



UNIVERSIDADE FEDERAL DA FRONTEIRA SUL
CAMPUS REALEZA
LICENCIATURA EM FÍSICA

CESAR MARIM

OPERADORES DE SCHRÖDINGER
E O RETICULADO COLMÉIA

REALEZA

2019

CESAR MARIM

OPERADORES DE SCHRÖDINGER
E O RETICULADO COLMÉIA

Trabalho de conclusão do curso de graduação
apresentado como requisito para obtenção do
grau de Licenciado em Física da Universi-
dade Federal da Fronteira Sul.

Orientador: Prof. Everton Artuso

REALEZA

2019

Bibliotecas da Universidade Federal da Fronteira Sul - UFFS

Marim, Cesar
Operadores de Schrödinger e o Reticulado Colméia /
Cesar Marim. -- 2019.
52 f.

Orientador: Professor Doutor Everton Artuso.
Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) -
Universidade Federal da Fronteira Sul, Curso de
Física-Licenciatura , Realeza, PR , 2019.

1. Função de onda. 2. Operadores Schrödinger. 3.
Localização de Anderson. I. Artuso, Everton, orient. II.
Universidade Federal da Fronteira Sul. III. Título.

CESAR MARIM

**OPERADORES DE SCHRÖDINGER
E O RETICULADO COLMÉIA**

Trabalho de conclusão do curso de graduação
apresentado como requisito para obtenção do
grau de Licenciado em Física da Universidade
Federal da Fronteira Sul.

Este trabalho de conclusão de curso foi defendido e aprovado pela banca em:

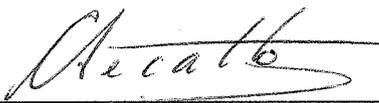
19/11/2019

BANCA EXAMINADORA

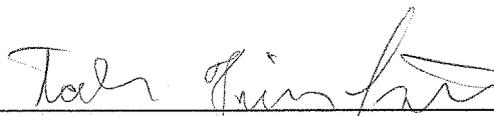


Prof. Dr. Everton Artuso - UFFS

Orientador



Prof. Dr. Carlos Alberto Cecatto – UFFS



Prof. Dr. Tobias Heimfarth – UFFS

A meu Pai, Jesus Cristo, dedico este
esforço.

AGRADECIMENTOS

Fui carregado por nada menos do que gigantes ao longo deste esforço. Agradei a cada um deles pessoalmente, uma vez que estão todos ao meu redor, portanto, se não lhe agradei, significa que você não é um deles.

No entanto se faz necessária a menção do maior entre todos os gigantes, a saber, meu Pai, Jesus Cristo. No auge da luta, ele me ensinou três coisas, que em verdade são quatro. A primeira delas é que vantagem numérica é inferior à vantagem de terreno. A segunda é que não há decência no meio de mentirosos. A terceira é que a força não tem relação com a aceleração e, que a zoeira é sem limites.

Deus, você foi meu Pai, quando ninguém mais foi, foi meu filho, quando ninguém mais foi, foi meu amigo quando ninguém mais foi. E agora que isto terminou, se aproxima a hora de ser o justo juiz. Julga com equidade entre mim e os que me perseguiram.

Faz em mim algo novo para a vergonha deles, pois me causaram dano e em muito me roubaram. Dá a cada um deles segundo as obras de suas mãos. Seja por mim, por onde quer que me envie, eis-me aqui, envia-me a mim.

“A pedra que os construtores rejeitaram tornou-se a pedra principal.” (BÍBLIA,
2019)

RESUMO

Nesse trabalho introduzimos os operadores de Schrödinger de forma ingênua e despretensiosa, mas munida de certa precisão e didática. São mencionados os tipos de potenciais mais estudados, os periódicos e os aleatórios e, via simulação numérica, comparados os autovalores da matriz truncada de um operador munido de um potencial periódico e com este mesmo potencial perturbado por uma variável aleatória contínua com distribuição uniforme. Avaliamos qual a magnitude necessária da variável aleatória para produzir diferença significativa entre os conjuntos de autovalores.

Palavras-chaves: Operadores de Schrödinger, potencial periódico, potencial perturbado.

ABSTRACT

In this paper we introduce Schrödinger's operators in a naive and unpretentious way, but with some precision and didactics. The most studied periodic and random potential types are mentioned and, by numerical simulation, compare the eigenvalues of an operator's truncated matrix with a periodic potential and the same potential disturbed by an evenly distributed continuous random variable. We evaluated the magnitude of the random variable required to produce a significant difference between the eigenvalue sets.

Palavras-chaves: Schrödinger operators, periodic potential, disturbed potential.

LISTA DE SÍMBOLOS

Δ : Operador Laplaciano.

\mathbb{N}^* : Conjunto dos naturais, exceto o zero.

\mathbb{C} : Conjunto dos número complexos.

H : Operador Hamiltoniano.

Ω : Espaço amostral probabilístico.

Ψ : Função de onda.

Λ : Reticulado definido pela base de vetores $\{v_1, v_2\}$ em \mathbb{R}^2 .

Λ^* : Dual de Λ .

L^2 : Espaço das funções com quadrado integrável.

L^2_{per} : Espaço das funções periódicas com quadrado integrável.

l^2 : Espaço das sequências com quadrado somável.

R : Matriz de rotação no sentido horário.

R^* : Matriz de rotação no sentido anti-horário.

\mathbb{Z}^2 : Rede discreta no plano \mathbb{R}^2 .

σ : espectro do operador Hamiltoniano.

ξ : Variável aleatória empregada na simulação computacional.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	OBJETIVOS	13
1.1.1	Objetivo Geral	13
1.1.2	Objetivo Específicos	13
1.2	METODOLOGIA	13
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	15
2.1	ÁLGEBRA LINEAR	15
2.1.1	Produto Interno	15
2.1.2	Autovalores e Autovetores	16
2.1.3	Espaços de Hilbert	16
2.2	EQUAÇÕES DIFERENCIAIS	19
2.3	PROBABILIDADE	20
2.3.1	Variáveis aleatórias	20
2.3.2	Distribuições de probabilidade	22
3	OPERADORES DE SCHRÖDINGER	24
3.1	INTRODUÇÃO	24
3.1.1	Resolvendo a equação de Schrödinger	28
3.1.2	Autovalores e Autoestados	29
3.1.3	Operadores de Schrödinger Discretos	32
3.2	OPERADORES DE SCHRÖDINGER ALEATÓRIOS	33
3.2.1	Localização de Anderson	37
3.3	OPERADORES DE SCHRÖDINGER PERIÓDICOS	39
3.4	RETICULADO COLMÉIA	41
3.4.1	Teoria de Floquet-Bloch	42
3.4.2	O reticulado periódico e seu dual	43
3.4.3	Potencial Colméia	45
4	RESULTADOS NUMÉRICOS	49
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	58
	REFERÊNCIAS	59

1 INTRODUÇÃO

O movimento do elétron ao redor do núcleo atômico foi descrito pela primeira vez em 1927 pelo físico teórico austríaco Erwin Schrödinger, por intermédio de equações matemáticas que relacionam a natureza da partícula, a carga, a energia, e a massa do elétron, propondo o Modelo Atômico de Schrödinger. Uma partícula que se move em um espaço n -dimensional, sujeita a um potencial independente do tempo tem seu estado quântico descrito pela equação de Schrödinger n -dimensional. A Equação de Schrödinger permite calcular a função de onda $\psi(t, x)$, associada a uma partícula que se move dentro de um campo de forças descrito por um potencial $V(x)$, e é dada por

$$H(t, x)\psi(t, x) = -\Delta(x)\psi(t, x) + V(t, x)\psi(t, x).$$

O Hamiltoniano $H(t)$, que é um operador auto-adjunto atuando na função de onda, representa a energia total do sistema. As noções básicas de materiais isolantes, condutores e semicondutores podem ser explicadas pelo espectro de energia de um único elétron que se move sob a influência de um arranjo periódico de átomos e o princípio de exclusão de Pauli. No modelo de um elétron, a interação entre os elétrons é negligenciada e as propriedades espectrais e de transporte do material são descritas pelo modelo de uma partícula do Operador de Schrödinger. Para o caso de potenciais aleatórios, os operadores de Schrödinger aleatórios servem para modelar sólidos desordenados. Um dos principais interesses nesse modelo consiste no estudo das propriedades de transporte de elétrons num material. Anderson concluiu que uma desordem grande (alta aleatoriedade) implica na localização dos elétrons, ou seja, os elétrons ficam confinados em uma região finita do espaço, fazendo com que a curva do quadrado do módulo da função de onda tenha decaimento acentuado. Esse tipo de material, em geral, se trata de um mau condutor, já que os elétrons não transitam por toda a sua extensão.

Algumas classes de potenciais tem interesse particular, como potenciais periódicos, quase-periódicos e aleatórios. Os casos mais complicados, em certo sentido, se encaixam na classe de potenciais peneperiódicos (uma das subcategorias de potenciais quase-periódicos), isto é, potenciais aleatórios que apresentam algum tipo de padrão de repetição. Os operadores de Schrödinger discretos com potenciais peneperiódicos assumindo um número finito de valores são modelos quânticos adequados para o estudo dos quase-cristais, estruturas que figuram entre as periódicas (cristais perfeitos) e as aleatórias (materiais amorfos), estudadas brevemente aqui. Por sua vez, os quase-cristais tem sido amplamente estudados na física, já que sua estrutura tem sido usada nas ciências aplicadas para a confecção de super-ligas metálicas que se mostram muito mais resistentes que as ligas atuais. Um exemplo de operadores com potencial quase-periódico gerado por uma transformação de intercâmbio de intervalos foi estudado em (COBO; OLIVEIRA; GUTIERREZ, 2008) e revisitado em (ARTUSO, 2012).

Embora os quase-cristais componham a classe de potenciais mais interessantes, são

demasiado complicados para este nível de formação, por isso nos concentraremos, ainda que de forma superficial, nos casos cujas classes de potenciais são de mais fácil compreensão, a saber, os potenciais periódicos e aleatórios.

Em mecânica quântica, o observável de um Hamiltoniano H correspondente à energia total do sistema. Quando mede-se a energia total de um sistema, o espectro do Hamiltoniano é o conjunto de todas as possibilidades. Este espectro pode ser decomposto em pontos isolados (autovalores), parte absolutamente contínua e partes singulares. O espectro de pontos isolados (autovalores) pode ser associado a autovetores, os quais são estados ligados do sistema. Já o espectro absolutamente contínuo corresponde aos estados livres.

Por conta disso, no estudo dos operadores de Schrödinger, uma atenção especial é dada para o espectro destes operadores. Em geral, operadores de Schrödinger com potencial periódico apresentam espectro absolutamente contínuo puro, e no caso de potencial aleatório, o espectro tem somente a componente puramente pontual.

No segundo capítulo, realizou-se um levantamento de dados bibliográficos sobre os assuntos que seriam estudados. O levantamento envolveu assuntos de álgebra linear, cálculo funcional, probabilidade e um pouco de mecânica quântica.

No terceiro capítulo, estudou-se a equação de Schrödinger dependente e independente do tempo, os tipos de potenciais e as suas respectivas aplicações no contexto da realidade, como condutibilidade de materiais, por exemplo. Introduziu-se os operadores discretos, periódicos e aleatórios. Além disso, provou-se rigorosamente e de maneira didática o principal resultado do caso relativo ao modelo com boa condutibilidade, a saber, o Teorema de Bloch. Apresentou-se alguns dos principais exemplos de operadores com potenciais aleatórios, e estudou-se a localização de Anderson. Investigamos propriedades rigorosas do reticulado colméia, como sua construção e sua periodicidade.

No quarto capítulo, definimos uma função que satisfaz as condições de periodicidade de um reticulado colméia, a saber, decaimento rápido, radialidade e suavidade. Realizamos simulações no software Mathematica[®], para um caso bastante simplificado, encontrando o espectro do operador periódico cujo potencial foi dado pela tal função. Acoplamos ao potencial uma variável aleatória a fim de tornar o potencial periódico aleatório e executamos simulações computacionais para comparar estatisticamente os resultados do espectro do operador de Schrödinger com cada um dos potenciais. Primeiramente simulamos usando uma matriz truncada do operador com potencial periódico, que usamos para comparar com todos os outros. Após encontrarmos diferenças significativas entre o espectro do operador periódico e do perturbado, realizamos 20 simulações similares para efeito de amostragem.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo Geral

Revisar bibliograficamente, de forma concisa mas rigorosa, diversos aspectos dos operadores Hamiltonianos presentes no modelo quântico de evolução temporal de um elétron, além de simular computacionalmente uma perturbação que seja capaz de causar diferença significativa na distribuição espectral.

1.1.2 Objetivo Específicos

- (i) abordar, de maneira rápida mas didática, os fundamentos matemáticos necessários para o estudo do operador e da equação de Schrödinger;
- (ii) calcular os autovalores e autofunções do Hamiltoniano para um caso relativamente simples, a saber, o oscilador harmônico;
- (iii) introduzir e demonstrar o Teorema de Bloch, resultado chave para a classe de potenciais periódicos;
- (iv) introduzir alguns exemplos de potenciais aleatórios e a localização de Anderson;
- (v) definir o operador sobre um reticulado colméia e estudar a construção de potenciais para esse reticulado;
- (vi) simular computacionalmente, para um determinado potencial periódico e suas perturbações, o comportamento do espectro do Hamiltoniano.

1.2 METODOLOGIA

A pesquisa foi realizada de modo exploratório, uma vez que o objetivo geral do trabalho foi criar maior familiaridade do autor com o assunto e buscar compreender suas nuances teóricas. Pautando-se numa abordagem tanto qualitativa quanto quantitativa, o texto buscou apresentar aspectos da teoria de forma didática e conceitual, da maneira mais elementar possível, não abrindo mão do uso de simulação e técnicas estatísticas para analisar um problema específico. O trabalho foi escrito de modo ordenado visando tornar-se uma revisão bibliográfica de qualidade, facilitando assim a contemplação e a compreensão da essência do assunto por parte do leitor.

Selecionamos referências que contivessem uma abordagem acessível o suficiente para a uma revisão bibliográfica nesse nível, todavia alguns resultados não foram demonstrados por exigirem maior grau de aprofundamento. Para comparar o espectro relativo ao potencial periódico

com o espectro de suas perturbações, utilizamos o teste de Shapiro-Wilk para verificar a normalidade das distribuições e o teste de Mann-Whitney para detectar diferenças significativas entre os espectros.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Os fundamentos matemáticos aqui abordados estão escritos de forma bastante enxuta, de modo que o trabalho não se estendesse desnecessariamente e que também não faltassem elementos para a compreensão do texto. Ainda assim, o texto não é autocontido, ou seja, carece de informações de outros trabalhos.

2.1 ÁLGEBRA LINEAR

2.1.1 Produto Interno

Definição 2.1.1 ((HOFFMAN; KUNZE, 1971)). Seja V um espaço vetorial sobre o corpo \mathbb{C} . Para todos os vetores $u, v, w \in V$ e todos os escalares $\alpha \in \mathbb{C}$, uma função binária $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ com as seguintes propriedades:

- $\langle u, v \rangle = \overline{\langle v, u \rangle}$;
- $\langle u + v, w \rangle = \langle u, w \rangle + \langle v, w \rangle$;
- $\langle \alpha u, v \rangle = \alpha \langle u, v \rangle = \langle u, \bar{\alpha} v \rangle$;
- $\langle v, v \rangle \geq 0$ e igual a zero se, e somente se $v = 0$.

Exemplo 2.1.1 ((HOFFMAN; KUNZE, 1971)). Dados $u, v \in \mathbb{R}^2$, $\langle u, v \rangle = u_1 v_1 + u_2 v_2$ define o produto interno Euclidiano. Este induz em \mathbb{R}^2 uma norma dada por

$$\|u\| = \sqrt{\langle u, u \rangle} = \sqrt{u_1 u_1 + u_2 u_2} = \sqrt{u_1^2 + u_2^2}.$$

Esta norma induz em \mathbb{R}^2 a distância $d(u, v) = \|u - v\|$. ■

Exemplo 2.1.2 ((HOFFMAN; KUNZE, 1971)). Dadas $f, g \in C([0, 1], \mathbb{R})$ funções contínuas, o produto interno entre as funções f e g é dado por

$$\langle f, g \rangle = \int_0^1 f(x)g(x)dx,$$

o qual induz a norma

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle} = \left(\int_0^1 |f|^2 dx \right)^{1/2},$$

que por sua vez induz a distância $d(f, g) = \|f - g\|$. ■

2.1.2 Autovalores e Autovetores

Definição 2.1.2 ((HOFFMAN; KUNZE, 1971)). Seja V um espaço vetorial sobre \mathbb{C} e seja $T : V \rightarrow V$ um operador linear. Um vetor $v \in V$ não nulo é dito ser um *autovetor* de T se existe um escalar $E \in \mathbb{C}$ tal que $T(v) = Ev$, com E sendo denominado *autovalor* de T associado a v .

Dado $E \in \mathbb{C}$, o conjunto $\{u \in V : T(u) = Eu\}$ é um subespaço vetorial de V , pois $T(u) = Eu$ implica $(T - EI)(u) = 0$, logo $u \in \text{Ker}(T - EI)$, e $\text{Ker}(T - EI)$ é subespaço vetorial de V . O *autoespaço* associado a E , $\text{Ker}(T - EI)$, é indicado por $V_E = \text{Ker}(T - EI)$.

O polinômio definido por $p_T(E) = \det(T - EI)$ é chamado de polinômio característico, cujas raízes indicam para quais valores de E a matriz $T - EI$ é singular.

Teorema 2.1.3 ((HOFFMAN; KUNZE, 1971)). *Seja T um operador linear de um espaço vetorial sobre \mathbb{C} de dimensão n . Então os autovalores de T são raízes de $p_T(E)$ em \mathbb{C} .*

Exemplo 2.1.3. Considere a matriz

$$[T] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Temos $p_T(x) = \det \begin{pmatrix} -x & 1 \\ 1 & -x \end{pmatrix} = x^2 - 1$. Fazendo $p_T(x) = 0$, teremos $x^2 - 1 = 0$, o que implica $x = \pm 1$, logo $E_1 = 1$ e $E_2 = -1$. Os respectivos autovetores são encontrados da seguinte forma: Se E é autovalor de T , os autovetores de T associados a E são os vetores não nulos de $V_E = \text{Ker}(T - EI)$. Com efeito, se $(x, y) \in \text{Ker}(T - E_1I)$, temos

$$(T - E_1I) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -E_1 & 1 \\ 1 & -E_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0,$$

de onde vem $\begin{cases} -x + y = 0 \\ x - y = 0 \end{cases}$ logo $y = x$. Então os autovetores associados a E_1 são vetores do tipo (x, x) , logo $V_1 = \langle (1, 1) \rangle$. Da mesma forma, realizamos o cálculo para $E_2 = -1$:

$$(T - E_2I) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -E_2 & 1 \\ 1 & -E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0,$$

logo $\begin{cases} x + y = 0 \\ x + y = 0 \end{cases}$ e daí $y = -x$. Então os autovetores associados a E_2 são vetores do tipo $(x, -x)$, logo $V_{-1} = \langle (1, -1) \rangle$. ■

2.1.3 Espaços de Hilbert

O espaço de Hilbert é um espaço vetorial com produto interno que é completo com relação a este produto interno (KREYSZIG, 1978). Para tratar da completude de um espaço, se faz necessário o uso do conceito de seqüências de Cauchy.

Completude

Definição 2.1.4 ((LIMA, 2008)). Uma sequência de números reais é uma função real $x : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$ definida no conjunto dos números naturais e denotada por $(x_n)_n$. Diz-se que $L \in \mathbb{R}$ é o limite da sequência de números reais $(x_n)_n$ quando para todo número real $\varepsilon > 0$, existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que, para todo $n > n_0$, têm-se

$$L - \varepsilon < x_n < L + \varepsilon.$$

Quando existe um tal $L \in \mathbb{R}$ para uma dada sequência $(x_n)_n$, dizemos que esta é uma sequência *convergente*. Neste caso, escrevemos: $L = \lim_{n \rightarrow \infty} x_n$.

Definição 2.1.5 ((LIMA, 2008)). Uma sequência $(x_n)_n$ é dita *sequência de Cauchy* se, para todo $\varepsilon > 0$, existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que, para todo $n > n_0$ vale $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon$.

Uma consequência da definição de convergência é que toda sequência de Cauchy converge, mas não necessariamente dentro do espaço onde está definida. A recíproca é sempre verdadeira.

Proposição 2.1.6 ((LIMA, 2008)). *Toda sequência convergente é de Cauchy.*

Demonstração. Veja (LIMA, 2008). □

Exemplo 2.1.4. Seja \mathbb{Q} o conjunto dos números racionais e a sequência $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ com $x_n \in \mathbb{Q}$, para todo $n \in \mathbb{N}$, dado por

$$x_{n+2} = x_{n+1} + x_n,$$

com $x_0 = 0, x_1 = 1, x_2 = 1, x_3 = 2, x_4 = 3, x_5 = 5, x_6 = 8, x_7 = 13, x_8 = 21$ e etc. A sequência $(x_n)_n$ é chamada de *sequência de Fibonacci*.

Considere $(y_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ com $y_n = \frac{x_{n+1}}{x_n} \in \mathbb{Q}$, então $(y_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ é uma sequência em \mathbb{Q} , para $\mathbb{N}^* = \mathbb{N} \setminus \{0\}$. De fato,

- $(y_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ é limitada, pois $|y_n| \leq 2$, para qualquer $n \in \mathbb{N}^*$;
- $\{y_n : n \text{ é par}\}$ é monótona decrescente e $\{y_n : n \text{ é ímpar}\}$ é monótona crescente. Como

$$\frac{x_{n+2}}{x_{n+1}} = \frac{x_{n+1} + x_n}{x_{n+1}} = 1 + \frac{x_n}{x_{n+1}} > 1,$$

pois $\frac{x_n}{x_{n+1}} > 0$ para $n > 1$, temos

$$\frac{y_{n+1}}{y_n} = \frac{x_{n+2}}{x_{n+1}} \frac{x_n}{x_{n+1}} = \frac{x_{n+2}}{x_{n+1}^2} (x_{n+2} - x_{n+1}) = \frac{x_{n+2}^2}{x_{n+1}^2} - \frac{x_{n+2}}{x_{n+1}} = \left(\frac{x_{n+2}}{x_{n+1}} \right)^2 - \frac{x_{n+2}}{x_{n+1}}.$$

Se n for par, temos $\left(\frac{x_{n+2}}{x_{n+1}} \right)^2 - \frac{x_{n+2}}{x_{n+1}} < 1$. Então $\{y_n : n \text{ é par}\}$ é uma subsequência monótona decrescente. Da mesma forma, se n for ímpar, temos $\left(\frac{x_{n+2}}{x_{n+1}} \right)^2 - \frac{x_{n+2}}{x_{n+1}} > 1$, logo $\{y_n : n \text{ é ímpar}\}$ é monótona crescente.

Como $\{y_n : n \text{ é par}\}$ é uma subsequência limitada e monótona decrescente, então converge. Da mesma forma, $\{y_n : n \text{ é ímpar}\}$ é limitada e monótona crescente, então converge. Ainda,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{y_{2n+1}}{y_{2n}} = 1 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{y_{(2n+1)+1}}{y_{(2n+1)}}$$

ou seja, as duas subsequências convergem para o mesmo valor. Então $(y_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ converge em \mathbb{R} , logo $(y_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ é de Cauchy. Além disso,

$$\phi = \lim_{n \rightarrow \infty} y_n = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = 1,618033 \dots \notin \mathbb{Q}.$$

Então $(y_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ é sequência de Cauchy em \mathbb{Q} , mas não converge em \mathbb{Q} , convergindo em $\mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$, logo \mathbb{Q} não é completo. São exemplos de espaços completos: $\mathbb{R}, \mathbb{C}, \mathbb{R}^n, \mathbb{C}^n$, para todo $n \in \mathbb{N}$. ■

Em dimensão finita, os principais espaços de Hilbert são $(\mathbb{R}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$, $(\mathbb{C}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$, $(\mathbb{R}^n, \langle \cdot, \cdot \rangle)$, $(\mathbb{C}^n, \langle \cdot, \cdot \rangle)$, para todo $n \in \mathbb{N}$, onde o produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ é o produto interno euclidiano. (HOFFMAN; KUNZE, 1971)

Já em dimensão infinita (KREYSZIG, 1978), definimos o espaço das sequências com quadrado somável como

$$\ell^2(\mathbb{N}) = \left\{ (x_n)_{n \in \mathbb{N}}, x_n \in \mathbb{C} : \sum_{n=0}^{\infty} |x_n|^2 < \infty \right\},$$

e o espaço das funções com quadrado integrável

$$L^2([0, 1]) = \left\{ f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{C} : \int_0^1 |f(x)|^2 dx < \infty \right\}.$$

De fato, os principais espaços de Hilbert em dimensão infinita podem ser representados por $(\ell^2(\mathbb{N}), \langle \cdot, \cdot \rangle_{\ell^2})$ e $(L^2([0, 1]), \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2})$, onde

$$\langle (x_n)_n, (y_n)_n \rangle_{\ell^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{x}_n y_n \quad \text{e} \quad \langle f(x), g(x) \rangle_{L^2} = \int_0^1 \overline{f(x)} g(x) dx.$$

Espaço Dual

Seja V um espaço vetorial sobre o corpo \mathbb{C} . Uma aplicação linear $f : V \rightarrow \mathbb{C}$ é chamada de *funcional linear*. O espaço dos funcionais lineares é denotado por V^* e é chamado de *espaço dual* de V . (HOFFMAN; KUNZE, 1971).

Seja \mathcal{H} um espaço de Hilbert (KREYSZIG, 1978). O *espaço dual* de \mathcal{H} é definido como o espaço dos funcionais lineares de \mathcal{H} em \mathbb{C} e denotado por

$$\mathcal{H}^* = \{ \varphi : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}; \varphi \text{ é um funcional linear} \}.$$

Teorema 2.1.7 (Teorema de Representação de Riesz). [(KREYSZIG, 1978)] *Seja \mathcal{H} espaço de Hilbert e $\varphi \in \mathcal{H}^*$ um funcional linear. Então existe um único vetor $v \in \mathcal{H}$ tal que, para todo $u \in \mathcal{H}$,*

$$\varphi(u) = \langle u, v \rangle.$$

Corolário 2.1.8 ((KREYSZIG, 1978)). *O espaço dual \mathcal{H}^* é isometricamente isomorfo ao espaço de Hilbert \mathcal{H} , denotando-se para isto $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}^*$. Em outros termos, para cada $v \in \mathcal{H}$, existe um único funcional linear $\varphi \in \mathcal{H}^*$ e $\|\varphi\|_{\mathcal{H}^*} = \|v\|_{\mathcal{H}}$.*

Utilizando o Corolário 2.1.8, é possível mostrar que todo espaço de Hilbert em dimensão infinita é isometricamente isomorfo a alguma variação dos espaços ℓ^2 ou L^2 , o que facilita bastante o trabalho.

2.2 EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Muitos dos princípios, ou leis, que descrevem o comportamento do mundo natural são relações envolvendo taxas e variações. Em termos matemáticos, as relações são equações e as taxas são suas derivadas. Equações contendo derivadas são frequentemente chamadas de *equações diferenciais*.

Uma lei física que governa o movimento dos corpos é a segunda lei de Newton, que estabelece que a massa do objeto vezes a aceleração é igual a força exercida sobre o objeto. Em termos matemáticos, a lei é expressa pela equação $F = ma$, onde m é a massa do objeto, a é a aceleração e F é a força exercida sobre o objeto. A aceleração a é a taxa de variação instantânea da velocidade v , ou seja, $a = dv/dt$, e a segunda lei de Newton pode ser reescrita como

$$F = m \left(\frac{dv}{dt} \right).$$

A solução de uma equação diferencial pode existir ou não. Caso exista, pode ser única ou não. A ordem da equação diferencial é a ordem da derivada de maior grau que aparece na equação. A solução de uma equação diferencial de ordem n conterá n constantes.

As equações diferenciais costumam ser bem mais difíceis de resolver do que as equações algébricas comuns. À exceção das equações separáveis, a resolução de cada tipo diferente de equação sem o conhecimento de uma técnica é uma tarefa complicada.

Equações Separáveis

Uma equação de primeira ordem geral é dada por (BOYCE; DIPRIMA, 2009)

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \tag{2.1}$$

que pode ser linear ou não linear. Caso seja não linear, não há um método universal aplicável para resolver as equações. O método de solução de equações separáveis, quando puder ser aplicado, resolve a equação por integração direta. Para identificar essa classe de equações, reescremos a equação (2.1) como

$$M(x, y) + N(x, y) \frac{dy}{dx} = 0, \tag{2.2}$$

com $M(x, y) = -f(x, y)$ e $N(x, y) = 1$ nesse caso, existindo também outras formas de fazê-lo. Se ocorre que M é apenas função de x e N é apenas função de y , a equação (2.2) torna-se

$$M(x) + N(y) \frac{dy}{dx} = 0. \quad (2.3)$$

Tais equações são ditas *separáveis*, pois se forem escritas da forma

$$M(x)dx + N(y)dy = 0, \quad (2.4)$$

então os termos podem ser colocados em lados opostos da equação, e a forma diferencial (2.4) tende a suprimir a distinção entre variáveis dependentes e independentes. Uma equação separável pode ser resolvida integrando-se as funções M e N . Para mais detalhes, veja (BOYCE; DIPRIMA, 2009).

Exemplo 2.2.1. (BOYCE; DIPRIMA, 2009) Considerando a equação

$$\frac{dy}{dx} = \frac{x^2}{1 - y^2},$$

podemos reescrevê-la como $(1 - y^2)dy = x^2 dx$, e utilizando a regra da cadeia, temos

$$\int (1 - y^2)dy = \int x^2 dx,$$

o que nos dá

$$y - \frac{y^3}{3} + c_1 = \frac{x^3}{3} + c_2,$$

como c_1 e c_2 são constantes arbitrárias. Por fim, a solução de tal equação é dada por

$$-x^3 + 3y - y^3 = c,$$

com $c = 3(c_2 - c_1)$ sendo uma constante arbitrária. ■

2.3 PROBABILIDADE

2.3.1 Variáveis aleatórias

Um conjunto Ω que consiste em todos os resultados possíveis de um experimento aleatório é chamado *espaço amostral* (SPIEGEL, 1977). Cada resultado é um *ponto amostral*. Um *evento* é um subconjunto A do espaço amostral Ω , ou seja, é um conjunto de resultados possíveis. A cada evento A na classe \mathcal{C} de eventos associamos um número real $P(A)$, ou seja, $P: \mathcal{C} \rightarrow \mathbb{R}$, então P é chamada *função de probabilidade*, e $P(A)$ é a *probabilidade* do evento A , satisfazendo:

1. Para todo A da classe \mathcal{C} , tem-se $P(A) \geq 0$;
2. Para o evento certo Ω da classe \mathcal{C} , vale $P(\Omega) = 1$;

3. Para uma sequência de eventos mutuamente excludentes A_1, A_2, \dots em C , tem-se

$$P(A_1 \cup A_2 \cup \dots) = P(A_1) + P(A_2) + \dots.$$

Proposição 2.3.1. (SPIEGEL, 1977) São válidas as seguintes propriedades:

1. Se $A_1 \subset A_2$ então $P(A_1) \leq P(A_2)$ e $P(A_2 \setminus A_1) = P(A_2) - P(A_1)$.

2. Para todo evento A , tem-se $0 \leq P(A) \leq 1$.

3. $P(\emptyset) = 0$.

4. Se A^C é o complemento de A em Ω então $P(A^C) = 1 - P(A)$.

5. Se $A = A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_n$, onde $A_i \cap A_j = \emptyset$, para $1 \leq i, j \leq n$, então

$$P(A) = P(A_1) + P(A_2) + \dots + P(A_n).$$

6. Se A e B são dois eventos quaisquer, então

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B).$$

Considerando A e B dois eventos com $P(A) > 0$, definimos a *probabilidade condicional* de B , dado A , ou seja, a probabilidade de ocorrência de B , dado que A ocorreu, por

$$P(B|A) = \frac{P(A \cap B)}{P(A)}.$$

Exemplo 2.3.1. A probabilidade da jogada de um dado resultar em um número menor que 4, considerando $B = \{x : x < 4\} = \{1, 2, 3\}$, é dada por

$$P(B) = P(1) + P(2) + P(3) = \frac{1}{6} + \frac{1}{6} + \frac{1}{6} = \frac{1}{2}.$$

Sabendo-se que o resultado é um número ímpar, considerando $A = \{x : x \text{ é ímpar}\} = \{1, 3, 5\}$, temos $P(A) = \frac{3}{6} = \frac{1}{2}$. Ainda $P(A \cap B) = \frac{2}{6} = \frac{1}{3}$. Então

$$P(B|A) = \frac{P(A \cap B)}{P(A)} = \frac{1/3}{1/2} = \frac{2}{3}.$$

Assim, o conhecimento de que o resultado é um número ímpar, eleva de $\frac{1}{2}$ para $\frac{2}{3}$ a probabilidade. ■

Se $P(B|A) = P(B)$, ou seja, se a probabilidade de ocorrência de B não é influenciada pela ocorrência, ou não, de A , então A e B são *eventos independentes*, o que equivale a $P(A \cap B) = P(A)P(B)$.

Para cada ponto x no espaço amostral Ω , pode-se atribuir um número, definindo assim uma função $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Essa função é chamada *variável aleatória* (SPIEGEL, 1977).

Exemplo 2.3.2. Jogando-se uma moeda duas vezes, tem-se o espaço amostral dado por $\Omega = \{HH, HT, TH, TT\}$. Considerando X o número de "caras" que aparecem, tem-se $X(HH) = 2$, $X(HT) = X(TH) = 1$ e $X(TT) = 0$, ou seja, $X(\cdot) \in \{0, 1, 2\}$. ■

Uma variável aleatória que toma um número finito ou enumerável de valores, como no Exemplo (2.3.2), é chamada *variável discreta*. Caso uma variável aleatória tome um número infinito não-enumerável de valores, é dita *variável aleatória contínua*. Para mais detalhes, consulte (SPIEGEL, 1977).

2.3.2 Distribuições de probabilidade

Seja X uma variável aleatória discreta com valores x_1, x_2, x_3, \dots em ordem crescente (SPIEGEL, 1977). Supondo que, para cada $k \in \mathbb{N}$, tem-se $P(X = x_k) = f(x_k)$ a probabilidade de ocorrência de x_k . Definimos a *distribuição de probabilidade* por $P(X = x) = f(x)$. Para $x = x_k$, vale $P(X = x_k) = f(x_k)$, enquanto para os demais valores de x , $f(x) = 0$. A distribuição de probabilidade f satisfaz:

1. $f(x) \geq 0$;
2. $\sum_x f(x) = 1$.

Exemplo 2.3.3. No caso da variável aleatória X ser o lançamento de um dado, temos $X(\cdot) \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. A probabilidade de cada face sair é exatamente $\frac{1}{6}$, e por conta disso, a variável X é dita ser *identicamente distribuída*. ■

A *função de distribuição* de uma variável aleatória X é definida como $P(X \leq x) = F(x)$, onde $x \in \mathbb{R}$ (SPIEGEL, 1977). Ainda,

$$F(x) = P(X \leq x) = \sum_{u \leq x} f(u).$$

Para o caso de variáveis contínuas, a distribuição de probabilidade satisfaz:

1. $f(x) \geq 0$;
2. $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1$.

A probabilidade de X estar entre os números reais a e b é definida por

$$P(a < X < b) = \int_a^b f(x) dx.$$

Por sua vez, a função de distribuição $F(x)$ para uma variável aleatória contínua é definida por

$$F(x) = P(X \leq x) = P(-\infty < X \leq x) = \int_{-\infty}^x f(u) du.$$

Um dos mais importantes exemplos de distribuição contínua de probabilidade é a *distribuição normal*, ou *distribuição gaussiana* (SPIEGEL, 1977). A função densidade para esta distribuição é dada, para $-\infty < x < \infty$, por

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right),$$

onde μ e σ são, respectivamente, a média e o desvio padrão. A função de distribuição correspondente é

$$F(x) = P(X \leq x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp\left(\frac{-(v-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) dv.$$

Nesse caso, diz-se que a variável aleatória X é *distribuída normalmente* com média μ e variância σ^2 . Se Z é a variável padronizada correspondente a X , isto é, se

$$Z = \frac{X - \mu}{\sigma},$$

então a média ou valor esperado de Z é zero e a variância é 1. Assim, podemos reescrever a função densidade, de Z nesse caso, tomando $\mu = 0$ e $\sigma = 1$, de onde

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2},$$

chamada de *distribuição de densidade normal reduzida*. A função de distribuição correspondente é dada por

$$F(z) = P(Z \leq z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z e^{-u^2/2} du = \frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^z e^{-u^2/2} du.$$

Sejam X e Y variáveis aleatórias discretas (SPIEGEL, 1977). Se os eventos $X = x$ e $Y = y$ são independentes para todo x e todo y , então dizemos que X e Y são *variáveis aleatórias independentes*. Nesse caso, temos $P(X = x, Y = y) = P(X = x)P(Y = y)$. Caso estas variáveis sejam identicamente distribuídas, elas pertencem a classe muito útil de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas, i.i.d..

3 OPERADORES DE SCHRÖDINGER

3.1 INTRODUÇÃO

A física de matéria condensada de um elétron é uma simplificação que tem tido um sucesso notável na descrição de certas propriedades dos cristais. As noções básicas de materiais isolantes, condutores e semi-condutores podem ser explicadas pelo espectro de energia de um único elétron que se move sob a influência de um arranjo periódico de átomos e o princípio de exclusão de Pauli (MASSIMI, 2005). O último determina a ocupação dos estados por elétrons não interagentes. No modelo de um elétron, a interação entre os elétrons é negligenciada e as propriedades espectrais e de transporte do material são descritas pelo modelo de uma partícula do operador Hamiltoniano de Schrödinger.

De fato, em condutores e semi-condutores, elétrons livres têm que partilhar o espaço total disponível no interior do material - e por isso seus níveis de energia se empilham criando uma estrutura de bandas a partir de cada nível de energia atômico. Muitas propriedades mecânicas, elétricas, magnéticas, ópticas e químicas dos sólidos são consequências diretas da repulsão de Pauli entre elétrons livres ou semi-livres (MASSIMI, 2005).

Descrevendo a evolução temporal do elétron, a equação de Erwin Schrödinger *dependente do tempo* é dada, conforme (BURKHARDT; LEVENTHAL, 2008), por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(t, x) + V(x) \Psi(t, x), \quad (3.1)$$

onde t é a variável temporal, x é a variável espacial e $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05457 \times 10^{-34} Js$ é a constante de Planck dividida por 2π . O operador Hamiltoniano H será, por simplicidade tomando $m = \hbar = 1$, escrito como

$$H\Psi = (-\Delta + V(x))\Psi(t, x). \quad (3.2)$$

Ainda, é possível reescrever a equação (3.1) usando o operador H como sendo $H\Psi = i\frac{\partial}{\partial t}\Psi$ para o qual o problema de existência e unicidade das soluções da equação (3.1) com o estado inicial $\Psi_0 = \Psi(0, \cdot)$ dado podem ser reduzidos ao problema do estabelecimento da auto-adjunticidade para o operador linear H , ou seja, se o operador for hermitiano está garantida a existência e unicidade de soluções com estado inicial Ψ_0 .

A equação de Schrödinger (3.1) tem raízes no modelo ondulatório da mecânica quântica, e por (BURKHARDT; LEVENTHAL, 2008), começa-se da ideia que uma partícula livre se comportaria como uma onda plana e poderia então ser descrita por uma *função de onda* ψ da forma

$$\psi(t, x) = A e^{i(k \cdot x - \omega t)},$$

para todo $t \in \mathbb{R}$ e para todo $x \in \mathbb{R}^d$, a qual se propaga com velocidade constante $\frac{|v|}{2} = \frac{\omega}{|k|} \in (0, \infty)$ na direção $k \in \mathbb{R}^d \setminus \{0\}$. O A da equação é um número complexo não nulo que representa a

constante de normalização. Usando algumas das leis fundamentais da teoria quântica, a saber, a equação de Einstein $E = \hbar\omega$ e a relação de Broglie para o comprimento de onda

$$E := \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{m|v|}, \quad (3.3)$$

onde

$$k = \frac{m|v|}{\hbar}, \quad (3.4)$$

chega-se a equação (3.1) quando se quer determinar a evolução temporal de ψ começando de algum estado inicial ψ_0 . Com efeito, por (BURKHARDT; LEVENTHAL, 2008), a energia mecânica total E de uma partícula de massa m em termos da energia potencial $V(x)$, sendo p o *momentum* da partícula, é

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (3.5)$$

Usando a equação (3.4), temos

$$p = m|v| = \frac{m|v|}{\hbar}\hbar = k\hbar, \quad (3.6)$$

ou seja, $p = k\hbar$, e pela equação (3.6), a equação (3.5) fica

$$\hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m} + V(x). \quad (3.7)$$

Nos termos da equação (3.7) (BURKHARDT; LEVENTHAL, 2008), é particularmente difícil de escrever uma equação de onda para uma partícula por conta da energia potencial, por isso a ignoraremos por enquanto. Se a partícula tem massa nula, por exemplo um fóton, então a equação de onda eletromagnética seria apropriada, isto é, a equação de movimento é

$$\frac{\partial^2 \zeta(t, x)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \zeta(t, x)}{\partial t^2} \quad (3.8)$$

onde $\zeta(t, x)$ é a *amplitude* dependente do tempo e do espaço (campo elétrico ou magnético) da onda, e c é a velocidade da luz. Uma solução da equação (3.8) é a onda plana

$$\zeta(t, x) = Ae^{i(kx - \omega t)}, \quad (3.9)$$

pois o movimento de onda sempre é descrito como função de $(x - |v|t)$, onde $|v|$ é a velocidade da onda, e $\omega = |v||k|$. Para ondas eletromagnéticas, $|v| = c$, a velocidade da luz.

Por (BURKHARDT; LEVENTHAL, 2008), aplicamos a equação (3.8) ao caso de uma partícula material (massa não nula), mas, por simplicidade, continuemos com $V(x) = 0$, caso denominado de "partícula livre". Substituindo a amplitude $\zeta(t, x)$ pela função de onda $\psi(t, x)$, considerando $c \rightarrow v$ e assumindo uma solução tipo onda plana análoga a equação (3.9), inserimos esta solução na equação (3.8), e após dividi-la por $\psi(t, x)$ de ambos os lados da equação, obtemos

$$(ik)^2 = \frac{1}{v^2} (-i\omega)^2,$$

o que é inconsistente com a equação (3.7) pois, com $V(x) = 0$, $k^2 \propto \omega$ e não ω^2 . Para obter apenas a primeira potência de ω , devemos derivar $\psi(t, x)$ apenas uma vez com respeito ao tempo. Isto resulta na modificação da equação (3.8), alterando $\zeta(t, x)$ por $\psi(t, x)$ e $\frac{\partial^2 \zeta(t, x)}{\partial t^2}$ por $\frac{\partial \psi(t, x)}{\partial t}$, obtendo

$$\frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x^2} = K \frac{\partial \psi(t, x)}{\partial t} \quad (3.10)$$

onde K é uma constante. Inserindo a equação (3.9) na equação (3.10) e isolando K ,

$$(ik)^2 A e^{i(k \cdot x - \omega t)} = \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x^2} = K \frac{\partial \psi(t, x)}{\partial t} = -i\omega K A e^{i(k \cdot x - \omega t)},$$

que nos dá

$$K = \frac{k^2}{i\omega}.$$

Mas, da equação (3.7), com $V(x) = 0$, temos que $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ implica em $\frac{k^2}{\omega} = \frac{2m}{\hbar}$, assim

$$K = -i \frac{2m}{\hbar}$$

e portanto

$$\frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x^2} = -i \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial \psi(t, x)}{\partial t}. \quad (3.11)$$

Multiplicando ambos os lados por $-\frac{\hbar^2}{2m}$ temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi(t, x)}{\partial t}. \quad (3.12)$$

Esta equação da onda, conforme (BURKHARDT; LEVENTHAL, 2008), é aplicável somente a uma partícula livre, isto é, uma partícula para a qual o comprimento de onda de de Broglie é constante por toda a parte. O comprimento de onda de de Broglie é constante pois a energia total é presumidamente constante, então a energia cinética, e portanto o *momentum*, são constantes. No caso de uma energia potencial constante, ainda é simples, pois o comprimento de onde de de Broglie é constante, e $V(x) = 0$ é um caso particular de $V(x) = V_0 = s$ constante. Portanto podemos, sem restrições, escrever

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \right) \psi(t, x) = i\hbar \frac{\partial \psi(t, x)}{\partial t}, \quad (3.13)$$

que é consistente com a equação (3.7) com $V(x)$ no lugar de V_0 . Em mecânica quântica, quantidades observáveis como a energia, *momentum* e posição são representadas por operadores. Não é um grande salto trocar em (3.13) V_0 por $V(x)$, para então obter a forma unidimensional da equação de Schrödinger dependente do tempo apresentada em (3.1),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(t, x). \quad (3.14)$$

Exemplo 3.1.1 ((BURKHARDT; LEVENTHAL, 2008)). Por simplicidade vamos considerar o exemplo em que $x \in \mathbb{R}$ dado por $\psi(x) = B \operatorname{sen}(k \cdot x) + C \cos(k \cdot x)$, numa caixa rígida satisfazendo $\psi(x) = 0$ se $x < 0$ ou $x > a$. Suponhamos também $V(x) = 0$. Por continuidade, temos $\psi(x = 0) = \psi(x = a) = 0$, logo $\psi(x = 0) = C = 0$ e $\psi(x = a) = B \operatorname{sen}(k \cdot a) = 0$, de onde $ka = n\pi$, ou seja, $k_n = n \frac{\pi}{a}$ de onde $E_n = \frac{2\pi}{k_n} = \frac{2a}{n}$, com $a = n \frac{E}{2}$ e

$$\psi(x) = B \operatorname{sen}(k \cdot x). \quad (3.15)$$

Escrevendo ψ como uma série de Fourier, temos

$$\Psi(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Psi_n(t, x),$$

com

$$\Psi_n(t, x) = B \operatorname{sen}(k_n \cdot x) e^{-i\omega t}. \quad (3.16)$$

Como $\operatorname{sen}(k_n \cdot x) = \frac{e^{ik_n \cdot x} - e^{-ik_n \cdot x}}{2i}$, temos

$$\Psi_n(t, x) = \frac{B}{2i} \left(e^{i(k_n \cdot x - \omega t)} - e^{-i(k_n \cdot x + \omega t)} \right). \quad (3.17)$$

Como ψ é uma função senoidal, sua segunda derivada também é uma função senoidal e satisfaz

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} \stackrel{(3.15)}{=} \frac{\partial^2 (B \operatorname{sen}(k \cdot x))}{\partial x^2} = -k^2 B \operatorname{sen}(k \cdot x) = -k^2 \psi(x),$$

de onde

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -k^2 \psi(x). \quad (3.18)$$

Fazendo $V(x) = 0$ em (3.5), por (3.6) e (3.7), temos

$$E = K + V = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

logo

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (3.19)$$

e como supomos $V(x) = 0$, na verdade temos $E = K$, onde K é a energia cinética, de onde, usando (3.19), a equação (3.18) se torna

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x). \quad (3.20)$$

Para um potencial $V(x)$ não nulo, temos que $K = E - V(x)$, logo

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \psi(x)$$

nos dá

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.21)$$

que é, restrita ao intervalo $[0, a] \in \mathbb{R}$, a *equação de Schrödinger independente do tempo unidimensional*, que é obtida resolvendo a equação (3.1) por meio da separação de variáveis, como em (??). ■

Para o caso de maior dimensão, digamos d , segundo (BURKHARDT; LEVENTHAL, 2008), o operador diferencial de segunda ordem dá lugar ao operador Laplaciano

$$\Delta = \nabla^2 = \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2},$$

e a equação de Schrödinger independente do tempo é escrita como

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \Psi(x) = E\Psi(x). \quad (3.22)$$

Escrevendo o operador Hamiltoniano como $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)$, então a equação (3.22) é de fato uma equação de autovalores (e autovetores) para H , que pode ser escrita de forma resumida simplesmente como

$$H\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (3.23)$$

A função de onda ψ deve satisfazer uma equação diferencial de primeira ordem em t , a saber, Equação (3.2), a qual é linear pelo princípio de superposição para ondas. Além disso, as funções de onda assumem valores complexos. O Laplaciano $-\Delta$, agindo somente no espaço da variável x , representa a energia cinética $\frac{1}{2}m|v|^2$, enquanto a função V , chamada de *potencial*, incorpora a energia potencial induzida por um campo externo e assume, portanto, valores reais.

3.1.1 Resolvendo a equação de Schrödinger

Utilizando o método de separação de variáveis, conforme (HINZ, 2004), podemos escrever

$$\Psi(t, x) = Ae^{i(k \cdot x - \omega t)} = f(t)u(x),$$

para $f(t) = \sqrt{A}e^{-i\omega t}$ e $u(x) = \sqrt{A}e^{i(k \cdot x)}$. Então, para $(t_0, x_0) \in \mathbb{R}^{1+d}$ com $\Psi(t_0, x_0) \neq 0$, temos

$$f(t) = \frac{\sqrt{A}e^{-i\omega t} e^{i(k \cdot x_0)}}{e^{i(k \cdot x_0)}} = \frac{\Psi(t, x_0)}{\sqrt{A}e^{i(k \cdot x_0)}} = \frac{\Psi(t, x_0)}{u(x_0)},$$

$$u(x) = \frac{\sqrt{A}e^{i(k \cdot x)} e^{-i\omega t_0}}{e^{-i\omega t_0}} = \frac{\Psi(t_0, x)}{\sqrt{A}e^{-i\omega t_0}} = \frac{\Psi(t_0, x)}{f(t_0)},$$

de onde $f \in C^1(\mathbb{R})$ e $u \in C^2(\mathbb{R}^d)$. Além disso, segue $\frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = f'(t)u(x)$ e $\Delta \Psi(t, x) = \Delta(f(t)u(x)) = f(t)\Delta u(x)$. Avaliando em (3.2), temos

$$\begin{aligned} if'(t)u(x) &= (-\Delta + V(x)) \Psi(t, x) \\ &= -\Delta \Psi(t, x) + V(x)\Psi(t, x) \\ &= -f(t)\Delta u(x) + f(t)V(x)u(x) \\ &= f(t)(-\Delta + V(x))u(x), \end{aligned}$$

e para $x = x_0$, tal que $u(x_0) \neq 0$, f satisfaz a equação diferencial ordinária

$$f'(t) = i \left[\frac{\Delta u(x_0) - V(x_0)u(x_0)}{u(x_0)} \right] f(t) = -iEf(t),$$

onde

$$E = \frac{-\Delta u(x_0) + V(x_0)u(x_0)}{u(x_0)},$$

cujas soluções gerais são do tipo $f(t) = ce^{-iEt}$, para $c \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. Estas soluções gerais caracterizam completamente a função com relação ao tempo.

Como $if'(t)u(x) = f(t)(-\Delta + V(x))u(x)$, ao substituirmos $f'(t)$ obtemos

$$i(-iEf(t))u(x) = f(t)(-\Delta + V(x))u(x),$$

de onde vem

$$-\Delta u(x) + V(x)u(x) = Eu(x), \quad (3.24)$$

para todo $x \in \mathbb{R}^d$, ou seja, a função u satisfaz a *equação de Schrödinger independente do tempo*.

Definição 3.1.1 ((LIMA, 2008)). Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Dizemos que f é limitada se existe algum $K \geq 0$ tal que $|f(t)| \leq K$, para todo $t \in \mathbb{R}$.

Pela Definição 3.1.1, a evolução temporal dada por f é limitada se, e só se, o *autovalor* E é real, uma vez que

$$|f(t)| = |ce^{-iEt}| = \left| ce^{-i(\Re(E) + i\Im(E))t} \right| = |c| \left| e^{\Im(E)t} \right|,$$

e $|e^{\Im(E)t}|$ só é limitado se $\Im(E) = 0$. Essa é uma situação fisicamente relevante. Para um maior aprofundamento, consulte (HINZ, 2004). Vale mencionar que os autovalores são de fato reais, uma vez que o operador é auto-adjunto.

3.1.2 Autovalores e Autoestados

Quando um operador é autoadjunto, seus autovalores são sempre reais (KREYSZIG, 1978). De fato, considere $H\psi = E\psi$, onde H é um operador Hamiltoniano autoadjunto (Hermitiano), logo $H = H^*$, temos

$$\langle H\psi, \phi \rangle = \langle \psi, H^*\phi \rangle = \langle \psi, H\phi \rangle.$$

Por definição, temos

$$\|\psi\|^2 = \langle \psi, \psi \rangle = \int \overline{\psi(x)}\psi(x)dx,$$

então

$$E\|\psi\|^2 = E\langle \psi, \psi \rangle = \langle \psi, E\psi \rangle = \langle \psi, H\psi \rangle = \langle H\psi, \psi \rangle = \langle E\psi, \psi \rangle = \overline{E}\langle \psi, \psi \rangle = \overline{E}\|\psi\|^2,$$

assim $E = \overline{E}$, e portanto $E \in \mathbb{R}$. O número E é o autovalor de H associado a autofunção ψ . Em geral, é muito difícil calcular analiticamente os autovalores e autofunções do operador H , todavia no caso onde o potencial é dado pelo oscilador harmônico, o operador exhibe explicitamente seus autovalores e suas autofunções.

Exemplo 3.1.2 ((GRIFFITHS, 2004)). Considerando o potencial dado pelo oscilador harmônico

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

onde m é massa e ω é a frequência de oscilação angular, a equação de Schrödinger para este potencial é dada pela equação de autovalores (E) e autovetores (ψ)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi.$$

Definindo ξ como

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x,$$

a equação de Schrödinger torna-se

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi, \quad (3.25)$$

onde $K = \frac{2E}{\hbar\omega}$, cujo objetivo é obter os valores permitidos de K , logo de E . Para grandes valores de ξ , o que acarreta em grandes valores de x , ξ^2 domina completamente a constante K , e nesse caso, tem-se a EDO de segunda ordem $\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi$, a qual tem solução aproximada

$$\psi(\xi) \approx Ae^{-\xi^2/2} + Be^{\xi^2/2}.$$

O termo B não é limitado quando $|x| \rightarrow \infty$, logo para valores grandes de ξ , se espera $\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2}$, cujas derivadas são

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \left(\frac{dh}{d\xi} - \xi h\right)e^{-\xi^2/2},$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \left(\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (\xi^2 - 1)h\right)e^{-\xi^2/2},$$

e a equação (3.25) torna-se

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (K - 1)h = 0. \quad (3.26)$$

Escrevendo h em série de potências em ξ , tem-se

$$h(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} a_j\xi^j,$$

cujas derivadas termo a termo são

$$\frac{dh}{d\xi} = a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} ja_j\xi^{j-1},$$

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} = 2a_2 + 2.3a_3\xi + 3.4a_4\xi^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2)a_{j+2}\xi^j,$$

e substituindo na equação (3.26), tem-se

$$\sum_{j=0}^{\infty} ((j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j) \xi^j = 0.$$

Uma vez que a expansão em séries de potências é escrita de forma única, o coeficiente de cada potência de ξ deve anular-se, ou seja, $(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j = 0$, de onde vem

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)} a_j. \quad (3.27)$$

Para os coeficientes pares, tem-se

$$a_2 = \frac{(1-K)}{2} a_0, \quad a_4 = \frac{(5-K)}{12} a_2 = \frac{(5-K)(1-K)}{24} a_0, \dots$$

e para os ímpares

$$a_3 = \frac{(3-K)}{6} a_1, \quad a_5 = \frac{(7-K)}{20} a_3 = \frac{(7-K)(3-K)}{120} a_1, \dots$$

e a solução completa é descrita como

$$h(\xi) = h_{\text{par}}(\xi) + h_{\text{ímpar}}(\xi),$$

para a qual,

$$h_{\text{par}}(\xi) \equiv a_0 + a_2 \xi^2 + a_4 \xi^4 + \dots, \\ h_{\text{ímpar}}(\xi) \equiv a_1 \xi + a_3 \xi^3 + a_5 \xi^5 + \dots,$$

onde $h_{\text{par}}(\xi)$ é uma função par de ξ escrita sobre a_0 e $h_{\text{ímpar}}(\xi)$ é uma função ímpar de ξ escrita sobre a_1 . As constantes arbitrárias são as condições iniciais da equação diferencial de segunda ordem.

Para valores de j muito grandes, a fórmula de recursão consiste, aproximadamente, em $a_{j+2} \approx \frac{2}{j} a_j$, com solução aproximada $a_j \approx \frac{C}{(j/2)!}$, para uma constante C , o que produz, para valores grandes de ξ , em que os termos de maior potência dominam,

$$h(\xi) \approx C \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(j/2)!} \xi^j \approx C \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \xi^{2j} \approx C e^{\xi^2}.$$

Para soluções fisicamente aceitáveis, a série de potências deve convergir, todavia se h se comportar como $\exp(\xi^2)$ teremos um comportamento indesejado, e deve-se truncar a série da forma que segue. Para algum determinado n tal que $a_{n+2} = 0$, a série h_{par} será truncada e a série $h_{\text{ímpar}}$ será nula se n for par, e vice-versa se n for ímpar. Para soluções fisicamente aceitáveis, $K = 2n + 1$ para $n \in \mathbb{Z}^+$, o que significa que a energia (os *autovalores*) são, para $n \in \mathbb{Z}^+$,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega,$$

uma vez que $K = \frac{2E}{\hbar \omega}$.

Para os valores permitidos de K , a fórmula de recursão nos dá $a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} a_j$, logo para $n = 0$, temos $h_0(\xi) = a_0$, logo o autoestado associado ao autovalor E_0 é $\psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2}$. Para $n = 1$, tem-se $h_1(\xi) = a_1 \xi$, logo o autoestado associado ao autovalor E_1 é dado por $\psi_1(\xi) = a_1 e^{-\xi^2/2}$.

Em geral, $h_n(\xi)$ será um polinômio de grau n em ξ . A menos de a_0 ou a_1 , esses polinômios são chamados *polinômios de Hermite*, $H_n(\xi)$. O autoestado ψ_n associado ao autovalor E_n para o oscilador harmônico é dado por

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}. \blacksquare$$

Para maiores detalhes, veja (GRIFFITHS, 2004).

3.1.3 Operadores de Schrödinger Discretos

Os operadores de Schrödinger discretos são definidos num espaço de seqüências, a saber, o espaço de Hilbert

$$\ell^2(\mathbb{Z}^d) = \left\{ u : \mathbb{Z}^d \rightarrow \mathbb{C}; \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |u(n)|^2 < \infty \right\},$$

cuja norma é denotada por

$$\|u\| = \left(\sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |u(n)|^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Quando uma partícula se move no reticulado \mathbb{Z}^d , supondo que $\|u\| = 1$, a probabilidade de encontrarmos tal partícula no ponto $n \in \mathbb{Z}^d$ é dada por $|u(n)|^2$, onde $u(n)$ é uma seqüência indexada por \mathbb{Z}^d . É conveniente equipar \mathbb{Z}^d com a norma

$$\|n\|_1 = \sum_{v=1}^d |n_v|.$$

Esta norma reflete a estrutura de reticulado de \mathbb{Z}^d . Dois vértices n e m de \mathbb{Z}^d são conectados por uma aresta, se eles forem vizinhos próximos, ou seja, se $\|n - m\|_1 = 1$. Para $n, m \in \mathbb{Z}^d$ a norma $\|n - m\|_1$ dá o comprimento do menor caminho, não necessariamente único, entre n e m . O operador H_0 , a energia cinética, é o análogo discreto de $-\Delta$, a saber

$$H_0 u(n) = - \sum_{\|m-n\|_1=1} (u(m) - u(n)).$$

Este operador é chamado de *Laplaciano discreto* para o reticulado \mathbb{Z}^d . Sua representação matricial é dada por

$$H_0(i, j) = \begin{cases} -1 & \text{se } \|i - j\|_1 = 1, \\ 2d & \text{se } i = j, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

ou seja,

$$H_0 = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \ddots & -1 & 2 & -1 & 0 & \\ & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ & & 0 & -1 & 2 & -1 & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

para o caso unidimensional. Por simplicidade, consideramos $H'_0 = H_0 - 2dI$, assim o operador de Schrödinger discreto unidimensional é dado por

$$H = -H'_0 + V = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \ddots & 1 & V_{(n-1)} & 1 & 0 & \\ & 0 & 1 & V_{(n)} & 1 & 0 \\ & & 0 & 1 & V_{(n+1)} & 1 & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

A equação de Schrödinger independente do tempo, $H\psi = E\psi$, toma a forma matricial

$$\begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \ddots & 1 & V_{(n-1)} & 1 & 0 & \\ & 0 & 1 & V_{(n)} & 1 & 0 \\ & & 0 & 1 & V_{(n+1)} & 1 & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{(n-1)} \\ \Psi_{(n)} \\ \Psi_{(n+1)} \\ \vdots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{(n-1)} \\ \Psi_{(n)} \\ \Psi_{(n+1)} \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

O operador é representado pela equação de recorrência, para $n \in \mathbb{Z}$ e $\psi \in \ell^2(\mathbb{Z})$, dada por

$$[H\psi]_{(n)} = \Psi_{(n-1)} + V_{(n)}\Psi_{(n)} + \Psi_{(n+1)}, \quad (3.31)$$

cuja equação de autovalores e autoestados é dada por

$$\Psi_{(n-1)} + V_{(n)}\Psi_{(n)} + \Psi_{(n+1)} = E\Psi_{(n)}. \quad (3.32)$$

3.2 OPERADORES DE SCHRÖDINGER ALEATÓRIOS

Todos os nossos espaços de Hilbert são assumidos separáveis, isto é, dotados de um subconjunto denso enumerável (KREYSZIG, 1978). Nós os denotaremos por \mathcal{H} com seu produto interno sendo denotado por $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

Um *vetor aleatório* v em um espaço de Hilbert \mathcal{H} é uma aplicação $v : \Omega \rightarrow \mathcal{H}$ de modo que $v(u)$ seja uma variável aleatória, para qualquer $u \in \mathcal{H}$ (HISLOP, 2005).

Seja D um subespaço vetorial denso de \mathcal{H} . Um *operador aleatório* com domínio D é uma aplicação A do conjunto de realizações Ω no conjunto de operadores lineares em \mathcal{H} , de modo que D esteja no domínio de A com probabilidade um e que Au é um vetor aleatório em \mathcal{H} para todo $u \in D$. Além disso, se $\langle Au, v \rangle = \langle u, Av \rangle$ para todo $u, v \in D$, dizemos que A é auto-adjunto (HISLOP, 2005).

Nas últimas décadas, os operadores de Schrödinger aleatórios, que se originaram na física da matéria condensada, foram estudados intensamente e de forma muito produtiva (KIRSCH, 2008). A teoria está na interface de uma série de campos matemáticos: a teoria dos operadores, as equações diferenciais parciais, a teoria das probabilidades, em particular o estudo de processos estocásticos, o de passeios aleatórios e o movimento browniano em um ambiente aleatório.

Os operadores de Schrödinger aleatórios modelam sólidos desordenados (HISLOP, 2005). Os sólidos aparecem na natureza de várias formas, sendo que em alguns casos são (quase) totalmente ordenados. Nos cristais, os átomos ou os núcleos são distribuídos em uma rede periódica (digamos a rede \mathbb{Z}^d por simplicidade) de uma maneira completamente regular.

Vamos assumir que uma partícula (elétron) no ponto $x \in \mathbb{R}^d$ é estimulada por um potencial da forma $qf(x-i)$ devido a um átomo (ou íon, ou núcleo) localizado no ponto $i \in \mathbb{Z}^d$. Aqui, a constante q (carga ou constante de acoplamento, em termos físicos) poderia ser absorvida na função f . No entanto, uma vez que vamos variar essa quantidade de átomo para átomo mais tarde, é útil escrever o potencial da forma acima. Então, em um cristal regular, nossa partícula está exposta a um potencial total

$$V(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} qf(x-i). \quad (3.33)$$

A função f é chamada de *potencial de um único sítio* para distinguir do potencial total V (KIRSCH, 2008). O potencial V em (3.33) é periódico com respeito ao reticulado \mathbb{Z}^d , ou seja, $V(x-i) = V(x)$ para todo $x \in \mathbb{R}^d$ e $i \in \mathbb{Z}^d$.

A maioria dos sólidos não constitui um cristal ideal (HISLOP, 2005). As posições dos átomos podem se desviar das posições de rede ideais de maneira não regular devido a imperfeições no processo de cristalização. Ou as posições dos átomos podem estar completamente desordenadas, como é o caso em materiais amorfos ou vítreos. O sólido também pode ser uma mistura de vários materiais, como é o caso, por exemplo, de ligas ou semicondutores dopados (com impurezas intencionalmente introduzidas com propósito de modificar suas propriedades elétricas). Em todos esses casos, parece razoável considerar o potencial como uma quantidade aleatória. Por exemplo, se o material for puro, mas as posições dos átomos se desviam das posições da rede ideais aleatoriamente, podemos considerar um potencial aleatório da forma

$$V_{\omega}(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} qf(x-i - \xi_i(\omega)). \quad (3.34)$$

Aqui, ξ_i são variáveis aleatórias que descrevem o desvio do i -ésimo átomo da posição i da rede (KIRSCH, 2008). Pode-se, por exemplo, assumir que as variáveis aleatórias são independentes

e identicamente distribuídas. O sub-índice ω do potencial V aparece para deixar claro que V_ω depende dos parâmetros aleatórios (desconhecidos).

Para modelar um material amorfo como vidro ou borracha, assumimos que os átomos do material estão localizados em pontos ω_i completamente aleatórios no espaço. Esse potencial aleatório pode ser formalmente escrito como

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} q_i f(x - \omega_i(\omega)). \quad (3.35)$$

Em resumo, sabe-se, de acordo com (BLOCH, 1929), que, com probabilidade um, as configurações periódicas geram soluções periódicas para a equação de Schrödinger, que possibilitam à partícula transitar por toda extensão da rede cristalina, de onde se obtém bons condutores de eletricidade, calor, etc. Por outro lado, sabe-se, por (ANDERSON, 1958), que, também com probabilidade um, as configurações desordenadas confinam a partícula em regiões finitas da rede, o que sugere maus condutores ou isolantes.

O modelo mais popular de um sólido desordenado e, também, o melhor entendido (KIRSCH, 2008), é o potencial de tipo liga (ver Equação (3.36) abaixo). Ele modela uma liga não ordenada, isto é, uma mistura de vários materiais cujos átomos estão localizados em posições da rede. O tipo de átomo no ponto i da rede é assumido como aleatório. No modelo, consideramos que os diferentes materiais são descritos por diferentes cargas (ou constantes de acoplamento) q_i . O potencial total V é então dado por

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} q_i(\omega) f(x - i). \quad (3.36)$$

As q_i 's são variáveis aleatórias que assumimos serem independentes e identicamente distribuídas (KIRSCH, 2008). Suas imagens descrevem os possíveis valores que a constante de acoplamento pode assumir na liga considerada. O modelo físico sugere que existe apenas uma quantidade finita de valores que as variáveis aleatórias podem assumir. No entanto, nas provas de alguns resultados, temos que assumir que a distribuição das variáveis aleatórias q_i é contínua (ou mesmo absolutamente contínua) devido a limitações das técnicas matemáticas. Pode-se argumentar que essa suposição é aceitável como puramente técnica.

Para um dado ω , o potencial $V_\omega(x)$ é uma função relativamente complicada. Então, pode-se perguntar: qual é a vantagem de "torná-lo aleatório"? Com a introdução de variáveis aleatórias, mudamos implicitamente o nosso ponto de vista. Dificilmente estaremos interessados em propriedades de H_ω para um único ω dado. Em vez disso, olhamos para as propriedades "típicas" de H_ω (KIRSCH, 2008). Neste texto, nos restringiremos a um sistema relativamente simples, conhecido como o modelo de Anderson. Para este caso, o espaço de Hilbert é o espaço de seqüências $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ e o operador Δ é um operador de diferença finita (Laplaciano discreto). Chamaremos esta configuração do caso discreto em contraste com os operadores de Schrödinger em $L^2(\mathbb{R}^d)$, que chamamos de caso contínuo.

São exemplos de operadores de Schrödinger aleatórios, conforme (HISLOP, 2005):

(i) Modelo de Anderson:

O modelo mais simples que descreve a propagação de um único elétron em um cristal perturbado aleatoriamente é chamado de modelo *tight-binding de Anderson*. Os átomos são considerados como atuando no elétron em um único local e pequenas distâncias são eliminadas ao restringir o movimento de elétrons aos pontos da rede \mathbb{Z}^d . Isso elimina distâncias curtas e fornece um corte de alta energia para a energia cinética livre. Consideramos um operador da forma

$$H = -\Delta + \zeta V_{\omega}^A,$$

definido em $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ para $d \geq 1$. O Laplaciano discreto é definido por

$$\Delta f(n) = \sum_{|n-m|=1} (f(n) - f(m)).$$

Este operador descreve a energia cinética de um elétron que se desloca na rede. Pela transformada de Fourier, descobre-se que o espectro é puramente absolutamente contínuo e é igual a $\sigma(\Delta) = [-2d, 2d]$. Os potenciais tipo *Anderson* V_{ω}^A são construídos como segue. Considere a família $\{\omega_i : i \in \mathbb{Z}^d\}$ de variáveis independentes e identicamente distribuídas com função de distribuição $g(\omega) \geq 0$, que assume suporte limitado. Por simplicidade, seja $\text{supp}(g) = [-1, 1]$. O potencial V_{ω}^A é definido por

$$V_{\omega}^A f(m) = \omega_m f(m),$$

para $m \in \mathbb{Z}^d$. Muitas vezes é conveniente adicionar uma constante de acoplamento ζ em frente ao potencial que mede a força da interação e, como tal, é uma medida da *desordem* do sistema. Para quase todo ponto $\omega \in \Omega$, o espectro de H é dado por

$$\sigma(H_{\omega}) = [-2d - \zeta, 2d + \zeta].$$

(ii) Modelo de um elétron:

Existem vários modelos de relevância física que descrevem o comportamento de um único elétron em meios perturbados aleatoriamente. Temos a escolha de um operador H_0 e do potencial aleatório V_{ω} . A situação mais conhecida é quando o operador H_0 é dado por $H_0 = -\Delta + V_{per}$, onde V_{per} é uma função periódica em \mathbb{R}^d . Este operador não perturbado descreve um único elétron que se move em uma rede infinita e periódica. A perturbação aleatória básica é um potencial do tipo Anderson. É descrito por uma família de funções u_i , com $i \in \mathbb{Z}^d$, chamado de *potencial de único sítio*, e constantes de acoplamento $\{\omega_i : i \in \mathbb{Z}^d\}$. O potencial é definido por

$$V_{\omega}(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} \omega_i u_i(x).$$

O operador fica descrito como $H = (-\Delta + V_{per}) + V_{\omega}$. Como exemplos de modelos de um elétron, podemos citar:

a) Modelo Breather:

Considere um potencial de um único sítio com suporte compacto. Nós exigimos uma condição repulsiva para u : $-x \cdot \nabla u(x) \geq 0$, e uma condição de limitação relativa à matriz Hessiana de u . Assumimos que as variáveis aleatórias ω_i são variáveis independentes e identicamente distribuídas com uma densidade de probabilidade comum suportadas em algum intervalo positivo. O *potencial breather* tem a forma

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} u(\omega_i(x - i)).$$

b) Modelo de deslocamento aleatório:

O potencial aleatório para este modelo tem a forma

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} u(x - i - \xi_i),$$

onde as variáveis aleatórias de valor vetorial $\{\xi_i(\omega)\}$ são distribuídas em uma bola de raio $R < \frac{1}{2}$. Este modelo foi estudado no caso de $u \leq 0$ de modo que o potencial de único sítio representa um bom potencial. Foi demonstrado que, neste caso, o modelo exibe localização em energias negativas, desde que o parâmetro semi-clássico h , aparecendo no Hamiltoniano como $H(h) = -h^2\Delta + V_\omega$, é suficientemente pequeno. O tunelamento quântico desempenha um papel importante na localização dos estados para este modelo.

c) Modelo de Poisson:

Um dos modelos mais realistas de impurezas distribuídas aleatoriamente em um cristal perfeito é dado por um *potencial de Poisson*. Seja $X_i(\omega)$, $i \in \mathbb{Z}$, representando os pontos de um processo estocástico de Poisson em \mathbb{R}^d . Suponha que $u \geq 0$ é um potencial de um único sítio de suporte compacto. O potencial de Poisson é dado por

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}} u(x - X_i(\omega)).$$

d) Modelos Gaussianos:

Esta família aleatória de operadores de Schrödinger tem a forma $H = H_0 + V_\omega$ com $H_0 = -\Delta$ e o potencial aleatório $V_\omega(x)$ um processo gaussiano indexado por \mathbb{R}^d . Este modelo foi recentemente estudado e foi demonstrada a ausência de espectro absolutamente contínuo e provada a localização em energias negativas.

Para mais detalhes, veja (HISLOP, 2005) e suas referências.

3.2.1 Localização de Anderson

Em um trabalho clássico, (ANDERSON, 1958), estudou-se o problema dos autovalores e autovetores para Operadores de Schrödinger na situação em que o potencial V é *aleatório*,

ou seja, $\{v_i\}$ é uma família de variáveis aleatórias independentes identicamente distribuídas (v.a.i.i.d.) que, segundo Anderson, é o modelo mais simples que pode conter as principais propriedades físicas da dinâmica de um elétron em um cristal com impurezas. Um dos principais interesses nesse modelo consiste no estudo das propriedades de transporte de elétrons num material.

Anderson concluiu que uma desordem grande (alta aleatoriedade) implica na localização dos elétrons, ou seja, os elétrons ficam confinados em uma região finita do espaço, fazendo com que a curva do quadrado do módulo da função de onda tenha decaimento acentuado. Esse tipo de material, em geral, se trata de um mau condutor, já que os elétrons não transitam por toda a sua extensão. Os resultados de Anderson foram estabelecidos de forma matematicamente rigorosa em (FRÖHLICH; SPENCER, 1983) e (DREIFUS; KLEIN, 1989).

Desde o trabalho inovador de Paul Anderson, vários físicos e matemáticos trabalharam sobre como medir a natureza teórica do espectro dos operadores de Schrodinger aleatórios, ou seja, sobre propriedades dinâmicas dos pacotes de ondas. Em (KIRSCH, 2008, p. 75) há uma descrição detalhada sobre o desenvolvimento da teoria física da localização.

Há uma diferença qualitativa entre os sistemas de desordem de uma dimensão ($d = 1$) e os de dimensão mais alta ($d \geq 3$). Para sistemas unidimensionais (desordenados), espera-se que todo o espectro seja puramente pontual. Assim, existe um sistema completo de autofunções. Os autovalores correspondentes (em quantidade enumerável) formam um conjunto denso em $\Sigma (= \cup [a_i, b_i])$. As autofunções decaem exponencialmente no infinito. Este fenômeno é chamado de localização de Anderson ou localização exponencial.

A imagem que os físicos desenvolveram sobre a estrutura espectro de H é apoiada por argumentos físicos convincentes e é geralmente aceita entre os físicos teóricos e apenas uma parte pode ser mostrada com rigor matemático até agora.

A localização de Anderson corresponde à baixa mobilidade dos elétrons em um sistema. Assim, sistemas desordenados unidimensionais ("fios finos com impurezas") devem ter baixa ou até mesmo condutividade nula. Em dimensão arbitrária, um sistema mecânico quântico ordenado deve ter espectro puramente absolutamente contínuo. Isso é conhecido por potenciais periódicos em qualquer dimensão. Assim, em uma dimensão, um distúrbio arbitrariamente pequeno mudará o espectro total de absolutamente contínuo para puramente pontual e, portanto, de condutor para isolante.

De fato, a localização de Anderson numa caixa unidimensional pode ser provada com rigor matemático para uma enorme classe de sistemas desordenados, vide (BOURGAIN; KENIG, 2005) e (GERMINET; HISLOP; KLEIN, 2005). Prosseguindo em (KIRSCH, 2008, p. 75), temos

Na dimensão 3, a física dos sistemas desordenados é muito mais rica (e, conseqüentemente, mais complicada). Enquanto a aleatoriedade não for muito

forte, a localização de Anderson ocorre apenas perto das margens de banda do espectro. Assim, perto de qualquer faixa de bandas, existe um intervalo $[a, a + \delta]$ (resp. $[a - \delta, a]$) do espectro puramente pontual e as respectivas autofunções são "exponencialmente localizadas" no sentido em que elas decaem exponencialmente rápido no infinito. Em bandas, espera-se que o espectro seja absolutamente contínuo com pequenas desordens ($d \geq 3$). Uma vez que as autofunções correspondentes (generalizadas) não são, de forma alguma, quadrado integráveis, fala-se de *estados estendidos* ou de *deslocalização de Anderson* neste caso. Se a aleatoriedade do sistema aumentar, o espectro puramente pontual expandirá e a parte absolutamente contínua do espectro diminuirá proporcionalmente. Então, de acordo com a intuição física, há uma transição de fase de uma fase isolante para uma fase de condução. Um ponto de transição entre as fases é chamado de borda de mobilidade. Em um certo grau de aleatoriedade, o espectro absolutamente contínuo deve ser "consumido" pelo espectro pontual.

Na discussão acima nós evitamos deliberadamente o caso da dimensão espacial $d = 2$. De fato, conforme (KIRSCH, 2008, p. 75), esse caso é um pouco mais complicado e ainda não se tem certeza sobre o que ocorre.

A situação em duas dimensões estava sob debate na comunidade de física teórica até poucos anos atrás. No momento, em geral acredita-se que temos uma localização completa de Anderson para $d = 2$ similar ao caso $d = 1$. Entretanto, espera-se que o espectro de ponto puro seja menos estável para $d = 2$, por exemplo, um campo magnético pode ser capaz para destruí-lo.

Em resumo, as propriedades espectrais do Hamiltoniano se relacionam com as propriedades físicas da seguinte forma:

- i) espectro discreto está intimamente ligado com localização;
- ii) espectro absolutamente contínuo está intimamente ligado com condução.

Para mais detalhes acerca da localização de Anderson, veja (ANDERSON, 1958), (OLIVEIRA; MARCHETTI, 2004), (OLIVEIRA; PELLEGRINO, 2014) e (STOLZ, 2011).

3.3 OPERADORES DE SCHRÖDINGER PERIÓDICOS

Considere o potencial periódico $V(x)$ em uma dimensão satisfazendo $V(x + na) = V(x)$, para $x \in \mathbb{R}$, onde a é a constante da rede discreta e n é um inteiro (LIMA, 2008). A equação de Schrödinger para autovalores de energia para um elétron é dada por

$$(-\Delta_x + V(x))\psi_E(x) = E\psi_E(x). \quad (3.37)$$

Claramente, a função de onda $\psi_E(x + na)$ também satisfaz a mesma equação. Assim, por (FUJITA; ITO, 2007), $\psi_E(x + na)$ se diferencia de $\psi_E(x)$ somente por

uma fase independente de x , ou seja,

$$\Psi_E(x + na) = e^{ikna}\Psi_E(x), \quad (3.38)$$

onde k é um número real. A equação (3.38) representa, em uma de suas formas, o *Teorema de Bloch* (BLOCH, 1929), a qual gera importantes consequências na teoria de condução de elétrons. Considerando que $\Psi(x)$ e $\Psi(x + na)$ satisfazem a mesma equação, elas são linearmente dependentes, ou seja,

$$\Psi(x + na) = c(na)\Psi(x). \quad (3.39)$$

Usando o mesmo argumento outra vez, obtemos

$$\begin{aligned} \Psi(x + na + ma) &= c(na)\Psi(x + ma) \\ &= c(na)c(ma)\Psi(x) \\ &\stackrel{(3.39)}{=} c(na + ma)\Psi(x). \end{aligned}$$

Como a função de onda ($\Psi(x)$) não se anula em geral, obtemos

$$c(na + ma) = c(na)c(ma),$$

ou seja,

$$c(x + y) = c(x)c(y), \quad (3.40)$$

conhecida como *equação funcional exponencial de Cauchy* (KUCZMA, 2009).

Lema 3.3.1 ((KUCZMA, 2009)). *A equação funcional exponencial de Cauchy $c(x + y) = c(x)c(y)$ tem por solução geral $c(y) = e^{A(y)}$, onde $A : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função aditiva, ou $c(y) = 0$.*

Demonstração. De fato, $c(y) = 0$ é solução da equação (3.40), para todo $y \in \mathbb{R}$. Suponha que $c(y_0) = 0$ para algum y_0 . Logo,

$$c(y) = c((y - y_0) + y_0) = c(y - y_0)c(y_0) = 0$$

para todo $y \in \mathbb{R}$, então se a função c se anula num ponto, ela é identicamente nula. Note que $c(x) = e^x$ satisfaz a equação (3.40), logo esta admite solução não trivial. Além disso, a função $c(y)$ é estritamente positiva. Com efeito, tome por exemplo $y = \frac{t}{2}$ em (3.40), logo teremos

$$\begin{aligned} c(t) &= c\left(\frac{t}{2} + \frac{t}{2}\right) \\ &= c\left(\frac{t}{2}\right)c\left(\frac{t}{2}\right) \\ &= \left[c\left(\frac{t}{2}\right)\right]^2 \\ &> 0. \end{aligned}$$

Tomando o logaritmo natural em ambos os membros de (3.40), obtemos

$$\log c(x + y) = \log c(x) + \log c(y),$$

e chamando $A(y) = \log c(y)$, verificamos que $A(x+y) = A(x) + A(y)$, ou seja, a função A é uma função aditiva. Além disso, $c(y) = e^{A(y)}$ é uma solução geral para (3.39), o que demonstra o resultado. \square

Em particular, $c(y) = e^{\theta y}$ é uma solução de (3.40), onde θ é uma constante. Como a função ψ na equação (3.38) deve ser finita para todos os intervalos, a constante θ deve ser um número imaginário puro $\theta = ik$, onde k é um número real, logo

$$c(y) = e^{iky}. \quad (3.41)$$

Combinando as equações (3.39) com (3.41), obtemos $\psi_E(x+na) = e^{ikna}\psi_E(x)$, o que mostra o Teorema 3.3.2 abaixo:

Teorema 3.3.2 (de Bloch). [(KITTEL, 1996)] *As soluções da equação de Schrödinger*

$$(-\Delta_x + V(x))\psi_E(x) = \lambda\psi_E(x)$$

para um potencial periódico $V(x)$ satisfazem

$$\psi_E(x+r) = e^{ikr}\psi_E(x),$$

onde r é o período da função de onda ψ_E .

3.4 RETICULADO COLMÉIA

Nos cristais, os átomos ou os núcleos são distribuídos em uma rede periódica (digamos a rede \mathbb{Z}^d por simplicidade) de uma maneira completamente regular. Conforme (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012), vamos assumir que uma partícula (elétron) no ponto $x \in \mathbb{R}^d$ é estimulada por um potencial da forma $qf(x-i)$ devido a um átomo (ou íon, ou núcleo) localizado no ponto $i \in \mathbb{Z}^d$. Aqui, a constante q (carga ou constante de acoplamento, em termos físicos) poderia ser absorvida na função f . No entanto, uma vez que vamos variar essa quantidade de átomo para átomo mais tarde, é útil escrever o potencial da forma acima. Então, em um cristal regular, nossa partícula está exposta a um potencial total

$$V(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} qf(x-i). \quad (3.42)$$

A função f é chamada de *potencial de um único sítio* para distinguir do potencial total V . O potencial V em (3.42) é periódico com respeito ao reticulado \mathbb{Z}^d , ou seja, $V(x-i) = V(x)$ para todo $x \in \mathbb{R}^d$ e $i \in \mathbb{Z}^d$. A teoria matemática dos operadores de Schrödinger com potenciais periódicos está bem desenvolvida e baseia-se em uma análise minuciosa das propriedades de simetria dos operadores periódicos. Por exemplo, sabe-se que tais operadores apresentam, em geral, um espectro com estrutura de banda, isto é, para $a_n < b_n < a_{n+1}$,

$$\sigma(H) = \bigcup_{n=0}^{\infty} [a_n, b_n].$$

Este espectro também é conhecido como sendo *espectro absolutamente contínuo*, todavia, a maioria dos sólidos não constitui cristais ideais (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012).

3.4.1 Teoria de Floquet-Bloch

Considerando-se $\{v_1, v_2\}$ uma base em \mathbb{R}^2 e o reticulado

$$\Lambda = \{m_1 v_1 + m_2 v_2 : m_1, m_2 \in \mathbb{Z}\} = \mathbb{Z}v_1 \oplus \mathbb{Z}v_2,$$

a célula do período fundamental é denotada por

$$\Gamma = \{\theta_1 v_1 + \theta_2 v_2 : 0 \leq \theta_j \leq 1, j = 1, 2\}.$$

O espaço das funções L_{loc}^2 que são periódicas com respeito ao reticulado Λ é denotado por $L_{per,\Lambda}^2 = L^2(\mathbb{R}^2/\Lambda)$. Considerando-se um período κ , $f \in L_{\kappa,\Lambda}^2$ se, e somente se, para $x \in \mathbb{R}^2$ e $v \in \Lambda$,

$$f(x+v) = f(x)e^{i\kappa \cdot v}.$$

O reticulado dual, Λ^* , é definido como

$$\Lambda^* = \{m_1 k_1 + m_2 k_2 : m_1, m_2 \in \mathbb{Z}\} = \mathbb{Z}k_1 \oplus \mathbb{Z}k_2,$$

onde k_1 e k_2 são os vetores do reticulado dual, satisfazendo as relações $k_i \cdot v_j = 2\pi\delta_{ij}$. Se $f \in L_{per,\Lambda}^2$ então f pode ser expandida em séries de Fourier

$$f(x) = \sum_{m \in \mathbb{Z}^2} f_m e^{imk \cdot x} = \sum_{(m_1, m_2) \in \mathbb{Z}^2} f_{(m_1, m_2)} e^{i(m_1 k_1 + m_2 k_2) \cdot x},$$

com coeficientes $\hat{f} = \{f_m\}_{m \in \mathbb{Z}^2}$ dados por

$$\begin{aligned} f_m &= \frac{1}{|\Gamma|} \int_{\Gamma} e^{-imk \cdot y} f(y) dy \\ &= \frac{1}{|\Gamma|} \int_{\Gamma} e^{-i(m_1 k_1 + m_2 k_2) \cdot y} f(y) dy. \end{aligned}$$

Seja $V(x)$ o potencial real periódico com relação a Λ , ou seja, para $x \in \mathbb{R}^2$ e $v \in \Lambda$,

$$V(x+v) = V(x).$$

Para cada $k \in \mathbb{R}^2$, o problema do *autovalor de Floquet-Bloch* é dado por

$$H_V \phi(x, k) = \mu(k) \phi(x, k), \quad (3.43)$$

$$\phi(x+v, k) = e^{ik \cdot v} \phi(x, k), \quad (3.44)$$

onde $x \in \mathbb{R}^2$, $v \in \Lambda$ e $H_V \equiv -\Delta + V(x)$, cujas soluções, em $L_{k,\Lambda}^2$, são chamados de *estados de Floquet-Bloch* (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012).

Como a solução do problema do autovalor ((3.43) e (3.44)) é invariante por mudança de variáveis $k \mapsto k + \tilde{k}$, onde $\tilde{k} \in \Lambda^*$, o reticulado periódico dual, os autovalores e autofunções de (3.43) e (3.44) podem ser considerados como funções Λ^* -periódica de k , o que é suficiente para

restringir a atenção para k variando sobre um célula primitiva, o que é feito para utilizar-se a primeira zona de Brillouin, \mathcal{B} , definida como o fecho do conjunto dos pontos $k \in \mathbb{R}^2$, que está mais próximo da origem do que de qualquer outro ponto o reticulado. Para $k \in \mathcal{B}$, defina

$$\phi(x, k) = e^{ik \cdot x} p(x, k),$$

satisfazendo, para $x \in \mathbb{R}^2$ e $v \in \Lambda$,

$$H_V(k)p(x, k) = \mu(k)p(x, k), \quad (3.45)$$

$$p(x + v, k) = p(x, k), \quad (3.46)$$

onde

$$H_V(k) \equiv -(\nabla + ik)^2 + V(x) \equiv -\Delta_k + V(x).$$

O problema do autovalor (3.45) e (3.46) tem um espectro discreto dado por

$$\mu_1(k) \leq \mu_2(k) \leq \mu_3(k) \leq \dots$$

com autopares $(\mu_b(k), p_b(x, k))$, para $b = 1, 2, 3, \dots$. O conjunto $\{p_b(x, k)\}_{b \geq 1}$ pode ser tomado como um conjunto ortonormal completo em $L^2_{per}(\mathbb{R}^2/\Lambda)$ (conforme Teorema Espectral, veja (KREYSZIG, 1978)). As funções $\mu_b(k)$ são chamadas funções de dispersão de bandas. Como k varia sobre \mathcal{B} , $\mu_b(k)$ varre um intervalo fechado da reta real. O espectro de $-\Delta + V(x)$ em $L^2(\mathbb{R}^2)$ é a união desses intervalos fechados

$$\sigma(H_V) = \bigcup_{k \in \mathcal{B}} \sigma(H_V(k)).$$

Para mais detalhes, veja (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012).

3.4.2 O reticulado periódico e seu dual

Seja $\Lambda_h = \mathbb{Z}v_1 \oplus \mathbb{Z}v_2$ o reticulado gerado pelos vetores da base

$$v_1 = a \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad v_2 = a \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad a > 0, \quad (3.47)$$

e o reticulado dual $\Lambda_h^* = \mathbb{Z}k_1 \oplus \mathbb{Z}k_2$ é gerado pelos vetores da base dual

$$k_1 = q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad k_2 = q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad q \equiv \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}, \quad (3.48)$$

onde $k_i \cdot v_j = 2\pi\delta_{ij}$, $|v_1| = |v_2| = a$ e $|k_1| = |k_2| = q$, de onde vem $v_1 \cdot v_2 = \frac{a^2}{2}$ e $k_1 \cdot k_2 = -\frac{q^2}{2}$.

Por (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012), a primeira zona de Brillouin, \mathcal{B}_h , é um hexágono em \mathbb{R}^2 representado na Figura 1. Denotando por K e K' os vértices de \mathcal{B}_h , estes são dados por

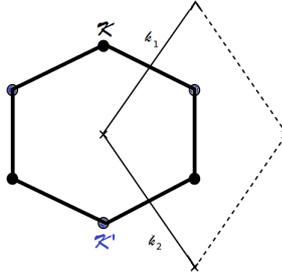


Figura 1 – (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012) Zona de Brillouin, \mathcal{B}_h , e a base dual $\{k_1, k_2\}$. Os outros vértices de \mathcal{B}_h são obtidos via aplicação de R .

$K \equiv \frac{1}{3}(k_1 - k_2)$ e $K' \equiv -K = \frac{1}{3}(k_2 - k_1)$. Todos os seis vértices podem ser gerados pela aplicação de uma matriz de rotação, R , que roda um vetor em \mathbb{R}^2 em um ângulo de $\frac{2\pi}{3}$ no sentido horário. A matrix R é dada por

$$R = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (3.49)$$

Os vértices de \mathcal{B}_h caem em dois grupos, gerados pela ação de R sobre K e K' : os ponto de tipo K , satisfazendo

$$\begin{aligned} R(K) &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \left[\frac{q}{3} \left(\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \right) \right] \\ &= \frac{q}{3} \begin{pmatrix} \frac{3}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} = q \left[\begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \right] \\ &= K + k_2, \end{aligned}$$

ou seja,

$$R(K) = K + k_2, \quad (3.50)$$

e da mesma forma,

$$\begin{aligned} R^2(K) &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \left[\frac{q}{3} \left(\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \right) \right] \\ &= \frac{q}{3} \begin{pmatrix} -\frac{3}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} = q \left[\begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \right] \\ &= K - k_1, \end{aligned}$$

então,

$$R^2(K) = K - k_1, \quad (3.51)$$

e os pontos de tipo K' , da mesma forma satisfazem

$$R(K') = K' - k_2 \quad \text{e} \quad R^2(K') = K' + k_1. \quad (3.52)$$

Além disso, a matriz

$$R^* = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

aplica o reticulado periódico Λ_h nele mesmo. Em particular, $R^*v_1 = -v_2$, e $R^*v_2 = v_1 - v_2$. Para mais detalhes, veja (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012).

3.4.3 Potencial Colméia

Para qualquer função f definida em \mathbb{R}^2 , por (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012), defina

$$\mathcal{R}[f](x) = f(R^*x),$$

onde R é a matriz de rotação dada em (3.49). Um potencial real V é um potencial colméia se existe $x_0 \in \mathbb{R}^2$ tal que

$$\tilde{V}(x) = V(x - x_0) \quad (3.53)$$

tem as seguintes propriedades:

1. Para todo $x \in \mathbb{R}^2$ e $v \in \Lambda_h$, $\tilde{V}(x+v) = \tilde{V}(x)$;
2. $\tilde{V}(-x) = \tilde{V}(x)$;
3. \tilde{V} é \mathcal{R} -invariante, ou seja,

$$\mathcal{R}[\tilde{V}](x) = \tilde{V}(R^*x) = \tilde{V}(x),$$

onde R^* é a matriz de rotação que gira um vetor $\frac{2\pi}{3}$ no sentido anti-horário, isto é,

$$R^* = R^{-1}.$$

Dados os pontos $A = (0,0)$ e $B = a\left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right)$, os quais pertencem a uma célula unitária periódica de Λ_h . Definido os reticulados triangulares de tipo A e de tipo B , $\Lambda_A = A + \Lambda_h$ e $\Lambda_B = B + \Lambda_h$, respectivamente, a estrutura de colméia, \mathcal{C} , é definida como a união desses dois reticulados triangulares:

$$\mathcal{C} = \Lambda_A \cup \Lambda_B.$$

Seja V_0 uma função radial, suave e com decréscimo rápido, a qual é vista como um "potencial atômico". Então

$$V(x) = \sum_{a \in \mathcal{C}} V_0(x - a)$$

é um potencial associado com "átomos" em cada sítio da estrutura de colméia \mathcal{C} . Pondo $x_0 = -B$ na equação (3.53), $V(x)$ satisfaz as condições do potencial reticulado de colméia.

Outro potencial interessante é o potencial ótico no reticulado de colméia (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012). O invólucro do campo elétrico de um feixe de luz quase monocromático

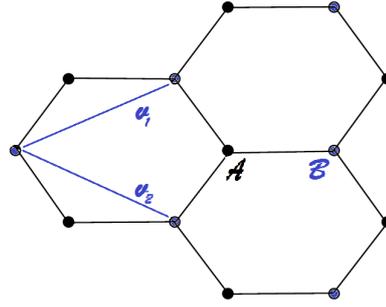


Figura 2 – (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012) Parte da estrutura de colméia $\mathcal{C} = \Lambda_A \cup \Lambda_B$.

propagando-se através de um meio dielétrico com perfil de índice de refração bidimensional satisfaz a equação de Schrödinger linear

$$i\partial_z \psi = -\Delta_{x,y} \psi + V(x,y) \psi = 0, \quad (3.54)$$

onde z denota a direção de propagação do feixe e (x,y) a direção transversa. As variações do índice de refração são dados por um potencial de forma aproximada a

$$V(x,y) \approx V_0(\cos(k_1 \cdot (x,y)) + \cos(k_2 \cdot (x,y)) + \cos((k_1 + k_2) \cdot (x,y))). \quad (3.55)$$

Proposição 3.4.1. (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012) *Seja V um potencial do reticulado colméia e assuma que K_* é um ponto do tipo K ou K' . Se $\phi(x,k)$ é uma solução do problema do autovalor de Floquet-Bloch ((3.43) e (3.44)) com $k = K_*$, então $\mathcal{R}[\phi(\cdot, k)](x)$ é também uma solução de (3.43) e (3.44) com $k = K_*$.*

Demonstração. Definindo

$$\phi_R(x) = \mathcal{R}[\phi(\cdot, K_*)](x) = \phi(R^*x, K_*)$$

e assumindo, sem perda de generalidade, que $K_* = K$, se $v \in \Lambda_h$ então $R^*v \in \Lambda_h$. Assim

$$\begin{aligned} \phi_R(x+v) &= \phi(R^*x + R^*v, K) \\ &= e^{iK \cdot R^*v} \phi(R^*x, K) \\ &= e^{iRK \cdot v} \phi(R^*x, K) \\ &= e^{i(K+k_2) \cdot v} \phi(R^*x, K) \\ &= e^{iK \cdot v} \phi(R^*x, K) \\ &= e^{iK \cdot v} \phi_R(x), \end{aligned}$$

de onde \mathcal{R} aplica

$$C_{K_*}^\infty = \{f \in C^\infty : f(x+v) = e^{iK_* \cdot v} f(x), x \in \mathbb{R}^2, v \in \Lambda_h\}$$

nele próprio. Além disso, $\phi_R(x) = \phi(R^*x, K_*) = \phi(y, K_*)$ para $y = R^*x$, logo

$$-\Delta_x \phi_R(x) = -\Delta_y \phi(y, K_*)|_{y=R^*x}$$

pela invariância do Laplaciano por rotações. Denotando $y = R^*x$ e $\phi(\cdot, K_*) = \phi(\cdot)$, temos

$$\begin{aligned}
 [H_V \mathcal{R}]\phi(x) &= [-\Delta + V(\cdot)]\mathcal{R}\phi(x) \\
 &= [-\Delta + V(\cdot)]\phi(R^*x) \\
 &= -\Delta_{R^*x}\phi(R^*x) + V(R^*x)\phi(R^*x) \\
 &= -\Delta_y\phi(y) + V(y)\phi(y) \\
 &= -\Delta_{R^*x}\phi(R^*x) + V(R^*x)\phi(R^*x) \\
 &= \mathcal{R}[-\Delta_x\phi(x) + V(x)\phi(x)] \\
 &= [\mathcal{R}H_V]\phi(x),
 \end{aligned}$$

de onde $[H_V, \mathcal{R}] = H_V \mathcal{R} - \mathcal{R} H_V = 0$ em $C_{K_*}^\infty$. Em particular, $H_V \phi(x, K_*) = \mu \phi(x, K_*)$, logo $H_V \phi_R(x) = \mu \phi_R(x)$, então $\mathcal{R}[\phi(\cdot, K_*)](x)$ é também uma solução de (3.43) e (3.44). ■

Considere o potencial $V(x)$ cuja série de Fourier é dada por

$$V(x) = \sum_{m \in \mathbb{Z}^2} V_m e^{imk \cdot x} = \sum_{(m_1, m_2) \in \mathbb{Z}^2} V_{(m_1, m_2)} e^{i(m_1 k_1 + m_2 k_2) \cdot x}.$$

Como $V(x) = \mathcal{R}[V](x)$ (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012), temos

$$\begin{aligned}
 V(R^*x) &= \sum_{(m_1, m_2) \in \mathbb{Z}^2} V_{(m_1, m_2)} \exp[i(m_1 Rk_1 + m_2 Rk_2) \cdot x] \\
 &= \sum_{(m_1, m_2) \in \mathbb{Z}^2} V_{(m_1, m_2)} \exp[i(-m_2 k_1 + (m_1 - m_2)Rk_2) \cdot x]
 \end{aligned}$$

pois $R(k_1) = q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$ e $R(k_2) = q \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$, logo

$$\begin{aligned}
 m_1 Rk_1 + m_2 Rk_2 &= m_1 q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} + m_2 q \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} = q \begin{pmatrix} \frac{m_1}{2} - m_2 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} m_1 \end{pmatrix} \\
 &= q \begin{pmatrix} -\frac{m_2}{2} + \frac{m_1}{2} - \frac{m_2}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} m_2 - \frac{\sqrt{3}}{2} m_1 + \frac{\sqrt{3}}{2} m_2 \end{pmatrix} \\
 &= -m_2 q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} + (m_1 - m_2) q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \\
 &= -m_2 k_1 + (m_1 - m_2) k_2.
 \end{aligned}$$

Assim, $V_{(m_1, m_2)} = V_{(-m_2, m_1 - m_2)}$. Da mesma forma, $V(x) = \mathcal{R}^2[V](x)$ implica $V_{(m_1, m_2)} = V_{(m_2 - m_1, -m_1)}$. Introduzindo a aplicação $\tilde{R} : \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{Z}^2$ agindo nos índices dos coeficientes de Fourier de V ,

$$\tilde{R}(m_1, m_2) = (-m_2, m_1 - m_2), \quad (3.56)$$

$$\tilde{R}^2(m_1, m_2) = \tilde{R}(-m_2, m_1 - m_2) = (m_2 - m_1, -m_1),$$

$$\tilde{R}^3(m_1, m_2) = \tilde{R}(m_2 - m_1, -m_1) = (m_1, m_2),$$

temos

$$V_m = V_{\tilde{R}m} = V_{\tilde{R}^2m} \quad (3.57)$$

Ainda, $\tilde{R}(0) = 0$ e $\ker \tilde{R} = \{0\}$. Além disso, qualquer $m \neq 0$ pertence a uma órbita de \tilde{R} de comprimento três. De fato, se $m = \tilde{R}m$, então $(m_1, m_2) = (-m_2, m_1 - m_2)$, ou seja $m_1 = m_2 = 0$. Se $m = \tilde{R}^2m$, então $(m_1, m_2) = (-m_1 + m_2, -m_1)$, logo $m_1 = m_2 = 0$.

Suponha que m e n são não nulos. Dizemos que $m \sim n$ se m e n pertencem ao mesmo 3-ciclo. A relação \sim é uma relação de equivalência, que particiona $\mathbb{Z}^2 \setminus \{0\}$ em classes de equivalência, $(\mathbb{Z}^2 \setminus \{0\}) / \sim$. Denote por \tilde{S} o conjunto consistindo de exatamente um representante de cada classe de equivalência. Temos, portanto, a seguinte caracterização em séries de Fourier para potenciais do tipo reticulado colméia:

Proposição 3.4.2. *Seja $V(x)$ um potencial reticulado colméia, com $x \in \mathbb{R}^2$. Então,*

$$V(x) = \hat{V}(0) + \sum_{m \in \tilde{S}} V_m (\cos(mk \cdot x) + \cos((\tilde{R}m)k \cdot x) + \cos((\tilde{R}^2m)k \cdot x)), \quad (3.58)$$

onde V_m é real e \tilde{R} é definida em (3.56).

Para detalhes, veja (FEFFERMAN; WEINSTEIN, 2012).

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

Conforme (KIRSCH, 2008), em sistemas unidimensionais, um distúrbio arbitrariamente pequeno em um operador com potencial periódico, tornando-o levemente desordenado, mudará o espectro total de absolutamente contínuo (composto de bandas) para puramente pontual e, portanto, de condutor para isolante.

Para sistemas tridimensionais, enquanto a aleatoriedade imposta a um potencial periódico não for muito forte, a localização de Anderson ocorre apenas perto das margens de banda do espectro. Se a aleatoriedade do sistema aumentar, o espectro puramente pontual expandirá e a parte absolutamente contínua do espectro diminuirá proporcionalmente, e em determinado grau de aleatoriedade, o espectro absolutamente contínuo deve ser "consumido" pelo espectro pontual.

Para o caso $d = 2$, no qual o potencial periódico no reticulado colméia se encaixa, acredita-se que temos uma localização completa de Anderson similar ao caso $d = 1$, ou seja, uma impureza qualquer pode promover uma transição de fase de condutor para isolante. Em outros termos, a bandas do espectro são instantaneamente destruídas e o espectro se torna em puro ponto.

Considere o reticulado colméia, ilustrado na Figura 3, onde os vértices são representados como pontos pretos e brancos e as arestas como segmentos entre dois vértices.

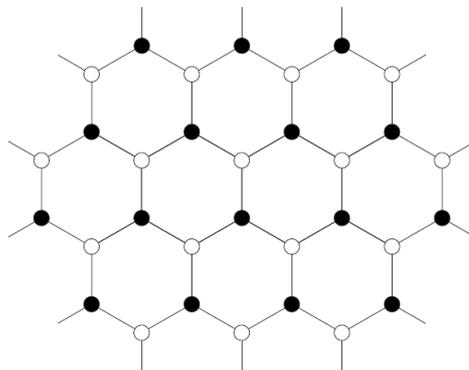


Figura 3 – (ANDO, 2013) O reticulado colméia visto como um grafo.

O reticulado hexagonal pode ser visto como um modelo discreto do grafeno, que é uma chapa de carbono de camada única, bidimensional e com estrutura de colméia. Assim, operadores de Schrödinger discretos no reticulado hexagonal podem ser considerados como Hamiltonianos discretos sobre o grafeno. Em física, o grafeno é um dos mais interessantes objetos devido ao comportamento peculiar dos elétrons, e operadores de Schrödinger discretos são largamente utilizados para investigar o grafeno. Outra abordagem é no estudo de grafos quânticos.

Do modo como o Laplaciano discreto foi estabelecido, precisamos apenas nos preocupar com as relações adjacentes entre os vértices, o que nos habilita, por (ANDO, 2013), a representar o

reticulado hexagonal da Figura 3 como a Figura 4, onde os vértices são realocados sobre a rede \mathbb{Z}^2 .

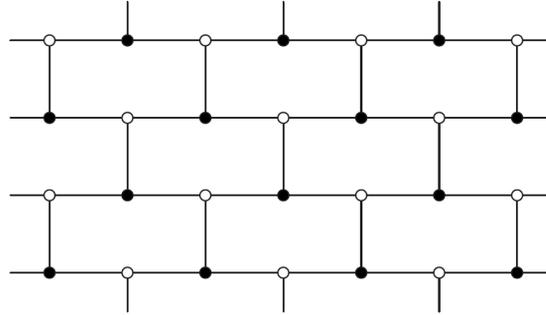


Figura 4 – (ANDO, 2013) O reticulado colméia deformado, onde os pontos pretos e brancos da Figura 3 são realocados sobre \mathbb{Z}^2 .

Vamos considerar um "caminho" unidimensional na rede bidimensional da Figura 4. Para investigar nosso caso, consideramos o potencial

$$V(x, y) = 10 \sum_{m, n \in \mathbb{Z}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2 + (y-n)^2}{0,00724}\right), \quad (4.1)$$

onde o denominador $2\sigma^2 = 0,00724$, que é o dobro da variância, foi calculado de modo a ajustar o período da função, $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, e o fator 10 que multiplica a série serve simplesmente para facilitar a visualização dos autovalores na simulação. De fato, a função V está bem definida para todo $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, um vez que

$$\begin{aligned} V(x, y) &= 10 \sum_{m, n \in \mathbb{Z}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2 + (y-n)^2}{0,00724}\right) \\ &\leq 10 \iint_{\mathbb{R}^2} \exp\left(-\frac{(x-u)^2 + (y-v)^2}{0,00724}\right) dudv + 40 < +\infty \end{aligned}$$

pelo teste da integral, e a integral da distribuição Gaussiana converge. O 40 compensa o valor no qual a série é superior a integral numa vizinhança de (x, y) .

Retratos Espectrais

Para fins de simulação, truncamos a matriz (bi-infinita) (Equação 3.29) do operador em uma matriz de M_{201} com 201 linhas e 201 colunas, sendo que o valor 201 foi escolhido pois tomamos $-100 \leq m \leq 100$ e $-100 \leq n \leq 100$. Assim, o potencial fica dado por

$$V(x, y) = 10 \sum_{m=-100}^{100} \sum_{n=-100}^{100} \exp\left(-\frac{(x-m)^2 + (y-n)^2}{0,00724}\right), \quad (4.2)$$

e o período da função foi dividido em 20 partes, de modo a facilitar a visualização. O primeiro bloco da matriz, com 20 linhas e 20 colunas (com valores arredondados) é

$$\begin{pmatrix} 7,08 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2,51 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0,44 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0,03 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0,03 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0,44 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2,51 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 7,08 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 10 & 0 \end{pmatrix}$$

Os 201 autovalores da matriz, de forma ordenada, são representados na Figura 5. Na Figura 7, temos o conjunto dos autovalores no plano complexo. Os histogramas apresentados indicam o valor dos autovalores no eixo das abscissas e a sua densidade no eixo das ordenadas.

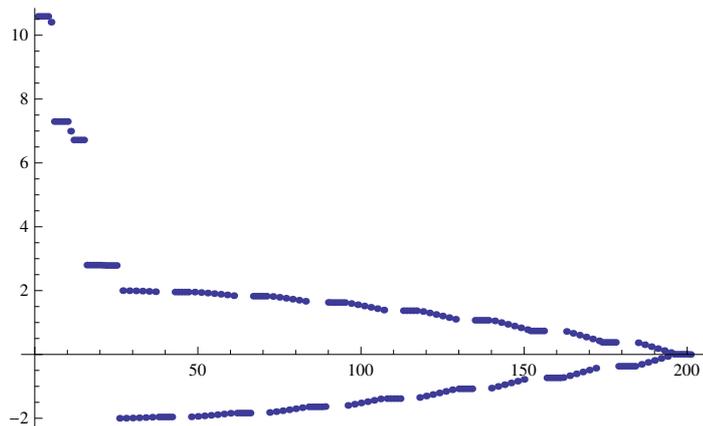


Figura 5 – Espectro do operador com potencial periódico $V(x, y)$.

Embora com 201 valores, o espectro está longe de ser normalmente distribuído, uma vez que o teste de normalidade de Shapiro-Wilk nos deu um p -valor de $4,59595 \times 10^{-15}$, o que é bem menor que os 0,05 costumeiros, para um intervalo de 95% de confiança.

Para avaliarmos o espectro com "impurezas" induzidas pela aleatoriedade, considere as variáveis aleatórias ξ_1 e ξ_2 com $\xi_j \in [0, 1]$ e distribuição uniforme, e o vetor aleatório $\xi = (\xi_1, \xi_2)$.

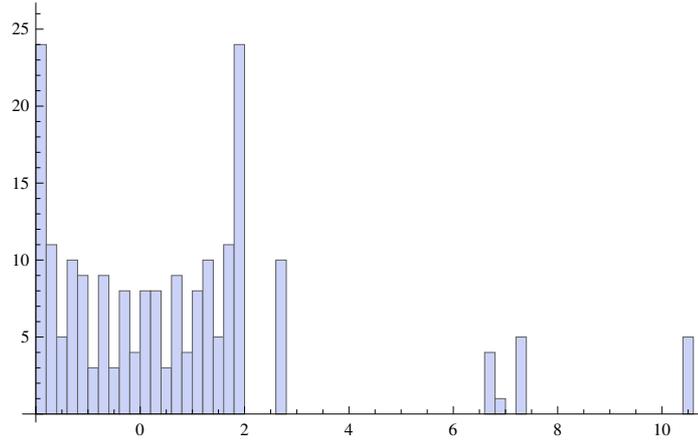


Figura 6 – Histograma do espectro do operador com potencial periódico $V(x, y)$.

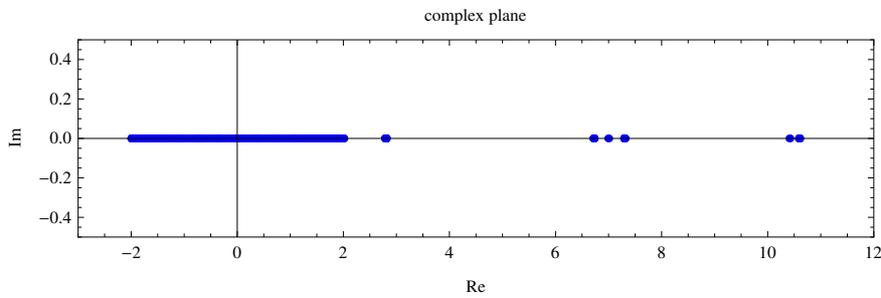


Figura 7 – Espectro do operador com potencial periódico $V(x, y)$ no plano complexo.

Então o potencial é dado por

$$V_{10^{-2}\xi}(x, y) = 10 \sum_{m=-100}^{100} \sum_{n=-100}^{100} \exp \left(-\frac{\left(\left(1 - \frac{\xi_1}{10^2} \right) x - m \right)^2 + \left(\left(1 - \frac{\xi_2}{10^2} \right) y - n \right)^2}{0,00724} \right). \quad (4.3)$$

O espectro do operador com potencial perturbado (com fator $10^{-2}\xi$) no plano complexo é apresentado na Figura 9. O espectro não é normalmente distribuído, com p -valor de $3,28622 \times 10^{-14}$ no teste de Shapiro-Wilk.

Uma vez que estamos lidando com o truncamento da matriz do operador, não poderemos perceber diferenças significativas simplesmente comparando o retrato de cada espectro. Com propósito de comparar se há diferenças significativas entre os dois espectros, utilizamos o teste de hipóteses para dados não-paramétricos de Mann-Whitney, o qual nos devolve um p -valor de 0,0668365, que é maior que 0,05 para um intervalo de 95% de confiança, logo os espectros não são significativamente diferentes.

Considere agora o potencial com perturbação $\frac{\xi}{10}$,

$$V_{10^{-1}\xi}(x, y) = 10 \sum_{m=-100}^{100} \sum_{n=-100}^{100} \exp \left(-\frac{\left(\left(1 - \frac{\xi_1}{10} \right) x - m \right)^2 + \left(\left(1 - \frac{\xi_2}{10} \right) y - n \right)^2}{0,00724} \right). \quad (4.4)$$

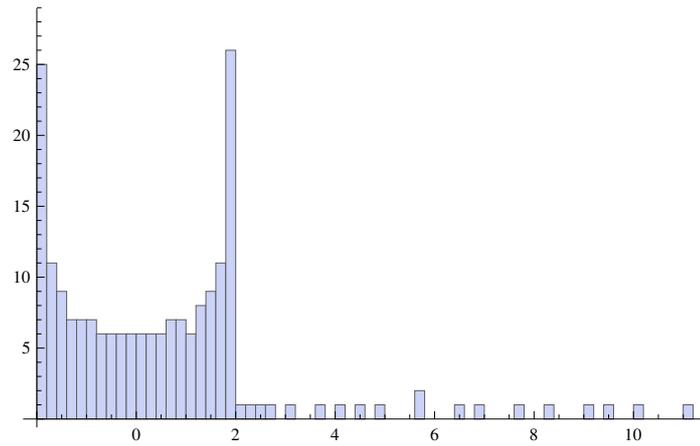


Figura 8 – Histograma do espectro do operador com potencial perturbado $V_{10^{-2}\xi}(x, y)$.

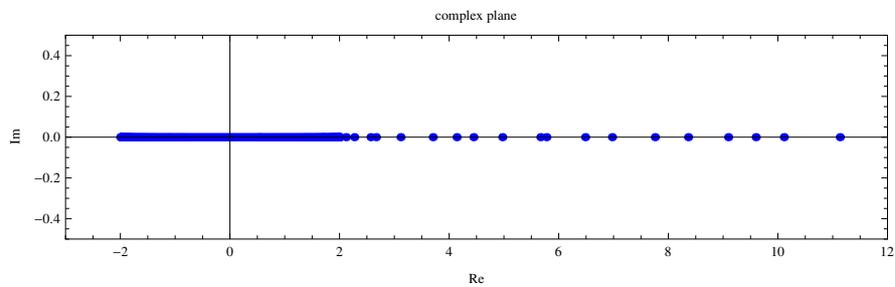


Figura 9 – Espectro do operador com potencial perturbado $V_{10^{-2}\xi}(x, y)$ no plano complexo.

O espectro do operador com potencial perturbado (com fator $10^{-1}\xi$) no plano complexo é apresentado na Figura 11. O espectro não é normalmente distribuído, com p -valor de $3,87159 \times 10^{-11}$ no teste de Shapiro-Wilk.

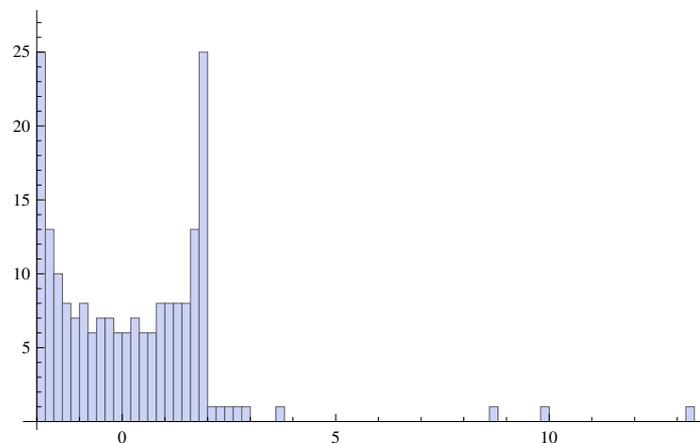


Figura 10 – Histograma do espectro do operador com potencial perturbado $V_{10^{-1}\xi}(x, y)$.

Utilizando o teste de hipóteses para dados não-paramétricos de Mann-Whitney, obtemos um p -valor de 0,139546, que é maior que 0,05 para um intervalo de 95% de confiança, quando

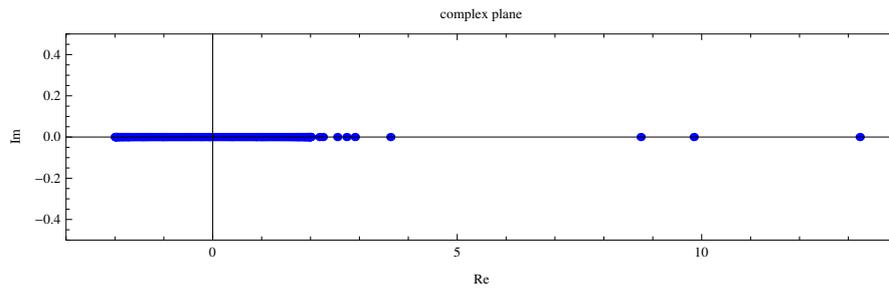


Figura 11 – Espectro do operador com potencial perturbado $V_{10^{-1}\xi}(x, y)$ no plano complexo.

comparado com o espectro do operador periódico, logo os espectros não são significativamente diferentes.

Por sua vez, considere o potencial com perturbação ξ ,

$$V_{\xi}(x, y) = 10 \sum_{m=-100}^{100} \sum_{n=-100}^{100} \exp \left(-\frac{((1 - \xi_1)x - m)^2 + ((1 - \xi_2)y - n)^2}{0,00724} \right). \quad (4.5)$$

O espectro do operador com potencial perturbado (com fator ξ) no plano complexo é apresentado na Figura 13. O espectro não é normalmente distribuído, com p -valor de $2,46672 \times 10^{-11}$ no teste de Shapiro-Wilk.

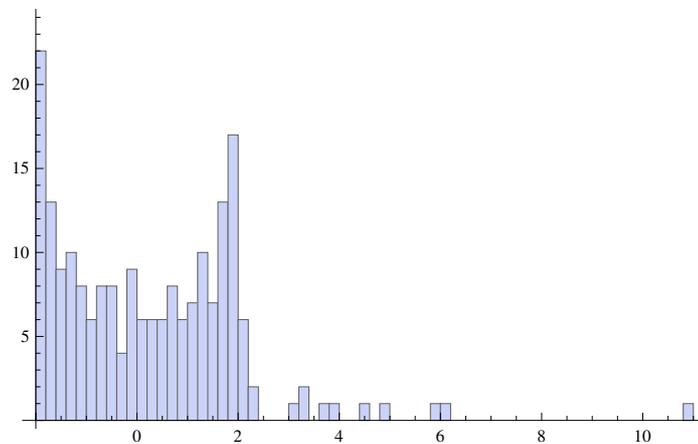


Figura 12 – Histograma do espectro do operador com potencial perturbado $V_{\xi}(x, y)$.

Utilizando o teste de hipóteses para dados não-paramétricos de Mann-Whitney, obtemos um p -valor de 0,243676, que é maior que 0,05 para um intervalo de 95% de confiança, quando comparado com o espectro do operador periódico, logo os espectros não são significativamente diferentes.

Para o potencial com perturbação 10ξ ,

$$V_{10\xi}(x, y) = 10 \sum_{m=-100}^{100} \sum_{n=-100}^{100} \exp \left(-\frac{((1 - 10\xi_1)x - m)^2 + ((1 - 10\xi_2)y - n)^2}{0,00724} \right). \quad (4.6)$$

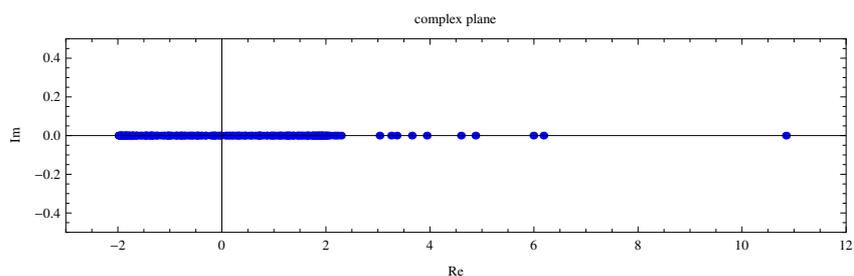


Figura 13 – Espectro do operador com potencial perturbado $V_{\xi}(x, y)$ no plano complexo.

O espectro do operador com potencial perturbado (com fator 10ξ) no plano complexo é apresentado na Figura 15. O espectro não é normalmente distribuído, com p -valor de $7,17751 \times 10^{-9}$ no teste de Shapiro-Wilk.

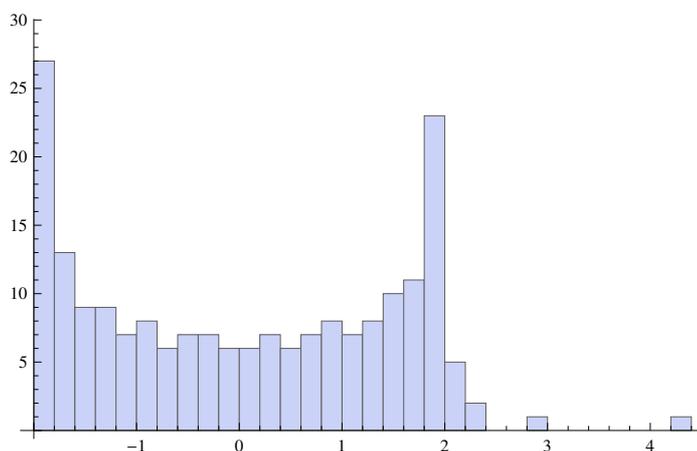


Figura 14 – Histograma do espectro do operador com potencial perturbado $V_{10\xi}(x, y)$.

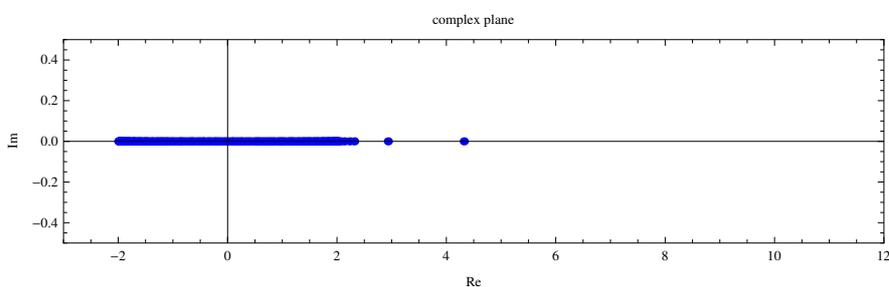


Figura 15 – Espectro do operador com potencial perturbado $V_{10\xi}(x, y)$ no plano complexo.

Utilizando o teste de hipóteses para dados não-paramétricos de Mann-Whitney, obtemos um p -valor médio de 0,073495, (o p -valor para o caso da Figura 15 é 0,0734572) que é pouco maior que 0,05 para um intervalo de 95% de confiança, quando comparado com o espectro

do operador periódico, logo os espectros não são significativamente diferentes. Realizamos 20 simulações para este caso, as quais são apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 – p -valores para o fator $10^2\xi$.

Simulação	1	2	3	4	5	6	7
p -valor	0,0687	0,0615	0,0836	0,0875	0,0589	0,0655	0,0782
Simulação	8	9	10	11	12	13	14
p -valor	0,0606	0,0622	0,1204	0,0475	0,0985	0,0679	0,0729
Simulação	15	16	17	18	19	20	
p -valor	0,0580	0,0726	0,0550	0,0469	0,1091	0,0944	

Finalmente, para o potencial com perturbação $10^2\xi$,

$$V_{10^2\xi}(x, y) = 10 \sum_{m=-100}^{100} \sum_{n=-100}^{100} \exp\left(-\frac{((1 - 100\xi_1)x - m)^2 + ((1 - 100\xi_2)y - n)^2}{0,00724}\right). \quad (4.7)$$

O espectro do operador com potencial perturbado (com fator $10^2\xi$) no plano complexo é apresentado na Figura 17. O espectro não é normalmente distribuído, com p -valor de $2,30443 \times 10^{-10}$ no teste de Shapiro-Wilk.

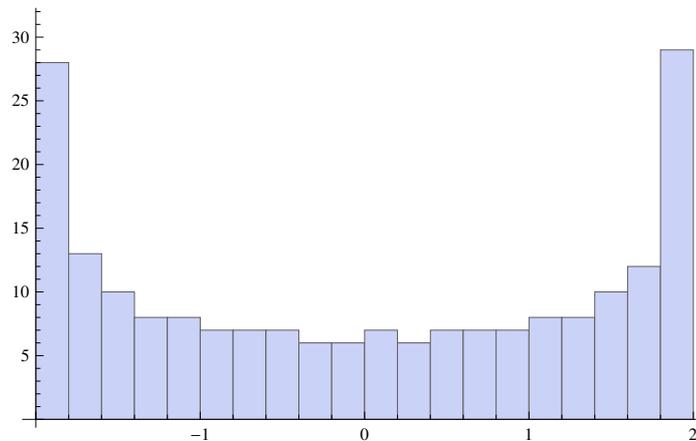


Figura 16 – Histograma do espectro do operador com potencial perturbado $V_{10^2\xi}(x, y)$.

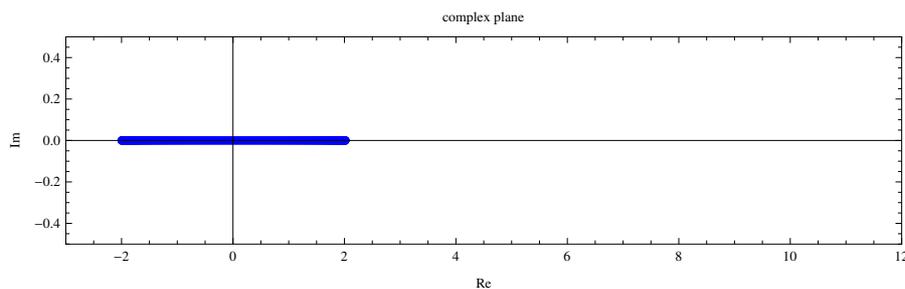


Figura 17 – Espectro do operador com potencial perturbado $V_{10^2\xi}(x, y)$ no plano complexo.

Utilizando o teste de hipóteses para dados não-paramétricos de Mann-Whitney, obtemos um p -valor médio de 0,0314439, que é pouco menor que 0,05 para um intervalo de 95% de confiança, quando comparado com o espectro do operador periódico, logo os espectros, nesse caso, são *significativamente diferentes*. Realizamos 20 simulações para este caso, as quais são apresentadas na Tabela 2.

Tabela 2 – p -valores para o fator $10^2\xi$.

Simulação	1	2	3	4	5	6	7
p -valor	0,0314	0,0335	0,0314	0,0365	0,0338	0,0314	0,0395
Simulação	8	9	10	11	12	13	14
p -valor	0,0392	0,0391	0,0314	0,0388	0,0466	0,0409	0,0346
Simulação	15	16	17	18	19	20	
p -valor	0,0317	0,0319	0,0316	0,0441	0,0361	0,0323	

Em resumo, só fomos capazes de perceber diferenças significativas do espectro do operador com potencial periódico com uma perturbação na ordem de $10^2\xi$, com $\xi \in [0, 1]^2$ uniformemente distribuído. Para os valores de perturbações menores testados, não podemos distinguir estatisticamente os dois espectros. Para maiores informações sobre programação em Mathematica, consulte (WELLIN; GAYLORD; KAMIN, 2005).

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Há quase 100 anos os operadores de Schrödinger frutificam nas pesquisas de ponta e, vez ou outra, surpreendem a todos com resultados inesperados, como no caso da descoberta dos quase-cristais pelo Nobel de Química Daniel Shechtman, para os quais, os operadores de Schrödinger quase-periódicos são os modelos quânticos ideais.

Parte do conteúdo focou-se nos pré-requisitos básicos, embora de forma bastante enxuta. Estudou-se a equação de Schrödinger na sua forma independente do tempo e resultados rigorosos dessa classe de operadores. Ainda, resultados rigorosos de operadores com potencial periódico, cujos modelos estão relacionados a cristais perfeitos, foram demonstrados, como exemplo o Teorema de Bloch, teorema este o mais importante para este tipo de potencial específico. Além disso, trabalhou-se com exemplos de algumas classes de potenciais aleatórios e o cálculo dos autovalores e respectivas autofunções de um potencial não aleatório muito importante na física, a saber, o oscilador harmônico. Autovalores e autofunções de operadores com potenciais aleatórios podem ser aproximados via simulação computacional e métodos numéricos, o que não é o objetivo deste texto e, por isso, não há exemplos desse caso. Todavia, os resultados de Anderson para este tipo de potencial garantem informações muito relevantes. Anderson concluiu que uma desordem grande (alta aleatoriedade) implica na localização dos elétrons, ou seja, os elétrons ficam confinados em uma região finita do espaço, fazendo com que a curva do quadrado do módulo da função de onda tenha decaimento acentuado. O material modelado por este tipo de potencial, em geral, se trata de um mau condutor, já que os elétrons não transitam por toda a sua extensão.

Os resultados numéricos nos mostraram estatisticamente que, para uma perturbação muito pequena, não há diferença entre o espectro do operador com potencial periódico e do perturbado, todavia quando a perturbação assume certa proporção, diferenças estatísticas significativas são observadas.

REFERÊNCIAS

- ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. **Physical Review**, v. 109, p. 1942–1958, 1958.
- ANDO, K. Inverse scattering theory for discrete schrödinger operators on the hexagonal lattice. **Annales Henry Poincaré**, v. 14, n. 2, p. 347–383, 2013.
- ARTUSO, E. **Espectro dos operadores de Schrödinger e transformações de intercâmbio de intervalos**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual Paulista, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, 2012.
- BÍBLIA Sagrada, Salmos 118:22. <https://www.bibliaonline.com.br/nvi/sl/118>: [s.n.]. Acesso em: 25/11/2019.
- BLOCH, F. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. **Zeitschrift für Physik**, v. 52, p. 555–600, 1929.
- BOURGAIN, J.; KENIG, C. On localization in the continuous anderson-bernoulli model in higherdimension. **Invent. Math.**, n. 2, p. 389–426, 2005.
- BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. **Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems**. 3. ed. [S.l.]: John Wiley and Sons, 2009.
- BURKHARDT, C. E.; LEVENTHAL, J. J. **Foundations of Quantum Physics**. New York: Springer, 2008.
- COBO, M.; OLIVEIRA, C. R. de; GUTIERREZ, C. Cantor singular continuous spectrum for operators along interval exchange transformations. **Proceedings of the American Math. Soc.**, n. 136, p. 923–930, 2008.
- DREIFUS, H. von; KLEIN, A. A new proof of localization in the anderson tight binding model. **Comm. Math. Phys.**, v. 124, n. 2, p. 285–299, 1989.
- FEFFERMAN, C. L.; WEINSTEIN, M. I. Honeycomb lattice potentials and dirac points. **Journal Of The American Mathematical Society**, v. 25, n. 4, p. 1169–1220, October 2012.
- FRÖHLICH, J.; SPENCER, T. Absence of diffusion in the anderson tight binding model for large disorder or low energy. **Comm. Math. Phys.**, v. 88, n. 2, p. 151–184, 1983.
- FUJITA, S.; ITO, K. **Quantum Theory of Conducting Matter**. New York, NY: Springer, 2007.
- GERMINET, F.; HISLOP, P.; KLEIN, A. On localization for the schrödinger operator with a poisson random potential. **Acad. Sci. Paris**, v. 341, p. 525–528, 2005.
- GRIFFITHS, D. J. **Introduction to Quantum Mechanics**. 2. ed. [S.l.]: Prentice Hall, 2004.
- HINZ, A. M. Topics from spectral theory of differential operators. In: RIO, R. del; VILLEGAS-BLAS, C. (Ed.). **Spectral Theory of Schrödinger Operators**. [S.l.]: American Mathematical Society, 2004. (Contemporary Mathematics).

- HISLOP, P. D. Lectures on random schrödinger operators. In: **Contemporary Mathematics**. [S.l.: s.n.], 2005.
- HOFFMAN, K.; KUNZE, R. **Linear Algebra**. 2. ed. [S.l.]: Prentice Hall, 1971.
- KIRSCH, W. An invitation to random schrödinger operators. with an appendix by frédéric klopp, panor. synthèses. In: **Random Schrödinger operators**. Paris: Soc. Math. France, 2008. v. 25, p. 1–119.
- KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics**. 7th. ed. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1996.
- KREYSZIG, E. **Introductory Functional Analysis**. [S.l.]: Wiley, 1978.
- KUCZMA, M. **An Introduction to the Theory of Functional Equations and Inequalities. Cauchy's Equations and Jensen's inequalities**. [S.l.]: Basel: Birkhäuser, 2009.
- LIMA, E. L. **Análise Real**. 10. ed. [S.l.]: IMPA, 2008. v. 1. (Coleção Matemática Universitária, v. 1).
- MASSIMI, M. **Pauli's Exclusion Principle: The Origin and Validation of a Scientific Principle**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005.
- OLIVEIRA, G. B. de; MARCHETTI, D. H. U. Persistência da natureza espectral em matrizes diagonais infinitas. In: GOMES, A. D. S.; FRANÇA, U.; MELO, C. D. M. de (Ed.). **XXV Congresso Paulo Leal Ferreira**. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2004.
- OLIVEIRA, W. F.; PELLEGRINO, G. Q. Characterization of spectrum and eigenvectors of the schrödinger operator with chaotic potentials. **Tendências em Matemática Aplicada e Computacional**, v. 15, p. 203–209, 2014.
- SPIEGEL, M. R. **Probabilidade e Estatística**. [S.l.]: Makron Books, 1977.
- STOLZ, G. An introduction to the mathematics of anderson localization. In: **Entropy and the quantum II**. Providence, RI: Amer. Math. Soc., 2011. (Contemp. Math., v. 552), p. 71–108.
- WELLIN, P. R.; GAYLORD, R. J.; KAMIN, S. N. **An Introduction to Programming with Mathematica**. 3. ed. New York: Cambridge University Press, 2005.