



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
UNICAMP

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

SINGULARIDADES QUÂNTICAS ASSOCIADAS A
DEFEITOS TOPOLÓGICOS EM ESPAÇOS-TEMPOS
CLASSICAMENTE SINGULARES

Autor:

João Paulo Pitelli Manoel

e-mail:

pitelli@ime.unicamp.br

Orientador:

Prof. Dr. Patricio Letelier

e-mail:

letelier@ime.unicamp.br

28 de Março de 2008

SINGULARIDADES QUÂNTICAS ASSOCIADAS A DEFEITOS TOPOLÓGICOS EM ESPAÇOS-TEMPOS CLASSICAMENTE SINGULARES.

Este exemplar corresponde à redação final da dissertação devidamente corrigida e defendida por **João Paulo Pitelli Manoel** e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 28 de Março de 2008.



Prof. Dr. Patricio Letelier

Banca Examinadora:

1. Prof. Dr. Patricio Anibal Letelier Sotomayor.
2. Prof. Dr. George Emanuel Avraam Matsas.
3. Prof. Dr. Alberto Vazquez Saa.

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, como requisito parcial para obtenção do Título de MESTRE em **Matemática Aplicada**.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP
Bibliotecária: Maria Júlia Milani Rodrigues**

M317s Manoel, João Paulo Pitelli
Singularidades quânticas associadas a defeitos topológicos em
espaços-tempos classicamente singulares / João Paulo Pitelli Manoel
– Campinas, [S.P.: s.n.], 2008.

Orientador : Patricio Anibal Letelier Sotomayor
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas,
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Relatividade Geral (Física). 2. Gravidade quântica. 3. Ope-
radores auto-adjuntos. 4. Teoria de campos. I. Sotomayor, Patricio
Anibal Letelier. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de
Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Título em inglês: Quantum singularities associated to topological defects in classically singular spacetimes.

Palavras-chave em inglês (Keywords): 1. General relativity (Physics). 2. Quantum Gravity. 3. Self-adjoint operators. 4. Field theory.

Área de concentração: Relatividade Geral/Gravitação Quântica

Titulação: Mestre em Matemática Aplicada

Banca examinadora:

Prof. Dr. Patricio Anibal Letelier Sotomayor (IMECC-UNICAMP)
Prof. Dr. George Emanuel Avraam Matsas (IFT-UNESP)
Prof. Dr. Alberto Vazquez Saa (IMECC-UNICAMP)

Data da defesa: 28-03-2008

Programa de pós-graduação: Mestrado em Matemática Aplicada

Dissertação de Mestrado defendida em 28 de março de 2008 e aprovada

Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



Prof. (a). Dr (a). PATRICIO ANIBAL LETELIER SOTOMAYOR



Prof. (a). Dr (a). GEORGE EMANUEL AVRAAM MATSAS



Prof. (a). Dr (a). ALBERTO VAZQUEZ SAA

Dedicatória

*Ao meu pai, Antônio
Carlos (in Memoriam), que
apesar do pouco tempo de
convivência, me ensinou
como ser homem e bugrino*

É

*à minha mãe, Maria de
Fátima, que nunca deixou
que nada me faltasse.*

Agradecimentos

Agradeço primeiramente ao Prof. Patricio Letelier, que soube me encaminhar às direções onde pude explorar o que tenho de melhor e me deu total liberdade ao longo do trabalho.

Agradeço aos meus tios, Genésio e Marli, à minha prima, Andréa, aos meus irmãos, Vitor e Vanessa, à minha mãe, Fátima e à minha avó, Renata, que sempre me apoiaram ao longo de todo o trabalho e me ajudaram nos momentos mais difíceis.

Agradeço a todos os meus amigos, cuja companhia fizeram os dias de trabalho parecerem bem menos desgastantes.

Gostaria também de agradecer aos funcionários do IMECC/Unicamp por sempre terem sido prestativos e educados comigo (em especial à secretária Fátima).

Por fim, agradeço o apoio financeiro do CNPQ.

Campinas,
23 de março de 2008.

João Paulo Pitelli Manoel

Abstract

Classical singular spacetimes are studied using quantum particles (instead of classical ones) obeying Klein-Gordon and Dirac equations, to determine if these spacetimes remain singular in the view of quantum mechanics. First we give a review of the mathematical framework necessary to study quantum singularities, with the main result to be used later is von Neumann's theory of deficient indices. In appendix A, a first work on quantum singularities in spacetimes with topological defects on a 2-dimensional hypersurface (cosmic walls), specifically spherical and cylindrical surfaces, is presented. These spacetimes remain singular in this theory and all extra informations (which in quantum mechanics correspond to boundary conditions) necessary to remove the naked singularity are found. In Appendix B, a $2+1$ dimensional spacetime with constant negative curvature is studied. It is shown that this spacetime remains quantum mechanically singular and all possible boundary conditions are found using results obtained in plane case.

Resumo

Espaços-tempos classicamente singulares são estudados utilizando-se partículas quânticas (ao invés de clássicas) obedecendo as equações de Klein-Gordon e Dirac, a fim de determinar se estes espaços permanecem singulares do ponto de vista quântico. Primeiramente é apresentada uma revisão do ferramental matemático necessário para o estudo de singularidades quânticas, cujo principal resultado utilizado é a teoria de índices deficientes devido a von Neumann. No apêndice A é apresentado um primeiro estudo sobre singularidades quânticas em espaços-tempos com defeitos topológicos numa superfície 2-dimensional (paredes cósmicas), em especial superfícies esféricas e cilíndricas. Estes espaços continuam singulares nesta teoria e todas as informações extras (que em mecânica quântica se apresentam sob a forma de condições de contorno) necessárias para se remover a singularidade são encontradas. No apêndice B, é estudado um espaço-tempo $2+1$ dimensional com curvatura negativa constante. É mostrado que este espaço permanece singular quando visto pela mecânica quântica e as condições de contorno possíveis são encontradas utilizando-se resultados obtidos no caso plano.

Sumário

Dedicatória	iv
Agradecimentos	v
Abstract	vi
Resumo	vii
1 Introdução	1
2 Ferramental Matemático	4
2.1 Introdução	4
2.2 Operadores Lineares Não Limitados	6
2.2.1 Operador Adjunto de Hilbert	6
2.2.2 Operadores Lineares Simétricos	9
2.2.3 Operadores Auto-Adjuntos	11
2.2.4 Operadores Lineares Fechados	17
2.3 Extensões Auto-Adjuntas	20
2.3.1 Operadores essencialmente auto-adjuntos.	23
2.4 Índices Deficientes, Transformada de Cayley	24

2.4.1	Critério para Auto-Adjunção	27
2.4.2	Método Ponto-Limite/Cículo-Limite	34
3	Singularidades Quânticas	46
4	Conclusões	50
A	Singularidades Quânticas em Espaços-tempos com Paredes Cósmicas	55
A.1	Introduction	56
A.2	Spherical and Cylindrical Walls	58
A.3	Quantum Singularities	59
A.4	Quantum Mechanics Around Bubbles and Cylindrical Shells	63
A.4.1	Bubbles	63
A.4.2	Cylindrical Shells	65
A.5	Boundary Conditions in $r = r_0$	66
A.6	Massless Particle Outside the Spherical Wall	67
A.7	Conclusions	68
B	Singularidades Quânticas no Espaço-tempo BTZ	72
B.1	Introduction	73
B.2	Quantum Singularities	74
B.3	Scalar Fields	77
B.4	Dirac Fields	80
B.5	Conclusion	84

Capítulo 1

Introdução

Em relatividade geral, singularidades num espaço-tempo são indicadas por geodésicas incompletas e/ou curvas incompletas de aceleração limitada [1]. Nos pontos onde essas curvas se encerram, a noção clássica de espaço e de tempo deixa de ser válida, assim como as leis da física, que são formuladas tendo como pano de fundo um espaço-tempo clássico.

O princípio da equivalência, que acopla a gravidade com o tensor de energia-momento, juntamente com a exigência de que a energia seja positiva implicam que a gravidade é sempre atrativa. Isto nos leva, muitas vezes, a singularidades. As tentativas de exclusão das singularidades através de uma modificação da teoria nos levam a uma gravidade repulsiva, o que não parece certo do ponto de vista físico.

A fim de garantir a previsibilidade das leis da física, foi conjecturada a hipótese fraca da censura cósmica, que diz que as singularidades que aparecem nas soluções das equações de Einstein, devem estar escondidas por um horizonte de evento. Esta hipótese nos garante que nenhum observador a uma distância infinita da singularidade, ou ao menos cuidadoso o suficiente para não ultrapassar o horizonte de eventos em direção a ela, poderá detectar qualquer efeito causado pela singularidade. Como dito por Hawking (ver [2]), esta hipótese é um pouco egoísta, já que não nos diz o que acontece com um observador que passa pelo horizonte de evento mas, apesar de ainda não ter sido provada, muitos autores desconfiam que, num contexto totalmente clássico ela esteja correta. Existe porém, a expectativa que uma teoria quântica completa da gravidade resolva este problema, ou seja, que esta teoria remova completamente as singularidades ou nos diga como corrigir as leis da física próximo

Introdução

a elas, a uma distância menor que o comprimento de Planck.

Ainda não existe tal teoria, mas ainda assim é possível analisar as singularidades de um ponto de vista quântico, através do estudo do comportamento de partículas obedecendo equações da mecânica quântica num background clássico, obtido através das equações de Einstein. Apesar de não lidarmos com uma teoria definitiva, alguns resultados podem nos dar “insights” de como proceder a fim de obter tal teoria.

Num trabalho recente, George Matsas e André Silva colocam em xeque a validade da hipótese da censura cósmica num contexto semiclássico (ver [3]), mostrando que existe uma probabilidade não nula de tunelamento de uma partícula escalar não massiva através da barreira de potencial em torno de um buraco negro extremamente carregado, fazendo com que ele adquira momento angular suficiente para que sua singularidade se transforme em uma singularidade nua (que não se “esconde” dentro de nenhum horizonte de eventos).

Neste trabalho porém, procederemos de maneira diferente. Ao invés de utilizarmos uma teoria semiclássica a fim de testar a validade da hipótese da censura cósmica, estaremos preocupados em determinar se alguns espaços classicamente singulares permanecem singulares quando testados por partículas quânticas. Para isso, estenderemos o conceito de singularidade para a mecânica quântica seguindo a definição dada por Horowitz e Marolf [4], onde um espaço é dito quanticamente não singular se a evolução de um pacote de ondas é completamente determinada a partir do pacote inicial dado em uma fatia do tipo espaço Σ no espaço-tempo. Caso contrário, o espaço é dito quanticamente singular e, assim como no caso clássico, perdemos a capacidade de prever o futuro da partícula e uma informação extra deve ser adicionada ao problema (neste caso, esta informação extra se apresenta sob a forma de condição de contorno).

É sabido que algumas singularidades nuas podem ser “curadas” quando testadas por partículas quânticas (ver [4] e [5]). E em alguns casos onde a singularidade nua persiste, as condições de contorno necessárias para remover as singularidades podem ser encontradas (ver [6], [7] e [8]).

As singularidades que serão estudadas neste trabalho não estão associadas a divergência de nenhum escalar formado a partir da métrica $g_{\mu\nu}$ e do tensor de curvatura $R_{\mu\nu\lambda\eta}$, mas devido a um defeito topológico, uma obstrução da continuação do espaço-tempo. Estes defeitos ocorrem naturalmente nas teorias do universo primitivo, baseadas na que-

Introdução

bra espontânea de simetria de algum grupo unificador. Como exemplos temos as cordas cósmicas, que surgem da quebra de simetria do grupo $U(1)$ e as paredes cósmicas, que estão associadas à quebra de uma simetria discreta. Estes defeitos são caracterizados por um tensor de curvatura $R_{\mu\nu\sigma\eta}$ nulo em todo espaço, exceto nos defeitos, onde é proporcional a uma função delta de Dirac δ .

Este trabalho será organizado da seguinte maneira: no capítulo 2 apresentaremos as ferramentas matemáticas que serão necessárias nos capítulos posteriores. No capítulo 3 definiremos matematicamente o conceito de singularidades quânticas. Nos apêndices A e B estudaremos três exemplos de espaços com defeitos topológicos e o capítulo 4 é reservado para a discussão dos resultados obtidos nos dois apêndices e para perspectivas futuras de trabalho.

Capítulo 2

Ferramental Matemático

Neste primeiro capítulo, as ferramentas básicas e os teoremas necessários para o estudo de operadores lineares não limitados em espaços de Hilbert são introduzidos. A idéia de operador adjunto de Hilbert é generalizada para o caso de operadores lineares não limitados e são estudados operadores simétricos e fechados. É dada a definição de índices deficientes e estudadas as relações desses índices com as possíveis extensões auto-adjuntas de um operador linear simétrico fechado. Uma segunda definição de operadores auto-adjuntos, os chamados operadores essencialmente auto-adjuntos é apresentada e sua importância na classificação de singularidades quânticas é ressaltada. Este texto tem como objetivo a construção das ferramentas matemáticas necessárias para o estudo de campos de Klein-Gordon, Maxwell, Schrödinger e Dirac em espaços-tempos classicamente singulares.

2.1 Introdução

Um espaço de Hilbert H sobre o corpo dos complexos $\mathbb{C}$ é um espaço vetorial com um produto interno

$$\begin{aligned} \langle, \rangle : H \times H &\longrightarrow \mathbb{C} \\ (\varphi, \psi) &\longmapsto \langle \varphi, \psi \rangle, \end{aligned} \tag{2.1}$$

antilinear na primeira entrada e linear na segunda entrada. Além disso, esse espaço é completo na norma $\|\cdot\|$, definida através do produto interno por $\|\varphi\| = \langle \varphi, \varphi \rangle^{1/2}$. No capítulo seguinte, nosso espaço de Hilbert será o espaço $L^2(\Sigma)$, o espaço das funções

quadrado integráveis numa fatia espacial Σ de um espaço-tempo estático classicamente singular. Neste espaço, nos confrontaremos com operadores diferenciais representando as equações da mecânica quântica nesse background singular clássico e analisaremos o número de extensões auto-adjuntas desses operadores. Mas antes, desenvolveremos uma teoria geral de operadores lineares num espaço de Hilbert qualquer, a fim de preparar todo o ferramental matemático necessário para o próximo capítulo.

A idéia de um operador linear num espaço de Hilbert H , é uma generalização direta da idéia de transformação linear num espaço de dimensão finita, isto é, um mapa com a seguinte propriedade:

$$T(\alpha\psi + \varphi) = \alpha T\psi + T\varphi \quad \forall \psi, \varphi \in H; \alpha \in \mathbb{C}. \quad (2.2)$$

Porém, um detalhe de extrema importância, nem sempre lembrado nos livros de mecânica quântica, é que um operador não é completamente determinado até que seu domínio seja especificado. Operadores com diferentes domínios devem ser considerados distintos. A definição formal é esta: Um operador linear $T : D(T) \longrightarrow H$ é um mapa linear de um subconjunto $D(T) \subseteq H$, o domínio de T , em um subconjunto $R(T) \subseteq H$, a imagem de T . O domínio e a imagem de T são subespaços vetoriais de H .

Um operador linear $T : D(T) \longrightarrow H$, onde $D(T) \subseteq H$, é dito limitado se existe um número $c > 0$ tal que $\forall \psi \in D(T)$

$$\|T\psi\| \leq c\|\psi\|. \quad (2.3)$$

Neste caso, a norma de T é definida por

$$\|T\| = \sup_{\psi \in D(T)} \|T\psi\| \quad (2.4)$$

Porém, é fato que muito dos operadores que aparecem em física são não limitados, por exemplo o operador posição em mecânica quântica (ver Exemplo 5).

Pela definição anterior de operador linear limitado, temos que um operador linear T é não limitado se existe uma sequência $\{\psi_n\}$ em $D(T)$, com $\|\psi_n\| = 1$ e tal que $\|T\psi_n\| \rightarrow \infty$.

O teorema de Hellinger-Toeplitz (ver [9] capítulo 10) diz que um operador linear

$T : H \longrightarrow H$ definido em todo espaço de Hilbert H e satisfazendo¹ $\langle T\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, T\psi \rangle \forall \psi, \varphi \in H$ é necessariamente limitado. Então um operador linear não limitado satisfazendo a condição anterior será definido apenas num subconjunto próprio de H . Este fato exemplifica a importância do conhecimento do domínio para operadores lineares não limitados. Então, para identificar um operador linear não limitado, deve-se primeiro especificar o domínio em que ele age e depois como ele age nesse subespaço. Para exemplificar o que foi dito, veja o exemplo a seguir.

Exemplo 1 (Operador posição). *Seja $H = L^2(\mathbb{R})$ e $D(T)$ o conjunto das funções $\phi \in L^2(\mathbb{R})$ tais que $\int_{\mathbb{R}} x^2 |\phi(x)|^2 dx < \infty$. Para $\phi \in D(T)$ defina $(T\phi)(x) = x\phi(x)$. Note que T é simétrico, pois $\langle T\phi, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} [x\phi(x)]\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)[x\psi(x)]dx = \langle \phi, T\psi \rangle$. Porém, T é não limitado, pois se escolhermos ϕ com suporte compacto "perto de mais ou menos infinito", podemos fazer $\|T\phi\|$ tão grande quanto quisermos, mantendo sempre $\|\phi\| = 1$. Obviamente, mesmo que $\phi \notin D(T)$, $x\phi(x)$ também é uma função bem definida, mas não está em $H = L^2(\mathbb{R})$. Então, se quisermos lidar somente com o espaço $H = L^2(\mathbb{R})$, devemos restringir nosso domínio. O domínio $D(T)$ escolhido é o maior domínio para o qual a imagem está em $H = L^2(\mathbb{R})$.*

Como pelo teorema de Helinger-Toeplitz, $D(T) = H$ é impossível para operadores simétricos não limitados, nos confrontamos com o problema de determinar domínios e extensões. Um operador $S : D(S) \longrightarrow H$ é dito uma extensão de T (notação, $T \subseteq S$) se $D(T) \subseteq D(S)$ e $S|_{D(T)} = T$, isto é, $S\psi = T\psi \forall \psi \in D(T)$. Se $D(T) \subsetneq D(S)$, dizemos que S é uma extensão própria de T .

2.2 Operadores Lineares Não Limitados

2.2.1 Operador Adjunto de Hilbert

Pelo teorema de representação de Riesz-Fréchet², sabemos que para um operador linear limitado $T : H \longrightarrow H$, o operador adjunto de Hilbert T^* , definido por $T^* : H \longrightarrow H$ tal

¹Operadores lineares satisfazendo essa condição, chamados simétricos ou Hermitianos, são de extrema importância em mecânica quântica. Eles serão estudados em detalhe mais tarde.

²Ver [9], Capítulo 3; [10], Capítulos 1 e 7.

que $\forall \varphi, \psi \in H$

$$\langle T^* \varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, T \psi \rangle, \quad (2.5)$$

existe, é limitado e $\|T^*\| = \|T\|$.

Para o caso geral, definiremos o operador adjunto de Hilbert T^* , para aqueles $\varphi \in H$ para os quais $\exists \varphi^* \in H$ tal que $\langle \varphi, T \psi \rangle = \langle \varphi^*, \psi \rangle \forall \psi \in D(T)$.

Para que T^* seja um mapa, deve associar a cada $\varphi \in D(T^*)$ um único $\varphi^* = T^* \varphi$. Veremos agora que isso ocorrerá se, e somente se, o domínio $D(T)$ de T é denso em H , isto é, $\overline{D(T)} = H$, onde $\overline{D(T)}$ denota o fecho do conjunto $D(T)$.

Demonstração. De fato, se $D(T)$ não é denso em H , então $D(T)^\perp \neq \{0\}$. Tomemos $\varphi_0 \in D(T)^\perp \setminus \{0\}$. Se $\varphi \in D(T^*)$, então $\exists \varphi^* \in H$ tal que $\forall \psi \in D(T)$

$$\langle \varphi, T \psi \rangle = \langle \varphi^*, \psi \rangle = \langle \varphi^*, \psi \rangle + 0 = \langle \varphi^*, \psi \rangle + \langle \varphi_0, \psi \rangle = \langle \varphi^* + \varphi_0, \psi \rangle. \quad (2.6)$$

e portanto $T^* \varphi = \varphi^*$ e $T^* \varphi = \varphi^* + \varphi_0$. T^* não está bem definido, portanto não é um mapa.

Analogamente, se $D(T)$ é denso em H , temos $D(T)^\perp = \{0\}$, portanto se $T^* \varphi = \varphi^*$ e $T^* \varphi = \bar{\varphi}$, então $\forall x \in D(T)$

$$\langle \varphi^* - \bar{\varphi}, \psi \rangle = \langle \varphi^*, \psi \rangle - \langle \bar{\varphi}, \psi \rangle = \langle \varphi, T \psi \rangle - \langle \varphi, T \psi \rangle = 0, \quad (2.7)$$

logo $\varphi^* - \bar{\varphi} \in D(T)^\perp \Rightarrow \varphi^* - \bar{\varphi} = 0 \Rightarrow \varphi^* = \bar{\varphi}$ e portanto $\varphi^* = T^* \varphi$ é único. $\square$

Quando $D(T)$ é denso em H , T é dito densamente definido em H (Como dito anteriormente, o espaço de Hilbert utilizado no próximo capítulo será o espaço L^2 . Precisaremos então de um conjunto em que nosso operador diferencial esteja bem definido e que seja denso em L^2 , pela observação anterior. Esse domínio será C_0^∞ , o conjunto das funções infinitamente diferenciáveis com suporte compacto.).

Podemos agora definir formalmente o operador adjunto de Hilbert.

Definição 1 (Operador adjunto de Hilbert). *Seja $T : D(T) \longrightarrow H$ operador linear densamente definido num espaço de Hilbert H . Então o operador adjunto de Hilbert $T^* : D(T^*) \longrightarrow H$ de T é definido como se segue. O domínio $D(T^*)$ de T^* consiste de todos os $\varphi \in H$ para os quais $\exists \varphi^* \in H$ tal que $\forall \psi \in D(T)$,*

$$\langle \varphi^*, \psi \rangle = \langle \varphi, T\psi \rangle. \quad (2.8)$$

Para cada $\varphi \in D(T^*)$, a ação de T^* é dada por

$$T^*\varphi = \varphi^*. \quad (2.9)$$

Note que se $T \subseteq S$, isto é, S é uma extensão linear de T , então $S^* \subseteq T^*$.

Demonstração. Primeiramente, se $D(T)$ é denso em H , $D(S)$ também é, já que $D(T) \subseteq D(S)$. Agora, seja $\varphi \in D(S^*)$, então $\exists \varphi^*$ tal que

$$\langle \varphi^*, \psi \rangle = \langle \varphi, S\psi \rangle \quad \forall \psi \in D(S). \quad (2.10)$$

Em particular,

$$\langle \varphi^*, \psi \rangle = \langle \varphi, S\psi \rangle = \langle \varphi, T\psi \rangle \quad \forall \psi \in D(T). \quad (2.11)$$

Logo $\varphi \in D(T^*) \Rightarrow D(S^*) \subseteq D(T^*)$. Além disso, pela equação (2.11), $\forall \varphi \in D(S^*)$, $T^*\varphi = S^*\varphi$. $\square$

Ao contrário do caso de operadores lineares limitados, o domínio $D(T^*)$ de T^* pode não ser denso em H , não podendo ser definido $T^{**} = (T^*)^*$ em todos casos. Podemos inclusive ter $D(T^*) = \{0\}$.

Exemplo 2. Tome $f \notin L^2(\mathbb{R})$ uma função mensurável limitada. Seja $D(T) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) : \int_{\mathbb{R}} |f(x)\psi(x)|dx < \infty\}$. $D(T)$ contém todas as funções em $L^2(\mathbb{R})$ de suporte compacto, logo $D(T)$ é denso em $L^2(\mathbb{R})$. Seja ψ_0 fixo em $L^2(\mathbb{R})$. Definimos então, para

ψ qualquer em $D(T)$, $(T\psi)(x) = \langle f, \psi \rangle \psi_0(x)$. Suponha agora que $\phi \in D(T^*)$, então

$$\begin{aligned} \langle T^* \phi, \psi \rangle &= \langle \phi, T\psi \rangle = \langle \phi, \langle f, \psi \rangle \psi_0 \rangle \\ &= \langle f, \psi \rangle \langle \phi, \psi_0 \rangle = \langle \langle \psi_0, \phi \rangle f, \psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Portanto $(T^* \phi)(x) = \langle \psi_0, \phi \rangle f(x)$. Mas $f \notin L^2(\mathbb{R})$, logo $\langle \psi_0, \phi \rangle = 0$ e todo $\phi \in D(T^*)$ é ortogonal a ψ_0 , assim $D(T^*)$ não é denso em $L^2(\mathbb{R})$ e não podemos definir T^{**} .

2.2.2 Operadores Lineares Simétricos

Em mecânica quântica, frequentemente lidamos com operadores $T : D(T) \longrightarrow H$ que satisfazem a relação $\langle T\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, T\psi \rangle \forall \varphi, \psi \in D(T)$. Dizemos que esses operadores são simétricos (ou Hermitianos).

Definição 2 (Operador linear simétrico). Um operador linear $T : D(T) \longrightarrow H$ densamente definido num espaço de Hilbert é dito simétrico se $\forall \varphi, \psi \in D(T)$

$$\langle T\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, T\psi \rangle. \quad (2.13)$$

Note que se T é simétrico então $T \subseteq T^*$, isto é, T^* é uma extensão de T . A recíproca dessa afirmação é também verdadeira, pois $\forall \varphi, \psi \in D(T)$

$$\langle T\varphi, \psi \rangle = \langle T^* \varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, T\psi \rangle. \quad (2.14)$$

Exemplo 3 (Operador Número). Seja $T : D(T) \longrightarrow l^2$ definido por

$$T\psi = (\eta_j), \quad \eta_j = j\xi_j \quad (2.15)$$

onde $D(T) \subset l^2$ consiste de todos os elementos $\psi = (\xi_j)$ com um número finito de termos ξ_j não nulos.

Este é um operador não limitado, densamente definido em l^2 (o espaço das sequências (ξ_j) , onde $\sum_{j=1}^{\infty} |\xi_j|^2 < \infty$). Vejamos que T é simétrico. Para isso, sejam $\psi = (\xi_j)_{1 \leq j \leq n_0}$ e $\varphi = (\eta_j)_{1 \leq j \leq n_1}$ em $D(T)$ e $N = \min\{n_0, n_1\}$, então

$$\langle \varphi, T\psi \rangle = \sum_{j=1}^N \overline{\eta_j} (j\xi_j) = \sum_{j=1}^N \overline{(j\xi_j)} \xi_j = \langle T\varphi, \psi \rangle. \quad (2.16)$$

Como $\varphi, \psi \in D(T)$ são quaisquer, concluímos que T é simétrico.

Note que o espaço l^2 é o espaço apropriado para o oscilador harmônico quântico. Um estado qualquer $|\psi\rangle$ é dado como a superposição de auto-estados do operador número

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n |n\rangle, \quad (2.17)$$

onde

$$N|n\rangle = n|n\rangle. \quad (2.18)$$

O exemplo a seguir, introduz o que será feito no próximo capítulo e nos apêndices.

Exemplo 4. Considere o operador T definido em $H = L^2(a, b)$ pelas equações

$$\begin{aligned} D(T) &= C_0^\infty(a, b); \\ Tf &= -if' \end{aligned} \quad (2.19)$$

Então, $\forall f, g \in D(T)$, temos (após uma integração por partes e usando o fato que $f(a) = f(b) = g(a) = g(b) = 0$)

$$\begin{aligned} \langle g, Tf \rangle &= \int_a^b \overline{g}(-if') dx = \underbrace{\overline{g}(-if)}_{=0} \Big|_a^b - \int_a^b \overline{g'}(-if) dx \\ &= \int_a^b \overline{-ig'} f dx = \langle Tg, f \rangle. \end{aligned} \quad (2.20)$$

O fator $-i$ em $Tf = -if'$ nos garante a simetria do operador T .

Operadores simétricos são de extrema importância em mecânica quântica, já que seus auto-valores são reais e auto-vetores correspondentes à auto-valores distintos são ortogonais. Isto é mostrado no seguinte teorema³.

³Ver [11], Capítulo 2.

Teorema 1. *Seja $T : D(T) \longrightarrow H$ operador linear simétrico. Então*

(i) *Os autovalores de T são reais.*

(ii) *Autovetores correspondentes à autovalores distintos são ortogonais.*

Demonstração. (i) Seja λ autovalor de T . Então existe $\psi \in D(T) \setminus \{0\}$ tal que $T\psi = \lambda\psi$. Como T é simétrico, temos

$$\lambda \langle \psi, \psi \rangle = \langle \psi, \lambda\psi \rangle = \langle \psi, T\psi \rangle = \langle T\psi, \psi \rangle = \langle \lambda\psi, \psi \rangle = \bar{\lambda} \langle \psi, \psi \rangle. \quad (2.21)$$

Como $\psi \neq 0$, temos $\lambda = \bar{\lambda}$ e concluímos que λ é real.

(ii) Sejam ψ e φ autovetores correspondentes aos autovalores distintos λ e μ respectivamente. Como T é simétrico

$$\begin{aligned} \lambda \langle \varphi, \psi \rangle &= \langle \varphi, \lambda\psi \rangle = \langle \varphi, T\psi \rangle = \langle T\varphi, \psi \rangle \\ &= \langle \mu\varphi, \psi \rangle = \bar{\mu} \langle \varphi, \psi \rangle = \mu \langle \varphi, \psi \rangle \end{aligned} \quad (2.22)$$

já que μ é real. Portanto

$$(\lambda - \mu) \langle \varphi, \psi \rangle = 0. \quad (2.23)$$

Como $\lambda - \mu \neq 0$, temos $\langle \varphi, \psi \rangle = 0$, logo ψ e φ são ortogonais. $\square$

2.2.3 Operadores Auto-Adjuntos

Podemos agora definir operadores lineares auto-adjuntos.

Teorema 2 (Operador linear auto-adjunto). *Um operador linear $T : D(T) \longrightarrow H$ densamente definido num espaço de Hilbert H é dito operador linear auto-adjunto se*

$$T^* = T \quad (2.24)$$

Note que para um operador ser auto-adjunto, devemos ter $D(T) = D(T^*)$. Este é o ponto chave de todo o trabalho. Como veremos mais tarde, pelo teorema de Stone,

um operador deve ser auto-adjunto a fim de nos dar a evolução do sistema físico, seja ela evolução temporal (no caso o operador em questão é o Hamiltoniano $\mathcal{H}$ do sistema) ou espacial (evolução dada pelo operador momento linear $\mathbf{p}$). Caso o operador não seja auto-adjunto, necessitaremos de uma extensão auto-adjunta a fim de obter a evolução do sistema (no nosso caso, o sistema consistirá em uma partícula escalar ou spinorial livre num espaço-tempo classicamente singular e estaremos preocupados com a evolução temporal da partícula.). No próximo capítulo, estaremos lidando com o espaço de Hilbert L^2 . O domínio do operador Hamiltoniano $\mathcal{H}$ será C_0^∞ . Este domínio é tão restritivo, apesar de ser denso em L^2 , que o operador adjunto de Hilbert terá como domínio todas as funções ψ em L^2 tais que $\mathcal{H}\psi \in L^2$, isto é, $D(\mathcal{H}^*) \supsetneq C_0^\infty$. Logo, com o domínio escolhido o operador não será auto-adjunto e teremos que nos confrontar com suas extensões auto-adjuntas. Este é um problema que aparece apenas no caso de operadores lineares não limitados. Para operadores limitados definidos em todo o espaço de Hilbert não há diferença entre operadores simétricos (ou Hermitianos) e operadores auto-adjuntos. Para operadores num espaço vetorial de dimensão finita, testamos a auto-adjunção de um operador apenas conferindo se o transposto conjugado da matriz que representa o operador numa base apropriada é igual a própria matriz. A seguir, uma afirmação muito simples de ser demonstrada, porém de grande importância.

"Todo operador auto-adjunto é simétrico".

Por outro lado, um operador linear simétrico não é necessariamente auto-adjunto, pois T^* pode ser uma extensão própria de T (ver seção 2.1).

Exemplo 5. *O operador do Exemplo 2 é simétrico, mas não é auto-adjunto. Isto porque o domínio de T^* é maior que o domínio de T , já que $D(T^*) = \{|\varphi\rangle = \sum_{n=0}^\infty \xi_n |n\rangle \in l^2 : \sum_{n=0}^\infty n^2 |\xi_n|^2 < \infty\} \supsetneq D(T)$. Veja que T^* opera em $D(T^*)$ como $T^*|\varphi\rangle = \sum_{n=0}^\infty n \xi_n |n\rangle$.*

Exemplo 6. *Seja T o operador do Exemplo 4. Para encontrar T^* devemos procurar todos os pares $(g, g^*) \in D(T^*) \times L^2(a, b)$ tais que $\forall f \in D(T)$*

$$\langle g, Tf \rangle = \langle g^*, f \rangle. \quad (2.25)$$

Então

$$\begin{aligned}\langle g^*, f \rangle &= \langle g, Tf \rangle = \langle g, -if' \rangle = -i \langle g, f' \rangle = \\ &= -i \int_a^b \bar{g} f' dx = -i \bar{g} f|_a^b + i \int_a^b \bar{g}' f = \int_a^b \overline{-ig'} f dx = \langle -ig', f \rangle,\end{aligned}\tag{2.26}$$

portanto $T^*g = -ig'$. Mas veja agora que se $g_1 \in L^2(a, b)$ e $g_1^* = -ig'_1$, então, como f tem suporte compacto em (a, b) ,

$$\langle g_1^*, f \rangle = \langle -ig'_1, f \rangle = i \langle g'_1, f \rangle = -i \langle g_1, f' \rangle = \langle g_1, -if' \rangle = \langle g_1, Tf \rangle\tag{2.27}$$

e nenhuma condição de contorno sobre g é necessária. Portanto

$$\begin{aligned}D(T^*) &= \{g \in L^2 : g' \in L^2\} \\ T^*g &= -ig'.\end{aligned}\tag{2.28}$$

Vemos assim que T^* é uma extensão própria de T , logo T não é auto-adjunto. Como dito anteriormente, o domínio de T é tão restritivo que permite que o domínio de seu adjunto de Hilbert seja muito maior.

Exemplo 7 (Operador regular de Sturm-Liouville). Apesar de tudo parecer perdido, muitos dos operadores usados em mecânica quântica são auto-adjuntos. Um exemplo é o operador regular de Sturm-Liouville T dado por

$$\begin{aligned}D(T) &= \{f \in L^2(a, b) : (-pf')' + qf \in L^2(a, b), f(a) = f(b) = 0\} \\ Tf &= (-pf')' + qf\end{aligned}\tag{2.29}$$

onde p e q são funções reais C^∞ e $p(x) > 0$ para $a \leq x \leq b$ ⁴.

Como caso particular, considere $p(x) = \frac{\hbar^2}{2m}$ e $q(x) = 0$ e temos o Hamiltoniano de uma partícula numa caixa.

Tomando no exemplo anterior $a = 0$ e $b = \pi$, temos uma partícula numa caixa de tamanho π . As auto-funções de T são $\{\sin(nx)\}_{n \in \mathbb{N}}$, que formam uma base de $L^2(0, \pi)$.

⁴Para verificar que T é auto-adjunto o procedimento é idêntico ao do Exemplo 6. Ver [10], Capítulo 10.

Podemos então tomar um estado qualquer como superposição dos auto-estados $\{\sin(nx)\}_{n \in \mathbb{N}}$ do Hamiltoniano

$$H\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x).$$

Dado um estado inicial $\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin(nx)$, a evolução do pacote de ondas é unicamente determinada pelo pacote inicial, isto é

$$\Psi(x, t) = \exp(-iHt/\hbar)\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-i\frac{\hbar}{2m}n^2t} \sin(nx). \quad (2.30)$$

Como veremos no teorema de Stone, a exponencial $\exp(-iHt/\hbar)$ só é possível pois H é auto-adjunto. Porém, H só é auto-adjunto pela imposição das condições de contorno $f(a) = f(b) = 0$. Outras condições de fronteira possíveis seriam todas da forma $f(a) = e^{i\theta}f(b)$, $\theta \in \mathbb{R}$, que implicam em conservação de probabilidade. Veremos mais tarde, que o Hamiltoniano sozinho, definido num conjunto mínimo que evite os pontos singulares a e b (isto é, $C_0^\infty(a, b)$), possui infinitas extensões auto-adjuntas. Logo, condições de fronteira serão necessárias a fim de tornar bem posto o problema de Cauchy. A partir daí, diremos que este sistema é quanticamente singular.

Vejamos como condições de fronteira apropriadas resolvem o problema de auto-adjunção para o caso do operador momento linear.

Exemplo 8. *Sejam mais flexíveis com as condições de contorno do operador T definido no exemplo 4, isto é, definimos*

$$\begin{aligned} D(T) &= \{f \in L^2 : f' \in L^2, f(b) = e^{i\theta}f(a)\} \\ Tf &= -if' \end{aligned} \quad (2.31)$$

onde $\theta \in \mathbb{R}$, vejamos que T passa a ser auto-adjunto.

Para isso, seja $g \in D(T^*)$, então $\forall \varphi \in C_0^\infty(a, b)$,

$$\langle g, -i\varphi' \rangle = \langle g, T\varphi \rangle = \langle g^*, \varphi \rangle = \langle T^*g, \varphi \rangle. \quad (2.32)$$

Mas $\langle g, -i\varphi' \rangle = i \langle g', \varphi \rangle = \langle -ig', \varphi \rangle$, logo

$$T^*g = -ig' \quad (2.33)$$

Agora, se $\psi \in D(T)$, então $\psi(b) = e^{i\theta}\psi(a)$ e

$$\begin{aligned} \langle T^*g, \psi \rangle &= \langle g, T\psi \rangle = \int_a^b \overline{g}(-i\psi')dx = -i\overline{g(x)}\psi(x)|_a^b + i \int_a^b \overline{g'}\psi dx \\ &= i\psi(a)[\overline{g(a)} - e^{i\theta}\overline{g(b)}] + \int_a^b \overline{-ig'}\psi dx \\ &= i\psi(a)[\overline{g(a)} - e^{i\theta}\overline{g(b)}] + \langle -ig', \psi \rangle \\ &= i\psi(a)[\overline{g(a)} - e^{i\theta}\overline{g(b)}] + \langle T^*g, \psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Assim $g(b) = e^{i\theta}g(a)$, o que implica que $D(T) = D(T^*)$ e portanto $T = T^* \Rightarrow T$ é operador auto-adjunto.

Tomemos nesse exemplo $(a, b) = (0, 2\pi)$. Então as autofunções de T são encontradas como se segue

$$\begin{aligned} -if' &= \lambda f \\ f(2\pi) &= e^{i\theta}f(0) \end{aligned} \quad (2.35)$$

logo os autopares de T são $(\lambda_n = \frac{\theta}{2\pi} + n, f_n = e^{\frac{i\theta x}{2\pi}} e^{inx})$, com $n \in \mathbb{Z}$. As autofunções $f_n(x)$ formam um conjunto completo de $L^2(0, 2\pi)$, já que podemos expandir $e^{-i\frac{\theta x}{2\pi}}g(x)$, com $g(x) \in L^2(0, 2\pi)$ qualquer, numa série de Fourier ordinária.

Repare que o operador apresentado no exemplo 8 é uma extensão própria do operador do exemplo 4. Portanto o operador

$$\begin{aligned} D(T) &= C_0^\infty(a, b); \\ Tf &= -if' \end{aligned} \quad (2.36)$$

possui uma família incontável (1 parâmetro) de extensões auto-adjuntas⁵.

⁵Este é o exemplo mais simples de um operador não "essencialmente auto-adjunto", conceito que será introduzido mais tarde.

Uma propriedade especial dos operadores lineares auto-adjuntos é que seu espectro⁶ é real. Além disso, é constituído apenas dos espectros discreto ($\sigma_p(T)$, o conjunto dos autovalores de T) e contínuo ($\sigma_c(T)$, o conjunto dos pontos $\lambda \in \mathbb{C}$ tais que o operador $T - \lambda$ possui inverso não limitado com domínio denso em H). Apresentamos este fato no seguinte teorema⁷.

Teorema 3 (Espectro de operadores lineares auto-adjuntos). *Seja $T : D(T) \longrightarrow H$ operador linear auto-adjunto num espaço de Hilbert complexo H . Então seu espectro $\sigma(T)$ é real e fechado. Além disso, seu espectro residual $\sigma_r(T)$ (o conjunto dos pontos $\lambda \in \mathbb{C}$ tais que o operador $T - \lambda$ possui inverso, limitado ou não limitado, cujo domínio não é denso em H) é vazio.*

O teorema anterior nos mostra porque os observáveis em mecânica quântica são representados por operadores auto-adjuntos. Obviamente, queremos medir quantidades reais. Note que o teorema acima exige que o operador seja auto-adjunto. Um operador simétrico (ou Hermitiano) possui todos os autovalores reais, mas nada garante que o restante do seu espectro seja real. Além disso, seu espectro residual pode ser não vazio. O espectro contínuo é constituído por autovetores aproximados, ou seja, se $\lambda \in \sigma_c(T)$, existe uma sequência $\{\varphi_n\}$ de vetores em H , com $\|\varphi_n\| = 1$, tal que $\lim_{n \rightarrow \infty} \|(T - \lambda)\varphi_n\| = 0$. Já para o espectro residual isso não acontece. Vemos assim a importância de termos, além de um espectro real, um espectro residual vazio, para uma possível decomposição espectral de um vetor em H . O teorema a seguir⁸ é chamado teorema espectral e nos dá a generalização da diagonalização de matrizes para operadores em espaços de dimensão infinita. Note que o operador é exigido ser auto-adjunto, não basta apenas ser simétrico.

Teorema 4 (Teorema Espectral). *Seja $\mathcal{H}$ um operador linear auto-adjunto num espaço de Hilbert H . Então H é isomórfico a um espaço de Hilbert de funções, $\int^\oplus H_\lambda \equiv L^2(\sigma(\mathcal{H}); H_\lambda)$, onde para cada $\lambda \in \sigma(\mathcal{H})$, H_λ é um espaço de Hilbert cuja dimensão depende de λ . Se $\psi \in L^2(\sigma(\mathcal{H}); H_\lambda)$ então para cada $\lambda \in \sigma(\mathcal{H})$, $\psi(\lambda)$ é um vetor em H_λ e a norma em $L^2(\sigma(\mathcal{H}); H_\lambda)$ é definida pela fórmula*

$$\|\psi\|^2 = \int_{\sigma(\mathcal{H})} \|\psi(\lambda)\|_{H_\lambda}^2 d\mu(\lambda), \quad (2.37)$$

⁶Para definição, ver [10], Capítulo 8.

⁷Para demonstração, ver [9], Capítulo 10.

⁸Ver [12], Capítulo 1.

onde μ é a medida em $\sigma(\mathcal{H})$ (μ é chamada medida de Stieltjes, ela é uma função contínua sobre todo o espectro contínuo e constante por partes, dando saltos finitos sobre os auto-valores). Sob este isomorfismo, $\mathcal{H}$ corresponde ao operador multiplicação por λ . Isto é, se U é uma bijeção isométrica de $\int^\oplus H_\lambda$ em H , então

$$\mathcal{H} = DUD^{-1}, \quad (2.38)$$

onde

$$[D\psi](\lambda) \equiv \lambda\psi(\lambda) \quad \forall \lambda \in \sigma(\mathcal{H}). \quad (2.39)$$

Exemplo 9 (Operador momento linear). Seja $T : D(T) \longrightarrow H$ definido pelas equações

$$\begin{aligned} D(T) &= \{f \in L^2(-\infty, +\infty) : f' \in L^2(-\infty, +\infty)\}; \\ Tf &= -if'. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Este operador é auto-adjunto e representa o observável momento linear em mecânica quântica. Seu espectro consiste em toda reta real e é puramente contínuo, ou seja, T não possui auto-valores. Qualquer função $\psi(x) \in L^2$ pode ser representada como

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(\lambda) e^{i\lambda x} d\lambda \quad (2.41)$$

onde $\tilde{\psi}(\lambda)$ é a transformada de Fourier de $\psi(x)$. Repare que esta representação só é possível pois T é auto-adjunto⁹.

2.2.4 Operadores Lineares Fechados

Definição 3 (Operador linear fechado). Seja $T : D(T) \longrightarrow H$ um operador linear num espaço de Hilbert H . Então T é dito fechado se

$$\begin{cases} \psi_n \longrightarrow \psi & [\psi_n \in D(T)] \\ T\psi_n \longrightarrow \varphi \end{cases} \quad (2.42)$$

⁹ Ver Teorema de Stone, que será enunciado na próxima sessão.

implicam $\psi \in D(T)$ e $T\psi = \varphi$.

Um operador linear T não limitado que não é fechado pode ou não ter uma extensão fechada. Se tiver, ele é dito um operador fechável, e a menor de tais extensões é chamada fecho de T , denotada por $\overline{T}$. Obviamente, T é fechável se, e somente se, tem a propriedade de sempre que duas sequências (ψ_n) e (φ_n) convergirem para o mesmo limite ξ em H e $(T\psi_n)$ e $(T\varphi_n)$ convergirem, então as duas últimas sequências convergem para o mesmo limite η . Se T tem essa propriedade, então o seu fecho é obtido definindo $\overline{T}\xi = \eta$ para cada par (ξ, η) .

Existe uma relação simples entre as noções de operador adjunto de Hilbert e fecho¹⁰.

Teorema 5. *Seja T operador linear densamente definido num espaço de Hilbert H . Então*

- (a) T^* é fechado.
- (b) T é fechável se, e somente se, $D(T^*)$ é denso em H . Neste caso $\overline{T} = T^{**}$.
- (c) Se T é fechável, então $(\overline{T})^* = T^*$.

Um operador linear simétrico é sempre fechável, já que $T \subseteq T^*$. Como T^* é uma extensão fechada de T , o fecho de T (neste caso T^{**} pelo teorema anterior) deve estar contido em T^* , logo $T^{**} \subset T^*$. Então para operadores simétricos

$$T \subset T^{**} \subset T^* \quad (2.43)$$

Para operadores simétricos fechados,

$$T = T^{**} \subset T^* \quad (2.44)$$

Para operadores auto-adjuntos,

$$T = T^{**} = T^*. \quad (2.45)$$

Vemos assim que um operador linear simétrico fechado é auto-adjunto se, e somente se, T^* é simétrico, pois nesse caso $T^* \subseteq T^{**}$.

¹⁰Ver [13], Capítulo 8.

Podemos agora provar um critério para determinar se um operador é auto-adjunto.

Teorema 6. *Seja T um operador linear simétrico num espaço de Hilbert H . Então as três afirmações seguintes são equivalentes:*

- (a) T é auto-adjunto.
- (b) T é fechado e $\text{Ker}(T^* \pm i) = \{0\}$.
- (c) $\text{Ran}(T \pm i) = H$.

Denotamos aqui o núcleo de um operador T como $\text{Ker}(T) = \{\psi \in D(T) : T\psi = 0\}$ e sua imagem como $\text{Ran}(T) = \{T\psi : \psi \in D(T)\}$.

Demonstração. (i) $\Rightarrow$ (ii) Se T é auto-adjunto, então $T = T^*$ é fechado pelo teorema 5. Além disso $(T \pm i)\varphi = 0 \Rightarrow T\varphi = \mp i\varphi$. Logo

$$\begin{array}{ccc}
 \langle T\varphi, \varphi \rangle & = & \langle \varphi, T\varphi \rangle \\
 \parallel & & \parallel \\
 \pm i \langle \varphi, \varphi \rangle & = & \mp i \langle \varphi, \varphi \rangle \\
 \underbrace{\hspace{1.5cm}} & & \\
 \Downarrow & & \\
 \langle \varphi, \varphi \rangle & = & 0 \\
 \Downarrow & & \\
 \varphi & = & 0
 \end{array}$$

(ii) $\Rightarrow$ (iii) Seja $\varphi \in \text{Ran}(T \pm i)^\perp$, então $\langle \varphi, (T \pm i)\psi \rangle = 0 \ \forall \psi \in D(T)$. Então $\langle \varphi, T\psi \rangle = \mp i \langle \varphi, \psi \rangle = \langle \pm i\varphi, \psi \rangle \ \forall \psi \in D(T)$. Logo $\varphi \in D(T^*)$ e $T^*\varphi = \pm i\varphi$. Portanto $\varphi \in \text{Ker}(T^* \mp i) = \{0\} \Rightarrow \varphi = 0$. Assim $\text{Ran}(T \pm i)^\perp = \{0\}$, logo $\text{Ran}(T \pm i)$ é denso em H . Basta agora mostrar que $\text{Ran}(T \pm i)$ é fechado. Mas T é fechado, logo $T \pm i$ também é. Então se (ψ_n) é uma sequência convergente em $\text{Ran}(T \pm i)$, ou seja, $\psi_n = (T \pm i)\varphi_n \longrightarrow \psi$, com $\varphi_n \in D(T)$, temos $\|\psi_n - \psi_m\| \longrightarrow 0$ e como

$$\|(T \pm i)\varphi\| = \|T\varphi\| + \|\varphi\| \quad (2.46)$$

$\forall \varphi \in D(T)$, temos $\|\varphi_n - \varphi_m\| \leq \|\psi_n - \psi_m\| \longrightarrow 0$. Portanto (φ_n) converge. Assim

$\varphi_n \longrightarrow \varphi$ e $(T \pm i)\varphi_n \longrightarrow \psi$ e como $T \pm i$ é fechado, temos que $\psi = (T \pm i)\varphi \Rightarrow \psi \in \text{Ran}(T \pm i)$. Portanto $\text{Ran}(T \pm i)$ é fechado, logo $\text{Ran}(T \pm i) = H$.

(iii) $\Rightarrow$ (i) Seja $\varphi \in D(T^*)$. Como $\text{Ran}(T \pm i) = H$, $\exists \psi \in \text{Ran}(T \pm i)$, tal que $(T \pm i)\psi = (T^* \pm i)\varphi$. Agora, $D(T) \subseteq D(T^*)$, logo $\varphi - \psi \in D(T^*)$ e

$$(T^* \pm i)(\varphi - \psi) = 0. \quad (2.47)$$

Como $\text{Ran}(T \pm i) = H$, $\text{Ker}(T^* \pm i) = \{0\}$, logo $\varphi = \psi \in D(T)$ e portanto pertence à $D(T^*)$, então T é auto-adjunto. $\square$

Nesta seção, estudamos operadores lineares fechados. Na prática, não estaremos preocupados se os operadores utilizados são fechados ou não (geralmente não serão fechados), já que, como veremos mais tarde, um operador e seu fecho possuem as mesmas extensões auto-adjuntas. Porém, os resultados sobre extensões auto-adjuntas da próxima sessão são demonstrados mais facilmente se assumirmos que estamos trabalhando apenas com operadores lineares fechados.

2.3 Extensões Auto-Adjuntas

A distinção entre operadores simétricos fechados e operadores auto-adjuntos é muito importante. É somente para operadores auto-adjuntos que vale o teorema espectral¹¹ e somente operadores auto-adjuntos podem ser exponenciados para dar um grupo unitário de 1-parâmetro que nos dá a dinâmica em mecânica quântica¹².

Exporemos agora alguns teoremas importantes, devido a M.H. Stone¹³, que mostram a importância dos operadores auto-adjuntos em mecânica quântica.

Teorema 7. *Seja A um operador auto-adjunto e defina $U(t) = e^{itA}$. Então*

(a) *Para cada $t \in \mathbb{R}$, $U(t)$ é um operador unitário e $U(t+s) = U(t)U(s) \forall t, s \in \mathbb{R}$.*

¹¹Ver Teorema 4

¹²Ver [14], Capítulo 2 para uma discussão simples e interessante sobre as propriedades do operador evolução-temporal de um sistema em mecânica quântica.

¹³Ver [13], Capítulo 8

(b) Se $\psi \in H$ e $t \rightarrow t_0$, então $U(t)\psi \rightarrow U(t_0)\psi$.

(c) Para $\psi \in D(A)$, $\frac{U(t)\psi - \psi}{t} \rightarrow iA\psi$ com $t \rightarrow 0$.

(d) Se $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)\psi - \psi}{t}$ existe, então $\psi \in D(A)$.

Definiremos agora o conceito de grupo unitário contínuo de 1-parâmetro.

Definição 4. Uma função operador de um parâmetro $U(t)$ satisfazendo (a) e (b) no Teorema 7 é chamado grupo contínuo de 1-parâmetro.

Teorema 8 (Teorema de Stone). Seja $U(t)$ um grupo unitário contínuo de 1-parâmetro num espaço de Hilbert H . Então existe um operador auto-adjunto A em H tal que $U(t) = e^{itA}$.

O teorema acima é de extrema importância em mecânica quântica. Quando lidarmos com operadores simétricos não auto-adjuntos, serão necessárias extensões auto-adjuntas desse operador a fim de obtermos grupos unitários contínuos de 1-parâmetro para a evolução do sistema. A partir daí sairá naturalmente a definição de singularidades quânticas.

No Exemplo 9, vemos claramente o funcionamento do Teorema 8 num caso prático. Mas veja que agora o parâmetro é a posição e T é o gerador infinitesimal de translação.

Em mecânica quântica não relativística, a equação que governa o sistema físico é a equação de Schrödinger

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle \quad (2.48)$$

onde $\mathcal{H}$ representa o operador Hamiltoniano do sistema (suponhamos que $\mathcal{H}$ seja independente do tempo). Se o operador Hamiltoniano for auto-adjunto, o estado do sistema num instante t pode ser obtido usando-se o operador $e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}$ da forma

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}|\psi(t=0)\rangle. \quad (2.49)$$

A idéia por trás do comentário que segue o exemplo 7 é que se os autovetores $\{|\varphi_n\rangle\}$ do

operador Hamiltoniano $\mathcal{H}$ formam uma base do espaço de Hilbert H , podemos exponenciar $\mathcal{H}$ da forma tradicional, ou seja

$$e^{i\mathcal{H}t/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\mathcal{H}t/\hbar)^n}{n!} \quad (2.50)$$

e obteremos

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\mathcal{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle. \quad (2.51)$$

Ou seja, a evolução do sistema é determinada unicamente pelo estado inicial.

No Exemplo 12 faremos uma discussão física muito interessante da falha do operador do Exemplo 4 em descrever a evolução espacial de um pacote de ondas.

Motivações físicas dão origem a expressões para o operador Hamiltoniano do sistema. Ele é geralmente um operador com derivadas parciais num espaço L^2 apropriado. A princípio, o domínio do operador não está especificado.

Geralmente é simples encontrar um domínio onde o operador Hamiltoniano é um operador simétrico T bem definido (que pode não ser auto-adjunto). Se o fecho $\overline{T}$ de T é auto-adjunto, podemos usá-lo, mas se $\overline{T}$ não for auto-adjunto, temos que nos perguntar se $\overline{T}$ possui extensões auto-adjuntas. E se possuir várias extensões, qual delas devemos utilizar?

Para ilustrar isto, considere o Hamiltoniano $\mathcal{H}$ de uma partícula presa numa região limitada Σ . Ele é um operador Laplaciano e tomamos como seu domínio o conjunto $C_0^\infty(\Sigma)$. Neste domínio, o Hamiltoniano está bem definido, é simétrico, porém não é auto-adjunto (lembre que o conjunto C_0^∞ é tão restritivo que permite que o domínio do adjunto de Hilbert do operador Hamiltoniano seja muito maior, isto é, $D(\mathcal{H}^*) = \{f \in L^2 : f' \in L^2\}$) e possui uma infinidade de extensões auto-adjuntas (dadas por T agindo em domínios maiores) que correspondem a diferentes condições de contorno impostas na fronteira. Cada uma dessas extensões pode ser usada para determinar a evolução do

sistema (a evolução não é única até uma informação extra ser adicionada)¹⁴.

Podemos agora definir o conceito de operadores essencialmente auto-adjuntos, que correspondem a operadores que possuem uma única extensão auto-adjunta.

2.3.1 Operadores essencialmente auto-adjuntos.

Definição 5. *Um operador linear simétrico T é dito essencialmente auto-adjunto se seu fecho $\overline{T}$ é auto-adjunto.*

Se T é essencialmente auto-adjunto, então T possui uma única extensão auto-adjunta. Isto porque se S é uma extensão auto-adjunta de T , então $T \subseteq S$, o que implica (por uma observação feita após a Definição 1) que $S = S^* \subseteq T^*$, logo $T^{**} \subseteq S$. Mas $T^{**} = \overline{T} = \overline{T}^* = T^*$, logo $T^* \subseteq S \Rightarrow S = \overline{T}^*$. Analogamente, se T possui uma única extensão auto-adjunta, então T é essencialmente auto-adjunto.

Note que se T é essencialmente auto-adjunto, então $\overline{T}^* = \overline{T} \Rightarrow T^* = T^{**}$, pelo Teorema 5. Portanto, T é essencialmente auto-adjunto se, e somente se, T^* é auto-adjunto.

Como dito anteriormente para o caso de uma partícula presa numa região limitada, frequentemente nos deparamos com um operador simétrico não auto-adjunto T . Se T é essencialmente auto-adjunto, sabemos que existe um único operador auto-adjunto associado à T . Assim, para identificar T não é necessário que se indique o seu domínio exato.

Exemplo 10 (Operador número). *Seja $D(T)$ o conjunto de todos os $\xi = (x_1, x_2, \dots) \in l^2$ com um número finito de termos x_j não nulos. Se $\xi = (x_1, x_2, \dots) \in D(T)$ então $T\xi = (x_1, 2x_2, 3x_3, \dots)$.*

T é um operador linear simétrico, mas não é fechado, já que a sequência $(\xi_n) \in D(T)$ tal que

$$\xi_n = \begin{cases} \frac{1}{j} & \text{se } j \leq n \\ 0 & \text{se } j > n \end{cases}$$

¹⁴Dizemos aqui que temos uma singularidade quântica. Definiremos isto de maneira formal mais tarde.

converge para $(\frac{1}{j})_{j \in \mathbb{N}} \notin D(T)$. O operador adjunto de Hilbert de T é dado por

$$D(T) = \{\xi = (x_2, x_2, \dots) \in l^2 : \sum_{j=1}^{\infty} j^2 |x_j|^2 < \infty\}$$

$$T^* \xi = (jx_j).$$

Agora, T^* é auto-adjunto (ver Exemplo 5), portanto T é essencialmente auto-adjunto. Veja que o fecho de T é o próprio adjunto de Hilbert T^* . Este exemplo explica porque quando estudamos o oscilador harmônico quântico, não nos preocupamos com o domínio do operador número de quanta de excitação.

Exemplo 11. O operador dado no Exemplo 4

$$D(T) = C_0^\infty(a, b);$$

$$Tf = -if'$$
(2.52)

não é essencialmente auto-adjunto pois como vimos no Exemplo 8, T possui uma infinidade de extensões auto-adjuntas.

2.4 Índices Deficientes, Transformada de Cayley

Seja M um subespaço de um espaço vetorial V . A codimensão de M é definida como a dimensão do seu complemento ortogonal, $M^\perp$.

Seja T um operador linear simétrico num espaço de Hilbert H . Os índices deficientes de T são definidos como

$$n_+ = \text{codim Ran}(T + i)$$

$$n_- = \text{codim Ran}(T - i).$$
(2.53)

Veremos que esses índices são essenciais para determinação do número de extensões auto-ajuntas de um operador linear simétrico fechado.

Introduzimos agora um conceito que será de primeira importância para demonstrar o critério que avaliará se um operador é essencialmente auto-adjunto.

Definição 6. A transformada de Cayley U de um operador linear simétrico $T : D(T) \longrightarrow H$, é definida como

$$U = (T - i)(T + i)^{-1}. \quad (2.54)$$

Vemos pela definição acima que $D(U) = \text{Ran}(T + i)$. Então, $\forall y \in \text{Ran}(T + i)$, definimos $x = (T + i)^{-1}y$ e, como T é simétrico, temos

$$\begin{aligned} \|Uy\|^2 &= \langle (T - i)y, (T - i)y \rangle = \langle Tx, Tx \rangle - i \langle x, Tx \rangle + i \langle Tx, x \rangle + \langle x, x \rangle \\ &= \langle Tx, Tx \rangle + \langle Tx, ix \rangle + \langle iTx, x \rangle + \langle x, x \rangle = \langle (T + i)x, (T + i)x \rangle \\ &= \|(T + i)x\|^2 = \|(T + i)(T + i)^{-1}y\|^2 = \|y\|^2 \end{aligned}$$

ou seja, U é uma isometria de $\text{Ran}(T + i)$ em $\text{Ran}(T - i)$.

Se T é auto-adjunto, então, pelo Teorema 6, $\text{Ran}(T + i) = \text{Ran}(T - i) = H$ e portanto U é unitário¹⁵. Reciprocamente, se U é um operador unitário, então $\text{Ran}(T \pm i) = H$ e pelo Teorema 6, T é auto-adjunto.

Veja agora que os índices deficientes definidos anteriormente correspondem à:

$$\begin{aligned} n_+ &= \dim D(U)^\perp \\ n_- &= \dim \text{Ran}(U)^\perp. \end{aligned} \quad (2.55)$$

O próximo lema servirá de base para demonstração do principal teorema do texto.

Lema 1. Seja $T : D(T) \longrightarrow H$ operador linear simétrico com transformada de Cayley U . Então

$$\begin{aligned} D(T) &= \text{Ran}(1 - U) \\ T &= i(1 + U)(1 - U)^{-1}. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Reciprocamente, se U é uma isometria e $\text{Ran}(1 - U)$ é denso em H , então $1 - U$ é inversível, o operador definido acima é simétrico e U é sua transformada de Cayley.

Demonstração. $\Rightarrow$) Seja $y \in D(U)$, ou seja, $y = (T + i)x$ com $x \in D(T)$. Então $Uy = (T - i)x$, logo $(1 - U)y = (T + i)x - (T - i)x = 2ix$. Portanto $Uy = 0 \Rightarrow x = 0 \Rightarrow y = 0$, logo

¹⁵Usamos aqui que um operador linear limitado num espaço de Hilbert complexo H é unitário se, e somente se, é uma isometria sobrejetiva. Ver [9], Capítulo 3.

$1 - U$ é injetivo e portanto possui inversa. Assim, para $T \in D(T)$, temos $x = \frac{1}{2i}(I - U)y$ e $i(1 + U)(1 - U)^{-1}x = \frac{1}{2}(1 + U)y = Tx$, logo $T = i(1 + U)(1 - U)^{-1}$.

$\Leftarrow$) Seja $x \in D(T)$. Então $(1 - U)x = 0$ implica $\langle y, (1 - U)x \rangle = 0 \ \forall y \in D(U)$. Agora, $\langle y, (1 + U)x \rangle = \langle y, x \rangle - \langle y, Ux \rangle = \langle Uy, Ux \rangle - \langle y, Ux \rangle$ já que U é isométrica. Assim $0 = \langle y, (1 + U)x \rangle = 0 = \langle (1 - U)y, Ux \rangle \ \forall y \in D(U)$. Como $\text{Ran}(1 - U)$ é denso em H , temos $Ux = 0$ e portanto $x = 0$. Logo $1 - U$ é injetivo e portanto possui inversa. Vejamos agora que U é a transformada de Cayley de T . Bem, $T + i = i(1 + U)(1 - U)^{-1} + i(1 - U)(1 - U)^{-1} = [i(1 + U) + i(1 - U)](1 - U)^{-1} = 2i(1 - U)^{-1}$. Então $(T + i)^{-1} = \frac{1}{2i}(1 - U) \Rightarrow (T - i)(T + i)^{-1} = 2i(1 - U)^{-1} \frac{1}{2i}(1 - U) = U$. Para ver que T é simétrico, tomemos $x, y \in D(U)$ quaisquer e temos

$$\begin{aligned}\langle Ty, x \rangle &= \langle -i(y + Uy), x - Ux \rangle \\ \langle y, Tx \rangle &= \langle (y - Uy), -i(x + Ux) \rangle\end{aligned}$$

e não é difícil ver que as duas expressões são iguais, já que T é simétrico □

Consideraremos aqui apenas operadores simétricos fechados. Não há perda de generalidade nisso, já que todo operador simétrico é fechável e o operador e seu fecho possuem as mesmas extensões auto-adjuntas (pois sejam T um operador linear simétrico e $\bar{T}$ o fecho de T . Se S é extensão auto-adjunta de $\bar{T}$, também é extensão auto-adjunta de T já que $T \subseteq \bar{T} \subseteq S$. Se S é extensão auto-adjunta de T , então S é fechado pelo Teorema 5, mas então $\bar{T} \subseteq S$).

O teorema apresentado a seguir é o principal teorema de todo texto e será o nosso critério para avaliar se um operador é essencialmente auto-adjunto.

Teorema 9 (von Neumann). *Seja $T : D(T) \longrightarrow H$ operador simétrico fechado com índices deficientes $n_+ = n_- = n$ e seja U sua transformada de Cayley. Então*

- (a) *Se A é uma extensão auto-adjunta de T e V é sua transformada de Cayley, então V é uma extensão de U que mapeia $\text{Ker}(T^* - i)$ isometricamente em $\text{Ker}(T^* + i)$.*
- (b) *Qualquer isometria V' de $\text{Ker}(T^* - i)$ em $\text{Ker}(T^* + i)$ determina uma única extensão auto-adjunta $T_{V'}$ de T . Como V' pode ser representado pode ser representado por*

uma matriz unitária $n \times n$, existe uma família de n^2 -parâmetros¹⁶ de extensões auto-adjuntas de T .

Demonstração. (a) Como T é fechado, $T + i$ também é fechado. Mas, T simétrico e $T + i$ fechado $\Rightarrow \text{Ran}(T + i)$ fechado. Então, pelo Teorema da Soma Direta¹⁷, $H = \text{Ran}(T \pm i) \oplus \text{Ran}(T \pm i)^\perp$. É fácil verificar que $\text{Ran}(T \pm i)^\perp = \text{Ker}(T^* \mp i)$, logo $H = \text{Ran}(T \pm i) \oplus \text{Ker}(T^* \mp i)$. O operador V é a transformada de Cayley de A e como é isometria, preserva ortogonalidade e portanto mapeia $\text{Ker}(T^* - i)$ em $\text{Ker}(T^* + i)$.

(b) Definamos um operador unitário $V : H \longrightarrow H$ em H usando a transformada de Cayley U de T e o operador V' da forma

$$\begin{aligned} Vx &= Ux & \text{se } x \in \text{Ran}(T + i) \\ Vx &= V'x & \text{se } x \in \text{Ker}(T^* - i) \end{aligned} \quad (2.57)$$

e estendendo a definição de V linearmente em todo H .

Como $D(T) = \text{Ran}(1 - U)$ pelo Lema 1, $\text{Ran}(1 - U)$ é denso em H , logo $\text{Ran}(1 - V)$ também é denso em H . Então, pelo mesmo lema, o operador definido por

$$\begin{aligned} D(T_{V'}) &= \text{Ran}(1 - V) \\ T_{V'}x &= i(1 + V)(1 - V)^{-1}x \end{aligned} \quad (2.58)$$

é simétrico e V é sua transformada de Cayley. Mas V é unitário, logo $T_{V'}$ é auto-adjunto. $\square$

2.4.1 Critério para Auto-Adjunção

Temos a seguir mais um resultado importante que relaciona os índices deficientes com as extensões auto-adjuntas de um operador simétrico fechado.

Lema 2. *Seja $T : D(T) \longrightarrow H$ um operador simétrico fechado com índices deficientes n_+ , n_- . Então*

¹⁶Lembre do exemplo 8.

¹⁷Ver [9], Capítulo 3.

(a) T é auto-adjunto se, e somente se, $n_+ = n_- = 0$.

(b) Se $n_+ \neq n_-$, então T não possui extensões auto-adjuntas.

Demonstração. (a) $\Rightarrow$) Se $n_+ = n_- = 0$, então $\text{Ran}(T \pm i)^\perp = \{0\}$ e portanto $\text{Ran}(T \pm i)$ é denso em H . Mas T é fechado, logo $\text{Ran}(T \pm i)$ é fechado, o que implica que $\text{Ran}(T \pm i) = H$ e pelo Teorema 6 T é auto-adjunto.

$\Leftarrow$) Se T é auto adjunto, então $\text{Ran}(T \pm i) = H$ pelo Teorema 6, logo $n_+ = n_- = 0$.

(b) Se $n_+ \neq n_-$, conseguiremos estender a transformada de Cayley como na demonstração do Teorema 9, mas ela não será unitária. Então o operador definido pela equação (2.58) será uma extensão simétrica não auto-adjunta de T . $\square$

Podemos agora unir todos os resultados discutidos nesta seção e na anterior num único critério para o teste de operadores simétricos fechados.

Teorema 10 (Critério para operadores essencialmente auto-adjuntos). *Para um operador T com índices deficientes (n_+, n_-) existem três possibilidades*

(a) Se $n_+ = n_- = 0$, então T é essencialmente auto-adjunto.

(b) Se $n_+ = n_- = n \geq 1$, então T possui infinitas extensões auto-adjuntas parametrizadas por uma matriz $n \times n$.

(c) Se $n_+ \neq n_-$, então T não possui extensões auto-adjuntas.

Para determinar os valores dos índices deficientes $n_\pm$ de um operador linear simétrico fechado T , devemos contar o número de soluções linearmente independentes das equações

$$\boxed{T^* \psi \mp i \psi = 0} \quad , \quad (2.59)$$

pois $n_\pm = \text{codim Ran}(T \pm i) = \dim \text{Ran}(T \pm i)^\perp = \dim \text{Ker}(T^* \mp i)$. Este critério será utilizado durante todo o restante do trabalho, por isso foi colocado em destaque acima. Vejamos o uso do Teorema 10 através de dois exemplos.

Exemplo 12. *Seja $H = L^2(0, 1)$ e T , como no Exemplo 4, definido por*

$$\begin{aligned} D(T) &= C_0^\infty(0, 1); \\ Tf &= -if'. \end{aligned}$$

Vimos que o operador adjunto de Hilbert T^ e T agem da mesma forma sobre uma função, mas que para T^* nenhuma condição de contorno é necessária.*

Devemos procurar então, as soluções das equações (ver equation (2.59))

$$T^*\psi_\pm = -i\psi'_\pm = \pm i\psi_\pm. \quad (2.60)$$

São elas

$$\psi_\pm = e^{\mp x}, \quad (2.61)$$

ambas em $H = L^2(0, 1)$.

Vemos assim que os índices deficientes de T são $n_+ = n_- = 1$ e portanto o operador tem uma família de 1 parâmetro de extensões auto-adjuntas, logo não é essencialmente auto-adjunto.

No Exemplo 8, tínhamos de antemão as extensões auto-adjuntas de T . O Teorema 9 nos diz que as extensões auto-adjuntas de um operador simétrico fechado estão em correspondência biunívoca com as isometrias de $\text{Ker}(T^ - i)$ em $\text{Ker}(T^* + i)$. A partir disto, deduziremos o resultado apresentado no Exemplo 8.*

Pela Equação (2.58), dado uma isometria V' , o operador auto-adjunto correspondente é dado pelas equações

$$\begin{aligned} D(T_{V'}) &= \text{Ran}(1 - V) \\ T_{V'}x &= i(1 + V)(1 - V)^{-1}x. \end{aligned}$$

Agora uma isometria qualquer de $\text{Ker}(T^ - i)$ em $\text{Ker}(T^* + i)$ é dada por $V' : e^{-x} \longrightarrow e^{i\gamma-1}e^x$, com $\gamma \in \mathbb{R}$, pois*

$$\|e^{i\gamma-1}e^x\| = \sqrt{\int_0^1 |e^{i\gamma-1}e^x|^2 dx} = \frac{1}{\sqrt{2e}} \sqrt{e^2 - 1} = \|e^{-x}\|. \quad (2.62)$$

Decompondo o espaço de Hilbert da forma

$$H = \text{Ran}(T + i) \oplus \text{Ker}(T^* - i), \quad (2.63)$$

vemos que qualquer função de $H = L^2(0, 1)$ pode ser escrita como $g(x) = f(x) + ce^{-x}$, com $f(x) \in \text{Ran}(T + i)$.

O operador V definido na Equação (2.57), age em $f(x)$ como $Uf(x)$, onde $U = (T - i)(T + i)^{-1}$ é a transformada de cayley de T . Mas $f(x) \in \text{Ran}(T + i)$, logo

$$f(x) = (T + i)f_1 = -if_1'(x) + if_1(x), \quad (2.64)$$

com $f_1(x) \in D(T)$.

Resolvendo por variação de parâmetros, temos

$$f_1(x) = ie^x \int_0^x f(y)e^{-y}dy. \quad (2.65)$$

Assim

$$\begin{aligned} Uf(x) &= (T - i)(T + i)^{-1}f(x) = (T - i)f_1(x) = -if_1'(x) - if_1(x) \\ &= 2e^x \int_0^x f(y)e^{-y}dy + f(x). \end{aligned} \quad (2.66)$$

Para $g(x) = f(x) + ce^{-x}$, temos

$$\begin{aligned} h(x) &= (1 - V)g(x) = f(x) + ce^{-x} - Uf(x) - cV'e^{-x} \\ &= f(x) + ce^{-x} - 2e^x \int_0^x f(y)e^{-y}dy - f(x) - ce^{i\gamma-1}e^x \\ &= -2e^x \int_0^x f(y)e^{-y}dy + c(e^{-x} - e^{x+i\gamma-1}). \end{aligned} \quad (2.67)$$

O primeiro termo do lado direito da equação zera em $\{0, 1\}$ já que $f(x) \in C_0^\infty(0, 1)$ e portanto pertence ao domínio de T . O segundo termo é dado por

$$g_1(x) = c(e^{-x} - e^{x+i\gamma-1}).$$

Logo

$$\begin{cases} g_1(0) = c(1 - e^{i\gamma-1}) \\ g_1(1) = c(e^{-1} - e^{i\gamma}) \end{cases} \implies h(1) = \frac{e^{-1} - e^{i\gamma}}{1 - e^{i\gamma-1}} h(0). \quad (2.68)$$

Mas $|\frac{e^{-1}-e^{i\gamma}}{1-e^{i\gamma-1}}| = 1$, portanto $h(1) = e^{i\theta}h(0)$. Temos assim, usando as equações (2.58) e (2.68) que

$$\begin{aligned} D(T_\theta) &= \{h(x) \in L^2(0,1) | h(1) = e^{i\theta}h(0)\} \\ T_\theta h &= -ih'. \end{aligned} \quad (2.69)$$

confirmando as previsões do Exemplo 8.

É interessante fazer uma análise física do que se passa no exemplo anterior (ver [15]). Em mecânica quântica, translações são dadas por um grupo unitário $U(y) : \varphi(x) \mapsto \varphi(x - y)$. Tomemos um pacote de ondas $\varphi(x) \in C_0^1(0,1)$ com suporte longe de $x = 1$ sendo transladado na direção desse ponto. Para y suficientemente pequeno, tal que o suporte do pacote transladado não atinge o ponto $x = 1$, temos

$$\lim_{y \rightarrow 0} \frac{U(y)\varphi(x) - \varphi(x)}{y} = \lim_{y \rightarrow \infty} \frac{\varphi(x - y) - \varphi(x)}{y} = i(-i\varphi'(x)), \quad (2.70)$$

ver Teorema 7.

Isto mostra que o gerador do grupo $U(y)$ é o momento linear $-i\frac{d}{dx}$.

Para pacotes com suporte próximos de $x = 1$ ou para y qualquer, devemos especificar o que acontece quando o pacote chega ao fim. Pela conservação da probabilidade (equivalente à imposição da unitariedade do grupo de translação), o que "sai" em $x = 1$ deve "entrar" em $x = 0$. A única liberdade que temos é com a escolha da fase do pacote entrando em $x = 0$. Pelo princípio da superposição, toda função deve ser alterada pelo mesmo fator de fase quando entrar em $x = 0$. Cada translação é determinada então por um parâmetro θ e o movimento é dado por e^{iyT_θ} , onde T_θ é dado por (2.69).

No Exemplo 12 encontramos as extensões auto-adjuntas do operador definido no Exemplo 4 de uma maneira ilustrativa, porém muito complicada do ponto de vista prático. Vejamos agora a forma geral de uma extensão qualquer de um operador linear simétrico fechado, parametrizada pelas isometrias V' de $\text{Ker}(T^* - i)$ em $\text{Ker}(T^* + i)$.

Na demonstração do Teorema 9, mais precisamente na Equação (2.58), vimos que uma possível extensão do operador T é dada por

$$\begin{aligned} D(T_{V'}) &= \text{Ran}(1 - V) \\ T_{V'}x &= i(1 + V)(1 - V)^{-1}x, \end{aligned}$$

onde V é definido na Equação (2.57) por

$$\begin{aligned} Vx &= Ux \quad \text{se } x \in \text{Ran}(T + i) \\ Vx &= V'x \quad \text{se } x \in \text{Ker}(T^* - i). \end{aligned}$$

Decompondo o espaço de Hilbert H (usando o Teorema da Soma Direta) da forma

$$H = \text{Ran}(T + i) \oplus \text{Ker}(T^* - i),$$

temos que qualquer elemento $\psi \in H$ pode ser escrito como

$$\psi = \varphi + \varphi_+, \tag{2.71}$$

com $\varphi \in D(T)$ e $\varphi_+ \in \text{Ker}(T^* - i)$.

Assim, o domínio de $A_{V'}$ pode ser encontrado através de

$$\begin{aligned} D(T_{V'}) &= \text{Ran}(1 - V) = \{(1 - V)\psi : \psi \in H\} \\ &= \{(1 - V)\varphi + (1 - V)\varphi_+ : \varphi \in \text{Ran}(T + i), \varphi_+ \in \text{Ker}(T^* - i)\} \\ &= \{(1 - U)\varphi + \varphi_+ - V'\varphi_+ : \varphi \in \text{Ran}(T + i), \varphi_+ \in \text{Ker}(T^* - i)\}. \end{aligned} \tag{2.72}$$

Agora, pelo Lema 1, $\text{Ran}(1 - U) = D(T)$, logo

$$D(T_{V'}) = \{\varphi_0 + \varphi_+ - V'\varphi_+ : \varphi_0 \in D(T), \varphi_+ \in \text{Ker}(T^* - i)\}. \tag{2.73}$$

Então, $T_{V'}$ age em $D(T_{V'})$ da seguinte forma

$$\begin{aligned} T_{V'}(\varphi_0 + \varphi_+ - V'\varphi_+) &= T\varphi_0 + i(1 + V')(1 - V')^{-1}(1 - V')\varphi_+ \\ &= T\varphi_0 + i\varphi_+ + iV'\varphi_+. \end{aligned} \tag{2.74}$$

Reestabelecemos agora o Teorema 9 como visto na referência [15], que já incorpora o domínio da extensão auto-adjunta do operador T .

Teorema 11. *As extensões auto-adjuntas de um operador linear simétrico fechado T estão em correspondência um a um com as isometrias parciais V' de $\text{Ker}(T^* - i)$ em $\text{Ker}(T^* + i)$ e*

$$\begin{aligned} D(T_{V'}) &= \{\varphi_0 + \varphi_+ - V'\varphi_+ : \varphi_0 \in D(T), \varphi_+ \in \text{Ker}(T^* - i)\} \\ T_{V'}(\varphi_0 + \varphi_+ - V'\varphi_+) &= T\varphi_0 + i\varphi_+ + iV'\varphi_+. \end{aligned} \quad (2.75)$$

Veremos mais tarde que para um operador de Sturm-Liouville sem pontos singulares, as extensões auto-adjuntas são facilmente obtidas e nenhuma análise mais complicada será necessária. A partir daí obteremos as extensões auto-adjuntas para a equação de Klein-Gordon em espaços com defeitos topológicos esféricos e cilíndricos (ver artigo anexado ao Apêndice A). Porém, o resultado mostrado no Teorema 11 é utilizado por Kay e Studer (ver [6]) para encontrar as extensões auto-adjuntas para o operador de Laplace-Beltrami num espaço cônico. Este resultado será utilizado no artigo anexado ao Apêndice B. No exemplo a seguir, utilizamos o resultado do Teorema 11 para o problema do Exemplo 12.

Exemplo 13 (Exemplo 12 revisitado). *A partir da Equação (2.75) confirmaremos os resultados obtidos no Exemplo 12.*

Seja $\psi \in D(T_\theta)^{18}$. Então

$$\psi = \varphi_0 + ce^{-x} - ce^{i\gamma-1}e^x. \quad (2.76)$$

Assim

$$\begin{aligned} \psi(0) &= \underbrace{\varphi_0(0)}_{=0} + c - ce^{i\gamma-1} = c(1 - e^{i\gamma-1}) \\ \psi(1) &= \underbrace{\varphi_0(1)}_{=0} + ce^{-1} - ce^{i\gamma} = c(e^{-1} - e^{i\gamma}). \end{aligned} \quad (2.77)$$

Portanto

$$\psi(1) = \frac{e^{-1} - e^{i\gamma}}{1 - e^{i\gamma-1}} \psi(0) \quad (2.78)$$

¹⁸Lembre que no Exemplo 12 tínhamos $e^{i\theta} = \frac{e^{-1} - e^{i\gamma}}{1 - e^{i\gamma-1}}$.

como no Exemplo 11.

Além disso

$$\begin{aligned} T_\theta \psi &= T_\theta \varphi_0 + ice^{-x} - ie^{i\gamma-1}e^x = -i(\varphi'_0 - ce^{-x} + ce^{i\gamma-1}e^x) \\ &= -i\psi', \end{aligned} \quad (2.79)$$

como era de se esperar.

Como dito anteriormente, nem todo operador linear simétrico possui extensões auto-adjuntas. Isto ocorre quando os índices deficientes são distintos. A seguir um exemplo onde isto ocorre.

Exemplo 14 (Operador momento radial). *Seja $H = L^2(0, \infty)$ e T o operador definido por*

$$\begin{aligned} D(T) &= \{f \in L^2(0, \infty) : f' \in L^2\} \\ Tf &= if'. \end{aligned} \quad (2.80)$$

Então as equações para encontrar os índices deficientes são

$$i\psi'_\pm = \pm i\psi_\pm. \quad (2.81)$$

As soluções são, como no exemplo anterior,

$$\psi_\pm = e^{\pm x}.$$

Mas ψ_+ não está em $H = L^2$, logo os índices deficientes de T são $n_+ = 0$ e $n_- = 1$, portanto T não possui extensões auto-adjuntas.

2.4.2 Método Ponto-Limite/Cículo-Limite

Os operadores que serão testados futuramente serão obtidos através das equações de Schrödinger, Klein-Gordon, Maxwell e Dirac em espaços-tempos classicamente singulares. Para espaços-tempos estáticos, representados por uma variedade $\mathcal{M} \approx \mathbb{R} \times \mathcal{X}$, essas equações podem ser isoladas numa parte temporal e numa parte espacial. Por exemplo (ver [16]), a equação de Klein-Gordon para uma partícula livre num espaço-tempo

localmente plano, mas com um ponto espacial removido, $\mathcal{M} \approx \mathbb{R} \times (\mathbb{R}^3 - \{0\})$ é dada por

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \Delta \psi, \quad (2.82)$$

onde (em coordenadas esféricas)

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (2.83)$$

Veremos mais tarde que, para analisar se um espaço-tempo classicamente singular é quanticamente regular, devemos analisar se a porção espacial do operador de onda da equação de campo de interesse é essencialmente auto-adjunta.

Por uma separação de variáveis da forma $\psi = f_{l,m}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$ (com $f_{l,m}(r) \in D = C_0^\infty(0, \infty)$), já que não sabemos a-priori o domínio de ação do operador laplaciano e queremos fugir das singularidades $r = 0$ e $r = \infty$), onde Y_l^m são os harmônicos esféricos, dividimos o espaço de Hilbert $H = L^2(\mathbb{R}^3 - \{0\}, r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi)$ num produto tensorial $H = L^2(\mathbb{R}^3 - \{0\}, r^2 dr) \otimes L^2([0, 2\pi) \times [0, \pi], d\Omega)$, onde $d\Omega$ é a medida usual na esfera $\mathbb{S}^2$.

Seja

$$D_{\mathbb{S}^2} = \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{m,l} Y_l^m(\theta, \phi) : l \in \mathbb{N} \cup \{0\}, \text{ finitos } a_{l,m} \text{ não nulos} \right\}. \quad (2.84)$$

Em funções da forma $f(r) Y_l^m(\theta, \phi)$, Δ age da seguinte maneira

$$(\Delta) f(r) Y_l^m(\theta, \phi) = \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{1}{r^2} l(l+1) \right) f(r) Y_l^m(\theta, \phi). \quad (2.85)$$

Agora, como $\{Y_l^m(\theta, \phi)\}$ é uma base de $L^2(\mathbb{S}^2, d\Omega)$, temos

$$L^2(\mathbb{R}^+, r^2 dr) \otimes L^2(\mathbb{S}^2, d\Omega) = \oplus_{l=0}^{\infty} L_l \quad (2.86)$$

onde $L_l = L^2(\mathbb{R}^+, r^2 dr) \otimes K_l$, com K_l sendo os subspaços degenerados correspondentes ao autovalor l .

Defina $D_l = \tilde{D} \cap L_l$ e teremos

$$\Delta|_{D_l} = \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{1}{r^2} l(l+1) \right) \otimes \mathbb{I}. \quad (2.87)$$

O seguinte teorema nos permite reduzir a análise de Δ apenas para sua porção radial para cada $l = 0, 1, 2, \dots$.

Teorema 12. *Seja $A_1, \dots, A_N$ operadores auto-adjuntos em $H_1, \dots, H_N$ e suponha que para cada k , D_k seja um domínio onde A_k é essencialmente auto-adjunto. Então $A = A_1 \otimes \dots \otimes A_N$ é auto-adjunto em $D = \otimes_{k=1}^N D_k$.*

A demonstração deste teorema sai do escopo do trabalho (ver [15]).

Pela discussão sobre a equação de Klein-Gordon num espaço plano com um ponto removido e pelo teorema 12 podemos ver que para descobrir se um operador diferencial é essencialmente auto-adjunto, basta analisar como o operador (um operador de Sturm-Liouville) atua na porção radial da função de onda já que, geralmente, a solução da porção angular forma uma base (conjunto completo) de $L^2(\text{ângulos})$.

Discutiremos agora sobre como encontrar as extensões auto-adjuntas de um operador de Sturm-Liouville com um ou dois pontos singulares. Os operadores diferenciais estudados no Apêndice A terão apenas $r = \infty$ como ponto singular, já os pontos singulares dos operadores do Apêndice B estarão em $r = 0$ e $r = \infty$.

Denotemos T_0 o operador

$$T_0\psi(x) = -\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right) + q(x)\psi(x) \quad (2.88)$$

onde $p(x) \geq 0$ e $q(x)$ são funções reais de classes C^1 e C^0 , respectivamente, em (a, ∞) . T_0 é chamado operador de Sturm-Liouville.

Quando uma função peso $r(x)$, contínua e positiva em (a, ∞) , é adicionada, a equação de auto-valores

$$-(p\psi)' + q\psi = \lambda r(x)\psi \quad (2.89)$$

é equivalente à equação de auto-valores com função peso $s(x) = 1$, de um novo operador

$$T'_0 = \frac{1}{r} [-(p\psi)' + q\psi] \quad (2.90)$$

em um espaço de Hilbert $L^2_\sigma(a, b)$, de medida σ dada por $d\sigma(x) = s(x)dx$. Analisaremos então o caso $r(x) = 1$.

Se nenhuma condição de contorno for necessária num ponto singular, a imposição de que a solução da Equação (2.89) pertença à L^2 toma o lugar de uma condição de contorno. Este é chamado o caso ponto-limite. Caso contrário, uma condição de contorno deve ser imposta na singularidade e dizemos que estamos no caso círculo-limite.

Como dito anteriormente, motivações físicas dão origem à expressões para o Hamiltoniano de uma partícula. Porém seu domínio, a princípio, não está especificado. Como não sabemos as condições de contorno (se necessárias) nos pontos singulares, tomamos como domínio D do operador Hamiltoniano um conjunto tal que $T_0\psi \in L^2 \forall \psi \in D$ e cujo suporte esteja longe desses pontos. Um conjunto que cumpre essas duas condições é $C_0^\infty(a, \infty)$.

Toda teoria desenvolvida a partir de agora será feita para $a = 0$, mas fica claro que ela funciona perfeitamente para a não nulo (caso estudado no Apêndice A).

Definimos então o operador

$$\begin{aligned} D(T) &= C_0^\infty(0, \infty) \\ T\psi &= T_0\psi = -(p\psi)' + q\psi. \end{aligned} \tag{2.91}$$

No domínio $C_0^\infty(0, \infty)$, a condição de que as funções e suas derivadas se anulem identicamente fora de um intervalo finito é tão forte, que nenhuma condição é necessária para o domínio do operador adjunto de Hilbert T^* de T . Além disso, usando o mesmo método empregado no Exemplo 6, vemos que T^* atua numa distribuição em L^2 como o operador T_0 . Portanto

$$\begin{aligned} D(T^*) &= \{\psi \in L^2(0, \infty) : T_0\psi \in L^2\} \\ T^*\psi &= -(p\psi)' + q\psi. \end{aligned} \tag{2.92}$$

Pelo resultado sintetizado no Teorema 10, a análise da auto-adjunção do fecho de um operador será feita pela determinação das dimensões dos subspaços $\text{Ker}(T^* \pm i)$. Devemos então resolver as equações

$$-(p\psi')' + q\psi = \pm i\psi \quad (2.93)$$

e contar o número de soluções linearmente independentes contidas em L^2 .

Como veremos a seguir, não será necessário analisar a integrabilidade do quadrado de uma solução de (2.93) em todo intervalo $(0, \infty)$. O método ponto-limite/círculo-limite (ver definição a seguir) nos dizem que a auto-adjunção essencial do operador (2.91) pode ser determinada analisando as soluções perto de 0 e ∞ separadamente. Ou seja, analisaremos as soluções separadamente em dois intervalos, $(0, c)$ e (d, ∞) .

Introduziremos agora de maneira mais precisas os conceitos ponto-limite e círculo-limite.

Definição 7 (Ponto-Limite/Círculo-Limite). *Dizemos que a equação*

$$-(p\psi')' + q\psi = \lambda\psi$$

está no caso ponto-limite em zero (respectivamente em infinito) se todas as suas soluções são quadrado integráveis perto de zero (respectivamente perto de infinito).

A terminologia utilizada (no caso ∞) tem sua origem na análise da Equação (2.93), com $p(x)$ estritamente positivo (apenas $r = \infty$ é ponto singular da equação), no intervalo $(0, b)$, a partir de duas soluções $f_{1,2}(x)$ que satisfazem as condições de contorno

$$\begin{aligned} f_1(0) &= 1 & p(0)f_1'(0) &= 0 \\ f_2(0) &= 0 & p(0)f_2'(0) &= 0. \end{aligned} \quad (2.94)$$

Uma solução geral de (2.93) pode então ser dada (a menos de uma constante) por

$$f(x) = f_1(x) + mf_2(x). \quad (2.95)$$

Pode-se mostrar¹⁹ que fazendo $b \rightarrow \infty$, ao menos uma solução $f(x)$ do tipo (2.95) é quadrado integrável. Além disso, os pontos m do plano complexo em que as soluções de (2.95) são quadrado integráveis em $(0, \infty)$ formam um disco D_∞ . Se D_∞ tiver raio

¹⁹Ver [10], Capítulo 10.

zero, isto é, consistir apenas do ponto m_∞ , estamos no caso ponto limite e nenhuma outra solução de ψ é quadrado integrável, exceto múltiplos de $f(x) = f_1(x) + m_\infty f_2(x)$. Se D_∞ for um círculo de raio não nulo, estamos no caso círculo limite. Tomando dois valores arbitrários de m em D_∞ , vemos que qualquer combinação linear de f_1 e f_2 é quadrado integrável.

De qualquer forma, existe uma solução da Equação (2.89) $\forall \lambda \in \mathbb{C}$, que é quadrado integrável no infinito, analogamente na origem. Podemos então estabelecer o seguinte teorema, que não será demonstrado, mas será passada a idéia principal da demonstração.

Teorema 13. *O operador T definido em (2.91) é essencialmente auto-adjunto se, e somente se, está no caso ponto-limite em zero e infinito.*

A idéia do teorema é que se estivermos no caso círculo limite em qualquer um dos casos, temos a liberdade de ajustar, através de uma combinação linear, a solução nesse ponto, para que case com a solução no outro ponto singular. Note que se um ponto se encontra no caso círculo limite, a solução geral neste ponto permanece com duas constantes arbitrárias e portanto, é necessária uma condição de contorno neste ponto a fim de eliminar uma das constantes. Assim o problema de valor inicial se torna bem posto. Note que, para cada condição de contorno imposta neste ponto, corresponde uma extensão auto-adjunta do operador de Sturm-Liouville.

Tomemos o operador T como em (2.88) (com $p(x) > 0$ no intervalo $(0, \infty)$) e suponhamos que T esteja no caso ponto limite no infinito para $\lambda = \pm i$. Definimos então uma extensão T_α de T por

$$\begin{aligned} D(T_\alpha) &= \{f \in C^\infty : f(x) = 0 \forall x > \text{algum } b \geq 0; f(0) \cos \alpha + p(0) \sin \alpha = 0\} \\ T_\alpha f &= T_0 f = -(pf')' + qf. \end{aligned} \quad (2.96)$$

Pelo método utilizado no Exemplo 6, o operador adjunto de Hilbert de T_α é definido no conjunto

$$D(T_\alpha^*) = \{f \in L^2(0, \infty) : T_0 f \in L^2(0, \infty), f(0) \cos \alpha + p(0) \sin \alpha = 0\}. \quad (2.97)$$

Pode ser mostrado²⁰ que $T_\alpha^* f = \pm i f$ não possui solução não trivial. Portanto, os

²⁰Ver [10], Capítulo 10.

índices deficientes de T_α são $(0, 0)$, logo T_α é essencialmente auto-adjunto e $T_\alpha, \alpha \in \mathbb{R}$, são suas extensões auto-adjuntas²¹. As condições (2.97) representam as condições mistas de contorno. Se fizermos $\alpha = 0$ temos a condição Dirichlet e $\alpha = \pi/2$ as condições de Neumann.

Para o caso $r = \infty$, existe um critério muito eficiente que nos diz quando esta singularidade se encontra no caso ponto-limite²².

Teorema 14. *Consideremos um operador de Sturm-Liouville da forma*

$$\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad (2.98)$$

onde $V(x)$ é diferenciável em $(0, \infty)$ e limitado superiormente por K em $[1, \infty)$. Suponha que

$$(i) \int_1^\infty \frac{dx}{\sqrt{K-V(x)}} = \infty.$$

$$(ii) V'(x)|V(x)|^{-3/2} \text{ é limitado perto de infinito.}$$

Então estamos no caso ponto-limite no infinito.

Esperamos em física que, a simples imposição de que a função de onda seja não divirja no infinito sirva como condição de contorno. Isto é o que ocorre na grande maioria dos casos.

Temos agora todo o ferramental matemático necessário para análise da auto-adjunção dos operadores que aparecem nas equações da mecânica quântica em Espaços-tempos classicamente singulares. Como exemplos dos métodos desenvolvidos até agora, analisemos os operadores que aparecem na equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio num espaço plano e para uma partícula obedecendo a equação de Klein-Gordon num espaço-tempo plano com um ponto removido, já discutido no início da seção.

Exemplo 15 (Átomo de Hidrogênio). *Ao resolver a equação de Schrödinger para o átomo de Hidrogênio, não é necessária nenhuma condição de contorno na origem, exceto a imposição que a solução pertença a L^2 . Os modos normais formam uma base para $L^2(\mathbb{R}^3)$.*

²¹Este resultado é muito importante e será utilizado no Apêndice A.

²²Ver [15], Capítulo 10.

Vejamos como o formalismo desenvolvido até agora nos ajuda a mostrar que o operador radial envolvido na equação de Schrödinger é essencialmente auto-adjunto.

A equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio tem a forma

$$\left[-\Delta - \frac{1}{r} \right] \varphi(\vec{r}, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\vec{r}, t). \quad (2.99)$$

Como será definido no próximo capítulo, para se testar uma singularidade em um espaço-tempo estático, utilizando partículas quânticas, apenas a parte espacial da equação de campo é necessária. Devemos analisar a dimensão dos subspaços $\text{Ker}(T^ \pm i)$, onde T é a porção espacial da equação.*

Com uma separação de variáveis (em coordenadas esféricas) do tipo $\psi = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$, temos

$$-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(rR) + \frac{l(l+1)}{r^2} R - \frac{1}{r} R \pm iR = 0, \quad (2.100)$$

onde foi usado que os harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \phi)$ são soluções da parte angular da equação de Schrödinger em coordenadas esféricas, com autovalores degenerados $l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$. Além disso, $\{Y_l^m\}_{l=0,1,2,\dots}^{m=-l,\dots,l}$ forma um conjunto completo, logo a auto-adjunção da parte angular do Hamiltoniano do átomo de hidrogênio está provada.

O espaço de Hilbert para a parte radial é $L^2(\mathbb{R}^+, r^2 dr)$. A partir de uma transformação unitária $U : L^2(\mathbb{R}^+, r^2 dr) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^+, dr)$, com $U : R(r) \mapsto f(r) = rR(r)$, temos

$$-f'' + \frac{l(l+1)}{r^2} f - \frac{1}{r} f \pm irf = 0. \quad (2.101)$$

Perto de $r = 0$, podemos desprezar o $\frac{1}{r}f(r) \pm irf$ e analisar a equação

$$-f'' + \frac{l(l+1)}{r^2} f = 0. \quad (2.102)$$

Essa equação tem como solução

$$f(r) = \begin{cases} r^{l+1} \\ r^{-l} \end{cases}, \quad (2.103)$$

ou voltando para função $R(r)$

$$R(r) = \begin{cases} r^l \\ r^{-(l+1)} \end{cases} \quad (2.104)$$

As funções r^l são quadrado integráveis perto de zero para todo l , isto é

$$\int_0^c r^{2l}(r^2 dr) = \frac{r^{2l+3}}{2l+3} \Big|_0^c < \infty. \quad (2.105)$$

Porém

$$\int_0^c r^{-2l-2}(r^2 dr) = \frac{r^{-2l+1}}{-2l+1} \Big|_0^c. \quad (2.106)$$

Se $l \neq 0$, $r^{-(l+1)} \notin L^2(\mathbb{R}, r^2 dr)$. Se $l = 0$, $R_0(r) = 1/r$ é quadrado integrável perto de zero, mas lembre que $\Delta(\frac{1}{r}) = -4\pi\delta(r)$, que não pertence à classe L^2 .

Concluimos assim que, para qualquer l , estamos no caso ponto-limite em $r = 0$.

Vejamos o caso $r = +\infty$. Comparando a Equação (2.101), com a Equação (2.98), vemos que $V(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{1}{r}$, que é usualmente chamado de potencial efetivo. Para $l = 0$ o potencial efetivo é limitado superiormente em $[1, \infty)$ por $K_0 = 0$, para $l \neq 0$ é limitado superiormente por $K_l = l(l+1) - 1$. Além disso $\forall l = 0, 1, 2, 3, \dots$

$$\begin{cases} \int_1^\infty \frac{1}{\sqrt{K_l - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{r}}} \geq \int_1^\infty \frac{1}{\sqrt{K_l + \frac{1}{r}}} = \infty \\ \lim_{r \rightarrow \infty} r V'(r) |V(r)|^{-3/2} = 0. \end{cases}$$

Estamos nas condições do Teorema B.12 e portanto no caso ponto-limite no infinito.

Como estamos no caso ponto-limite nos dois casos concluimos que o operador radial da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio é essencialmente auto-adjunto em $C_0^\infty(0, \infty)$ e nenhuma condição de contorno é necessária nos pontos singulares. É interessante notar que para resolver completamente o átomo de hidrogênio²³, não especificamos em nenhum momento o domínio do operador Laplaciano e a única condição exigida é que as soluções pertençam a L^2 , como é de se esperar após a análise feita neste exemplo.

Exemplo 16 (Partícula relativística live em $\mathbb{R} \times (\mathbb{R}^3 - \{0\})$). Vejamos o caso da equação

²³Ver [11], Capítulo 7.

de Klein-Gordon num espaço $\mathcal{M} \approx \mathbb{R} \times (\mathbb{R}^3 - \{0\})$. Como no exemplo anterior, após uma transformação unitária $U : R(r) \mapsto f(r) = rR(r)$ temos

$$-f'' + \frac{1}{r^2}l(l+1)f \pm irf = 0. \quad (2.107)$$

O potencial efetivo nesse caso é $V(r) = \frac{1}{r^2}l(l+1)$ e claramente estamos no caso ponto-limite no infinito. Como já visto no exemplo anterior, as soluções dessa equação perto da origem são

$$f(r) = \begin{cases} r^{l+1} \\ r^{-l} \end{cases}. \quad (2.108)$$

As soluções r^{l+1} pertencem a $L^2(\mathbb{R}^+, dr)$ perto de zero para todo valor de l . As funções r^{-l} só são quadrado integráveis perto de zero para o caso $l = 0$. Estamos no caso ponto-limite para $l = 1, 2, \dots$, mas o caso $l = 0$ merece maior atenção. Como vimos anteriormente, para esse caso $R_0(r) = 1/r$ e $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(r)$. O ponto $\vec{r} = 0$ foi retirado do nosso espaço, portanto esse modo é permitido. Estamos assim no caso círculo-limite na origem. Devemos impor uma condição de contorno na origem a fim de tornar o operador auto-adjunto. Para encontrar as possíveis condições de contorno na origem seguiremos como Kay e Studer ([6]) fizeram para uma partícula num cone.

Pela Equação (2.75) o domínio de uma extensão auto-adjunta de um operador fechado T tem a forma

$$D(T_{V'}) = \{\varphi_0 + \varphi_+ - V'\varphi_+ : \varphi_0 \in D(T), \varphi_+ \in \text{Ker}(T^* - i)\}$$

onde V' é uma isometria de $\text{Ker}(T^* - i)$ para $\text{Ker}(T^* + i)$.

No nosso caso $V'\varphi_+ = \delta\varphi_-$ com $|\delta| = 1$, então

$$D_\delta = \{\varphi_0 + \varphi_+ - \delta\varphi_- : \varphi_0 \in C_0^\infty(\mathbb{R}^+)\} \quad (2.109)$$

Para encontrar $\varphi_\pm$ devemos resolver a equação

$$-\frac{d^2}{dr^2}\varphi_\pm(r) - \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\varphi_\pm(r) \mp i\varphi_\pm(r) = 0. \quad (2.110)$$

As soluções (devidamente normalizadas) são simples,

$$\varphi_+(r) = \begin{cases} \sqrt{2} \frac{e^{\frac{-1+i}{\sqrt{2}}r}}{r} \\ \sqrt{2} \frac{e^{\frac{1+i}{\sqrt{2}}r}}{r} \end{cases} \quad (2.111)$$

e

$$\varphi_- = \begin{cases} \sqrt{2} \frac{e^{\frac{-1-i}{\sqrt{2}}r}}{r} \\ \sqrt{2} \frac{e^{\frac{1-i}{\sqrt{2}}r}}{r} \end{cases}. \quad (2.112)$$

Como $\frac{e^{\frac{1-i}{\sqrt{2}}r}}{r}$ e $\frac{e^{\frac{1+i}{\sqrt{2}}r}}{r}$ não estão em L^2 temos $\varphi_+ = \sqrt{2} \frac{e^{\frac{-1+i}{\sqrt{2}}r}}{r}$ e $V'\varphi_+ = \sqrt{2} \delta \frac{e^{\frac{-1-i}{\sqrt{2}}r}}{r}$. Assim, se $\psi \in D_\delta$,

$$\psi = \varphi_0 + \sqrt{2} \frac{e^{\frac{-1+i}{\sqrt{2}}r}}{r} - \delta \sqrt{2} \frac{e^{\frac{-1-i}{\sqrt{2}}r}}{r}. \quad (2.113)$$

Como o operador Δ_0^2 não é fechado em $C_0^\infty(\mathbb{R}^+)$, D_δ é um caroço²⁴ para a extensão auto-adjunta $(\Delta_0^2)_\delta$, isto é, $\overline{(\Delta_0^2)_\delta|_{D_\delta}} = (\Delta_0^2)_\delta$. O domínio completo de $(\Delta_0^2)_\delta$ é

$$D((-\Delta_0^2)_\delta) = \{\psi \in D((-\Delta_0^2)^*) : \langle -\Delta_0^2 \phi, \psi \rangle = \langle \phi, (-\Delta_0^2)^* \psi \rangle, \forall \phi \in D_\delta\}. \quad (2.114)$$

Integrando por partes, temos

$$D((-\Delta_0^2)_\delta) = \{\psi \in D((-\Delta_0^2)^*) : \lim_{r \rightarrow 0} (\psi_\delta r^2 \psi' - \psi r^2 \psi'_\delta) = 0\} \quad (2.115)$$

onde $\psi_\delta = \varphi_+ - \delta \varphi_- = \sqrt{2} \frac{e^{\frac{-1+i}{\sqrt{2}}r} - \delta e^{\frac{-1-i}{\sqrt{2}}r}}{r}$.

Assim, perto $r = 0$ (onde $e^{\frac{-1+i}{\sqrt{2}}r} \cong 1$) temos

$$\psi_\delta r^2 \psi' - \psi r^2 \psi'_\delta = (1 - \delta) r \psi' - \psi \{r[-(1 - \delta) + i(1 + \delta)] - (1 - \delta)\}. \quad (2.116)$$

A condição dada na Equação (2.115) nos dá

$$\lim_{r \rightarrow 0} (\alpha(r\psi(r))' - \psi(r)) = 0 \quad (2.117)$$

²⁴Ver [13], Capítulo 8.

onde $1/\alpha = -1 + \frac{i(1+\delta)}{(1-\delta)}$, $\alpha \in \mathbb{R}$.

As extensões auto-adjuntas de $-\Delta_0^2$ são

$$\begin{cases} D((-\Delta_0^2)_\delta) = \{\psi \in D((-\Delta_0^2)^*) : \lim_{r \rightarrow 0} (\alpha(r\psi(r))' - \psi(r)) = 0\} \\ (-\Delta_0^2)_\delta \psi = -\psi'' - \frac{2}{r}\psi \end{cases} \quad (2.118)$$

com $\alpha \in \mathbb{R}$.

Podemos agora definir singularidades quânticas e utilizar as técnicas desses dois últimos exemplos para decidir se alguns espaços classicamente singulares, permanecem singulares quando testados por partículas quânticas.

Capítulo 3

Singularidades Quânticas

Em relatividade geral, uma singularidade num espaço-tempo é indicada por geodésicas incompletas. Nos pontos onde elas se encerram, uma informação extra deve ser imposta, já que perdemos a capacidade de prever o futuro da partícula devido ao fim abrupto da geodésica. Em mecânica quântica, essa informação extra equivale a necessidade de impor uma condição de contorno nos pontos classicamente singulares, a fim de tornar auto-adjunta a porção espacial do operador de onda. Quando isso não é necessário, a evolução do pacote de ondas é unicamente determinada pela função de onda em $t = 0$. Dizemos que o espaço é quanticamente não singular. O que ocorre nesses casos é que a imposição de que a solução da equação de campo seja quadrado integrável, funciona como uma condição de contorno e o pacote inicial é então suficiente para determinar a evolução da partícula.

Um exemplo de uma situação classicamente singular, que se torna não singular quando visto pela mecânica quântica é o átomo de hidrogênio não relativístico. A simples imposição de que as soluções da equação de Schrödinger desse sistema sejam quadrado integráveis, é suficiente para nos dar um conjunto completo de auto-funções. Dado um pacote de onda inicial, sua evolução é unicamente determinada.

Um outro exemplo simples, agora de um caso singular que se mantém singular quando testada pela mecânica quântica, é de uma partícula não relativística presa numa caixa unidimensional $(0, 1)$. Uma condição de contorno deve ser dada nas bordas da caixa (geralmente escolhemos $\psi(0) = \psi(1) = 0$) a fim de obtermos a evolução do pacote de

ondas da partícula. Formalizemos agora matematicamente os conceitos apresentados nos parágrafos anteriores.

Seguindo o modelo apresentado por Wald [17] e seguido por Horowitz e Marolf [4], seja $(M, g_{\mu\nu})$ um espaço-tempo estático com vetor de Killing do tipo tempo ξ^μ . Seja t o parâmetro de Killing e Σ uma fatia estática (não contendo as singularidades), ortogonal ao vetor de Killing para todo t . A equação de Klein-Gordon nesse espaço é

$$\square\Psi = M^2\Psi, \quad (3.1)$$

onde $\square = \nabla^\mu \nabla_\mu$ pode ser separado numa parte temporal e numa parte espacial da forma

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -A\Psi = V D^i (V D_i \Psi) - M^2 V^2 \Psi, \quad (3.2)$$

com $V = -\xi^\mu \xi_\mu$ e D_i a derivada espacial covariante na fatia Σ .

Obter o domínio $D(A)$ de ação do operador é algo mais difícil e a princípio não temos nenhuma informação a respeito disso. Tomemos então um domínio mínimo, em que o operador esteja bem definido e que evite as singularidades do espaço. Um conjunto apropriado para isso é $C_0^\infty(\Sigma)$, o conjunto das funções suáveis com suporte em Σ . No espaço de Hilbert $L^2(\Sigma, V^{-1}d\mu)$, onde $d\mu$ é o elemento de volume em Σ , não é difícil mostrar (integrando por partes) que o operador $(A, C_0^\infty(\Sigma))$, com A dado na equação (B.2), é simétrico e positivo. Dessa forma, extensões auto-adjuntas sempre existem [13] (ao menos a extensão de Friedrichs).

Seja A_E uma extensão de A , obtida relaxando-se as condições de contorno, de tal forma que o domínio do operador A_E coincida com o domínio do operador adjunto de Hilbert A_E^* . Pela auto-adjunticidade de A_E , a evolução do campo Ψ é unicamente determinada pelo pacote inicial e dada por

$$\Psi(t) = \cos(A_E^{1/2}t)\Psi(0) + A_E^{1/2} \sin(A_E^{1/2}t)\dot{\Psi}(0), \quad (3.3)$$

onde as funções do operador A_E dadas na equação anterior são garantidas pelo teorema espectral [13].

Para o caso não relativístico, a situação é muito semelhante. A equação de Schrödinger pode ser escrita como

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\nabla^2 \Psi, \quad (3.4)$$

onde ∇^2 é o operador de Laplace-Beltrami em (Σ, h_{ij}) , h_{ij} é a métrica induzida por $g_{\mu\nu}$ em Σ . Se $-\nabla_E^2$ é uma extensão auto-adjunta de $-\nabla^2$, então a evolução da partícula é dada por

$$\Psi(t) = e^{-i\nabla_E^2 t} \Psi(0). \quad (3.5)$$

Se várias extensões auto-adjuntas de A existirem, devemos escolher uma a fim de obter a evolução temporal da partícula. Uma informação extra é necessária, o espaço é dito quanticamente singular e fica claro a analogia dessa definição com o caso clássico. Agora, se existir uma única extensão auto-adjunta do operador A (neste caso seu fecho $\overline{A}$), ele é dito essencialmente auto-adjunto e a evolução quântica da partícula é unicamente determinada pelo pacote inicial. O espaço é então não singular quando visto pela mecânica quântica.

O critério para determinar se um operador é essencialmente auto-adjunto basea-se no teorema devido a von Neumann [15], que diz que as extensões auto-adjuntas de um operador A estão em correspondência um a um com as isometrias de $\text{Ker}(A^* - i)$ em $\text{Ker}(A^* + i)$, onde Ker denota o núcleo e A^* o operador adjunto de Hilbert de A . O domínio do operador A é tão pequeno, isto é, as restrições feitas às funções pertencentes a $D(A) = C_0^\infty(\Sigma)$ são tão fortes, que o domínio do operador adjunto de Hilbert fica extremamente grande e nenhuma condição sobre $\psi \in D(A^*)$ é necessária, exceto que $A^*\psi$ se mantenha em L^2 , ou seja,

$$D(A^*) = \{\psi \in L^2 : A^*\psi \in L^2\}. \quad (3.6)$$

Devemos então resolver as equações

$$A^*\psi \mp i\psi = 0 \quad (3.7)$$

e analisar quais soluções pertencem à L^2 . Denotamos $n_\pm = \dim \text{Ker}(A^* \mp i)$ e chamamos de índices deficientes [10].

Se nenhuma solução pertencer à L^2 , então $n_+ = n_- = 0$, não existem isometrias de $\text{Ker}(A^* - i)$ para $\text{Ker}(A^* + i)$ e o operador A é essencialmente auto-adjunto. Se $n_+ = n_- = 1$, existe uma família de 1-parâmetro de isometrias e portanto de extensões

auto-adjuntas. O caso $n_+ = n_- = 2$ é análogo.

Capítulo 4

Conclusões

No apêndice A, pela primeira vez espaços-tempos com defeitos topológicos numa superfície 2-dimensional puderam ser estudados e ficou comprovado que estas singularidades não são removidas quanto testadas por partículas quânticas. Além disso, estes espaços se mostraram extremamente favoráveis para a determinação das condições de contorno necessárias para tornar auto-adjunta a porção espacial do operador de onda, já que os pontos onde se encontram as singularidade físicas (na superfície $r = (a + b)/2$) não representam uma singularidade da métrica e portanto da equação de Klein-Gordon. Desta forma, as condições de contorno se mostram extremamente simples (ver [10], Capítulo 10). Isto é de certa forma surpreendente, já que a determinação das condições de contorno necessárias para alguns espaços-tempos mais simples, como por exemplo as cordas cósmicas, se mostra extremamente complicada (no caso da corda cósmica, um contínuo de modos normais são singulares e as condições de contorno ainda não foram encontradas). Apesar dos dois exemplos estudados apresentarem casos bem simples de paredes cósmicas, este trabalho abre portas para o estudo de casos mais complicados de superfícies singulares, mostrando que é possível avançar os casos com singularidades 0 e 1-dimensional. No final do apêndice, um exemplo teórico exemplifica como as condições de contorno encontradas anteriormente removem as singularidades.

No trabalho do apêndice B foi mostrado como resultados já bem conhecidos para o caso plano podem ser utilizados para o estudo de teorias da gravidade com $2 + 1$ dimensão, onde está presente uma constante cosmológica Λ negativa. A aplicação do caso plano

se baseia no fato que para o estudo de pontos singulares, estamos preocupados com propriedades locais, onde os efeitos da curvatura podem ser desprezados em primeira ordem. O intervalo $-1 < m < 0$ permanece singular para partículas escalares massivas, mas a singularidade é removida quando testada bósons não massivos ou por férmions. De um ponto de vista completo, onde tanto partículas escalares quanto férmions podem estar presentes, a singularidade persiste, o que garante a presença de um estado fundamental (o espaço anti-de Sitter $m = -1$), já presente na teoria clássica. O caso $2 + 1$ dimensional com constante cosmológica $\Lambda > 0$ (um universo em expansão) foi resolvido exatamente para férmions com soluções dadas em termos das funções hipergeométricas (ver [18]) e pode ser usado para estudar de um ponto de vista quântico a singularidade neste espaço também. Porém este estudo ficará para um trabalho posterior.

Existe uma quantidade muito grande de espaços-tempos que ainda podem ser estudados utilizando as ferramentas apresentadas nestes trabalho (como por exemplo o universo $2 + 1$ dimensional em expansão citado acima). Em projetos futuros, pretendemos explorar outros espaços-tempos e, incentivados pelo resultado obtido por Matsas e Silva [3], encontrar condições onde a hipótese da censura cósmica possa falhar. Durante todo este trabalho, usamos um background clássico e testamos as singularidades com partículas quânticas. É possível também realizar o processo contrário, realizando uma quantização canônica do espaço-tempo [19] e resolvendo para as variáveis canônicas a equação de Wheeler-deWitt, a fim de determinar o comportamento de quantidades clássicas, como o escalar de Ricci (ver [20]) e determinar se as singularidades são removidas com essa teoria.

Notas sobre as referências: As referências [1]– [2], [4]– [18] e [21]– [37] foram utilizadas no desenvolvimento do trabalho, incluindo a composição dos dois artigos anexados nos apêndices A e B, que têm discriminadas as referências utilizadas em cada um deles ao final. As referências [3] e [19]– [20] foram colocadas pois servirão de inspiração para trabalhos futuros sobre o mesmo tema singularidades quânticas. As referências [38]– [48] não foram citadas diretamente no trabalho, mas tiveram alguma importância no desenvolvimento deste.

Referências Bibliográficas

- [1] Hawking, S. e Ellis, G. (1973). *The Large Scale Structure of Space-Time* (Cambridge University Press, Cambridge).
- [2] Hawking, S.W. (1995). *Phys. Rev. D.* **24**60.
- [3] Matsas, G. e Silva, A.R. (2007). *Phys. Rev. Lett.* **99**, 181301.
- [4] Horowitz, G.T. e Marolf, D. (1995). *Phys. Rev. D.* **52**, 5670.
- [5] Helliwell, T.M. e Konkowski, D.A. (1987). *Class. Quantum Grav.* **24**, 3377.
- [6] Kay, B.S. e Studer, U.M. (1991). *Comm. Math. Phys.* **138**, 103.
- [7] Gerbert, P.S. e Jackiw, R. (1989). *Commun. Math. Phys.* **124**, 229.
- [8] Deser, S., Jackiw, R. e 't Hooft, G. (1984). *Ann. Phys.* **152**, 220.
- [9] Kreyszig, E. (1989). *Introductory Functional Analysis With Applications* (John Wiley & Sons, New York).
- [10] Richtmyer, R.D. (1978). *Principles of Advanced Mathematical Physics, Vol. 1* (Springer, New York).
- [11] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. e Franck, L. (1977). *Quantum Mechanics, Vol. 1* (John Wiley & Sons, New York).
- [12] Fulling, S.A. (1989). *Aspects of Quantum Field Theory in Curved Space-Time* (Cambridge University Press, Cambridge).
- [13] Reed, M. e Simon, B. (1972). *Functional Analysis* (Academic Press, New York).

- [14] Sakurai, J.J. (1994). *Modern Quantum Mechanics, Revised Edition* (Addison-Wesley Publishing Company, New York).
- [15] Reed, M. e Simon, B. (1972). *Fourier Analysis and Self-Adjointness* (Academic Press, New York).
- [16] Ishibashi, A. e Hosoya, A. (1999). *Phys. Rev. D.* **60**, 104028.
- [17] Wald, R.M. (1980). *J. Math. Phys.* **21**, 2802.
- [18] Sucu, Y. e Ünai, N. (2007). *J. Math. Phys.* **48**, 052503.
- [19] DeWitt, B.S. (1967). *Phys. Rev. D* **160**, 1113.
- [20] Monerat, G.A., Oliveira-Neto, G., Silva, E.V.C. e Lemos, N.A. (2007). *arXiv:0708.3852v1 [gr-qc]*.
- [21] Letelier, P.S. (1987). *Class. Quantum Grav.* **4**, L75.
- [22] Gal'tsov, D.V. e Letelier, P.S. (1993). *Phys. Rev. D.* **47**, 4273. ; Veja também, Letelier, P.S. (1995). *Class. Quantum Grav.* **12**, 471.
- [23] Heliwell, T.M. e Konkowski, D.A. (1987). *Am. J. Phys.* **55**, 401.
- [24] Konkowski, D.A. e Helliwell, T.M. (2001). *Gen. Rel. Grav.* **33**, 1131.
- [25] Helliwell, T.M., Konkowski, D.A. e Arndt, V. (2003). *Gen. Rel. Grav.* **35**, 79.
- [26] Konkowski, D.A., Helliwell, T.M. e Wieland, C. (2004). *Class. Quantum Grav.* **21**, 265.
- [27] Letelier, P.S. e Wang, A. (1995). *J. Math. Phys.* **36**, 3023.
- [28] Letelier, P.S. (1995). *J. Math. Phys.* **36**, 3043.
- [29] Staruszkiewicz, A. (1963). *Acta. Phys. Polon.* **24**, 734.
- [30] Bañados, M., Teitelboim, C. e Zanelli, J. (1992). *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1849.
- [31] Bañados, M., Henneaux, M., Teitelboim, C. e Zanelli, J. (1993). *Phys. Rev. D.* **48**, 1506.
- [32] Deser, S. e Jackiw, R. (1984). *Ann. Phys.* **153**, 405.

- [33] Pantoja, N., Rago, H. e Rodríguez, R. (2004). *J. Math. Phys.* **45**, 1994.
- [34] Horowitz, G.T. e Myers, R. (1995). *Gen. Relativ. Gravit.* **27**, 915.
- [35] P. de Sousa Gerbert, *Phys. Rev. D* **40**, 1346 (1989).
- [36] Gavrilov, S.P., Gitman, D.M. e Tomazelli, J.L. (2005). *Eur. Phys. J. C* **39**, 245.
- [37] Kahlilov, V.R. e Ho C.L. (1998). *Mod. Phys. Lett. A* **13**, 615.
- [38] Letelier, P.S. (1992). *Class Quantum Grav.* **9**, 2057.
- [39] Gleiser, R.J. e Letelier, P.S. (1992). *Class Quantum Grav.* **9**, 2057.
- [40] Letelier, P.S. (1995). *Class Quantum Grav.* **12**, 2221.
- [41] Letelier, P.S. (1989). *Class. Quantum Grav.* **6**, L207.
- [42] Tod, K.P. (1994). *Class Quantum Grav.* **11**, 1331.
- [43] Taub, A.H. (1980). *J. Math. Phys.* **21**, 1423.
- [44] Vilenkin, A. e Shellard, E.P.S. (1994). *Cosmic Strings and Other Topological Defects* (Cambridge University Press, London).
- [45] Cruz, N., Martínez, C. e Peña, L. (1994). *Class. Quantum Grav.* **11**, 2731.
- [46] Khalilov, V.R. (2005). *Phys. Rev. A* **71**, 012105.
- [47] Khalilov, V.R. (2004). *Theor. Math. Phys.* **140**, 1229.
- [48] Wald, R.M. (1984). *General Relativity* (The University of Chicago Press, Chicago).

Apêndice A

Singularidades Quânticas em Espaços-tempos com Paredes Cósmicas

ref.: *J. Math. Phys.* 48, 09251-1–09251-9 (2007)

Quantum Singularities in Spacetimes with Spherical and Cylindrical Topological Defects

Paulo M. Pitelli¹ and Patricio S. Letelier²

Departamento de Matemática Aplicada, Instituto de Matemática, Estatística e
Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas, 13083-970, Campinas, SP,
Brazil

Exact solutions of Einstein equations with null Riemman-Christoffel curvature tensor everywhere, except on a hypersurface, are studied using quantum particles obeying the Klein-Gordon equation. We consider the particular cases when the curvature is represented by a Dirac delta function with support either on a sphere or on a cylinder (spherical and cylindrical shells). In particular, we analyze the necessity of extra boundary conditions on the shells.

¹e-mail: pitelli@ime.unicamp.br

²e-mail: letelier@ime.unicamp.br

A.1 Introduction

Topological defects appear naturally in theories of the early universe based on the spontaneous symmetry breaking of some unifying group. Examples are the cosmic string, which appears in the breaking of a $U(1)$ symmetry group and the cosmic wall, which is produced in the breaking of a discrete symmetry. These defects are characterized by a null curvature tensor everywhere, except on a submanifold, where it is proportional to a Dirac delta function.

These spaces are classically singular, Wald [1], followed by Horowitz and Marolf [2], establishes an analogy between the classical and quantum singularities. The trajectories of classical particles (geodesics) used to test classical singularities are replaced by solutions to a quantum mechanics equation. Spacetimes with a 0-dimensional singularity, as well as, spacetimes with a 1-dimensional singularity have been classically and quantum mechanically studied [1]- [11]

In a seminal paper on this subject, Wald [1] considered an arbitrary self-adjoint extension of the spatial portion of wave operator in an arbitrary static spacetime (with singularities consistent with staticity) and showed that the resulting solution agreed with the usual Cauchy evolution inside the domain of dependence of the initial surface.

Horowitz and Marolf [2] considered a spacetime as quantum mechanically nonsingular when the evolution of a general state is uniquely defined for all time. They showed that there exist a general class of spacetimes with naked singularities which are nonsingular quantum mechanically.

Ishibashi and Hosoya [7] studied several spacetimes with naked singularities using Sobolev spaces (instead of L^2) as the function space of initial data. They showed that some spacetimes, which remain quantum mechanically singular with a L^2 function space, become regular when probed by waves in Sobolev space (for example, the negative mass Schwarzschild spacetime). But, the Sobolev space is not the natural space in quantum mechanics.

Kay and Studer [8] studied the 2-dimensional cone (the spacetime generated by a point source in a 3-dimensional Einstein gravity without cosmological constant [3]), described

by the metric

$$ds^2 = -dt^2 + dr^2 + \beta^2 r^2 d\theta^2, \quad (\text{A.1})$$

where the constant β is related to the mass of the source. They showed that this spacetime remains singular when tested by quantum particles and found all the possible self-adjoint extensions necessary to turn self-adjoint the spatial portion of the wave operator. They are represented by a non trivial 1-parameter family of boundary conditions.

Helliwell, Konkowski and Arndt [10] studied a $1 + 3$ dimensional spacetime with a cosmic dislocation and a disclination at $z = 0$ given by the metric [5],

$$ds^2 = -dt^2 + dr^2 + \beta^2 r^2 d\theta^2 + (dz + \gamma d\theta)^2, \quad (\text{A.2})$$

where γ is a screw dislocation parameter. They found that this spacetime remains singular and generalized the results to Maxwell and Dirac fields, with the same results.

To the best of our knowledge the spacetime singularities for defects of dimensions grater than one have not been studied from a quantum mechanical view point. The aim of this work is to study the evolution of quantum particles in spacetimes with defects on hypersurfaces, specifically on spherical (bubbles) and cylindrical shells.

This paper is organized as follows. In section A.2 we discuss some classical aspects of spacetimes with spherical and cylindrical walls. In section A.3 we present a short review of quantum singularities in a general static spacetime, based mainly on references [1] and [2]. In section A.4 we study the quantum behavior of particles in spacetimes with spherical and cylindrical defects and discuss about necessity of extra boundary conditions on the classical singular wall. In section A.5 we find a 1-parameter family of boundary conditions for spherical, as well as, cylindrical shells. In section A.6 we give a simple example which illustrates the results of the two previous sections. Finally, in section A.7, we discuss some of our results and point out generalizations to spacetimes with shells with other symmetries and to quantum particles obeying Maxwell and Dirac equations.

A.2 Spherical and Cylindrical Walls

Spacetimes with a topological defect on a general hypersurface $\phi = 0$ can be constructed splitting the space in two regions, say Ω^+ and Ω^- , where $\phi > 0$ and $\phi < 0$, respectively. By the requirement that the Riemann-Christoffel tensor, $R_{\mu\nu\sigma\eta}$, be null on Ω^+ and Ω^- , we obtain a spacetime similar to Minkowski spacetime, except for the defect.

We demand continuity of the metric and discontinuity of its first derivatives on $\phi = 0$. The dependence of $R_{\mu\nu\sigma\eta}$ on the second derivative of $g_{\mu\nu}$ gives us a delta function with support on the defect.

Spherical and cylindrical defects are obtained with the function $\phi = r - r_0$, where r is the radial coordinate on both cases. In the spherical case metric is [13],

$$\begin{aligned} ds^2 &= -dt^2 + dr^2 + (r - b)^2 d\Omega^2, & r > r_0 \\ ds^2 &= -dt^2 + dr^2 + (r - a)^2 d\Omega^2, & r < r_0, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

where $d\Omega^2$ is the usual measure on $\mathbb{S}^2$, $b = r_0 + 4/\rho_0$ and $a = r_0 - 4/\rho_0$, ρ_0 is a positive constant. This metric represents a static spherical shell of radius $r_0 = (a + b)/2$, centered at the origin, with density $\rho = \rho_0 \delta(r - r_0)$. Note that on $r = r_0$, the metric is continuous, while its first derivatives have a discontinuity given by

$$\begin{aligned} [g_{\theta\theta,r}] &= \lim_{r \rightarrow r_0^+} g_{\theta\theta,r} - \lim_{r \rightarrow r_0^-} g_{\theta\theta,r} = 2(a - b), \\ [g_{\phi\phi,r}] &= \lim_{r \rightarrow r_0^+} g_{\phi\phi,r} - \lim_{r \rightarrow r_0^-} g_{\phi\phi,r} = 2(a - b) \sin^2 \theta. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

The non-null components of curvature tensor $R_{\mu\nu\lambda\sigma}$, viewed as a distribution [12], are

$$\begin{aligned} R_{1212} &= (b - a) \delta(r - r_0) \\ R_{1313} &= (b - a) \sin^2 \theta \delta(r - r_0). \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

The non-null components of the energy-momentum tensor are

$$\begin{aligned} T_{00} &= (b - a) \delta(r - r_0) \\ T_{11} &= -(b - a) \delta(r - r_0). \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Similarly, for the cylindrical case, we have

$$\begin{aligned} ds^2 &= -dt^2 + dr^2 + (r - b)^2 d\varphi^2 + dz^2, & r > r_0 \\ ds^2 &= -dt^2 + dr^2 + (r - a)^2 d\varphi^2 + dz^2, & r < r_0 \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

but now $b = r_0 + 2/\rho_0$ and $a = r_0 - 2/\rho_0$. The metric in this case represents a static cylindrical shell centered at the z axis, of radius $r_0 = (a+b)/2$ and density $\rho = \rho_0 \delta(r - r_0)$.

Note that on both cases, metrics inside and outside the shells, are obtained from the Minkowski spacetime by an isometric coordinate transformation $r \longrightarrow r - \text{constant}$. Hence, they are isometric to Minkowski spacetime.

Note that if one allows the radial coordinate take negative values we have two Minkowski spacetimes separated by a defect, i.e., a wormhole, which makes these spacetimes particularly interesting.

The points $r = a$ and $r = b$ are metric singularities of the polar type, without any deeper geometrical meaning. The real spacetime singularity is on $r = r_0$, the middle point between a and b .

Figure A.2-1 shows timelike geodesics on the external side of the bubble [13], in the plane $\theta = \pi/2$. The continuous circle represents the physical singularity $r = r_0$, whereas the dashed one represents the metric singularity $r = b$. The figure shows that the surface $r = b$ is completely regular. The geodesics cross this surface with no problem.

A.3 Quantum Singularities

In general relativity, spacetime singularities are indicated by incomplete geodesics. At points where a geodesic abruptly ends, extra information is needed, since it is not possible to predict the future of a free falling particle in an incomplete geodesic spacetime. In quantum mechanics, this extra information corresponds to a boundary condition at the classical singular points needed to turn self-adjoint the spatial part of the wave operator. When this extra information is not necessary the evolution of the wave packet is uniquely determined by the wave function at $t = 0$. We say that space is not quantum mechanically singular. In such cases, the condition that the solutions be square-integrable works as

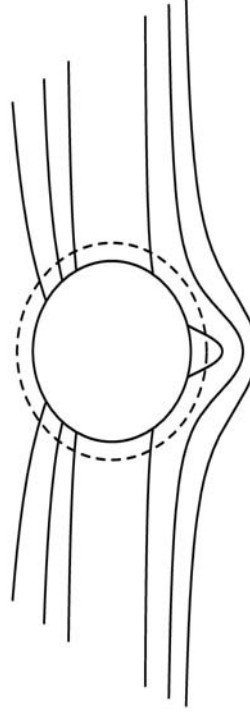


Figura A.2-1. Motions of equal energy particles, with distinct angular momentum, subjects to the gravitational field generated by a spherical defect on the external side of the shell. Some of these geodesics end abruptly on the surface $r = r_0$, while the surface $r = b$ is perfectly regular.

a boundary condition and the initial conditions alone determine time evolution of the particles.

An example of a classical singular theory, which becomes nonsingular in the view of quantum mechanics, is the nonrelativistic hydrogen atom. The imposition of quadratic integrability of the solutions of Schrödinger equation are sufficient to provide a complete set of eigenfunctions. Given an initial wave packet, its time evolution is uniquely determined.

Another example, now of a singularity that remains singular when tested by quantum mechanics, is the nonrelativistic particle trapped in a 1-dimensional box. A boundary condition is necessary on both edges (it is usually taken $\psi(0) = \psi(1) = 0$) in order to evolve uniquely the wave packet. Now we shall present the concepts mentioned previously in a more precise way.

Let $(M, g_{\mu\nu})$ be a static spacetime with a timelike Killing vector field ξ^μ . Also, let t be

the Killing parameter and Σ a static spacelike slice (without any singularity) orthogonal to the Killing vector for all t . The Klein-Gordon equation on this space is

$$\square\Psi = M^2\Psi, \quad (\text{A.8})$$

where $\square = \nabla^\mu \nabla_\mu$ can be split in a temporal and a spatial part, like

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -A\Psi \quad (\text{A.9})$$

$$= VD^i(VD_i\Psi) - M^2V^2\Psi, \quad (\text{A.10})$$

with $V = -\xi^\mu \xi_\mu$ and D_i the spatial covariant derivative on the slice Σ .

To find the domain of the operator A , $D(A)$, is a more difficult task and generally no information is provided. So, a minimum domain is taken (a core), where the operator can be defined and which does not enclose the spacetime singularities. An appropriate set is $C_0^\infty(\Sigma)$, the set of the smooth function of compact support on Σ . On the Hilbert space $L^2(\Sigma, V^{-1}d\mu)$, where $d\mu$ is the proper element on Σ , it is not difficult to show (integrating by parts) that the operator $(A, C_0^\infty(\Sigma))$ is a positive symmetric operator. Then, self-adjoints extensions always exist [14] (at least the Friedrichs extension). Let A_E be such extension, obtained by relaxing the boundary condition so that the extended domain coincides with the domain of its adjoint operator. Because of the self-adjointness of A_E , the time evolution of the field Ψ is uniquely determined by the initial wave packet and is given by

$$\Psi(t) = \cos(A_E^{1/2}t)\Psi(0) + A_E^{1/2} \sin(A_E^{1/2}t)\dot{\Psi}(0), \quad (\text{A.11})$$

where functions of the operator A_E exist by the spectral theorem [14].

For the nonrelativistic case, the situation is similar. The Schrödinger equation can be written as,

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\nabla^2\Psi, \quad (\text{A.12})$$

where ∇^2 is the Laplace-Beltrami on (Σ, h_{ij}) and h_{ij} is the induced metric on Σ . If $-\nabla_E^2$ is a self-adjoint extension of $-\nabla^2$, the evolution of the particle is given by

$$\Psi(t) = e^{-i\nabla_E^2 t}\Psi(0). \quad (\text{A.13})$$

If many self-adjoint extensions exist, the choice of one is necessary in order to obtain the time evolution of the particle. Extra information is needed (boundary conditions), the spacetime is quantum mechanically singular and we can clearly see the resemblance to the classical case. However, if there is only one self-adjoint extension, the operator A is said essentially self-adjoint and the quantum evolution of the particle is uniquely determined by the initial packet. The spacetime is quantum mechanically nonsingular.

To study quantum singularities of a static spacetime, i.e., the essentially self-adjointness of the spatial operator A defined in equation (A.10), a tool used is the von Neumann theorem [16], which says that the self-adjoint extensions of a closed Hermitian operator T is in a one-to-one correspondence with the partial isometries of $\text{Ker}(T^* - i)$ into $\text{Ker}(T^* + i)$, where $\text{Ker}(T^* \pm i)$ denotes the kernel of $T^* \pm i$ and T^* denotes the Hilbert adjoint operator of T .

In our case, the domain of A is so small, i.e., the restrictions on the functions in $D(A) = C_0^\infty(\Sigma)$ are so strong, that the domain of the adjoint operator becomes extremely wide and no restrictions on $\psi \in D(A^*)$ are necessary, except that $A^*\psi \in L^2$. Hence

$$D(A^*) = \{\psi \in L^2 : A^*\psi \in L^2\}. \quad (\text{A.14})$$

So, we must solve the following equations

$$A^*\psi \mp i\psi = 0 \quad (\text{A.15})$$

and count the number of solutions in L^2 . We define $n_\pm = \dim \text{Ker}(A^* \mp i)$ and name them the deficiency indecis [14–16].

If do not exist solutions of (B.6) in L^2 , then $n_+ = n_- = 0$ and A is essentially self-adjoint. If $n_+ = n_- = 1$, there is a 1-parameter family of isometries of $\text{Ker}(A^* - i)$ into $\text{Ker}(A^* + i)$, hence there is a 1-parameter family of self-adjoint extensions. The case $n_+ = n_- = 2$ is similar.

A.4 Quantum Mechanics Around Bubbles and Cylindrical Shells

A.4.1 Bubbles

In the spacetime described by the metric (A.3), Klein-Gordon equation is similar to the wave equation in flat spacetime, except by the isometric transformation $r \rightarrow r - \text{constant}$,

$$\nabla_\mu \nabla^\mu \Psi = -\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} + \nabla^2 \Psi = M^2 \Psi. \quad (\text{A.16})$$

In our case

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r-b} \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{(r-b)^2} - M^2 \Psi \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r-a} \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{(r-a)^2} - M^2 \Psi, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

where $\mathbf{L}^2$ is the square of angular momentum operator.

As we said previously, we must solve the equations

$$A^* \psi \mp i\psi = 0,$$

where A is the spatial portion of the wave equation (right hand side of equation (A.17)).

The equation separates using $\psi = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$, where $Y_l^m(\theta, \varphi)$ are the usual spherical harmonics. The radial part is

$$\begin{aligned} R''_{l,m}(r) + \frac{2}{(r-b)} R'_{l,m}(r) + \left[(\pm i - M^2) - \frac{l(l+1)}{(r-b)^2} \right] R_{l,m}(r) &= 0 \\ R''_{l,m}(r) + \frac{2}{(r-a)} R'_{l,m}(r) + \left[(\pm i - M^2) - \frac{l(l+1)}{(r-a)^2} \right] R_{l,m}(r) &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

The spacetimes on both sides of the bubble are completely independent (they are separated by a wall), so the appropriate Hilbert space is the tensorial product of the L^2 spaces on each side of the bubble. If we call Σ_1 the outer spatial slice and Σ_2 the inner

one, we have

$$H = L^2(\Sigma_1, (r - b)^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi) \otimes L^2(\Sigma_2, (r - a)^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi). \quad (\text{A.19})$$

Therefore we shall analyze the spatial portion of the wave operators on each side of the bubble. Let us look first to the external side of the bubble, as r goes to infinity, the last term in equation (A.18) can be neglected and the asymptotic solution is

$$R(r) = \frac{1}{(r - b)} [C_1 e^{\alpha(r-b)} + C_2 e^{-\alpha(r-b)}], \quad (\text{A.20})$$

where

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(\sqrt{1 + M^4} + M^2)^{1/2} \mp i(\sqrt{1 + M^4} - M^2)^{1/2} \right]. \quad (\text{A.21})$$

Obviously, solution (A.20) is square-integrable near infinity only if $C_1 = 0$. The behavior near $r = r_0$ does not really matter in this case, this point is an ordinary point of equation (A.18). Then, both solutions are continuous in $r = r_0$, hence, square-integrable near this point. So we can adjust the constants of the general solution in order to meet the asymptotic behavior at infinity $R(r) \sim (1/r)e^{-\alpha(r-b)}$.

There is one solution in L^2 , to each equation in (B.6). Hence $n_{\pm} = 1$ and exists a one-parameter family of self-adjoints extensions of A in Σ_1 .

For the inner portion of the bubble, the procedure is similar, but now with r taking values between $-\infty$ and r_0 . Again, there is a one-parameter family of self-adjoint extensions of A in $L^2(\Sigma_2)$.

Hence, the spacetime (A.3) remains quantum mechanically singular. The evolution of a wave packet is not uniquely determined by the initial state of the particle and a boundary condition need to be imposed (independently) on both sides of the spherical wall.

A.4.2 Cylindrical Shells

For spacetime described by (A.7), the appropriate Hilbert space is

$$H = L^2(\Sigma_1, |r - b| dr d\varphi dz) \otimes L^2(\Sigma_2, |r - a| dr d\varphi dz). \quad (\text{A.22})$$

As in the previous case, after separating variables $\psi = R(r)e^{im\varphi}e^{ikz}$, we have (for the radial portion outside the shell)

$$R''_{m,k}(r) + \frac{1}{(r-b)}R'_{m,k}(r) + \left[(\pm i - (k^2 + M^2)) - \frac{m^2}{(r-b)^2} \right] R_{m,k}(r) = 0. \quad (\text{A.23})$$

As r goes to infinity, the asymptotic behavior of $R(r)$ is

$$R(r) \sim \frac{1}{\sqrt{(r-b)}} (C_1 e^{\alpha(r-b)} + C_2 e^{-\alpha(r-b)}) \quad (\text{A.24})$$

where

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(\sqrt{1 + (M^2 + k^2)^2} + M^2 + k^2)^{1/2} \mp i(\sqrt{1 + (M^2 + k^2)^2} - M^2 - k^2)^{1/2} \right]. \quad (\text{A.25})$$

Again, $R(r)$ is square-integrable near $+\infty$ only if $C_1 = 0$, hence

$$R(r) \sim \frac{1}{\sqrt{(r-b)}} e^{-\alpha(r-b)}. \quad (\text{A.26})$$

For r near r_0 , both solutions are continuous (as in the bubble case), hence square-integrable. Then we find a solution in L^2 for each equation in (B.6). The deficiency indices are $n_{\pm} = 1$, so there are infinitely many self-adjoint extensions of A in this case too. This space remains singular when tested by quantum particles.

A.5 Boundary Conditions in $r = r_0$

On both spacetimes studied in the last section the Klein-Gordon equation presents only one singular point, $r = +\infty$ in the outer portion and $r = -\infty$ in the inner one (we remind that $r = a, b$ are polar metric singularities). The boundary conditions on $r = r_0$, necessary to turn self-adjoint the spatial portion of the wave operator are simple as we shall see.

The radial portions of the Klein-Gordon operator are given by

$$\begin{aligned} A_r &= \frac{1}{(r-b)^2} \left\{ -\frac{d}{dr} \left[(r-b)^2 \frac{d}{dr} \right] + l(l+1) + M^2(r-b)^2 \right\} \quad (\text{bubble}) \\ A_r &= \frac{1}{(r-b)} \left\{ -\frac{d}{dr} \left[(r-b) \frac{d}{dr} \right] + \frac{m^2}{(r-b)} + \right. \\ &\quad \left. + (k^2 + M^2)(r-b) \right\} \quad (\text{cylindrical shell}) \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

in the Hilbert spaces

$$\begin{aligned} L^2((r_0, \infty), (r-b)^2 dr) \quad (\text{bubble}) \\ L^2((r_0, \infty), |r-b| dr) \quad (\text{cylindrical shell}). \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

On both cases, they have the general form

$$A_r = -\frac{1}{w(r)} \left\{ \frac{d}{dr} \left[p(r) \frac{d}{dr} \right] + q(r) \right\} \quad (\text{A.29})$$

in the Hilbert space $L^2(\Sigma, w(r)dr)$.

Because $r = r_0$ is not a singular point of (A.29), the self-adjoint extensions are found extending the domain of A to functions in L^2 satisfying [15],

$$f(r_0) \cos \alpha + p(r_0) f'(r_0) \sin \alpha = 0 \quad (\text{A.30})$$

with $\alpha \in \mathbb{R}$.

So, the boundary conditions in our case are:

External Side

- Bubble

$$R(r_0) \cos \alpha + (r_0 - b)^2 R'(r_0) \sin \alpha = 0, \quad (\text{A.31})$$

- Cylindrical Shell

$$R(r_0) \cos \alpha + (r_0 - b) R'(r_0) \sin \alpha = 0, \quad (\text{A.32})$$

$\alpha \in \mathbb{R}$.

Internal Side

- Bubble

$$R(r_0) \cos \beta + (r_0 - a)^2 R'(r_0) \sin \beta = 0, \quad (\text{A.33})$$

- Cylindrical Shell

$$R(r_0) \cos \beta + (r_0 - a) R'(r_0) \sin \beta = 0, \quad (\text{A.34})$$

$\beta \in \mathbb{R}$.

A.6 Massless Particle Outside the Spherical Wall

To illustrate results of sections A.4 and A.5, we will discuss a simple example, a massless particle in the outer side of the bubble. The Klein-Gordon equation can be solved exactly by separation of variables $\Psi = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi)e^{-i\omega t}$ (positive-frequency solution). The general solution of the radial part is

$$R_{l,m}(r) = A_{l,m}j_l(\omega(r - b)) + B_{l,m}\eta_l(\omega(r - b)), \quad (\text{A.35})$$

where j_l and η_l are the spherical Bessel and Neumann functions, respectively. Because neither of them are square-integrable near infinity, there is only one linear combination

of these functions which are square-integrable [15], apart from a multiplicative constant. One of the constants in (A.35) was eliminated and we have a set of square-integrable functions at $+\infty$, $\{F_{l,m}\}$, so that

$$R_{l,m} = C_{l,m} F_{l,m}(\omega(r - b)). \quad (\text{A.36})$$

We pick the parameter $\alpha = 0$, which corresponds to the boundary condition $R(r_0) = 0$ (Dirichlet boundary condition). This condition imposes a quantization of the allowed energies $\{\omega_{l,n}\}_{n \in \mathbb{N}}$, where $\omega_{l,n}(r_0 - b)$ are the zeros of $F_{l,m}$. We then have a complete set of eigenfunction $\{F_{l,m,n}\}$ so that a general solution of Klein-Gordon equation can be written by a superposition of the allowed modes as

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{l,m} F_{l,m,n}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) e^{-i\omega_n t}, \quad (\text{A.37})$$

resting only one constant to be determined. In this way, the knowledge of the initial packet is sufficient to determine the quantum dynamic of the particle. Note that the choice of one boundary conditions given in (B.21) turned our operator into self-adjoint, so that the evolution of the particle becomes uniquely determined by the initial wave packet.

A.7 Conclusions

Two singular spacetimes that represent defects on a hypersurface were tested using quantum mechanics. We find that they remain singular when probed by waves. They had to be partitioned in two independent parts, so the splitting of the Hilbert space in a tensorial product was necessary. Due to the fact that the classical singular points ($r - r_0 = 0$) are ordinary points of Klein-Gordon equation the boundary conditions necessary to turn self-adjoint the spatial portion of the wave operator can be easily found. Two real parameters are necessary, because each side of the wall behaves independently.

A wide class of spacetimes with singularities in a 2-dimensional submanifold can be found in references [12] and [13]. They represent open and closed shells of different shapes, like parabolic and toroidal shells. These spacetimes are not as simple as the ones studied in the present work, but they are still static and, in principle, can be treated, in a similar

way.

We do not foresee special difficulties to study Maxwell and Dirac fields for bubbles and cylindrical shells.

Acknowledgements

We thank CNPq for financial support and P.S.L. also thanks FAPESP.

Referências Bibliográficas

- [1] R.M. Wald, J. Math. Phys. **21**, 2082 (1980).
- [2] G.T. Horowitz and D. Marolf, Phys. Rev. **52**, 5670 (1995).
- [3] S. Deser, R. Jackiw, and G. 't Hooft, Ann. Phys. **152** , 220 (1984).
- [4] P.S. Letelier, Class. Quantum Grav. **4** , 75 (1987).
- [5] D.V. Gal'tsov and P.S. Letelier, Phys. Rev. D **47**, 4425 (1993); See also, P.S. Letelier, Class. Quantum Grav. **12**, 471 (1995).
- [6] T.M. Heliwell and D.A. Konkowski, Am. J. Phys. **55**, 401 (1987).
- [7] A. Ishibashi and A. Hosoya, Phys. Rev. D, **60**, 104028 (1999).
- [8] B.S. Kay and U.M. Studer, Comm. Math. Phys. **138** , 103 (1991).
- [9] D.A. Konkowski, and T.M. Helliwell, Gen. Rel. Grav. **33**, 1131 (2001).
- [10] T.M. Helliwell, D.A. Konkowski and V. Arndt, Gen. Rel. Grav. **35** , 79 (2003).
- [11] D.A. Konkowski, T.M. Helliwell and C. Wieland, Class. Quantum Grav. **21**, 265 (2004).
- [12] P.S. Letelier, and A. Wang, J. Math. Phys. **36**, 3023 (1995).
- [13] P.S. Letelier J. Math. Phys. **36**, 3043 (1995).
- [14] M. Reed and B. Simon, *Functional Analysis*, (Academic Press, New York, 1980).
- [15] R.D. Richtmyer, *Principles of Advanced Mathematical Physics*, (Springer, New York, 1978).

- [16] M. Reed and B. Simon, *Fourier Analysis and Self-Adjointness*, (Academic Press, New York, 1975).

Apêndice B

Singularidades Quânticas no Espaço-tempo BTZ

ref: to appear in Phys. Rev. D

Quantum Singularities in the BTZ Spacetime

João Paulo M. Pitelli¹ and Patricio S. Letelier²

Departamento de Matemática Aplicada, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas, 13083-970, Campinas, SP, Brazil

The spinless Bañados-Teitelboim-Zanelli (BTZ) spacetime is considered in the quantum theory context. Specially, we study the case of negative mass parameter using quantum test particles obeying the Klein-Gordon and Dirac equations. We study if this classical singular spacetime, with a naked singularity at the origin, remains singular when tested with quantum particles. The need of additional information near the origin is confirmed for massive scalar particles and all the possible boundary conditions necessary to turn the spatial

¹e-mail: pitelli@ime.unicamp.br

²e-mail: letelier@ime.unicamp.br

portion of the wave operator self-adjoint are found. When tested by massless scalar particles or fermions, the singularity is “healed” and no extra boundary condition are needed. Near infinity, no boundary conditions are necessary.

B.1 Introduction

In the $2+1$ dimensional Einstein theory of gravitation without cosmological constant, the spacetime is necessarily flat and only its global topological properties [1] makes it different from the trivial $2+1$ dimensional Minkowski spacetime. In the simplest case of a point particle at the origin, the resulting spacetime is conic [2] (the usual plane with a slice removed and identified edges). It is the $2+1$ dimensional analog of the $3+1$ dimensional cosmic string (for a classical treatment see [3] and for a quantum treatment [4]).

When a negative cosmological constant, Λ , is considered, the Einstein equations admit a black hole solution [5]. The lower dimension of the BTZ solution makes it a particularly simple example of a spacetime with the main properties of the usual $3+1$ black hole.

The negative cosmological constant gives us a asymptotically anti-de Sitter spacetime, instead of a flat one. In fact, the BTZ spacetime is locally anti-de Sitter, differing only by its global topological properties [6, 7].

There are three different kinds of spacetimes (solutions of Einstein equations) depending on a mass parameter m , which has been adjusted so that the mass vanishes when the horizon size goes to zero, that is, $m = 0$ for the vacuum state. For $m > 0$, there is a continuum black hole spectrum with a singularity of the Taub-NUT type at the origin, hidden by an event horizon given by $r_+ = \sqrt{ml}$ [5], where $l^{-2} = -\Lambda$. This spacetime does not violate the cosmic censorship hypothesis since the singularity is hidden. It is a reasonable classical spacetime and quantum mechanical considerations are not needed in this case.

As m takes values smaller than or equal to zero, there appears a continuous sequence of naked singularities (point particle sources) at the origin. The singularities do not come from any curvature scalar divergence, but rather from a topological obstruction of the spacetime continuation, since the Ricci tensor has a term proportional to the Dirac distribution [8] in addition to the constant curvature. This last term is due to the presence

of the cosmological constant. Near the origin, where the curvature can be neglected, the spacetime is conic, so it must be excluded by the cosmic censorship hypothesis. It is in this classical background that the quantum test particles will be studied in order to see if the spacetime remains singular when considered in the quantum theory context. In this paper we adopt the definition of quantum singularity due to Horowitz and Marolf [10], which says that a spacetime is quantum mechanically nonsingular if the time evolution of any wave packet is uniquely determined by the initial wave function.

When m takes the value -1 , the spacetime does not present an event horizon, but there is no singularity to hide either, so this solution (a true anti-de Sitter spacetime) is again permissible and it is the ground state of the theory (for a discussion of the importance of naked singularities to establish the ground state in any gravitation theory, see [9]).

For the mass parameter $m < -1$ the spacetime represents point sources with negative mass without physical meaning.

The purpose of this work is to study the naked singularities for the continuous sequences of spacetimes separating the black hole like spectrum from the ground state anti-de Sitter spacetime. We shall use quantum test particles to determine if these spacetimes are quantum mechanically singular.

The paper is organized as follows, in section B.2 we present a brief review of quantum singularities in a general static spacetime. In section B.3 we apply the formalism presented in the previous section to the case of scalar particles. We also consider the boundary conditions studied by Kay and Studer [11] and adopt them in the context of the BTZ spacetime. In section B.4, we extend the formalism to particles with spin. Finally, in section B.5, we discuss the results presented in this work.

B.2 Quantum Singularities

In general relativity, a spacetime singularity is indicated by incomplete geodesics or, more precisely, by b-incompleteness, i.e., incomplete curves of boundary acceleration [14]. At the singular points, an extra information must be added, since we lose the capacity to predict the future of a particle following an incomplete worldline.

In order to generalize this concept to quantum mechanics, Horowitz and Marolf proposed a simple definition of singularity. They stated that a spacetime is nonsingular if the evolution of any state is uniquely determined for all time. In this way, a spacetime is said quantum mechanically nonsingular if the time evolution of any wave packet is uniquely determined by the initial wave data on a Cauchy surface.

To be more precise, let $(M, g_{\mu\nu})$ be a static spacetime with a timelike Killing vector field ξ^μ , t be the Killing parameter and Σ a static spatial slice orthogonal to ξ^μ . The Klein-Gordon equation on this spacetime,

$$\square\Psi = M^2\Psi, \quad (\text{B.1})$$

can be split in a temporal and a spatial part,

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -A\Psi = VD^i(VD_i\Psi) + M^2V^2\Psi, \quad (\text{B.2})$$

where $V^2 = -\xi^\mu\xi_\mu$ and D_i is the spatial covariant derivative on Σ

To avoid the singular points, we take $C_0^\infty(\Sigma)$, the set of all smooth functions of compact support on Σ , as the domain $D(A)$ of the operator A defined in equation (B.2). With this domain, A is a well-defined positive symmetric operator on the Hilbert space $H = L^2(\Sigma, V^{-1}d\mu)$, where $d\mu$ is the usual measure on Σ .

The chosen domain is so small, i.e., the restrictions on functions are so strong, that the domain of the Hilbert adjoint operator A^* is extremely large and it is composed of all functions ψ in $L^2(\Sigma, V^{-1}d\mu)$ such that $A\psi \in L^2$. Then, A is not self-adjoint.

Hence, we are face with the problem of searching for self-adjoint extensions of A and to discover if it has only one or many of such extensions.

If A has only one self-adjoint extension (its closure $\overline{A}$), then A is said essentially self-adjoint [15–17]. Since we are worried with the one particle description, not a field theory, the positive frequency solution satisfies

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (\overline{A})^{1/2}\Psi, \quad (\text{B.3})$$

and the evolution of the wave packet is uniquely determined by the initial data,

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = e^{-it(\bar{A})^{1/2}} \Psi(0, \mathbf{x}). \quad (\text{B.4})$$

In this case, we say that the spacetime is quantum mechanically non-singular.

Now, if A has many self-adjoint extensions A_α , where α is a real parameter, we must choose one in order to evolve the wave packet. Any solution of the form

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = e^{-it(A_\alpha)^{1/2}} \Psi(0, \mathbf{x}), \quad (\text{B.5})$$

is a good solution and an extra information must be given to tell us which one has to be chosen. In this case we say that the spacetime is quantum mechanically singular.

The criterion used to determine the number of self-adjoint extensions of A (Theorem X.2 on reference [16]) is to solve the equations

$$A^* \psi \pm i\psi = 0, \quad (\text{B.6})$$

and to count the number of linear independent solutions in L^2 , i.e., the dimension of $\ker(A^* \pm i)$. If there is no square-integrable solutions, the operator posses a unique self-adjoint extension and it is essentially self-adjoint. If there is one solution in L^2 to each equation in (B.6), a one-parameter family of self-adjoint extensions exists and its extension is not unique. The theory of deficiency indices of von Neumann says that these self-adjoint extensions are represented by the one-parameter family of the extended domains of the operator A given by [16]

$$D^\omega = \{\psi = \phi + \phi^+ + e^{i\omega} \phi^- : \omega \in \mathbb{R}, \phi \in D(A)\}, \quad (\text{B.7})$$

where

$$A^* \phi^\pm = \pm i \phi^\pm \quad (\text{B.8})$$

and $\phi^\pm \in L^2$. The term $e^{i\omega}$ in (B.7) appears because the theory says that the self-adjoint extensions of the operator A are in one-to-one correspondence with the isometries from $\ker(A^* - i)$ to $\ker(A^* + i)$, i.e., the isometries given by $\phi^+ \mapsto e^{i\omega} \phi^-$.

B.3 Scalar Fields

The metric for the spinless BTZ spacetime [5] is

$$ds^2 = -V(r)^2 dt^2 + V(r)^{-2} dr^2 + r^2 d\theta^2, \quad (\text{B.9})$$

with the usual ranges of the cylindrical coordinates and

$$V(r)^2 = -m + \frac{r^2}{l^2}, \quad (\text{B.10})$$

where m is the mass parameter.

After separating variables, $\psi = R(r)e^{in\theta}$, the radial portion of equation (B.6) can be cast as

$$R_n'' + \frac{(V^2 r)'}{V^2 r} R_n' - \frac{n^2}{V^2 r^2} R_n - \frac{M^2}{V^2} R_n \pm i \frac{R_n}{V^4} = 0. \quad (\text{B.11})$$

To consider the case $r \rightarrow \infty$, we note that for large values of r the metric takes the form,

$$ds^2 \approx -\left(\frac{r^2}{l^2}\right) dt^2 + \left(\frac{r^2}{l^2}\right)^{-1} dr^2 + r^2 d\theta^2. \quad (\text{B.12})$$

This spacetime is asymptotically anti-de Sitter. The measure on the slice Σ is $d\mu = r dr$. From the definition of Horowitz and Marolf [10] we find that the measure of our Hilbert space H is $V^{-1} d\mu = l dr$.

Then, the equation (B.11) takes the form

$$R_n'' + \frac{3}{r} R_n' - \frac{n^2 l^2}{r^4} R_n - \frac{M^2 l^2}{r^2} R_n \pm i \frac{l^4 R_n}{r^4} = 0. \quad (\text{B.13})$$

For very large values of r , we can consider only the first two terms of the equation (B.13). Then we have

$$R_n'' + \frac{3}{r} R_n' = 0, \quad (\text{B.14})$$

whose solution is

$$R_n(r) = C_{1n} + C_{2n} r^{-2}, \quad (\text{B.15})$$

where C_{1n} and C_{2n} are arbitrary constants. $R(r) \in L^2$ if and only if $C_{1n} = 0$. Then, for

each mode we have only one solution in L^2 . Let us now, analyze the case $r \rightarrow 0$.

The metric in this case is approximately given by

$$ds^2 \approx -\alpha^2 dt^2 + \alpha^{-2} dr^2 + r^2 d\theta^2, \quad (\text{B.16})$$

where $\alpha^2 = -m$ (remember we are interested in the case $-1 < m < 0$).

Redefining the coordinates ($t \rightarrow \alpha$, $r \rightarrow \alpha^{-1}r$), we have

$$ds^2 \approx -dt^2 + dr^2 + \alpha^2 r^2 d\theta^2. \quad (\text{B.17})$$

The metric (B.17) tells us that near the singularity $r = 0$, where curvature effects are negligible, the BTZ spacetime is conic.

The parameter $m = -\alpha^2$ is related to the mass of the point particle source by $\alpha = 1 - 4Gm_{\text{source}}$ and to the deficit angle by $\Delta = 2\pi(1 - \alpha)$.

As noted by Horowitz and Marolf [10], the case of the massive test particles need not to be considered. The additional term $-\frac{M^2}{V^2}R$ in equation (B.11) acts as a repulsive potential, increasing the rate at which the non-square integrable solution diverges at the origin, and driving the square integrable solution more quickly to zero. Then, if the operator A defined in equation (B.2) is essentially self-adjoint for $M = 0$, it is also essentially self-adjoint for $M > 0$. Therefore, we need only to analyze the massless case $M = 0$.

From (B.17) we find that equation (B.11) reduces to

$$R_n'' + \frac{1}{r}R_n' + \left[\pm i - \frac{n^2}{\alpha^2 r^2} \right] R_n = 0, \quad (\text{B.18})$$

whose general solution is

$$R_n(r) = A_n J_{|n/\alpha|}(kr) + B_n N_{|n/\alpha|}(r), \quad (\text{B.19})$$

where $J_\nu(kr)$ and $N_\nu(kr)$ are the ν^{th} order Bessel and Neumann functions, respectively, and $k = \sqrt{i}$.

Near $r = 0$, $J_{|n/\alpha|}(x) \sim x^{|n/\alpha|}$, $\forall n$, while $N_{|n/\alpha|}(x) \sim x^{|n/\alpha|}$, except for $n = 0$, when $N_{|n/\alpha|}(x) \sim \ln x$. From the behavior of the Bessel and Neumann functions near the origin, it is easy to show that $J_{|n/\alpha|}(kr)$ is square-integrable near $r = 0$ for all $n = 0, 1, 2, \dots$, while $N_{|n/\alpha|}r$ is square-integrable near $r = 0$ only if $|n/\alpha| \leq 1$, or $|n| \leq \alpha < 1$. So $N_n(r)$ belongs to L^2 near $r = 0$ only if $n = 0$. In this case, we can adjust the constants A_0 and B_0 in equation (B.19) to meet the asymptotic behavior at infinity, $R(r) \sim 1/r^2$.

Then, for $n = 0$, there is a solution of equation (B.6) in $L^2(\mathbb{R}^+, V^{-1}d\mu)$. Therefore, there is a one-parameter family of self-adjoint extensions of A and the spacetime is quantum mechanically singular.

Near $r = 0$, the negative mass BTZ spacetime is similar to a conic spacetime [see equation (B.17)]. Positive-frequency solutions of the Klein-Gordon equation in this spacetime satisfies

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (\mu^2 - \Delta)^{1/2}\Psi, \quad (\text{B.20})$$

where μ is the particle mass and Δ is the Laplace-Beltrami operator on the cone.

The boundary conditions necessary to turn the operator $(\mu^2 - \Delta_0)^{1/2}$ self-adjoint, in this case, are already known for a scalar test particle [11]. They are obtained using Neumann's theory of deficiency indices (see [16]) and are given by

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} \{ [\ln(qr/2) + \gamma] r R'_0(r) - R_0 \} &= 0, & q \in (0, \mu], \\ \lim_{r \rightarrow 0} r R'_0(r) &= 0, & q = 0, \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

where γ is Euler-Mascheroni constant. Since $-q^2$ is an eigenvalue of $-\Delta_0$, the quantity q is restricted by $0 \leq q \leq \mu$ in order that the operator $(\mu^2 - \Delta)^{1/2}$ makes sense. Note that for a massless particle ($\mu = 0$) we must take the boundary condition for $q = 0$. Thus the spacetime is non-singular when tested by massless particles.

Because we are interested only in local conditions at $r = 0$, we take these boundary conditions as the boundary conditions of our problem and, given one of the conditions in equation (B.21), the evolution of the wave packet is uniquely determined by the initial data. Different choices give us different theories.

B.4 Dirac Fields

In a $2 + 1$ dimensional spacetime, fermions have only one spin polarization [18], hence spinors have only two components and the Dirac equation consists of a set of two coupled partial differential equations. The constant Dirac matrices, $\gamma^{(j)}$, in flat spacetimes are replaced by the Pauli matrices [19], i.e.,

$$\gamma^{(j)} = (\sigma^{(3)}, i\sigma^{(1)}, i\sigma^{(2)}), \quad (\text{B.22})$$

where Latin indices represent internal (local) indices. In this way

$$\{\gamma^{(i)}, \gamma^{(j)}\} = 2\eta^{(ij)}\mathbb{I}_{2 \times 2}, \quad (\text{B.23})$$

where $\eta^{(ij)}$ is the Minkowski metric in $2 + 1$ dimensions, i.e., $\eta^{(ij)} = \text{diag}(-1, 1, 1)$ and $\mathbb{I}_{2 \times 2}$ is the 2×2 identity matrix.

The coordinate dependent metric $g_{\mu\nu}(x)$ and matrices $\sigma^\mu(x)$ (Greek indices representing external, or global, indices) are related to the dreibein $e_\mu^{(i)}(x)$ by

$$\begin{aligned} g_{\mu\nu}(x) &= e_\mu^{(i)}(x)e_\nu^{(j)}(x)\eta_{(ij)}, \\ \sigma^\mu(x) &= e^\mu_{(i)}\gamma^{(i)}. \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

In the general $2 + 1$ dimensional spacetime with metric $g_{\mu\nu}(x)$, the Dirac equation for a free particle (with mass M) can be cast as

$$i\sigma^\mu(x)[\partial_\mu - \Gamma_\mu(x)]\Psi(x) = M\Psi, \quad (\text{B.25})$$

where $\Gamma_\mu(x)$ is the spinorial affine connection and it is given by

$$\Gamma_\mu(x) = \frac{1}{4}g_{\lambda\alpha}[e_{\nu,\mu}^{(i)}(x)e_{(i)}^\alpha(x) - \Gamma_{\nu\mu}^\alpha(x)]s^{\lambda\nu}(x), \quad (\text{B.26})$$

with

$$s^{\lambda\nu}(x) = \frac{1}{2}[\sigma^\lambda(x), \sigma^\nu(x)]. \quad (\text{B.27})$$

As in the case of scalar particles, we are interested in the two singular cases ($r \rightarrow \infty$

and $r = 0$). When $r \rightarrow \infty$, we take the metric (B.12). For this metric, we choose

$$\begin{aligned} e_{\mu}^{(i)}(t, r, \theta) &= \text{diag}(r/l, l/r, r), \\ e_{(i)}^{\mu}(t, r, \theta) &= \text{diag}(l/r, r/l, 1/r). \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

The coordinate dependent gamma matrices and the spinorial affine connection are given by

$$\begin{aligned} \sigma^{\mu}(x) &= \left(\frac{l}{r} \sigma^{(3)}, \frac{ir}{l} \sigma^{(1)}, \frac{i}{r} \sigma^{(2)} \right), \\ \Gamma_{\mu}(x) &= \left(\frac{1}{2} \frac{r}{l^2} \sigma^{(2)}, 0, \frac{i}{2} \frac{r}{l} \sigma^{(3)} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Now, for the spinor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.30})$$

we can write the Dirac equation in the spacetime (B.12) as,

$$\begin{aligned} \frac{il}{r} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} - \frac{r}{l} \frac{\partial \psi_2}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta} - \frac{1}{l} \psi_2 - M \psi_1 &= 0, \\ -\frac{il}{r} \frac{\partial \psi_2}{\partial t} - \frac{r}{l} \frac{\partial \psi_1}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta} - \frac{1}{l} \psi_1 - M \psi_2 &= 0. \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

For the positive frequency solutions we shall use the ansatz,

$$\Psi_{n,E}(t, \mathbf{x}) = \begin{pmatrix} R_{1n}(r), \\ R_{2n}(r) e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{in\theta} e^{-iEt}. \quad (\text{B.32})$$

Note that $\Psi(t, \mathbf{x})$ is an eigenfunction of the total angular momentum $J_z = L_z + S_z$, with $J_z = -i \frac{\partial}{\partial \theta}$ and $S_z = \sigma^{(3)}/2$, with eigenvalue $n + \frac{1}{2}$ [20]. We have for the radial part of the Dirac equation,

$$\begin{aligned} R'_{1n}(r) + \left(\frac{1}{r} - \frac{nl}{r^2} \right) R_{1n}(r) + \left(\frac{Ml}{r} + \frac{El^2}{r^2} \right) R_{2n}(r) &= 0, \\ R'_{2n}(r) + \left(\frac{1}{r} + \frac{nl}{r^2} \right) R_{2n}(r) + \left(\frac{Ml}{r} - \frac{El^2}{r^2} \right) R_{1n}(r) &= 0. \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

By neglecting the lower order terms, since we are interested in the $r \rightarrow \infty$ case, we have:

$$\begin{aligned} R'_{1n}(r) + \left(\frac{1}{r}\right)R_{1n}(r) + \left(\frac{Ml}{r}\right)R_{2n}(r) &= 0, \\ R'_{2n}(r) + \left(\frac{1}{r}\right)R_{2n}(r) + \left(\frac{Ml}{r}\right)R_{1n}(r) &= 0. \end{aligned} \tag{B.34}$$

Therefore, for both components we have the same equation,

$$R''_j(r) + \frac{3}{r}R_j(r) + \frac{1}{r^2}(1 - M^2l^2)R_j(r) = 0 \quad (j = 1, 2). \tag{B.35}$$

Again, neglecting lower order terms we obtain

$$R''_j(r) + \frac{3}{r}R_j(r) = 0 \quad (j = 1, 2). \tag{B.36}$$

Hence, asymptotically, the radial portion of the spinor Ψ behaves as

$$R(r) = Ar^{-2} + B, \tag{B.37}$$

where A and B are constant spinors.

The solution (B.37) is square-integrable only if $B = 0$. Only one constant must be specified. Then our solution is well-behaved near infinity and no extra boundary conditions are necessary.

The metric near $r = 0$ is very close to the conic background (B.17). This problem has already been dealt with in references [12] and [13]. The metric (after changing the variable $r \rightarrow \alpha r$) is,

$$ds^2 = -dt^2 + \alpha^{-2}dr^2 + r^2d\theta^2, \tag{B.38}$$

and the measure on the slice Σ is $\alpha^{-1}rdr$.

The appropriate dreibein is

$$e_{\mu}^{(i)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha^{-1} \cos \theta & \alpha^{-1} \sin \theta \\ 0 & -r \sin \theta & r \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (\text{B.39})$$

And by choosing positive energy solutions of the form,

$$\Psi_{n,E}(t, \mathbf{x}) = \begin{pmatrix} R_{1n}(r) \\ iR_{2n}(r) \end{pmatrix} e^{i(n+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\sigma^{(3)})\theta} e^{-iEt}, \quad (\text{B.40})$$

we obtain the system of equations,

$$\begin{aligned} R'_{1n}(r) + \left[\frac{1}{2r} - \frac{n+\frac{1}{2}}{\alpha r} \right] R_{1n}(r) + \frac{E+M}{\alpha} R_{2n}(r) &= 0, \\ R'_{2n}(r) + \left[\frac{1}{2r} + \frac{n+\frac{1}{2}}{\alpha r} \right] R_{2n}(r) - \frac{E-M}{\alpha} R_{1n}(r) &= 0. \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

A complete set of solutions of the Dirac equation in the spacetime (B.38) is given by the normal modes,

$$\Psi_{n,E}(t, \mathbf{x}) = \left[A_n \begin{pmatrix} J_{|\nu|}(\kappa r) \\ iJ_{|\nu+1|}(\kappa r) \end{pmatrix} + B_n \begin{pmatrix} N_{|\nu|}(\kappa r) \\ -iN_{|\nu+1|}(\kappa r) \end{pmatrix} \right] e^{i(n+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\sigma^{(3)})\theta} e^{-iEt}, \quad (\text{B.42})$$

where $\nu = [2n + (1 - \alpha)]/2\alpha$, $\kappa^2 = (E^2 - M^2)/\alpha^2$, A_n and B_n are arbitrary constant. The Bessel function J_{λ} , $\lambda \in \mathbb{R}$, is square-integrable for all λ , but the Neumann function $N_{|\lambda|}$ is not, except when $|\lambda| < 1$. Note that the second spinor in (B.42) is square-integrable when $|\nu| < 1$ and $|\nu+1| < 1$, i.e., $-1 < \nu < 0$. It is easy to see that this condition does not hold for any value of $n \in \mathbb{Z}$. Therefore, an arbitrary wave packet can be described by

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n \begin{pmatrix} J_{|\nu(n)|}(\kappa r) \\ iJ_{|\nu(n)+1|}(\kappa r) \end{pmatrix} e^{i(n+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\sigma^{(3)})\theta} e^{-iEt} \quad (\text{B.43})$$

and the initial condition $\Psi(0, \mathbf{x})$ is sufficient to determine the time evolution of the particle. The Cauchy problem is well-posed and the spacetime is nonsingular when tested by fermions. It is interesting to note that this is the case only for the $2+1$ dimensional spacetime, since for the $3+1$ dimensional case (see [21]), the extra dimension adds a

continuous parameter k representing the wave vector in the Fourier transform of Ψ . The existence of this continuous parameter allows that an infinite number of normal modes to be singular. So the spacetime around a cosmic string remains singular when tested by fermions. The fact that in the $2 + 1$ dimensional spacetime the spatial modes have only discrete indices excludes this possibility.

B.5 Conclusion

The BTZ spacetime with mass parameter $m \geq 0$ does not cause any problem since the weak cosmic censorship hypothesis is satisfied (the singularity is hidden). For the mass parameter interval $-1 < m < 0$, the classical singularity persists when tested by massive scalar fields. In principle, we do not have any reason to choose one of the boundary conditions in (B.21). As well as, it is uncertain the future of a classical particle moving along a geodesic which reaches the singularity after a finite time, it is uncertain the time evolution of the corresponding quantum particle, provided it obeys the Klein-Gordon equation. But, when tested by massless scalar bosons and by fermions, the singularity is “healed” and no extra boundary conditions are necessary. The spacetime is wave regular for these fields.

Because the BTZ spacetime with negative mass parameter is not regular for every quantum particle, it must be excluded by the weak cosmic censorship hypothesis. For this reason, the $m = -1$ case, which is the stable ground state of the BTZ spacetime when studied in the general relativity context, remains stable when studied in the quantum mechanics framework.

Acknowledgements

We thank CNPq for financial support and P.S.L. also thanks FAPESP.

Referências Bibliográficas

- [1] S. Deser, R. Jackiw and G. t'Hooft, Ann. Phys. **152**, 220 (1984)
- [2] A. Staruszkiewicz, Acta. Phys. Polon. **24**, 734 (1963).
- [3] P.S. Letelier, Class. Quantum Grav. **4**, 75 (1987).
- [4] D.A. Konkowski and T.M. Helliwell, Gen. Relativ. Grav. **33**, 1131 (2001).
- [5] M. Bañados, C. Teitelboim and J. Zanelli, Phys. Rev. Lett. **69**, 1849 (1992).
- [6] M. Bañados, M. Henneaux, C. Teitelboim and J. Zanelli, Phys. Rev. D **48**, 1506 (1993).
- [7] S. Deser and R. Jackiw, Ann. Phys. **153**, 404.(1984).
- [8] N. Pantoja, H. Rago and R. Rodríguez, J. Math. Phys. **45**, 1994 (2004).
- [9] G.T. Horowitz and R. Myers, Gen. Relativ. Gravit. **27**, 915 (1995).
- [10] G.T. Horowitz and D. Marolf, Phys. Rev. **52**, 5670 (1995).
- [11] B.S. Kay and U.M. Studer, Comm. Math. Phys. **138**, 103 (1991).
- [12] P. de Sousa Gerbert, Phys. Rev. D **40**, 1346 (1989).
- [13] P. S. Gerbert and R. Jackiw, Commun. Math. Phys. **124**, 229 (1989).
- [14] S. Hawking and G. Ellis, *The Large Scale Structure of Space-Time*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1973).
- [15] M. Reed and B. Simon, *Functional Analysis*, (Academic Press, New York, 1980).

- [16] M. Reed and B. Simon, *Fourier Analysis and Self-Adjointness*, (Academic Press, New York, 1975).
- [17] R.D. Richtmyer, *Principles of Advanced Mathematical Physics*, (Springer, New York, 1978).
- [18] S.P. Gavrilov, D.M. Gitman and J.L. Tomazelli, Eur. Phys. J. C **39**, 245 (2005).
- [19] Y. Sucu and Nuri Ünai, J. Math. Phys. **48**, 052503 (2007).
- [20] V.R. Kahlilov and C.L. Ho, Mod. Phys. Lett. A **13**, 615 (1998).
- [21] T.M. Helliwell, D.A. Konkowski and V. Arndt Gen. Rel. Grav. **35**, 79 (2003).