcal{F}(\Omega; \mathbb{C})$ possui naturalmente uma estrutura de álgebra: Para todo $f_1, f_2 \in \mathcal{F}(\Omega; \mathbb{C})$ definimos o produto $f_1 \circ f_2 \in \mathcal{F}(\Omega; \mathbb{C})$ por

$$[f_1 \circ f_2]\,(x) := f_1(x) f_2(x) \ .$$

Com este produto, $\mathcal{F}(\Omega; \mathbb{C})$ é uma álgebra associativa, comutativa e com unidade. Um segundo exemplo importante de álgebra é o espaço $\mathcal{L}(V)$ das funções lineares $V \to V$, V um espaço vetorial: Para todo $\Theta_1, \Theta_2 \in \mathcal{L}(V)$ definimos o produto $\Theta_1 \circ \Theta_2 \in \mathcal{L}(V)$ por

$$[\Theta_1 \circ \Theta_2]\,(v) := \Theta_1(\Theta_2(v)) \ .$$

O espaço vetorial $Mat_{N\times N}$, $N \in \mathbb{N}$, munido com o produto habitual de matrizes é uma álgebra associativa com unidade. Para $N \geq 2$ esta álgebra não é comutativa. Observe que se a dimensão de V é finita, $\dim(V) = N \in \mathbb{N}$, utilisando-se a representação matricial de funções lineares, podemos identificar $\mathcal{L}(V)$ com a álgebra de matrizes $N \times N$.

Definição 7 (espaços normados) *Seja $(V, +, \cdot)$ um espaço vetorial. Dizemos que a função $\|\cdot\| : V \to \mathbb{R}_0^+ := [0, \infty)$ é uma "semi-norma" em V, se esta possui as seguintes propriedades:*

(i) Homogeneidade de grau 1 com relação à multiplicação por escalar: Para todo $v \in V$ e todo $\alpha \in \mathbb{C}$, $\|\alpha \cdot v\| = |\alpha|\,\|v\|$.

(ii) Subaditividade (desigualdade triangular): Para todo $v_1, v_2 \in V$, $\|v_1 + v_2\| \leq \|v_1\| + \|v_2\|$.

Dizemos que a semi-norma $\|\cdot\|$ em V é uma "norma" em V se esta for não degenerada, isto é:

(iii) para todo $v \in V$, $\|v\| = 0 \in \mathbb{R}_0^+$ se e somente se $v = 0 \in V$.

Neste caso $(V, +, \cdot, \|\cdot\|)$ *é um "espaço normado".*

O exemplo mais simples de espaço normado próprio corpo dos complexos $\mathbb{C}$ com a norma dada pelo valor absoluto:

$$\|z\| := |z|, \quad z \in \mathbb{C} \ .$$

Para todo $N \in \mathbb{N}$, defina a "norma euclidiana" $\|\cdot\|_2$ em $\mathbb{C}^N$:

$$\|(z_1, \ldots, z_N)\|_2 := \sqrt{|z_1|^2 + \cdots + |z_N|^2} \ .$$

$(\mathbb{C}^N, \|\cdot\|_2)$, $N \in \mathbb{N}$, é um espaço normado, o "espaço euclidiano de dimensão N".

A seguir discutimos uma generalização dos espaços euclidianos para o caso da dimensão infinita:

Definição 8 (espaços ℓ^2) *Seja* Ω *um conjunto não vazio e defina* $\ell^2(\Omega) \subset \mathcal{F}(\Omega; \mathbb{C})$ *como sendo o subespaço das funções* $f : \Omega \to \mathbb{C}$ *tal que a soma dos números não negativos* $\{|f(\omega)|^2\}_{\omega \in \Omega}$ *seja* finita. *Para todo* $f \in \ell^2(\Omega)$ *defina*

$$\|f\|_2 := \sqrt{\sum_{\omega \in \Omega} |f(\omega)|^2} \in \mathbb{R}_0^+ \ .$$

Observação 9 *Mais adiante usaremos o espaço* $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ *para estudar partículas quânticas em um cristal (cúbico) de dimensão* $d \in \mathbb{N}$.

Definição 10 *Sejam* $(V, +, \cdot, \|\cdot\|_V)$ *e* $(W, +, \cdot, \|\cdot\|_W)$ *espaços normados. Para todo* $\Theta \in \mathcal{L}(V; W)$ *defina a "norma de operador"*

$$\|\Theta\|_{\mathrm{op}} := \sup_{v \in V, \ \|v\|_V = 1} \|\Theta(v)\|_W \in [0, \infty] \ .$$

Seja o conjunto

$$\mathcal{B}(V; W) := \{\Theta \in \mathcal{L}(V; W) \ : \ \|\Theta\|_{\mathrm{op}} < \infty\} \ .$$

$\mathcal{B}(V; W)$ *é chamado o espaço dos "operadores limitados" de* $(V, +, \cdot, \|\cdot\|_V)$ *em* $(W, +, \cdot, \|\cdot\|_W)$. *Se* $V = W$ *utilizaremos a notação* $\mathcal{B}(V) \equiv \mathcal{B}(V; V)$.

Exercício 11 *Mostre que* $\mathcal{B}(V; W)$ *é um subespaço do espaço vetorial* $(\mathcal{L}(V; W), +, \cdot)$ *e que* $\|\cdot\|_{\mathrm{op}}$ *define uma norma em* $(\mathcal{B}(V; W), +, \cdot)$.

Note que se a dimensão de V for finita, então $\mathcal{B}(V; W) = \mathcal{L}(V; W)$.

A seguir definiremos dois operadores limitados em $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$, os quais serão utilizados posteriomente no estudo de partículas quânticas em cristais.

Definição 12 (operador de energia potencial em $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$) *Seja* $\mathcal{V}$ *uma função* $\mathbb{Z}^d \to \mathbb{R}$ *limitada, ou seja,*

$$\sup_{x \in \mathbb{Z}^d} |\mathcal{V}(x)| < \infty \ .$$

A esta função associamos um operador linear em $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$*, também denotado por* $\mathcal{V}$*:*

$$[\mathcal{V}(\varphi)](x) := \mathcal{V}(x)\varphi(x) \ .$$

Este operador é limitado:

Exercício 13 *Mostre que*

$$\|\mathcal{V}\|_{\text{op}} = \sup_{x\in\mathbb{Z}^d} |\mathcal{V}(x)| \ .$$

Este operador descreve a energia potencial de uma particula quântica no cristal de rede cúbica $\mathbb{Z}^d$. O operador relacionado à energia cinética é o "Laplaciano discreto" definido da seguinte forma:

Definição 14 (Laplaciano discreto) *O Laplaciano discreto $\Delta_d \in \mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}^d))$ é definido por:*

$$\begin{aligned} &[\Delta_d(\varphi)](x_1,\ldots,x_d) \\ : \ &= \sum_{n=1}^{d} [\varphi(x_1,\ldots,x_n+1,\ldots,x_d)+\varphi(x_1,\ldots,x_n-1,\ldots,x_d)-2\varphi(x_1,\ldots,x_d)] \ . \end{aligned}$$

Operadores do tipo

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_d + \mathcal{V} \in \mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}^d)$$

são chamados "operadores de Schrödinger discretos" e descrevem uma partícula quântica que se move num cristal (de rede cúbica) em d dimensões. Note que estão sendo usadas unidades nas quais $\hbar = 1$ e $m = 1$ (massa da partícula).

A equação de Schrödinger correspondente,

$$i\frac{d}{dt}\varphi(t) = H(\varphi(t)) \ ,$$

descreve a evolução temportal de tal partícula.

O objetivo dessas notas é de expor alguns resultados matemáticos úteis para a compreensão do comportamento das soluções desta equação diferencial ordinária em $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$. De particular interesse é o estudo da existência de estados ligados, os quais correspondem a soluções que permanecem localizadas espacialmente, para tempos arbitrariamente grandes.

Definição 15 (álgebras normadas) *Seja $(\mathcal{A},+,\cdot,\circ)$ uma álgebra e $\|\cdot\|$ uma norma em $(\mathcal{A},+,\cdot)$. Dizemos que $(\mathcal{A},+,\cdot,\circ,\|\cdot\|)$ é uma "álgebra normada" se a norma $\|\cdot\|$ for submultiplicativa, isto é, se, para todo $A_1, A_2 \in \mathcal{A}$,*

$$\|A_1 \circ A_2\| \leq \|A_1\| \, \|A_2\| \ .$$

Exercício 16 *Mostre que $\mathcal{B}(V)$ é uma álgebra normada com respeito à norma de operador $\|\cdot\|_{\text{op}}$.*

A seguir discutiremos a noção de convergência em espaços normados.

Definição 17 (sequências de Cauchy e convergentes) *Seja $(V,+,\cdot,\|\cdot\|)$ um espaço normado e $v_n \in V$, $n \in \mathbb{N}$, uma sequência em V.*

(i) Dizemos que v_n é uma "sequência de Cauchy" se, para todo $\varepsilon > 0$, existe $N \in \mathbb{N}$, tal que, para todo $m, n \in \mathbb{N}$ com $m, n \geq N$, tem-se $\|v_n - v_m\| \leq \varepsilon$.

(ii) A sequência $v_n \in V$, $n \in \mathbb{N}$, é dita "convergente" em V se existe $v \in V$ tal que, para todo $\varepsilon > 0$, existe $N \in \mathbb{N}$, tal que, para todo $n \in \mathbb{N}$ com $n \geq N$, tem-se $\|v - v_n\| \leq \varepsilon$. Neste caso dizemos que a sequência converge para $v \in V$.

Note que, pela subaditividade da norma, toda sequência convergente em V é uma sequência de Cauchy. Se uma sequência de Cauchy v_n, $n \in \mathbb{N}$, converge num espaço normado $(V, +, \cdot, \|\cdot\|)$ então o elemento $v \in V$ para qual ela converge é único. Este elemento é chamado o limite da sequência v_n e é denotado por $\lim_{n\to\infty} v_n$.

Definição 18 (espaços e álgebras de Banach) *Dizemos que um espaço normado $(V, +, \cdot, \|\cdot\|)$ é um "espaço de Banach" se este for "completo", isto é, se toda sequência de Cauchy neste espaço for convergente. Uma álgebra normada $(\mathcal{A}, +, \cdot, \circ, \|\cdot\|)$ é dita ser uma "álgebra de Banach" se esta for associativa e $(\mathcal{A}, +, \cdot, \|\cdot\|)$ um espaço de Banach.*

É sabido que todo espaço normado é dimensão *finita* é automaticamente completo. Em particular, os espaços euclidianos $(\mathbb{C}^N, \|\cdot\|_2)$, $N \in \mathbb{N}$, são espaços de Banach. Observe, porém, que nem todo espaço normado de dimensão infinita é completo. Portanto existem espaços normados que não são de Banach. Os espaços euclidianos $(\ell^2(\Omega), \|\cdot\|_2)$ são sempre completos, mesmo os de dimensão infinita.

Exercício 19 *(i) Seja V um espaço normado e W um espaço de Banach. Mostre que $\mathcal{B}(V; W)$ é um espaço de Banach com respeito à norma de operador $\|\cdot\|_{\mathrm{op}}$.*

(ii) Seja V um espaço de Banach. Mostre que $\mathcal{B}(V)$ é uma álgebra de Banach com respeito à norma de operador $\|\cdot\|_{\mathrm{op}}$.

1.2 Espaços de Hilbert

Definição 20 (produto escalar) *Seja V é um espaço vetorial (sobre $\mathbb{C}$). Dizemos que $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \to \mathbb{C}$ é um "semi-produto escalar" em V se:*

(i) $\langle v, v \rangle \geq 0$,

(ii) $\langle v_1, v_2 \rangle = \overline{\langle v_2, v_1 \rangle}$ para todo $v_1, v_2 \in V$,

(iii) $\langle v_1, \alpha v_2 \rangle = \alpha \langle v_1, v_2 \rangle$ para todo $v_1, v_2 \in V$, e todo $\alpha \in \mathbb{C}$,

(iv) $\langle v_1, v_2 + v_3 \rangle = \langle v_1, v_2 \rangle + \langle v_1, v_3 \rangle$.

Um semi-produto escalar é um produto escalar se este for "não degenerado", isto é, se $\langle v, v \rangle = 0$ se e somente se $v = 0$.

Note que as propriedades (ii)–(iv) implicam:

(v) $\langle \alpha v_1, v_2 \rangle = \overline{\alpha} \langle v_1, v_2 \rangle$ para todo $v_1, v_2 \in V$, e todo $\alpha \in \mathbb{C}$,

(vi) $\langle v_1 + v_2, v_3 \rangle = \langle v_1, v_3 \rangle + \langle v_2, v_3 \rangle$.

Definição 21 (norma associada a um produto escalar) *Seja V um espaço vetorial (sobre $\mathbb{C}$) e $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \to \mathbb{C}$ um semi-produto escalar. Para todo $v \in V$ defina*

$$\|v\| = \|v\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle} := \sqrt{\langle v, v \rangle} \ .$$

Teorema 22 (desigualdade de Cauchy-Schwarz) *Para todo $v_1, v_2 \in V$,*

$$|\langle v_1, v_2 \rangle| \leq \|v_1\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle} \|v_2\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle} \ .$$

Demonstração: Sejam $v_1, v_2 \in V$ arbitrários. Para todo $\alpha \in \mathbb{R}$ temos

$$0 \leq \langle v_1 + \alpha \cdot v_2, v_1 + \alpha \cdot v_2 \rangle = \alpha^2 \|v_2\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle}^2 + 2\alpha \operatorname{Re}\{\langle v_1, v_2 \rangle\} + \|v_1\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle}^2 \ .$$

Se $\|v_2\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle} = 0$, então, tomando-se $\alpha \to \pm\infty$ na desigualdade acima,

$$\pm \operatorname{Re}\{\langle v_1, v_2 \rangle\} \geq 0 \ .$$

Isso implica que $\operatorname{Re}\{\langle v_1, v_2 \rangle\} = 0$. Seja agora $\|v_1\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle} > 0$. Pela propriedade de positividade acima, o polinômio de segundo grau real $x \mapsto \|v_2\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle}^2 x^2 + 2\operatorname{Re}\{\langle v_1, v_2 \rangle\}x + \|v_1\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle}^2$ tem no máximo uma raiz real. Logo,

$$4 \left(\operatorname{Re}\{\langle v_1, v_2 \rangle\}\right)^2 - 4 \|v_1\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle}^2 \|v_2\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle}^2 \leq 0 \ .$$

Portanto,

$$|\operatorname{Re}\{\langle v_1, v_2 \rangle\}| \leq \|v_1\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle} \|v_2\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle}$$

para todo $v_1, v_2 \in V$. Para $v_1, v_2 \in V$ escolha $c \in \mathbb{C}$, tal que $|c| = 1$ e

$$\langle v_1, cv_2 \rangle = c \langle v_1, v_2 \rangle = |\langle v_1, v_2 \rangle| \ .$$

Pela desigualdade acima:

$$\begin{aligned} |\langle v_1, v_2 \rangle| &= |\operatorname{Re}\{c \langle v_1, v_2 \rangle\}| \\ &= |\operatorname{Re}\{\langle v_1, cv_2 \rangle\}| \\ &\leq \|v_1\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle} \|cv_2\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle} \leq \|v_1\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle} \|v_2\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle} \ . \end{aligned}$$

□

Uma consequência direta da desigualdade de Cauchy-Schwarz é o fato de $\|\cdot\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle}$ ser uma semi-norma em V:

Teorema 23 *A função $\|\cdot\| : V \to \mathbb{R}$, $v \mapsto \|v\|_{\langle \cdot, \cdot \rangle}$, define uma semi-norma em V. Se $\langle \cdot, \cdot \rangle$ é um produto escalar, então, $\|\cdot\|$ é uma norma em V.*

Demonstração: Exercício.

Observe que nem toda semi-norma em V provém de um produto escalar. De fato, toda semi-norma da forma $\|\cdot\|_{\langle\cdot,\cdot\rangle}$ necessariamente verifica a identidade do paralelogramo:

Lema 24 (identidade do paralelogramo) *Seja V um espaço vetorial complexo e, $\langle\cdot,\cdot\rangle : V\times V \to \mathbb{R}$ um semi-produto escalar. Então, para todo $v_1, v_2 \in V$,*

$$\|v_1 + v_2\|^2_{\langle\cdot,\cdot\rangle} + \|v_1 - v_2\|^2_{\langle\cdot,\cdot\rangle} = 2\left(\|v_1\|^2_{\langle\cdot,\cdot\rangle} + \|v_2\|^2_{\langle\cdot,\cdot\rangle}\right) .$$

Demonstração: Exercício.

É fácil encontrar exemplos de semi-normas que não possuem a propriedade acima. De fato, toda norma em V que verifique a identidade do paralelogramo provém necessariamente de um produto escalar. Este é único e pode ser reconstruído a partir da norma:

Teorema 25 (Jordan e von Neumann) *Seja V um espaço vetorial sobre $\mathbb{C}$ e $\|\cdot\|$ uma norma em V. Se esta verifica a identidade do paralelogramo, então, existe um produto escalar único $\langle\cdot,\cdot\rangle : V \times V \to \mathbb{C}$ tal que $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{\langle\cdot,\cdot\rangle}$. Neste caso,*

$$\langle v_1, v_2\rangle = \frac{1}{4}(\|v_1 + v_2\|^2 - \|v_1 - v_2\|^2 + i\,\|v_1 - iv_2\|^2 - i\,\|v_1 + iv_2\|^2)$$

para todo $v_1, v_2 \in V$.

As expressões acima do produto escalar em função da norma é conhecida como "identidade da polarização".

Definição 26 (espaços de Hilbert) *Seja V um espaço vetorial (sobre $\mathbb{C}$) e $\langle\cdot,\cdot\rangle : V \times V \to \mathbb{C}$ um produto escalar. Dizemos que $(V, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ é um "espaço de Hilbert" se $(V, \|\cdot\|_{\langle\cdot,\cdot\rangle})$ for um espaço de Banach. Se V não for necessariamente completo com relação à norma $\|\cdot\|_{\langle\cdot,\cdot\rangle}$, então, $(V, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ é chamado de "espaço pré-Hilbert".*

Como, pela discussão acima, o produto escalar $\langle\cdot,\cdot\rangle$ é completamente determinado pela norma $\|\cdot\|_{\langle\cdot,\cdot\rangle}$ associda a este, espaços de Hilbert são um caso especial de espaços normados: Os espaços pré-Hilbert são exatamente os espaços normados, cuja norma verifica a identidade do paralelogramo e os espaços de Hilbert são os espaços de Banach com esta propriedade.

É fácil mostrar que a norma euclidiana $\|\cdot\|_2$ dos espaços $\mathbb{C}^N$ e $\ell^2(\Omega)$ verificam à identidade do paralelogramo. Usando a identidade da polarização acima, obtemos o produto escalar associado a esta:

$$\langle(z_1, \ldots, z_N), (z_1', \ldots, z_N')\rangle = \overline{z_1}z_1' + \cdots + \overline{z_N}z_N' ,$$

para $(z_1, \ldots, z_N), (z_1', \ldots, z_N') \in \mathbb{C}^N$, e

$$\langle f, g\rangle = \sum_{\omega\in\Omega} \overline{f(\omega)}g(\omega)$$

para $f, g \in \ell^2(\Omega)$.

Um outro exemplo importante de espaço é Hilbert, são os espaços de "funções de quadrado integrável". Devido ao estudo de partículas quânticas em cristais, que relalizaremos mais adiante, consideramos aqui funções de quadrado integrável nas "zonas de Brillouin" correspondentes. Seja $B_d := [-\pi, \pi]^d$, $d \in \mathbb{N}$, (cubo de lado 2π em d dimensões). B_d é chamado "zona de Brillouin associada a rede cúbica $\mathbb{Z}^d$". Denotaremos por $L^2(B_d)$ o espaços das funções $\widehat{\varphi} : B_d \to \mathbb{C}$ com

$$\int_{B_d} |\widehat{\varphi}(p)|^2 d^d p < \infty \ .$$

Definimos em $L^2(B_d)$ a norma

$$\|\widehat{\varphi}\|_2 := \sqrt{\int_{B_d} |\widehat{\varphi}(p)|^2 d^d p} \ .$$

O espaço normado $(L^2(B_d), \|\cdot\|_2)$ é um espaço de Hilbert. O produto escalar deste é dado por:

$$\left\langle \widehat{\varphi}, \widehat{\psi} \right\rangle = \int_{B_d} \overline{\widehat{\varphi}(p)}\widehat{\psi}(p) d^d p \ .$$

Definição 27 *Sejam $(\mathcal{H}_1, \|\cdot\|^{(1)})$ e $(\mathcal{H}_2, \|\cdot\|^{(2)})$ dois espaços de Hilbert. Dizemos que $U \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1; \mathcal{H}_2)$ é uma "transformação unitária" se esta for uma isometria bijetiva, ou seja, se $U : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ for uma bijeção e*

$$\|U(v)\|^{(2)} = \|v\|^{(1)}$$

para todo $v \in \mathcal{H}_1$. Dizemos que os espaços de Hilbert são "unitariamente equivalentes" se existe uma trasformação unitária $\mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$.

Note que se $U : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ é uma transformação unitária, então, também $U^{-1} : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$ o é. Devido à identidade da polarização, transformações unitárias preservam o produto escalar ("preservam ângulos"):

Lema 28 *Sejam $(\mathcal{H}_1, \|\cdot\|^{(1)})$ e $(\mathcal{H}_2, \|\cdot\|^{(2)})$ dois espaços de Hilbert e $\langle \cdot, \cdot \rangle^{(1)}$, $\langle \cdot, \cdot \rangle^{(2)}$ os respectivos produtos escalares. Seja $U : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ uma trasformação unitária. Então, para todo $v_1, v_2 \in \mathcal{H}_1$,*

$$\langle U(v_1), U(v_2)\rangle^{(2)} = \langle v_1, v_2\rangle^{(1)} \ .$$

Os espaços de Hilbert $L^2(B_d)$ e $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ são unitariamente equivalentes. Uma tranformação unitária unitária entre esses dois espaços é dada pela transformada de Fourier:

Teorema 29 (Plancherel) *Existe uma tranformação unitária única $\mathcal{F} : L^2(B_d) \to \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ para a qual*

$$[\mathcal{F}(\widehat{\varphi})](x_1, \ldots, x_d) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{B_d} \widehat{\varphi}(p) e^{-i(p_1 x_1 + \cdots + p_d x_d)} d^d p \; .$$

É útil, de um ponto de vista físico, transformar o Laplaciano discreto Δ_d, que é um operador em $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$, em um operador em $L^2(B_d)$ por intermédio da transformação unitária $\mathcal{F}$:

Lema 30

$$[\mathcal{F}^{-1} \Delta_d \mathcal{F}(\widehat{\varphi})](p_1, \ldots, p_d) = \left(\sum_{n=1}^{d} 2(\cos(p_n) - 1) \right) \widehat{\varphi}(p_1, \ldots, p_d) \; .$$

Observe que

$$2(\cos(p_n) - 1) \simeq -p_n^2$$

para pequenos p_n. Portanto, próximo a $p_1, \ldots, p_d = 0$ tem-se:

$$[\mathcal{F} \Delta_d \mathcal{F}^{-1}(\widehat{\varphi})](p_1, \ldots, p_d) \simeq -(p_1^2 + \cdots + p_d^2) \widehat{\varphi}(p_1, \ldots, p_d) \; .$$

Este comportamento, entre outros, motiva a identificação de $-\frac{1}{2}\Delta_d$ com o operator de energia cinética.

Ao contrário do caso de espaços normados gerais, a noção de ortogonalidade pode ser introduzida de modo natural em espaços de Hilbert. Esta tem, como veremos, muitas consequências importantes:

Definição 31 *Seja $(\mathcal{H}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ um espaço de Hilbert real ou complexo e sejam $v_1, v_2 \in \mathcal{H}$. Dizemos que "v_1 é ortogonal a v_2" (notação: $v_1 \perp v_2$) se $\langle v_1, v_2 \rangle = 0$. Sejam $\Omega_1, \Omega_2 \subset \mathcal{H}$ subconjuntos não vazios. Dizemos que estes são ortogonais se $\langle v_1, v_2 \rangle = 0$ para todo $v_1 \in \Omega_1$ e todo $v_2 \in \Omega_2$. Para todo subconjunto $\Omega \subset \mathcal{H}$ não vazio, defina*

$$\Omega^\perp := \{ v' \in \mathcal{H} \; : \; v' \perp v \text{ para todo } v \in \Omega \} \subset \mathcal{H} \; .$$

O conjunto $\Omega^\perp$, o maior subconjunto de $\mathcal{H}$ ortogonal a Ω, é chamado "complemento ortogonal de Ω".

Lema 32 *Seja $(\mathcal{H}, \|\cdot\|)$ um espaço de Hilbert real ou complexo.*

(i) [Teorema de Pitágoras] Para todo $v_1, v_2 \in \mathcal{H}$, $v_1 \perp v_2$,

$$\|v_1 + v_2\|^2 = \|v_1\|^2 + \|v_2\|^2 \; .$$

(ii) Para todo $\Omega \subset \mathcal{H}$ não vazio, $\Omega^\perp$ é um subespaço completo de $\mathcal{H}$.

(iii) Para todo $\Omega \subset \mathcal{H}$ não vazio, $\Omega \subset (\Omega^\perp)^\perp$.

Demonstração: Exercício.

Definição 33 (somas diretas em espaços de Hilbert) *Seja* $(\mathcal{H}, \|\cdot\|)$ *um espaço de Hilbert e sejam* $V_1, \ldots, V_N \subset \mathcal{H}$ *subespaços. Dizemos que* $\mathcal{H}$ *é a "soma direta" destes subespaços (notação* $\mathcal{H} = V_1 \oplus_2 \cdots \oplus_2 V_N$*) se:*

(i) Para todo $i, j = 1, \ldots, N$ *com* $i \neq j$*,* $V_i \perp V_j$*,*

(ii) para todo $v \in \mathcal{H}$ *existem vetores* $v_1 \in V_1, \ldots, v_N \in V_N$ únicos*, tais que*

$$v = v_1 + \cdots + v_N \ .$$

Observe que somas diretas em espaços vetoriais $\mathcal{H}$ arbitrários (não necessariamente espaços de Hilbert) são definidas pela propriedade (ii) da definição acima. Neste caso a notação utilizada é $\mathcal{H} = V_1 \oplus \cdots \oplus V_N$. Faremos uso da notação $\oplus_2$ para fazer referência à propriedade (i), ou seja, à ortogonalidade mútua dos subespaços $V_1, \ldots, V_N$.

O teorema a seguir garante a existência e unicidade da decomposição ortogonal de vetores em espaços de Hilbert:

Teorema 34 (teorema da decomposição ortogonal) *Seja* $(\mathcal{H}, \|\cdot\|)$ *um espaço de Hilbert e seja* $V \subset \mathcal{H}$ *um subespaço* completo*. Então,* $\mathcal{H} = V \oplus_2 V^{\perp}$*.*

O teorema acima tem inúmeras consequências importantes. Uma primeira consequência imediata, mas não menos importante, é a existência dos chamados projetores ortogonais para todo subespaço completo de um espaço de Hilbert $(\mathcal{H}, \|\cdot\|)$: Seja $V \subset \mathcal{H}$ um tal subespaço e para todo $v \in \mathcal{H}$ seja $v = v_0 + v_1$ a decomposição de v, cuja existência e unicidade é assegurada pelo teorema, com $v_0 \in V$ e $v_1 \in V^{\perp}$. É fácil ver que a condição

$$P_V(v) = v_0$$

define de modo único uma função linear $P_V \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Esta função tem as seguintes propriedades:

Lema 35 *Para todo subespaço fechado* $V \subset \mathcal{H}$*:*

(i) P_V *é um projetor, isto é,* $P_V \circ P_V = P_V$*.*

(ii) $P_V \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ *com* $\|P_V\|_{\text{op}} \leq 1$*.*

(iii) $\|P_V\|_{\text{op}} = 0$ *se e somente se* $V = \{0\}$*.* $\|P_V\|_{\text{op}} = 1$*, caso contrário.*

Demonstração: Exercício.

Mais adiante veremos que, para todo projetor $P \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ *autoadjunto,* o espaço imagem $P(\mathcal{H}) \subset \mathcal{H}$ é um subespaço fechado e $P = P_{P(\mathcal{H})}$. Portanto, pela discussão acima, existe uma relação biunívoca entre os projetores autoadjuntos de $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ e os subespaços fechados do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$.

Uma segunda consequência importante do teorema da decomposição ortogonal é o teorema de representação de Riesz-Fréchet, o qual demonstraremos a seguir. Seja $(\mathcal{H}, \|\cdot\|)$ um espaço de Hilbert sobre $\mathbb{C}$ e $v \in \mathcal{H}$ um vetor qualquer. Defina a função $\varphi_v : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$, $\varphi_v(v') := \langle v, v' \rangle$. Devido à definição do produto escalar, φ_v é linear. Pela desigualdade de Cauchy-Schwartz temos

$$|\varphi_v(v')| \le \|v\| \, \|v'\|$$

para todo $v' \in \mathcal{H}$. Logo, $\|\varphi_v\|_{\mathrm{op}} \le \|v\| < \infty$ e, portanto, $\varphi_v \in \mathcal{B}(\mathrm{H}; \mathbb{C})$. Mostraremos a seguir que todo elemento de $\mathcal{B}(\mathrm{H}; \mathbb{C})$ (ou seja, todo funcional linear contínuo $\mathcal{H} \to \mathbb{C}$) é desta forma:

Teorema 36 (teorema de representação de Riesz-Fréchet) *Seja $(\mathcal{H}, \|\cdot\|)$ um espaço de Hilbert. Para todo $\varphi \in \mathcal{B}(\mathcal{H}; \mathbb{C})$ existe um $v_\varphi \in \mathcal{H}$ único, tal que $\varphi = \varphi_{v_\varphi}$. Para todo $\varphi \in \mathcal{B}(\mathcal{H}; \mathbb{C})$, $\|\varphi\|_{\mathrm{op}} = \|v_\varphi\|$. Para todo $\varphi, \varphi' \in \mathcal{B}(\mathcal{H}; \mathbb{C})$ e todo $\alpha \in \mathbb{C}$,*

$$v_{\varphi+\varphi'} = v_\varphi + v_{\varphi'} \quad e \quad v_{\alpha\varphi} = \overline{\alpha} v_\varphi \ .$$

Pelo teorema acima os espaços H e $\mathcal{B}(\mathcal{H}; \mathbb{C})$ podem ser identificados de maneira canônica, se $\mathcal{H}$ for um espaço de Hilbert. Tal identificação é isométrica e antilinear.

A seguir introduziremos a noção de (operadores) adjuntos de operadores limitados em espaços de Hilbert. Seja, então, $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert e $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Note que, devido a desigualdade de Cauchy–Schwarz, para todo $w \in \mathcal{H}$, a função

$$v \mapsto \langle w, A(v) \rangle$$

define um funcional linear contínuo $\varphi_{A,w} : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$. Pelo teorema de Riesz-Fréchet, existem vetores únicos $v_{A,w} \in \mathcal{H}$ com

$$\langle w, A(v) \rangle = \langle v_{A,w}, v \rangle$$

para todo $v, w \in \mathcal{H}$ e todo $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Usando a unicidade de $v_{A,w} \in \mathcal{H}$, segue imediatamente que a função $A^* : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, $w \mapsto v_{A,w}$ é linear. O operador $A^* \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ é chamado o "adjunto" de $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Por construção:

$$\langle w, A(v) \rangle = \langle A^*(w), v \rangle \quad \text{e} \quad \langle A(w), v \rangle = \langle w, A^*(v) \rangle$$

para todo $v, w \in \mathcal{H}$ e todo $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. O operador adjunto possui as seguintes propriedades:

Teorema 37 *Para todo $A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$:*

(i) $A^* \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ *com* $\|A^*\|_{\mathrm{op}} = \|A\|_{\mathrm{op}}$ *e* $\|A^* \circ A\|_{\mathrm{op}} = \|A\|_{\mathrm{op}}^2$.

(ii) $(A \circ B)^* = B^* \circ A^*$.

(iii) $(A + B)^* = A^* + B^*$ *e* $(\alpha A)^* = \overline{\alpha} A^*$ *para todo* $\alpha \in \mathbb{C}$.

(iv) $(A^*)^* = A$.

Lema 38 *Seja $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert e $U \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ uma transformação unitária. Então, $U^{-1} = U^*$.*

Demonstração: Para todo $v, w \in \mathcal{H}$ temos

$$\langle v, w \rangle = \langle U(v), U(w) \rangle = \langle v, U^* U(w) \rangle .$$

Logo,

$$\langle v, (\mathbf{1} - U^* U)(w) \rangle$$

para todo $v, w \in \mathcal{H}$. Potanto, $U^* U = \mathbf{1}$. Como $U : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é função bijetiva, concluímos que $U^{-1} = U^*$. □

Definição 39 (operadores autoadjuntos) *Seja $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert. Dizemos que $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ "autoadjunto" se $A = A^*$.*

Dois exemplos importantes de operadores autoadjuntos no espaço de Hilbert $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ são os operadores $\mathcal{V}$ e Δ_d definidos acima, associados, respectivamente, às energias potencial e cinética de uma partícula quântica num cristal de rede cúbica.

A noção de projetores ortogonais introduzida acima é equivalente à noção de projetores auto-adjuntos:

Teorema 40 *Seja $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert e $V \subset \mathcal{H}$ um subespaço fechado. Então, $P_V = P_V^*$. Se $P \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ é um projetor (ou seja, $P \circ P = P$) auto-adjunto, então, $P(\mathcal{H}) \subset \mathcal{H}$ é um subespaço completo e P é o projetor ortogonal associado a este subespaço.*

A seguir definiremos uma família de projetores ortogonais em $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$, a qual será usada para introduzir a noção de estado ligado de partículas quânticas em cristais (de rede cúbica $\mathbb{Z}^d$):

Definição 41 *Para todo $R > 0$ defina o operador $P_R \in \mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}^d))$ por:*

$$[P_R(\varphi)](x) = \varphi(x) \text{ se } |x| \leq R \text{ e } [P_R(\varphi)](x) = 0 \text{ senão.}$$

É fácil ver que esses operadores são projetores autoadjntos. Portanto são projetores ortogonais.

1.3 Dinâmica quântica

Seja $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert e $H \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ autoadjunto. A este operator (Hamiltoniano) associamos a equação de Schrödinger

$$\left\{ \begin{array}{rcl} i\frac{d}{dt}\varphi(t) & = & H(\varphi(t)) \\ \varphi(0) & = & \varphi_0 \end{array} \right. .$$

O vetor $\varphi_0 \in \mathcal{H}$ representa o estado inicial do sistema. $\varphi(t) \in \mathcal{H}$ representa o estado no tempo $t \in \mathbb{R}$. É sabido que, para todo estado inicial $\varphi_0 \in \mathcal{H}$, a equação diferencial ordinária acima possui solução $\varphi(t)$, $t \in \mathbb{R}$, a qual é única. Esta solução tem a propridade de conservação da norma: $\|\varphi(t)\| = \|\varphi_0\|$ para todo $t \in \mathbb{R}$.

A seguir introduzimos a noção de estados ligados no caso especial de partículas quânticas na rede cristalina $\mathbb{Z}^d$, o qual corresponde ao espaço de Hilbert $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$.

Definição 42 (estados ligados em $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$) *Seja $H \in \mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}^d))$ autoadjunto e defina o subespaço*

$$\mathcal{H}_{lig,H} := \left\{ \varphi_0 \ : \ \lim_{R\to\infty} \sup_{t>0} \|\varphi(t) - P_R(\varphi(t))\|_2^2 = 0 \right\} \ .$$

Os elementos de $\mathcal{H}_{lig,H} \subset \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ são chamdos "estados ligados de H".

Observe que, escolhendo-se um estado inicial normalisado (ou seja, $\|\varphi_0\|_2 = 1$), a quantidade $|[\varphi(t)](x)|^2$ é interpretada como sendo a probabilidade de se encontrar uma partícula em $x \in \mathbb{Z}^d$ no tempo t. A norma quadrada

$$\|\varphi(t) - P_R(\varphi(t))\|_2^2$$

representa então a probabilidade de se encontrar a partícula, no tempo $t \in \mathbb{R}$, em um ponto $x \in \mathbb{Z}^d$ da rede cristalina com $|x| > R$. Portanto, se $\varphi_0 \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)$, $\|\varphi_0\|_2 = 1$, é estado ligado no sentido da definição acima, a partícula correspondente permanecerá com probabilidade tão próxima de 1 quanto se queira em uma região finita do cristal, durante todo o tempo. Observe que $\mathcal{H}_{lig,H} \subset \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ pode ser trivial, ou seja $\mathcal{H}_{lig,H} = \{0\}$. Neste caso a partícula, em qualquer estado em que se encontre, não permanecerá por tempo indeterminado no interior de regiões finitas da rede cristalina.

É possível caracterisar de modo análogo o complemento ortogonal de $\mathcal{H}_{lig,H}$:

Teorema 43 *$\varphi_0 \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ é elemento de $(\mathcal{H}_{lig,H})^\perp \subset \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ se e somente se, para todo $R > 0$,*

$$\lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|P_R(\varphi(t))\|_2^2 \, dt = 0 \ .$$

Deste modo, partículas em estados ortogonais aos estados ligados têm a propriedade de, em média temporal ao longo de grandes tempos, não permanecerem em nenhuma região finita. Também é sabido que $\mathcal{H}_{lig,H}$ que é um subespaço completo e, portanto,

$$\ell^2(\mathbb{Z}^d) = \mathcal{H}_{lig,H} \oplus_2 (\mathcal{H}_{lig,H})^\perp.$$

Assim sendo, todo estado inicial $\varphi_0 \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ de uma partícula quântica em $\mathbb{Z}^d$ pode ser unicamente decomposto em uma componente que pemanecerá localisada no espaço por tempo indefinido (componente ligada) e uma segunda que se dispersará mais e mais no espaço a medida evolui no tempo.

2 Espectro de Elementos de uma Álgebra

Dizemos que o elemento A de uma álgebra $\mathcal{A}$ *com unidade* é "inversível" se existe $A^{-1} \in \mathcal{A}$ tal que

$$A \circ A^{-1} = A^{-1} \circ A = \mathbf{1}.$$

Tal $A^{-1} \in \mathcal{A}$ é chamado "elemento inverso" de $A \in \mathcal{A}$.

Definição 44 (espectro e resolvente) *Seja $\mathcal{A}$ uma álgebra com unidade. O "conjunto resolvente" $\rho(A) \equiv \rho_{\mathcal{A}}(A) \subset \mathbb{C}$ de A em $\mathcal{A}$ é o conjunto de todo $\lambda \in \mathbb{C}$, tal que $(\lambda \mathbf{1} - A)$ é inversível. O conjunto $\sigma(A) \equiv \sigma_{\mathcal{A}}(A) := \mathbb{C} \backslash \rho_{\mathcal{A}}(A)$ é chamado "espectro de A em $\mathcal{A}$" .*

É sabido que se $\mathcal{A}$ é uma ágebra de Banach com unidade, então, para todo $A \in \mathcal{A}$, o conjunto resolvente $\rho(A)$ é um aberto de $\mathbb{C}$ e o espectro $\sigma(A) \subset \mathbb{C}$ é fechado e limitado. Logo, como o espectro $\sigma(A) \subset \mathbb{C}$ de um elemento A de uma álgebra de Banach $\mathcal{A}$ é sempre limitado podemos definir o "raio espectral" de A em $\mathcal{A}$:

$$r(A) \equiv r_{\mathcal{A}}(A) := \sup\{|\lambda| \ : \ \lambda \in \sigma_{\mathcal{A}}(A)\} < \infty \ .$$

O seguinte resultado relaciona o raio espectral de um elemento $A \in \mathcal{A}$ com a norma das potências deste:

Teorema 45 (raio espectral em ágebras de Banach) *Seja $\mathcal{A}$ uma ágebra de Banach com unidade. Então:*

$$\begin{aligned} r(A) &= \inf_{n \in \mathbb{N}} \|A^n\|^{1/n} \\ &= \lim_{n \to \infty} \|A^n\|^{1/n} \leq \|A\|. \end{aligned}$$

As álgebras $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ de operadores limitados em espaços de Hilbert possuem propriedades suplementares que permitem uma melhor caracterisação do espectro de seus elemento. A seguir discutiremos as propriedades mais relevantes assim como suas implicações para o espectro.

2.1 O espectro de elementos de álgebras C^*

Definição 46 (álgebra estrela) *Seja $(\mathcal{A}, +, \cdot)$ uma ágebra (sobre $\mathbb{C}$). Dizemos que a operação $\mathcal{A} \to \mathcal{A}$, $A \mapsto A^*$ é uma "involução" da ágebra $\mathcal{A}$ se:*

(i) $\forall A \in \mathcal{A} : (A^*)^* = A$;

(ii) $\forall A, B \in \mathcal{A} : (A \circ B)^* = B^* \circ A^*$;

(iii) $\forall A, B \in \mathcal{A}$, $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$: $(\alpha A + \beta B)^* = \bar{\alpha} A^* + \bar{\beta} B^*$.

Álgebras com involução são chamadas "álgebras estrela". O elemento A da ágebra estrela $\mathcal{A}$ é dito "normal" se $A^*A = AA^*$. O elemento normal $A \in \mathcal{A}$ é dito "auto-adjunto" se $A = A^*$. Se $\mathcal{A}$ possui unidade e $AA^* = A^*A = \mathbf{1}$, então, dizemos que A é um "unitário" de $\mathcal{A}$.

Note que se a ágebra estrela $\mathcal{A}$ possui unidade $\mathbf{1} \in \mathcal{A}$ então esta é necessariamente um elemento autoadjuto da ágebra. A seguir sempre suporemos, mesmo sem mensão explicita, que $\mathcal{A}$ possui unidade.

Definição 47 (álgebras estrela normadas) *Seja $\mathcal{A}$ uma ágebra estrela e $\|\cdot\|$ uma norma em $\mathcal{A}$.*

(i) Dizemos que $(\mathcal{A}, \|\cdot\|)$ é uma ágebra estrela normada se esta é uma ágebra normada e $\|A\| = \|A^*\|$ para todo $A \in \mathcal{A}$.

(ii) Dizemos que a álgebra estrela normada $(\mathcal{A}, \|\cdot\|)$ é uma ágebra estrela de Banach se esta for uma ágebra de Banach.

(iii) A ágebra estrela de Banach $(\mathcal{A}, \|\cdot\|)$ é dita ser uma álgebra C^* se

$$\|A^* \circ A\| = \|A\|^2$$

para todo $A \in \mathcal{A}$.

O espaço $(\mathcal{B}(\mathcal{H}), \|\cdot\|_{\text{op}})$ dos operadores lineares limitados $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$ com a norma de operador é um exemplo importante de ágebra C^* com unidade.

Teorema 48 (espectro em ágebras C^*) *Seja $\mathcal{A}$ uma ágebra C^*. Se A é autoadjunto, ou seja $A = A^*$, então, o raio espectral de A é máximo: $r(A) = \|A\|$. Além disso $\sigma(A)$ é puramente real.*

2.2 Espectro de Operadores Limitados Autoadjuntos em Espaços de Hilbert

Seja $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert. Como discutido acima, o espaço $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ dos operatores limitiados em $\mathcal{H}$ define uma álgebra C^*. Portanto, seu elementos autoadjuntos têm espectros que são subconjuntos fechados e limitados de $\mathbb{R}$. É conveniente, também do ponto de vista da Mecânica Quântica, definir alguns diferentes tipos de pontos espectrais e subespaços de $\mathcal{H}$ a eles relacionados. Em particular, estabeleceremos uma relação entre a noção de estados ligados, definida anteriormente, e o tipo espectral correspondente aos autovalores dos operadores:

Definição 49 (espectro puro ponto) *Seja $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Dizemos que $z \in \mathbb{C}$ é "autovalor" de A se existe $\varphi \in \mathcal{H}$, $\|\varphi\| = 1$, tal que $A(\varphi) = z\varphi$ (de modo equivalente: $A(\varphi) - z\varphi = 0$). Neste caso φ é chamado autovetor (normalizado) de A associado ao autovalor z. Denotaremos o conjunto dos autovalores de A por $\sigma_{pp}(A)$. O conjunto $\sigma_{pp}(A) \subset \mathbb{C}$ é chamado "espectro puro ponto" de A. Dizemos $z \in \sigma_{pp}(A)$ tem degenerecência de ordem $N \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$ se o espaço formado pelos autovetores de A associados a z tem dimensão N.*

Observe que se $z \in \sigma_{pp}(A)$ então $(z\mathbf{1} - A)$ não possui inversa e, portanto, $z \in \sigma(A)$. Sendo assim, $\sigma_{pp}(A) \subset \sigma(A)$. Sabemos que se $\mathcal{H}$ tem dimensão finita, ou seja, $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ é uma álgebra de matrizes, então $\sigma_{pp}(A) = \sigma(A)$. Porém, em espaços de Hilbert de dimensão infinita, em geral, nem todo ponto espectral de A é um autovalor. De fato, se H= $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$, os autovalores de A estão diretamente relacionados com os estados ligado definidos acima. Como consequência disso, a existência de estado não ligados indica a presença de outros tipos de pontos espectrais no espectro de A. A relação entre autovetores (e, portanto, espectro puro ponto) e estados ligados em $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ é estabelecida pelo seguinte teorema:

Teorema 50 *(RAGE) Seja $H \in \mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}^d))$ autoadjunto. Então $H_{lig,H}$ é o menor subespaço completo de $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ que contém todos os autovetores de H.*

O teorema acima tem a importante consequência de converter o problema da existência de estados ligados em um problema de existência de espectro puro ponto. Portanto, é útil estudar de modo mais preciso propriedade gerais deste tipo espectral.

Dizemos que $z \in \sigma(A)$ é um ponto espectral isolado de $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ se existe $\varepsilon > 0$ tal que, para todo $z' \in \sigma(A)$, $z' \neq z$, $|z' - z| \geq \varepsilon$. Mesmo em dimensão infinita pontos isolados do espectro de um operador autoadjunto são sempre autovalores:

Teorema 51 (pontos espectrais isolados) *Seja $z \in \sigma(A)$ um ponto espectral isolado de $A = A^*$. Então $z \in \sigma_{pp}(A)$.*

A consideração acima conduz a introdução da seguinte categoria de autovalores:

Definição 52 (espectro discreto e essencial) *Dizemos que $z \in \sigma_{pp}(A)$ é autovalor "discreto" de $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ se este possui degenerecência* finita *e é um ponto espectral isolado. $\sigma_d(A) \subset \sigma_{pp}(A)$ denota o conjunto dos autovalores discreto de A e $\sigma_{ess}(A) := \sigma(A) \backslash \sigma_d(A)$ seu complemento. $\sigma_d(A) \subset \sigma(A)$ e $\sigma_{ess}(A) \subset \sigma(A)$ são chamados espectro discreto e essencial de A, respectivamente.*

A seguir caracterizaremos a totalidade do espectro através da noção de "autovalores generalizados".

Definição 53 (autovalores generalizados) *Seja $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Dizemos que $z \in \mathbb{C}$ é "autovalor generalizado" de A se existe uma sequencia de vetores $\varphi_n \in \mathcal{H}$, $\|\varphi_n\| = 1$, tal que*

$$\lim_{n\to\infty} (A(\varphi_n) - z\varphi_n) = 0 \ .$$

Neste caso a sequência φ_n é chamada sequência de autovetores aproximantes de A associada ao autovalor generalizado z.

Note que se $z \in \mathbb{C}$ é autovalor (comum) de A, então também é autovalor generalizado no sentido acima. Para ver isso considere a sequência constante $\varphi_n = \varphi$, onde é um autovetor associado ao autovalor z. Não é difícil mostrar que todo autovalor generalizado é um ponto espectral do operador considerado. Um fato útil na análise do espectro de operadores é que a conversa desta afirmação também é verdadeira:

Teorema 54 *Seja $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. $z \in \sigma(A)$ se e somente se for autovalor generalizado de A.*

Assim como o espectro puro ponto está associado a sequências constantes de autovetores, é também possível associar o espectro essencial à um tipo particular de sequências de autovalores aproximantes:

Definição 55 (sequências de Weyl) *Sequências $\varphi_n \in \mathcal{H}$, $\|\varphi_n\| = 1$, com $\varphi_n \perp \varphi_m$ para todo $n \neq m$, serão chamadas aqui "sequências de Weyl".*

Teorema 56 *Seja $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. $z \in \sigma_{ess}(A)$ se e somente se existe uma sequência de Weyl $\varphi_n \in \mathcal{H}$ tal que*

$$\lim_{n\to\infty} (A(\varphi_n) - z\varphi_n) = 0 \ .$$

Uma consequência direta, porém muito útil, dos resultados discutidos acima, é que os espectros puro ponto, essencial e discreto são invariantes com relação à transformações unitárias:

Teorema 57 *Sejam $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ dois espaços de Hilbert e $U : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$ uma transformação unitária. Seja $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$. Então*

$$\begin{aligned} \sigma(A) &= \sigma(U^{-1} \circ A \circ U), \quad \sigma_{pp}(A) = \sigma_{pp}(U^{-1} \circ A \circ U), \\ \sigma_d(A) &= \sigma_d(U^{-1} \circ A \circ U), \quad \sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(U^{-1} \circ A \circ U). \end{aligned}$$

Usando o teorema acima e a transformação unitária $\mathcal{F} : L^2(B_d) \to \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ (dada pela transformada de Fourier) assim como o Lema 30 podemos determinar o espectro, o espectro essencial e o discreto do Laplaciano discreto $\Delta_d \in \mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}^d))$:

Exercício 58 *Mostre que*

$$\sigma_{ess}(\Delta_d) = \sigma(\Delta_d) = [-2d, 0] \ .$$

Em particular $\sigma_d(\Delta_d) = \emptyset$.

Para operadores mais complicados do que Δ_d é geralmente muito difícil determinar o espectro através do estudo de sequências de autovetores aproximantes explícitas. Neste caso se faz uso de alguma teoria, adequada ao opertador em questão, de perturbação do espectro. A seguir apresentamos uma destas teorias, a qual é útil no estudo do espectro de Operadores de Schrödinger discretos $H = -\frac{1}{2}\Delta_d + \mathcal{V}$.

2.3 Estabilidade do Espectro Essencial

Definição 59 (operadores de posto finito e compactos) *Seja $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert. Dizemos que o operador $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ é de "posto finito" se o subespaço*

$$\{A(\varphi) \ : \ \varphi \in \mathcal{H}\} \subset \mathcal{H}$$

(espaço imagem de A) tem dimensão finita. Dizemos que $K \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ é um "operador compacto" se existe uma sequência $A_n \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ de operadores de posto finito, tal que

$$\lim_{n\to\infty} \|K - A_n\|_{\mathrm{op}} = 0 \ .$$

Ou seja, se, no sentido da norma de operador, K está arbitrariamente próximo de um operador de posto finito.

Um exemplo importante de operadores compactos em $\mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}^d))$ são os operadores de energia potencial associados a potencias que decaem no infinito:

Exercício 60 *Seja $\mathcal{V}$ uma função $\mathbb{Z}^d \to \mathbb{R}$ tal que $\mathcal{V}(x) \to 0$ para $|x| \to \infty$. Mostre que o operador correspondente $\mathcal{V} \in \mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}^d))$ é compacto.*

Perturbações que correspondem a operadores compactos têm a propriedade de não alterarem o espectro essencial:

Teorema 61 *Seja $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ um operador qualquer e $K \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ um operador compacto. Então tem-se:*

$$\sigma_{ess}(A + K) = \sigma_{ess}(A) \ .$$

O teorema acima nos permite determinar facilmente o espectro essencial de operadores de Schrödinger discretos:

Teorema 62 *Seja $\mathcal{V}$ uma função $\mathbb{Z}^d \to \mathbb{R}$ tal que $\mathcal{V}(x) \to 0$ para $|x| \to \infty$. Então*

$$\sigma_{ess}\left(-\frac{1}{2}\Delta_d + \mathcal{V}\right) = \sigma_{ess}\left(-\frac{1}{2}\Delta_d\right) = [0, d] \ .$$

A seguir utilizaremos o resultado acima para provar a existência de estados ligados para operadores de Schrödinger discretos. Note que como o Laplaciano discreto Δ_d é um operador autoadjunto e $\sigma(\Delta_d) = [-2d, 0]$, pelo Teorema 48, temos $\|\Delta_d\|_{\mathrm{op}} = 2d$. Suponha que

$$\sup_{x\in\mathbb{Z}^d} |\mathcal{V}(x)| > 2d \ .$$

Então $\|\mathcal{V}\|_{\mathrm{op}} > 2d$. Seja o operador de Schrödinger discreto

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_d + \mathcal{V} \ .$$

Pela desigualdade triangular para a norma de operador, temos:

$$2d < \|\mathcal{V}\|_{\mathrm{op}} = \left\| H + \frac{1}{2}\Delta_d \right\|_{\mathrm{op}} \leq \|H\|_{\mathrm{op}} + \frac{1}{2}\|\Delta_d\|_{\mathrm{op}} = \|H\|_{\mathrm{op}} + d \ .$$

Logo,

$$\|H\|_{\mathrm{op}} > d$$

e, como H é autoadjunto, pelo Teorema 48, seu raio espctral é superior a d. Suponha que $\mathcal{V}(x) \to 0$ quando $|x| \to \infty$. Neste caso, como discutido acima,

$$\sigma_{ess}(H) = [0, d] \ .$$

Como o raio espectral de H é superior ao raio do espectro essencial $\sigma_{ess}(H)$ (que é exatamente d), isso implica que existem pontos espectrais discretos em $\sigma(H)$. Como H é autoadjunto, tais pontos são autovalores de H. Portanto, pelo Teorema RAGE, temos:

Teorema 63 *Suponha que* $\mathcal{V}(x) \to 0$ *quando* $|x| \to \infty$ *e* $\sup_{x\in\mathbb{Z}^d} |\mathcal{V}(x)| > 2d$. *Então o espaço* $H_{lig,H}$ *de estados logados de* H *é não trivial.*

Note que no teorema acima não foi necessário supor que o potencial seja atrativo (ou seja, $\mathcal{V} \leq 0$). Para que o operador de Schrödinger discreto possua estados ligados basta que o potencial $\mathcal{V}$ seja forte o suficiente, mesmo que este seja repulsivo (ou seja, $\mathcal{V} \geq 0$).

Na próxima seção discutiremos o princípio de “Birman-Schwinger”, o qual permite um estudo mais acurado do espectro discreto de operadores de Schrödinger discretos. Em particular veremos que há uma grande diferença de comportamendos entre os casos de dimensão inferior a três e maior ou igual a três.

3 Espectro Discreto de Operadores de Schrödinger Discretos – Princípio de Birman-Schwinger

Teorema 64 (Birman-Schwinger) *Seja $\mathcal{V} \geq 0$ um potencial tal que $\mathcal{V}(x) \to 0$ quando $|x| \to \infty$ e seja os operadores de Schrödinger discretos H_- (caso atrativo) e H_+ (caso repulsivo) definidos por*

$$H_- := -\frac{1}{2}\Delta_d - \mathcal{V}, \quad H_+ := -\frac{1}{2}\Delta_d + \mathcal{V} \ .$$

(i) $s < 0$ pertence ao espectro discreto de H_- se e somente se 1 é um autovalor do operador de Birman

$$B_-(s) := \mathcal{V}^{1/2} \circ \left(-\frac{1}{2}\Delta_d - s\right)^{-1} \circ \mathcal{V}^{1/2} \ .$$

(ii) $s > d$ pertence ao espectro discreto de H_- se e somente se 1 é um autovalor do operador de Birman

$$B_+(s) := \mathcal{V}^{1/2} \circ \left(s + \frac{1}{2}\Delta_d\right)^{-1} \circ \mathcal{V}^{1/2} \ .$$

Note que todo $s < 0$ e todo $s > d$ pertence ao conjunto resolvente de $-\frac{1}{2}\Delta_d$. Portanto os operadores

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_d - s\right)^{-1}, \quad s < 0, \quad \text{e} \quad \left(s + \frac{1}{2}\Delta_d\right)^{-1}, \quad s > d,$$

existem e são limitados.

Defina a função $\delta_0 : \mathbb{Z}^d \to \mathbb{R}$ por $\delta_0(0) := 1$ e $\delta_0(x) := 0$ para $x \neq 0$. Para dar um exemplo simples, porém importante, do uso do teorema de Birman–Schwinger, consideréremos o caso repulsivo com $\mathcal{V} = \lambda\delta_0$, $\lambda > 0$, em toda dimensão $d \in \mathbb{N}$. Note que neste caso $\mathcal{V}^{1/2} = \sqrt{\lambda}\delta_0$. Com isso, 1 é valor próprio de $B_+(s)$, $s > d$, se e somente se

$$B_+(s)(\delta_0) = \delta_0 \ .$$

Observe que a função δ_0 é um elemento de $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$. Usando-se a tranformada de Fourier na equação acima, temos que 1 é valor próprio de $B_+(s)$, $s > d$, se e somente se

$$\Xi(s) := \frac{\lambda}{(2\pi)^d} \int_{B_d} \frac{1}{s + (\cos(p_1) - 1) + \cdots + (\cos(p_d) - 1)} dp_1 \cdots dp_d = 1 \ .$$

Note agora que Ξ é uma função contínua e decrescente no intervalo (d, ∞), tal que

$$\lim_{s\to\infty} \Xi(s) = 0 \ .$$

Portanto, pelo princípio de Birman–Schwinger, o operador de Schrödinger discreto

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_d + \lambda\delta_0$$

possui espectro discreto (e, portanto, estados ligados repulsivos) se

$$\Xi(s) > 1 \quad \text{para um } s > d \ .$$

Com o critério acima para a existência de espectro discreto, o seguinte exercício mostra que há uma grande diferença de comportamento entre operadores de Schrödinger em dimensão até 2 e superior a 2:

Exercício 65 *(i) Mostre que se $\lambda > 0$ e $d = 1, 2$ (dimensão da rede cristalina), então $\lim_{s\downarrow d} \Xi(s) = \infty$.*

(ii) Mostre que se $d > 2$ o limite $\lim_{s\downarrow d} \Xi(s) =: \Xi(0)$ é finito.

Com as observações acima concluimos:

Teorema 66 *Seja, para $\lambda > 0$,*

$$-\frac{1}{2}\Delta_d + \lambda\delta_0 \in \mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}^d)) \ .$$

(i) Se $d = 1, 2$, então, para todo $\lambda > 0$, o espaço de estados ligados $\mathcal{H}_{lig,H} \subset \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ é não trivial.

(iii) Se $d > 3$, então, para todo $\lambda > \lambda_0$, onde

$$\lambda_0 := \left(\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{B_d} \frac{1}{s + (\cos(p_1) - 1) + \cdots + (\cos(p_d) - 1)} dp_1 \cdots dp_d \right)^{-1} > 0 \ ,$$

o espaço de estados ligados $\mathcal{H}_{lig,H} \subset \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ é não trivial.